



## 「量子効果に見えない」奇妙な量子トンネル効果の発見

### 研究成果のポイント

- ・大きな水素同位体効果が観測されない量子トンネル効果の発見。
- ・宇宙における有機物の同位体変化過程の解明。
- ・「量子トンネル効果」が今までの予想以上に多くの化学反応に寄与。

### 研究成果の概要

量子トンネル効果<sup>※1</sup>は、幅広い分野の化学において重要な役割を果たしています。量子トンネル効果は質量が小さいほど顕著になるため、水素原子とその重い同位体である重水素<sup>※2</sup>原子とでは、重水素原子の方が反応速度が格段に遅くなると考えられています（同位体効果<sup>※3</sup>が大きい）。しかし我々は、固体有機物と水素・重水素原子との化学反応において極めて同位体効果の小さい量子トンネル効果を発見しました。この結果は「量子トンネル効果には大きな同位体効果が観測される」という化学の常識に一石を投ずるとともに、量子トンネル効果が今まで考えられてこなかった多くの化学反応に寄与していることを示しています。

本研究成果は、米国科学アカデミー紀要（PNAS）オンライン速報版で 2015 年 6 月 1 日（月）の週（米国東部時間）に公開される予定です。

### 論文発表の概要

研究論文名：Quantum Tunneling Observed without Its Characteristic Large Kinetic Isotope Effects  
（大きな速度論的同位体効果が観測されない量子トンネル効果）

著者：羽馬哲也，植田寛和，香内 晃，渡部直樹（北海道大学低温科学研究所）

公表雑誌：米国科学アカデミー紀要（PNAS）

公表日：日本時間（現地時間）2015 年 6 月 2 日（火）午前 4 時（米国東部時間 2015 年 6 月 1 日（月）午後 3 時）

## 研究成果の概要

### (背景)

私たち人間を含む生物や身の回りにある物質、さらには宇宙に存在する物質も化学反応によって絶えず変化しています。一般に、化学反応が進むためには、反応物が活性化障壁（化学反応を起こすために必要なエネルギー）を乗り越えるためのエネルギーが必要となります。そのため、化学反応による物質の変化は高温ほど速く、低温では遅くなります。しかし、水素 (H) など質量の小さい粒子の場合には、物質の波動性が顕著になり、エネルギーが無くても活性化障壁を透過すること（量子トンネル効果）で化学反応が進むことが知られています（図1）。水素は水 (H<sub>2</sub>O) をはじめ有機物にも普遍的に含まれているため、水素が関わる化学反応に量子トンネル効果がどれほど寄与しているかを理解することは、極めて重要視されています。

量子トンネル効果を引き起こす物質の波動性は質量に反比例します。そのため反応物を重い同位体（Hなら重水素 (D)）に置き換えた場合、反応速度が1/100ほどになります（同位体効果が大きい）。そのため、「大きな同位体効果を観測すること」が量子トンネル効果の証拠であると、従来考えられてきました。

### (研究手法・成果)

本研究では、量子トンネル効果で進む反応に大きな同位体効果が観測されるかどうかを調べるために、図2のような超高真空・極低温実験装置を用いて固体のベンゼン (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>) と H, D 原子とを反応させる実験を行いました。

その結果、固体のベンゼンの表面に H 原子または D 原子を照射すると、量子トンネル効果によってシクロヘキサン (C<sub>6</sub>H<sub>12</sub> または C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>D<sub>6</sub>) が生成することがわかりました。しかし、量子トンネル効果で反応が進んでいるにも関わらず、H 原子と D 原子との反応速度の比はわずか 1.5 程度と (H/D = 1.5)、同位体効果が非常に小さいことがわかりました（図3）。一方、気相におけるベンゼンと H, D 原子との反応には大きな同位体効果があることが知られており (H/D = 100)、この「同位体効果の小さい」奇妙な量子トンネル効果は「固体の表面」での反応に特有の現象であることがわかりました。<sup>※4</sup>

