

理研ニュース

4

1999 No. 214

理化学研究所

2● 研究最前線

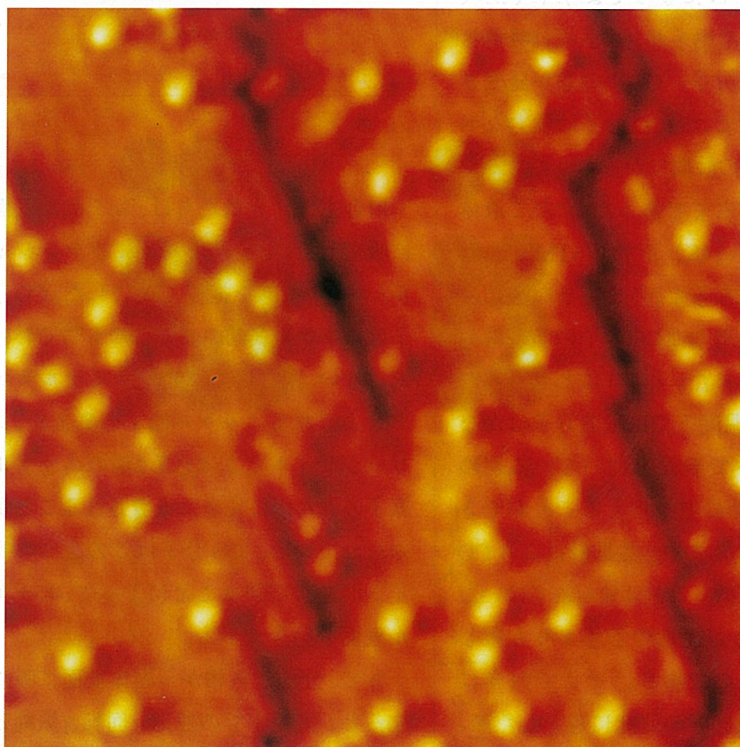
- ・吸着分子が跳びまわるダイナミックな表面世界

6● TOPICS

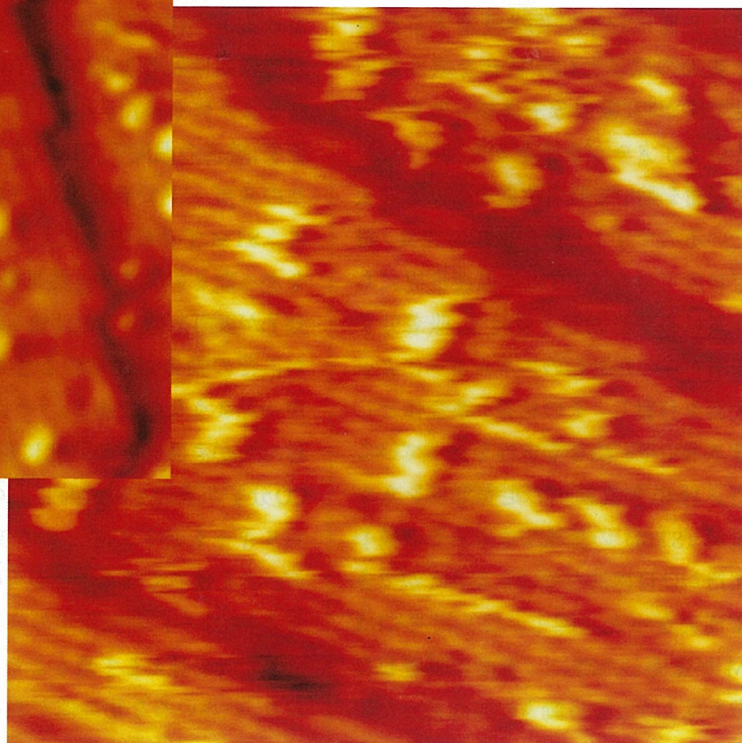
- ・「退職主任研究員記念講演会」を開催
- ・「前田メモリアルシンポジウム」開催される
- ・平成12年度基礎科学特別研究員の公募開始
- ・戎崎俊一主任研究員、和光市で講演
- ・事務機構の改編のお知らせ
- ・研究部門の組織変更について
- ・BSIがBACを開催
- ・「理事長ファンド」による研究成果を発表

