

# 100兆分の1秒の光パルスで 分子の未知の振る舞いを観る

田原太平 TAHARA Tahei

中央研究所 田原分子分光研究室 主任研究員

「サイエンスは、新しい可能性の提示だと思います」と田原太平主任研究員は語る。「誰も観たことがなかったもの、誰も観ることができなかったものを初めて観て、こういうことが起きていますと示す。そうすれば、そこからさらに新しいサイエンスが生まれます」。田原分子分光研究室では100兆分の1秒という極めて短い時間の光パルスを駆使した独自の分光法を開発し、今まで誰も観ることができなかった分子の振る舞いを探っている。

## 科学を根底から支える分光学

田原主任研究員はまず、無色透明な液体が入った三つのフラスコを取り出した。「三つともクマリンという分子が溶けています。どれもほとんど色が付いていません。ところが、光を当てると、別々の色で光ります(写真1)」

なぜ、光を当てると違う色で光るのか?「光を分子に当てると、光と分子が相互作用して、ある特定の色(波長)の光を吸収したり、散乱したり、蛍光を発したりします。実は、この三つのフラスコは、クマリン分子を溶かしている液体がそれぞれ違います。そのため、溶けているクマリン分子の状態も違うので、光と分子の相互作用の仕方が変わり、それぞれ別の色で光るのです」

光を分子に当てたときに生じる光の色を調べることで、分子の性質や状態を探る。このような分野を分光学という。「一般に“見る”というと、形を見ることをイメージしますが、分光学では光で分子の性質や状態を知ることが“観る”と言います。光と分子の相互作用を深く理解して、物質を観る新しい方法を開発し、今まで観えなかったものを観る。それが分光学です」

その分光学の知識をもとにして、宇宙のかなたの星で起きている現象を理解したり、新しい化学物質をつくり、生命現象を理解したりすることができる。「分光学はあらゆる科学分野を根底から



写真1 クマリン溶液の蛍光と田原主任研究員

支えているのです」

## サイエンスの限界に挑む

田原主任研究員は、10フェムト秒、つまり1秒の100兆分の1という極限的に短い時間の光パルスを駆使した独自の分光法を開発し(表紙写真)、化学反応の過程で分子が変化する様子をとらえる研究を進めてきた。化学反応が起きるとき、分子中の原子が動き、分子の形が変わる。その変化は、フェムト秒レベルの極めて短い時間に起きる出来事だ。

例えば、7-アザインドール二量体という物質に紫外光を当てると、水素結合に関係する二つの水素が移動することが約40年前から知られていた(図1)。しかし、光で起こるこの化学反応の過程は長い間、よく分からなかった。

1995年、米国のAhmed Zewail博士(1999年ノーベル化学賞受賞)たちは、水素は一つずつ順番に動くと主張した。1997年、この主張に異議を唱えたのが、田原主任研究員だった。「私たちの実験データでは、二つの水素は同時に動いていると考えられました。論争になるとは思わず、気楽に論文を発表しました(笑)」。こうしてどちらが正しいのか、世界的な大論争が始まり、この10年間、なかなか決着がつかなかった。水素の移動は極めて短い時間に起こる出来事なので、どちらが正しいか、はっきりと見分けることができなかったからだ。

2007年、田原主任研究員は長年の論争に決着をつける決定的な論文を発表した。「一つずつ順番に動かしたら、一方の水素だけが動いた中間状態があるはず。私たちは10兆分の1秒ごとに撮影できるカメラによって、水素の動きを示す蛍光を連続的に撮影し、中間状態がないことを突き止めました。二つの水素は1兆分の1秒の間に同時に移動していたのです。これでこの論争に決着がついたと思います」

7-アザインドール二量体は、DNA塩基対と似た構造を持つ。この成果は、紫外線によりDNAがどのように傷付くのか、その化学的な仕組みを理解することに役立つと期待される。しかし、この論争が大きな注目を集めた理由はそれだけではない、と田原主任研究員は言う。

「多くの研究者がこの論争を面白がったのは、これがF1レースのようなものだったからだと思います。レーシングカーのように時速300キロで走ることができる車をつくっても、公道は走れません。しかし、どれだけ速い車をつくれるのか、テクノロジーの限界に挑むところにF1の意義があります。私たちの論争も、1兆分の1秒の間に起こる現象を見分けられるのか、サイエンスの限界に挑んだことが、多くの研究者を引き付けたのだと思います」