### (今後への期待)

本研究で発見された「同位体効果の小さい」量子トンネル効果は、「量子トンネル効果で反応が進むときには大きな同位体効果が観測される」という今までの常識に一石を投ずるものであり、多くの分野に影響を与えることが予想されます（図4）。たとえば、宇宙で有機物を作るには H, D 原子の量子トンネル効果による化学反応が重要なことが知られています。本実験は宇宙の超高真空・極低温環境を忠実に再現しているため、宇宙における有機物の同位体組成の変化を詳細に理解することができるようになります。また、化学反応の多くは本研究のように物質の「表面」で進んでいます。そのため、「同位体効果の小さい」量子トンネル効果は、他の反応でも普遍的に存在している可能性があります。今後「同位体効果の小さい」量子トンネル効果を考慮することにより、多くの化学反応のメカニズムについて理解が深まることが期待されます。

## お問い合わせ先

所属・職・氏名：北海道大学低温科学研究所 助教 羽馬哲也（はま てつや）

TEL：011-706-5474 FAX：011-706-7142 E-mail：hama@lowtem.hokudai.ac.jp

ホームページ：<http://www.lowtem.hokudai.ac.jp/astro/index.html>

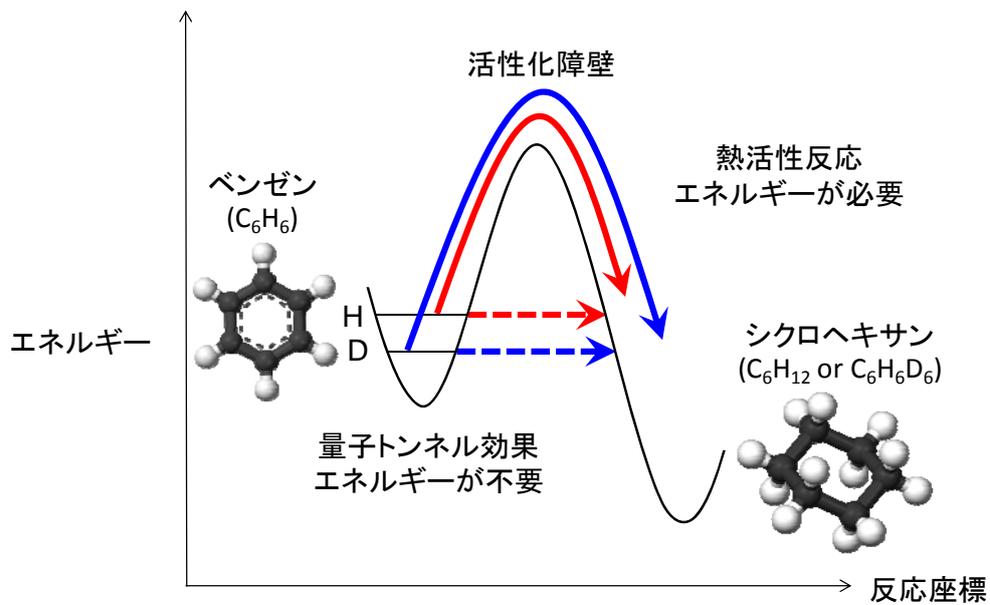


図1 化学反応における2通りのプロセス。熱活性反応と量子トンネル効果。

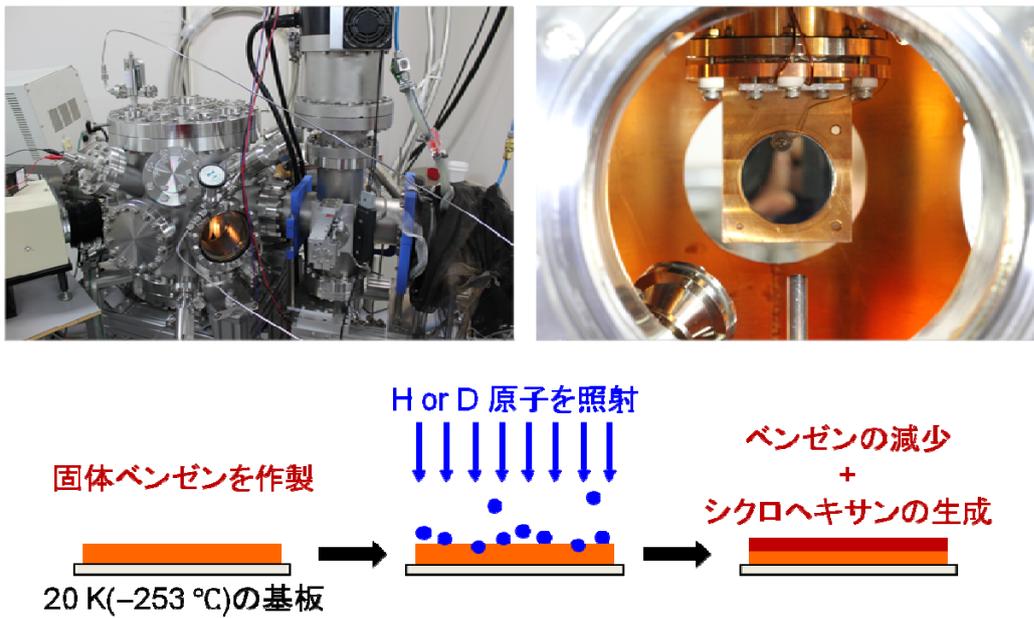


図2 (左上) 北海道大学低温科学研究所の超高真空・極低温実験装置  
 (右上) 超高真空容器の中に設置した極低温の基板  
 (下) 実験の模式図

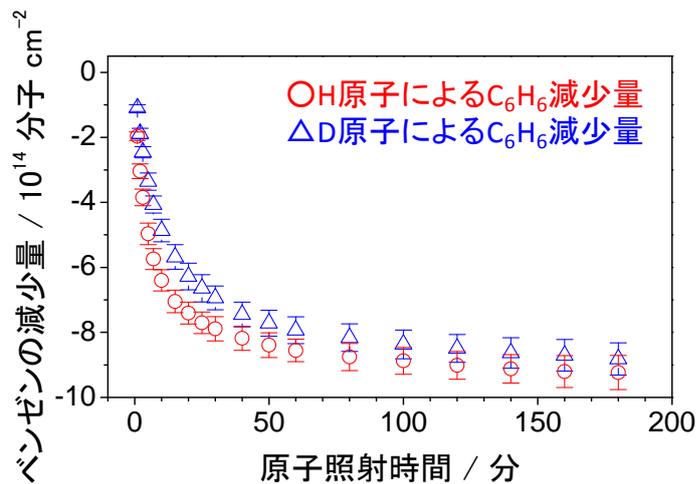


図3 H, D原子との反応による固体ベンゼン (20 K) の減少の時間変化。量子トンネル効果で反応が進んでいるにもかかわらず、同位体効果が非常に小さい。