8● 原酒

- ・チーム研究と国際協力



ベンゼン分子のSTMイメージ



吸着分子が跳びまわるダイナミックな表面世界

固体の表面は触媒として化学工業の重要な舞台であり続けてきた。また最近では、固体表面に気体分子が吸着すると電気伝導度が変化することを利用したガスセンサーなどが暮らしの中にも浸透している。「触媒は化学物質の変換の場ですし、センサーは化学情報を電気信号に変換する場といえます。つまり固体表面はマルチ化学コンバーターと捉えることができます」と語る川合真紀表面化学研究室主任研究員。同研究室は、固体表面がどのような仕組みでコンバーター機能を果たしているのかを、大胆な着想と精緻な手法によって果敢に攻め、固体表面化学のフロンティアを拓きつつある。

表面をホッピングする吸着分子

固体表面に分子が化学吸着するとき、表面の原子と化学結合を組んでいる。「ですから、吸着分子はじっとしているというイメージを抱きがちですが、じつは表面を動いて吸着位置をどんどん変えているのです」と川合主任研究員。絶対ゼロ度ではなく、有限の温度世界にある物質は必ず熱励起を受ける。吸着分子も表面からの熱励起のエネルギーによって表面を移動し、その結果、系全体としてはエネルギー的な安定性を保っているのだ。1980年代初めの走査型トンネル顕微鏡 (STM) の登場により、その様子を私たちは目のあたりにすることができるようになった (図1、2)。「じつはSTMが登場した時に、表面に吸着した分子を見ようという動きが当然あったのですが、なかなかきちっと見えたという報告が出てこなかったのです。」

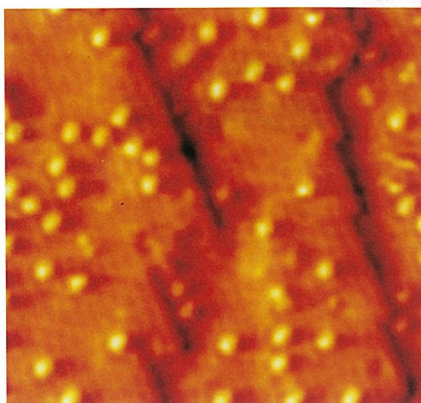


図1 低温でPd(110)表面に吸着したベンゼン分子のSTMイメージ。212Kではベンゼン分子が制しして観測される。

80年代の半ばになってようやく二次元格子を組んだベンゼンの表面に吸着した一酸化炭素分子 (CO) の像が発表された。この像では、CO分子は強力なベンゼンの格子の隙間にごっちりトラップされているごとくであった。やがて液体ヘリウム温度 (4K) 下でもSTMが作動できるようになると、さまざまな種類の固体表面に吸着したCO分子の像が得られるようになった。「これはとりもなおさず、普通の温度下では吸着分子はかなりのスピードで表面を動いているために、STMでその像を捉えることができなかったといえます」熱拡散によりCO分子が表面を動くことは知られてはいたが、その動きが従来予想よりも激しかったようなのである。「そこで91年に私たちが表面化学の研究に着手した際、CO分子が表面を動く時にどのようなエネルギーを感じているのかを、既存のデータを使って描くことから始めてみました」ちなみに表面化学の分野では、CO分子が吸着種として最もよく調べられており、いろいろな物性値が明らかにされている。いわば吸着種のスタンダードともいべき物質だという。

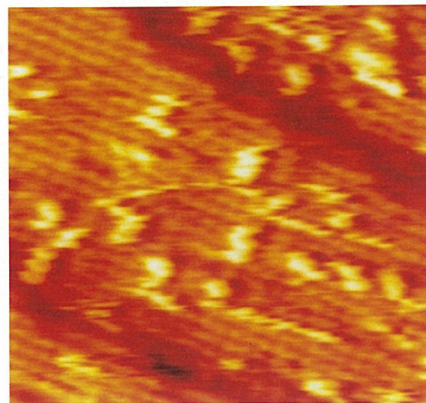


図2 228Kになると表面で分子が動き始める。分子は安定した吸着サイト間をホッピングするので、ちぎれた形で観測される。

CO分子の感じるポテンシャル・エネルギー

川合主任研究員たちは、ニッケル表面に吸着したCO分子を対象にポテンシャル・エネルギーを描くことにした。CO分子はニッケル表面のどこにでもつくわけではない。図3のようにターミナルサイトとよばれるニッケル原子の真上か、ブリッジサイトとよばれる2個のニッケル原子の真ん中に安定に吸着されることが知られている。CO分子はこの2つのサイト間を跳び移ることによって、ニッケル表面を動きまわる。

さて、分子が気相から固体表面に吸着すると、気相中での並進、回転、振動といった分子の運動は吸着束縛によって著しく変化し、分子内振動だけでなく、束縛並進モード、束縛回転モードの振動モードが生じる。この内、束縛並進モードの振動エネルギーが、表面に平行な方向への分子の運動を支配する。つまり、分子の運動を記述するときはそのポテンシャル曲率を与えることになる。吸着種

