

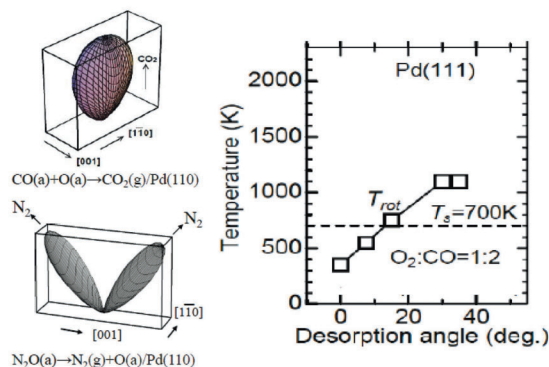
ホームページ : <http://www.sssj.org/ejsnt> 電子メール : [ejssnt@sss.jst.go.jp](mailto:ejssnt@sss.jst.go.jp)J-Stage アーカイブ : <http://www.jstage.jst.go.jp/browse/ejsnt/>

## 脱離分子から化学反応の遷移状態を探る

## An Experimental Approach to Transition States of Surface Reactions; Energy Partitioning in Repulsive Desorption (Conference -SSSJ-32-)

Vol. II, pp. 65-71 (April 27, 2013)

Tatsuo Matsushima, Hideo Orita, Anton Kokal



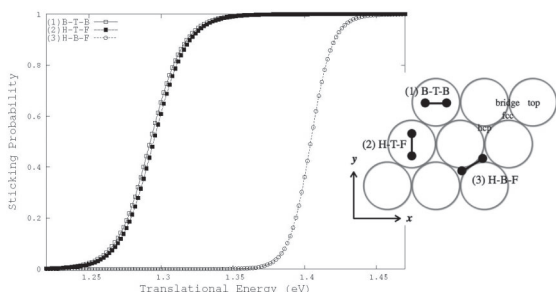
固体表面で起こる化学反応によって生じる生成分子が脱離する場合、その並進運動や回転・振動運動に再分配されるエネルギーの情報から、化学反応を起こすサイトの構造や化学反応のダイナミクスに関する情報を得ることができる。そのために筆者らは角度分解TOF型分子速度測定装置と状態別可能な多光子共鳴イオン化法(REMPI)を組み合わせた実験手法を開発して反応性脱離過程を観測した。例えば、パラジウム結晶表面上で起こる会合脱離型反応である  $\text{CO(a)}+\text{O(a)}\rightarrow\text{CO}_2\text{(g)}$  や分離脱離型反応である  $\text{N}_2\text{O(a)}\rightarrow\text{N}_2\text{(g)}+\text{O(a)}$  で脱離する分子の計測を行い、反応場の構造情報や反応脱離ダイナミクスの詳細情報を得ることができた。

## 酸素分子の解離吸着におけるトンネル効果

Tunneling Effect of  $\text{O}_2$  in Dissociative Adsorption on Pt(111) Surface (Regular Paper)

Vol. II, pp. 72-75 (May 25, 2013)

Koji Shimizu, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasa



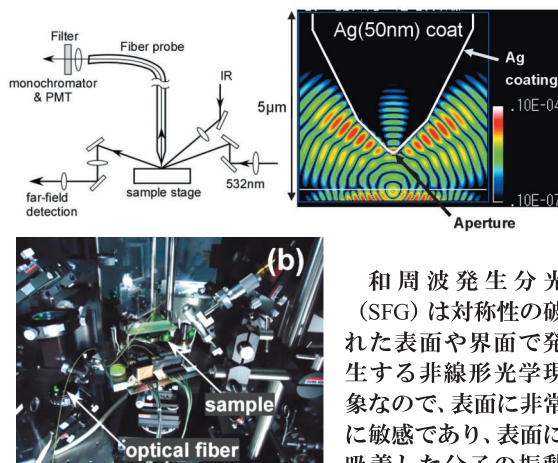
(重) 水素分子の解離吸着や拡散過程でトンネル効

果が効いていることが知られているが、重い元素に関しては古典的に取り扱われることが多い。しかし、最近、酸素分子の零点エネルギーが  $\text{SrTiO}_3$  の強誘電相の形成や成層圏でのオゾンの形成に影響していることが指摘されている。本研究では、白金結晶表面での酸素分子の解離吸着反応において、その吸着確率と入射する分子の運動エネルギーとの関係を量子力学計算で解析した。その結果、吸着確率 0 から 1 に遷移するエネルギー領域があり、その遷移領域が計算に用いたポテンシャル形状に依存することや分子振動が影響していることなどを議論し、その結果、トンネル効果によって解離吸着を促進していることが示唆された。

## 走査型近接場光顕微鏡で和周波発生分光をする

## Feasibility Study for Near-Field Optical Sum-Frequency Generation Spectroscopy Using a Metal-Coated Fiber (Regular Paper) Vol. II, pp. 76-79 (June 15, 2013)

Takayuki Miyamae, Takashi Tokizaki



和周波発生分光 (SFG) は対称性の破れた表面や界面で発生する非線形光学現象なので、表面に非常に敏感であり、表面に吸着した分子の振動

構造などの研究に広く用いられているが、空間分解能が無いのが欠点である。一方、走査型近接場光顕微鏡 (SNOM) は回折限界を超えてナノメートル尺度での空間分解能を持つ光学顕微鏡なので、SFG と組み合わせれば、高い空間分解能で局所的な分子振動の情報を得ることができ、強力な表面分析手法となると期待できる。本研究では、銀膜でコートしたマルチモード光ファイバーを用いることによって、進行漏れ光を効果的に除去して近接場光のみを検出することに成功した。これは、時間領域差分法のシミュレーション計算から示され、プローブと試料表面間の距離依存性から実験的にも確かめられた。これを用いた SNOM で、Au 結晶表面上に吸着したオクタデカンチオール分子の振動に対応する SFG 信号を得ることに成功した。