## 化学反応をリアルタイムで追う

「論争のポイントは、中間状態があるかどうか、という点でした。私たちはさらに進んで、分子がある状態から違う状態へ変化する過程をリアルタイムで観測する研究を行っています」

例えば、10-ヒドロキシベンゾキノリンという分子に光を当てると、酸素と結合していた水素が移動して窒素と結合する(図2)。このような化学反応の過程をリアルタイムでとらえることにより、分子中の原子の動き方には、さまざまなケースがあることが分かってきた。「例えば、光が当たった原子が、光に押された方向へそのまま動いて反応する場合も、押されたのとは違う方向へ移動して反応する場合もあるのです」

このような観測により、将来は光で化学反応をコントロールすることができるかもしれない、と田原主任研究員は夢を語る。

「次の段階では、光の当て方を変えて原子を今までは違う方向へ押してやると、化学反応自体を変えられるかどうかを調べていこうと考えています」

図1 7-アザインドール二量体の二重水素移動

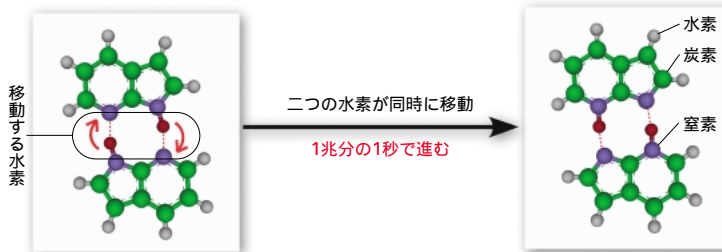
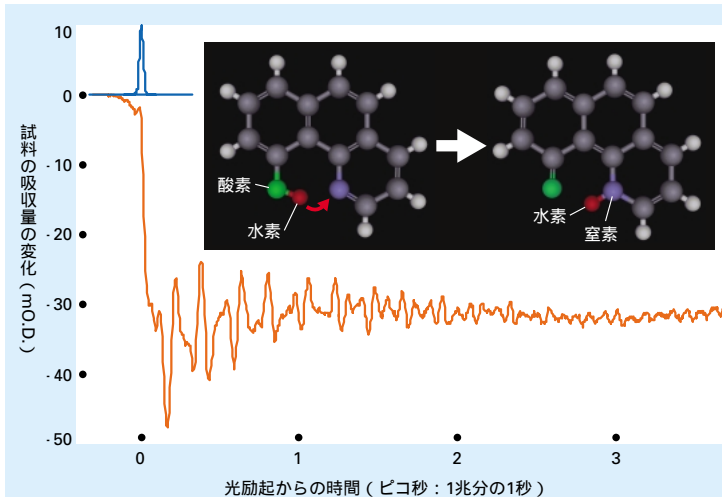


図2 10-ヒドロキシベンゾキノリンの水素の移動



光が当たると分子が不安定になって反応を始め、酸素と結合していた水素が移動して、窒素と結合する。そのときの運動の記憶として分子が振動している様子を波形は示している。

## 新たな知を生み出す

「フェムト秒の光パルスを駆使して、化学反応の過程をリアルタイムで観測できる研究室は、私たちを含めて世界に数ヶ所しかありません」と語る田原主任研究員だが、「2001年、理研中央研究所に研究の場を移した当初は、ずいぶん悩みました」と打ち明けた。

「大学などでは、異分野の研究者と話す機会はほとんどありません。ところが、理研には、自然科学のあらゆる分野のトップサイエンティストがいて、その人たちと顔を突き合わせて話をする機会がよくあります。話してみると、価値観やものの見方が違います。その中で私の研究にはどういう意味があるのかと、価値観を揺さぶられ、悩みました。そして最終的には、自分の本質に忠実であろうと考えるに至りました。つまり、F1的な研究をやること。先端的で典型的なテーマにチャレンジすることで、その背後にある一般的な現象を理解するための知を深めることです。エンジニアリングは既存の知を使って役に立つものを生み出しますが、サイエンスで重要なのは、新たな知を生み出すことです」

## 界面の分子を観る

「最後に、私たちの最も新しい1F1的な研究を紹介しましょう」。田原主任研究員は再び、液体の入ったフラスコを取り出した。「液体と空気が接している界面、ここでは分子は何色をしているのか分かりますか？ 私たちはこの界面にある分子の色だけをとらえて、その状態を知る方法を開発しました」