のスタンダードであるCO分子の場合は、ニッケルを始め、いくつかの固体表面での束縛並進モードの振動エネルギーがすでに明らかにされている。

「各々のサイトのポテンシャルエネルギーを、束縛並進モードの振動エネルギーで与えられる曲率に沿った2次曲線(調和振動子近似)で描いてみたのです」それが図4だ。両サイトの吸着エネルギーの差である11ミリエレクトロンボルト(meV)は、川合主任研究員たちが実験によって求めた。「図を書いたところ、ターミナルサイトからブリッジ

への移動に対するエネルギー障壁は60 meV、逆の移動の場合は70 meVとなったのです」吸着エネルギー1.3eVの約20分の1と予想外に低い値であった。従来、ニッケル表面上のCO分子移動のエネルギー障壁は300 meVといわれていたが、それよりもずっと低いことになる。「このことは、CO分子はかなりのスピードで自由にサイト間を動いているということを意味します。STMを使っても、常温ではCO吸着分子像がなかなか得られなかった事実とは一致しますが、果たして本当にこんなにエネルギー障壁

が低いのか、今度は実験で確かめてみようということになりました。」

30 Kくらいまで温度を下げると、ニッケルにランダムに吸着したCO分子が集合体(島構造)をつくっていくことが知られている。そこで川合主任研究員たちは、孤立したCO分子が島をつくる過程をサイト間の跳び移りとみて、赤外反射吸収分光法でこの過程を観測し、その活性化エネルギー60meVを導きだした。「私たちが既存データをもとに描いたポテンシャル・エネルギー図による値とほとんど同じでした。」

これで、ニッケルのサイト間をポンポン跳

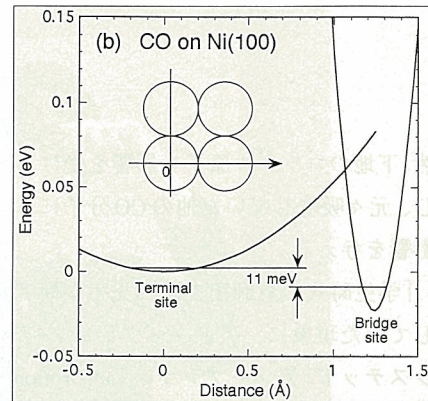


図4 Ni(100)上に吸着したCO分子のターミナルサイトからブリッジサイトにかけてのポテンシャル・エネルギー面(調和振動を仮定)

び移るCO分子像というのは普遍的なものとなった。それだけではなく、束縛並進モードの調べられている吸着系では、ポテンシャル・エネルギーの作図により、「おおよそのエネルギー障壁を算出でき、吸着した分子の振る舞いを予想できるのではないだろうか」ということにまで広がる。

「このような『一般化』ができればいいな、と思っています。そのためには、個々のサイトの束縛並進モードを自在に測定することのできる方法論の開発が必要ですが、昨年米国の研究者がSTMを使って単分子の振動データをとったという報告がありましたので、今後の展開を楽しみにしています。」

すでに吸着している分子と飛来してくる分子の関係は？

CO分子がニッケル表面に衝突する時、1回の衝突で表面に補足されるのではなく、何回か跳ねると考えられている。その間に、吸着エネルギーに相当する1.3eV分の運動エネルギーを表面原子の格子振動に渡し、捉えられるわけだ。原子、分子レベルの世界では、CO分子の表面への衝突は、彗星の地球への衝突と同じように衝撃的なものである。当