図4 本研究で発見された同位体効果の小さな量子トンネル効果とその意義

【用語解説】

※1 量子トンネル効果

物質を粒子として扱う古典力学では、化学反応が進むためには反応物が活性化障壁（化学反応を起こすために必要なエネルギー）を乗り越えるエネルギーが必要となる。しかし、H, D原子など質量の小さい粒子は波動性が顕著であるため、エネルギーが無くても活性化障壁を透過して化学反応が進む(図1)。このことを量子トンネル効果という。

※2 重水素

水素の同位体のひとつ。水素原子が陽子1個からなる原子核と電子1個で構成されているのに対し(質量数は1)、重水素原子は陽子1個と中性子1個からなる原子核と電子1個で構成されている(質量数は2)。このように原子核を構成する陽子の数は等しく、中性子の数が異なる原子同士を同位体という。

### ※3 同位体効果

原子や分子内の原子を同位体に置き換えたときに生じる変化。水素原子を重水素原子に置換することによる変化は水素同位体効果という。有機物の同位体 (H/D) 組成は、その有機物が経てきた化学反応により変化する。そのため、地球や宇宙に存在する有機物の同位体組成は、地球・宇宙環境における物質の成り立ちを知るための手掛かりとして盛んに研究されている。

### ※4 補足解説

固体の表面での化学反応は、一般に複数の段階を経て進む。本研究の反応では、

(1) H (D) 原子が表面を拡散しベンゼンと衝突 (反応前段階, 熱活性型過程)

(2) 衝突の際に H (D) 原子がベンゼンと結合 (反応段階, 量子トンネル効果)

と2段階を経て進む。(1)の原子の表面拡散は熱活性型過程で進むため、小さな同位体効果しか持たない(H/D速度比にして1.4程度)。本研究によって、(2)で量子トンネル効果によりH, D原子がベンゼンに付加していても、(1)の影響により実験で観測される同位体効果は極めて小さくなることがわかった。