界面では、さまざまな化学反応が起きている。例えば、空気中を飛んでいる水滴の界面で起きている化学反応を知ることが、大気汚染などのメカニズムを解明する上で重要だ。また、生命の仕組みを解明するには、生体膜という界面の上で起きているさまざまな化学反応を知る必要がある。「ところが、界面で分子がどのような状態になっているのか、それを観るための方法の開発はとても遅れているのです」

1980年代、強い光を当てて界面の分子だけを観測する、「二次の非線形分光」と呼ばれる方法が考案された。それによって界面の分子の色を観測することが、原理的にはできる。「しかし、これまでは当てる光の色(波長)を少しずつ変えながら、スペクトル(波長ごとの強度の分布)を取る必要があり、実験に何日もかかってしまいます。そのため、この方法はあまり発展していませんでした」

田原主任研究員らは、この実験時間をわずか1分

程度に短縮する方法を開発した。「さまざまな色を含む白色のフェムト秒光パルスを当てて、一度にスペクトルを取ってしまおうというアイデアです。この方法は、世界でもまだ、私たちにしかできません」

この方法によって、驚くべきことが分かった。「水と空気の界面では、分子はその構造の違いによって、油やアルコールなど、あたかも異なる液体の中にいるかのような違った色を示していることが分かったのです。そしてそれは、どうも分子の構造によって分子の傾き方や浮き上がり方が違うために起こるようだ、ということが分かりました(図3)。水と空気の界面で、そのような違いがあるなんて、今まで思ってもみなかった現象です。こんな基礎的なことが、21世紀になるまで分かっていなかったんです。とてもシンプルなことです。だからこの成果はとても自慢なんです。シンプルなことにこそ、サイエンスの最も本質的なことが示されているからです。今後は生体を含めて複雑なシステムの中で、シンプルなことを見つける実験をしていきたいですね」

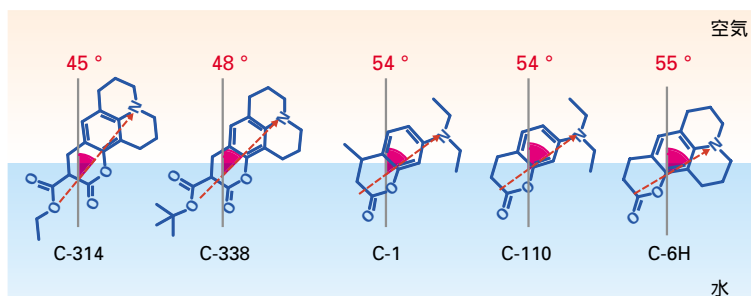
## 新しいものを観るには

田原主任研究員は、学生のころ、良いサイエンティストになるための戦略を練ったと振り返る。

「同級生には頭のいい人がたくさんいました。ただ、彼らは難しいことを言ってあれこれ批評はするけれど、あまりチャレンジをしない。例えば2回ぐらい試して、1回成功する。私はそれほど頭がいいわけではないが、元気と体力には自信がある。彼らが2回やるうちに、10回チャレンジすれば、3回ぐらいは成功できるだろう。10回あれば、ばからしいと思われるようなアイデアも試すことができる。その中には、本当に新しいことがあるかもしれない。そういうやり方をしようと思ったのです」。さらに、「新しいものを観るには、基礎的な力をしっかりと身に付けた“おっちょこちょい”でなければいけない」と続ける。「ばからしいと思われるアイデアにもチャレンジする、おっちょこちょい。そういうアイデアもやってみないとどうしても我慢できないという“内圧”、好奇心が研究者には大事だと思います」

(取材・執筆: 立山 晃)

図3 水と空気の界面における分子の状態



水分子は、酸素側がマイナス、水素側がプラスへ、電荷の偏り(極性)を持つ。構造が異なる分子は傾き方(赤い矢印)や浮き上がり方が異なるため、同じ水と空気の界面でも、水との相互作用の大きさが違って、異なる極性を感じていることが分かった。

**サイエンスは、  
新しい可能性の提示だと思います。**

### 関連情報:

2007年3月20日プレスリリース「1兆分の1秒で進む水素の超高速移動メカニズムを分子レベルで解明」  
特開2006-194770「時間分解蛍光顕微鏡」  
特開2006-145406「電子スペクトル測定方法及び装置」