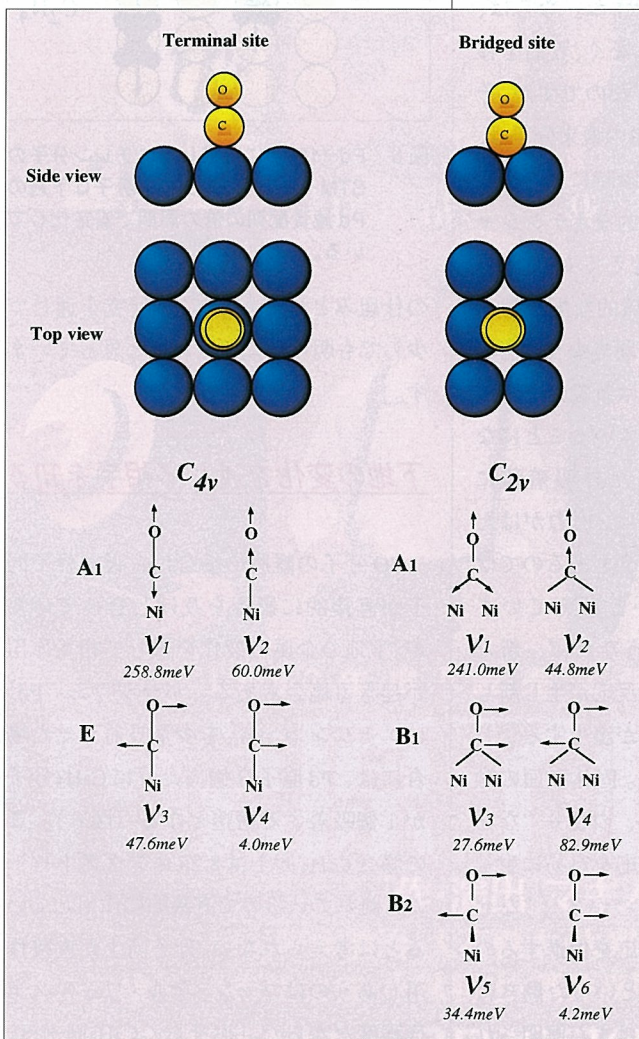


図3 Ni(100)上でのCO分子の吸着状態と基準振動モード

然、下地のニッケル原子も影響を受けるし、元々吸着していた他のCO分子にも影響を与える。

「学生時代の恩師田丸謙二先生が研究していた現象に、アドソープション・アシステッド・デソープション (adsorption assisted desorption) というのがあります」これは、表面を真空下ではなくガスを入れて気相下に置いたほうが、吸着した分子が表面から外へ飛び出す (離脱) 割合が高くなるという現象だ。CO分子とニッケルの系の場合には、吸着分子の数が少ないときにも10倍程度も上がる。この現象も新たに表面に衝突したCO分子が、ニッケルという下地を介して、あるいは直接的に、以前から存在していた吸着分子へ影響を及ぼした結果だと考えられる。そこで、川合主任研究員たち

は、CO分子とニッケル系において気相下での吸着と離脱の過程を、赤外反射吸収分光法を用いて詳細に追いかけていった。

そして、すでに吸着しているCO分子の隣のサイトに新たにCO分子が入ったときに、瞬間的なクラスターをつくると同時に反発的なポテンシャルが働き、どちらかのCO分子が離脱していくという過程が明らかになった (図5)。

「普通は1.3eVである離脱の活性化エネルギーが5分の1の0.26eVに落ちます。古参分子も新参分子も側にくっつき合っているのは嫌なんですね。ならば、表面から飛び出すのではなく、表面を移動して逃げてもいいはずなのですが、そうもいかない……」新参者の飛来分子は、電子的な相互作用により瞬時にその場所

の電子的なポテンシャルを変えてしまうので、機械的な配置替えをする間もなく、古参あるいは新参分子が飛び出していくことになるようだ。「吸着種によっては、引力がはたらく場合もあるのではないかと考えています」そうならば、新たな化学反応が生じ新しい分子が誕生することになる。固体表面の触媒作用、つまり“なぜ化学反応を容易に生じさせるのか? ”、“なぜ化学反応を促進するのか?”といった働きについてはまだ解明されてはいない。「触媒作用

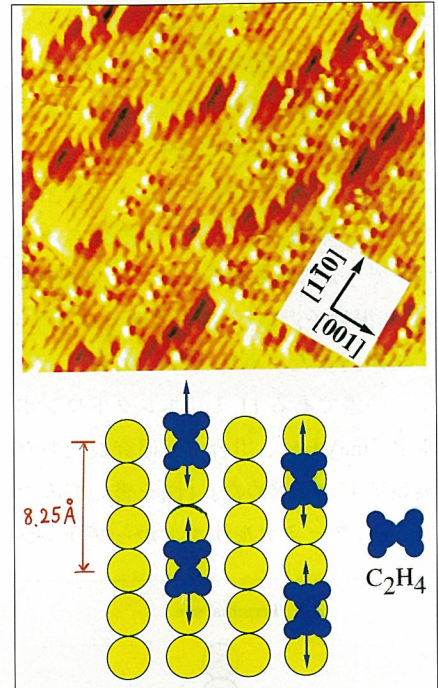


図6 Pd (100) に吸着したエチレン分子のSTMイメージ、エチレン分子は下地のPd減資配列の倍の周期で安定化している。

の仕組みとは何か、この研究を通じて少しでも明らかにできればと思っています。」

下地の変化を通して相手を知る

CO分子の離脱の場合には、吸着分子同士が直接的に影響を及ぼし合っていたが、下地の金属の変化を通して相互作用が起きる場合もある。パラジウム (Pd) にエチレン (C₂H₄) を少量吸着させた場合には、Pd原子3個あたりにC₂H₄分子が1個吸着する構造となる (図6)。この場合C₂H₄同士は8.25オングストロームも離れているので直接的に作用しているとは考えられない。分子同士が直接作用しあうのはファン・デル・ワールス半径程度だからだ。「おそらくC₂H₄同士は、下地のPd原子の変形を通して、互いに

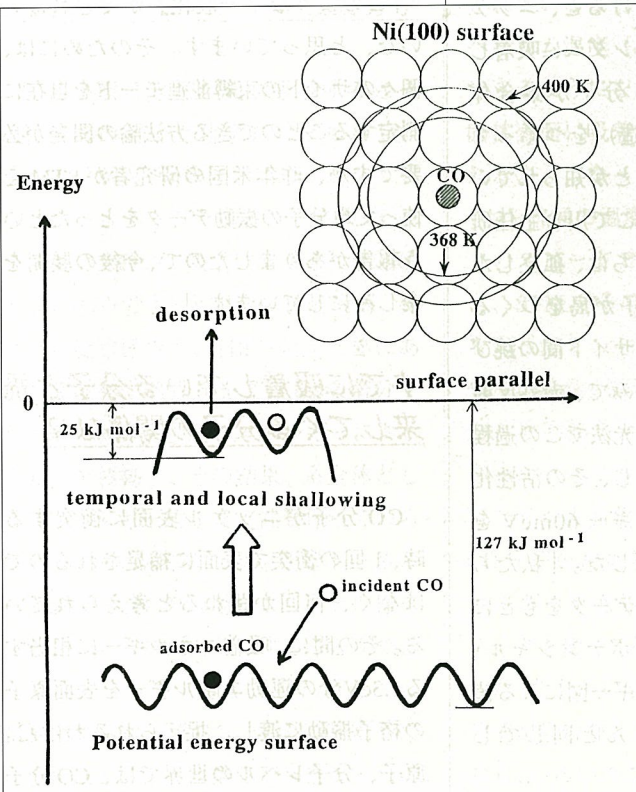


図5 Ni (100) 上に吸着したCOの真空中への脱離と Adsorption assisted desorption のポテンシャル・エネルギー図

これくらい離れていたほうがエネルギー的に安定だと感じるのでしょうか」川合主任研究員たちはこのPdを介しての情報交換には、 C_2H_4 の二重結合を司るパイ系電子とPdの電子系との相互作用に秘密があるのではないかと考えている。「パイ電子が下地金属の格子と相互作用していると、どのようなサインを出すかを理論の人たちと組んで考え、そのサインを実験でつかんでいきたいと思っています。」

吸着分子同士の関係は？

さて、固体表面に存在する異種の吸着

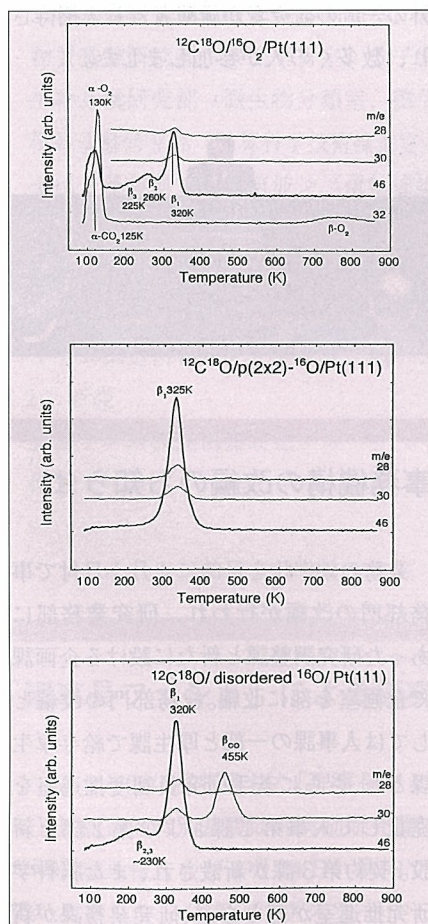


図7 Pt(111)に共吸着した酸素とCOからの昇温脱離スペクトル

種はどのような関係をもつのだろうか？ここで固体表面にCO分子と酸素分子(O_2 分子)が存在する時にどのようなことが起きるのかについて、川合主任研究員たちが研究した成果についてお伝えしよう。

まず、CO分子と O_2 分子の表面に吸着した白金試料をよく冷やす。そして徐々に温度を上げて観測していくと、非常に面白い現象を目の当たりにすることができる。「温度上昇とともに、3回の二酸化炭素(CO_2)合成の場が登場しますよ」(図7)。

CO分子と O_2 分子を比べると、CO分子のほうがずっと表面を動きやすい。 O_2 分子は活性化エネルギーが高いためじっとしている。ところが、温度を125Kまで上げると、 O_2 分子が解離して酸素原子(O)となる。すると切れたOは表面に沿って動いて安定したサイトへ着こうとする。この時、CO分子と出会い反応が起きると考えられる。「解離したO原子が安定な吸着サイトに着いてしまうと、そこでまたじっとしてしまい、 CO_2 の発生が押さえられます。」

さらに温度を上げて225Kになると、また CO_2 が大量に発生するようになる。225KまではO原子は吸着サイトにランダムに着いている。温度が上昇し、熱励起により表面を動けるだけのエネルギーを得ると、他のO原子の位置を感じながら着くサイトの位置を変えて超構造をつくる。その温度下では超構造をつくったほうがエネルギー的に安定化するためだ。そして、この組み替えのときに、またCO分子と出会いが生じ、 CO_2 が大量発生する。



川合主任研究員

さらに温度を上げると、熱励起による揺らぎが大きくなって今度はO原子の超構造そのものが崩れるようになり、このときまた CO_2 の大量発生が起こる。このように酸素のほうがポテンシャル・エネルギーのある安定した状態から別の安定した状態に移るときに CO_2 の合成反応が起きることを川合主任研究員たちは明らかにしたわけだが、従来はCO分子の表面移動が引き金だと考えられていた。「吸着分子の表面移動を始め、固体表面で起こる現象はすべて、ある安定なポテンシャルから別の安定なポテンシャルに移る過程で起こっています。ですから、ポイントとなるさまざまな安定状態をピックアップし、その相互の遷移をつなぐような形で研究を進めていきたいと思っています。そうすれば、固体表面のコンバーター機能の全貌が見えてくるのではないかと……。」

伝統ある触媒化学の新しい地平が、今まさに拓かれつつある。

文責：広報室

監修：表面化学研究室
主任研究員 川合真紀
取材・構成：由利伸子

「退職主任研究員記念講演会」を開催

3月25、26日の両日、3月末をもって退職する主任研究員の記念講演会が和光本所・鈴木梅太郎記念ホールで開かれ、以下のようなテーマで講演しました。

25日 飯塚哲太郎（生物物理化学研究室）

「生物的铁に魅せられて」

中川威雄（研究基盤技術部）

「基盤技術部への期待」

26日 松岡勝（宇宙放射線研究室）

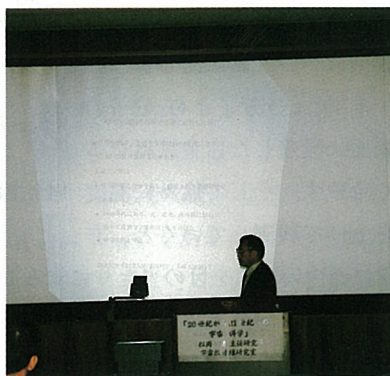
「20世紀から21世紀への宇宙科学」

雀部博之（生体高分子物理研究室）

「有機分子の積木遊び」

高見道生（無機化学物理研究室）

「レーザー分光30年」



平成12年度基礎科学特別研究員の公募開始

自発的かつ自主的に研究する場を若手研究者に提供する平成12年度の「基礎科学特別研究員」の募集が4月1日から始まりました。基礎科学特別研究員は、主にポスドクを対象とし、理研の優れた研究施設やスタッフのアドバイスを受け

ながら、自らの研究テーマを追求することができます。

応募締め切りは1999年5月31日(月)。採用人員は約70名。応募資格、待遇などの詳細は、総務部人事第2課基礎特研担当までお問い合わせ下さい。

電話 :048 (467) 9268

FAX :048 (463) 3687

E-mail :wakate@postman.riken.go.jp

「前田メモリアルシンポジウム」開催される

3月3、4日の両日、和光本所・鈴木梅太郎記念ホールにおいて「前田メモリアルシンポジウム」が開催されました。このシンポジウムは1998年3月26日に急逝された分子昆虫学研究室の前田進主任研究員の1周年忌に「前田メモリアル」として開催されたもので、戦略的基礎研究推進事業・前田プロジェクト「昆虫ウイルスと宿主との分子応答機構とその応用」の成果報告会も兼ねて開催されました。故前田主任研究員が開拓されたバキュロウイルス学に焦点をあてて、国内外の一流の研究者が講演者として招待され、数多くの人々が参加しました。



戎崎俊一主任研究員、和光市で講演

2月7日、「和光市地域青少年を育てる会30周年・連合会20周年記念式典」が和光市民文化センター・サンアゼリアで開かれました。第1部の市内中学校のバンド合同演奏、第2部の記念式典に続き、第3部で戎崎俊一計算科学研究室主任研究員が「計算機で探る宇宙のなぞ」について講演し、コンピュータによる銀河系の進化のシミュレーションを会場の大型スクリーンいっぱいに映し出したほか、高校生の通訳でNASAと交信し

たり、ハッブル望遠鏡が撮影した画像を受信するなど、新しい試みが披露されました。



事務機構の改編のお知らせ

業務の効率化を目的に4月1日付で事務部門の改編が行われ、研究業務部にあった研究調整課と新たに設ける企画課で企画室を部に改編。総務部門の改編としては人事課の一部と厚生課で給与厚生課とし、さらに若手研究員制度推進室を廃止して人事第1課および第2課を新設。契約第3課が新設され、また脳科学研究推進室が部となり、研究業務課が新たに設置されました。

研究部門の組織変更について

理研の近年の研究分野の多様化、地域展開等研究環境の変化に対応して、研究部門の組織変更が1999年4月、以下の通り行われました。

○和光本所およびライフサイエンス筑波研究センター

(1) 名称変更

RIビーム科学研究室(旧リニアック研究室)、ビーム物理工学研究室(旧プラズマ物理研究室)、生体分子機能研究室(旧ゲノム科学研究室)

(2) 廃止

サイクロトロン研究室、計算科学研究室、研究基盤技術部、培養生物部、実験動物室<筑波>、ジーンバンク室<筑波>、分子神経生物学研究室<筑波>

(3) 新設

研究基盤の強化等のため下記の6基盤研究部が新設されました。

加速器基盤研究部(RIビームファクトリー計画推進室、ビーム分配技術開発室、ラジオアイソトープ技術室)

工学基盤研究部(研究機器開発室、基盤技術開発室、技術開発促進室)

物質基盤研究部(表面解析室、分子構造解析室、化学分析室、生体分子解析室)

生物基盤研究部(微生物分類室、微生物系統保存室、動物試験室)

情報基盤研究部(計算科学技術推進室、イメージ情報技術開発室、情報環境室)

遺伝子基盤研究部<筑波>(遺伝子材料開発室、細胞材料開発室、実験動物開発室、実験植物開発室)

○ゲノム科学総合研究センター

(1) 名称変更

ゲノム構造情報研究グループ(旧ゲノム領域構造・機能研究グループ)

(2) 新設

動物ゲノム機能情報研究グループ(マウス変異開発研究チーム、マウス変異探索研究チーム)

BSIがBACを開催

脳科学総合研究センター(BSI)による「アドバイザー・カウンシル」(BAC)の第2回会合が3月18日から19日まで開かれました。BACは、外国人委員11名、日本人委員9名で構成され、BSIの運営方法や研究計画と成果、研究の進め方などについて外部有識者から意見を聞くとともに、BSI全体の総合評価を受けることを目的としています。

初日は、最初に昨年2月に行われた第1回会合以後のBSIの活動の概要を伊藤正男所長が、続いて研究成果や将来計画などを各研究グループディレクターが説明しました。その後、研究室に移り、視察と現場での討議などが実施されました。2日目には、全メンバーで自由討議と評価結果のとりまとめが行われました。

結果の概要については、5月発行予定のBSIニュースに掲載される予定です。



「理事長ファンド」による研究成果を発表

平成9年度に採択された「理事長ファンド」(創造的特別基礎研究奨励研究費)の研究成果報告会が2月24日、所内で開かれました。発表会はポスターセッション形式で行われ、1年間の研究で得られた29の成果が発表されました。

理事長ファンドは、新たな発想に基づく最先端の萌芽的研究課題や、緊急に対応・推進する必要があるテーマに対して配分される特別枠の研究費。申請額に応じて2つのカテゴリーに分かれ、春と秋の2回募集されます。平成10年度は審

査の結果、カテゴリーIが14件(応募総数29件)、カテゴリーIIが17件(同49件)選ばれました。

カテゴリーII(申請額200万円未満)は、研究部門所属の職員だけでなく、ポスドクを対象とした基礎科学特別研究員にも応募資格が与えられています。



チーム研究と国際協力



筆者近影

私も理研に入所してはや10年が経ち、月日の流れの速さに驚いています。現在は、ライフサイエンス筑波研究センターの遺伝子基盤研究部の運営を任せ日夜奮闘しております。今後益々忙しくなることを自分に言い聞かせている今日この頃です。この度は「原酒」の執筆にあたり、私の研究生活における人間関係についての私見を述べたいと思います。

最近、精密な解析技術の開発やコンピューター技術開発に支えられた膨大な情報の利用が可能になってきました。そのため、われわれ研究者もこれに対応した研究体制をとる必要が出てきました。即ち、機能的に構成された研究チームの編成が現代科学推進にとって重要な課題となってきたのです。もちろん、このチームの構成要素は人間であるため「互いの信頼関係」や「尊敬」が大変重要なファクターとなってきます。更に、この関係は国際協力へと展開され、異なった視点によって同一プロジェクトを推進することが出来るようになりました。ここで重要なことは、国際協力においては、異なった文化背景を持った研究者が集まって研究をするため、「信頼」という言葉が円滑な研究推進の潤滑剤となるということです。

私も現在、パスツール研究所やチェコのメンデル大学およびテネシー大学の研究グループと長年にわたって共同研究を行っていますが、円滑な推進を継続するためには、いずれの場合も互いの「信頼や尊敬」が常に重要なファクターとして作用していることを強調したいのです。各研究チームの構成員は同一の目的思考を持って集まっていますが、良い意味で互いに利用し合える余裕が欲しいものです。彼等は私のことを『My Friend』と呼んでくれます。しかし、残念なことに国内においてはこのような形で私を受け入れてくれている研究チームがありません。これは、文化の違いによって起こることでしょうか？

多くの日本人には相変わらず「外国人コンプレックス」が浸透しており研究者もその例外ではないのが現状です。研究雑誌のページを一枚めくればそこはすでに外国ですから、これらの日常生活を通して研究者は一般の人に比べて生の欧米文化に接触する機会が多いわけです。しかし、明治維新の頃の日本のように欧米の方法をそのまま受け入れ「本邦初公開」紛いの研究を行っている研究者もあとを絶たないことは

大変残念であると同時に、今後国際舞台における日本人として大変恥ずかしいことであると思います。今こそ「独創性」と「誇り」を持って開かれた国際社会に出るときであると思うのです。

このような意味で理研は、非常に優れた研究体制を整備した研究所であるといえます。近い将来に予定されている省庁統合に向けた内部グループの積極的なチーム編成や、基盤研究部を中心とした「研究牽引型の支援体制」の整備は正に今後の国際社会における一躍を担うものと信ずるのです。研究体制の複雑化に伴い人間関係も複雑となります。このようなときに、世界をリードするのは恐らく互いの信頼をもってまとまった研究チームであると思います。

遺伝子基盤研究部

部長 日下部守昭



国際マウスゲノム学会（1998年、ドイツ、ガルミッシュにて）

懇親会で、パスツール研究所のゲネ博士（筆者の左）のグループと歓談する。こういった時間が人間関係成熟の肥やしとなっていると思う。

理研ニュース No.214 April 1999

発行日：平成11年4月15日

編集発行：理化学研究所総務部広報室

〒351-0198 埼玉県和光市広沢2番1号

電話 (048) 467-9272 (ダイヤルイン) Fax (048) 462-4715

ホームページ [http://www.riken.go.jp]

Email: koho@postman.riken.go.jp

制作協力：株式会社 スリーアイ パブリケーション



愚力ナリ、我等ガ日々。

美シキ哉、我等ガ青春。

1997年度「読売文学賞」受賞作品

東京原子核クラブ

[作・演出] マキノノゾミ

[出演] (五十音順) 阿南健治・大石継太・大家仁志・奥田達士・木下政治

キムラ緑子・小市慢太郎・小林勝也・酒井高陽・西川忠志・三上市朗・南谷朝子

1999年5月30日(日)~6月10日(木) PARCO 劇場 渋谷/パルコパート1-9F

[前売開始] 4月4日(日) [料金] 6,000円(全席指定・税込) [お問合せ] パルコ劇場 03-3477-5858 [企画・製作] 株式会社パルコ

STAFF [美術] 奥村泰彦 [照明] 大川貴啓 [衣裳] 三大寺志保美 [音楽] 川崎晴美 [音響] 堂岡俊弘 [舞台監督] 菅野将棋

[宣伝写真] 野口博 [宣伝美術] 鳥井和昌 [製作] 佐々木征司 [制作] 佐藤玄

