豊田理研における研究課題：

分子－固体表面間相互作用が顕在化する表面反応素過程の解明

目的：　金属触媒が関与する触媒作用は、自動車の排ガス浄化等に極めて重要な役割を果たしている。本研究では、触媒反応としては最も典型的な反応であるＣＯ分子のＯ原子による酸化反応を例にとって、その反応性を、反応に関与する原子、分子および表面間のポテンシャルエネルギー面（ＰＥＳ）との関連を実験的に明らかにしようとするものである。気相分子と表面吸着原子との直接衝突によって進む反応機構である Eley-Rideal 反応機構を用いると、衝突エネルギー等の初期条件を選択できるので、分子線法を用いた研究を行う。具体的には、超高真空装置内で清浄 Pt(111)面上に吸着した ^{18}O原子に、並進エネルギーを 0.1～2.3 eV の範囲内で制御したＣＯ分子を衝突させ、CO_2 分子が生成する実験条件を探索する。さらに、生成するCO_2 分子の散乱角度や速度分布を測定し、反応の起こる様子を詳しく調べることによって、反応系のＰＥＳについての知見を得ることを目指す。

実験法：　自家製の分子線-表面衝突反応解析装置（図１）を用いる。１）通常の熱エネルギーよりも高く、その並進エネルギーが制御された超熱 CO 分子を、シード法という超音速分子線法ではよく知られた方法で生成する。２）液体窒素で冷却した清浄 Pt(111)上に吸着した ^{18}O 原子に、超音速分子線法によって 0.4～2.3 eV までのある決まった超熱エネルギーに加速したCO分子を衝突させ、３）生成した $^{12}C^{18}O^{16}O$ (質量=46)分子を、試料室に設置した質量分析器および回転型質量分析器で検出する。４）また、生成する $^{12}C^{18}O^{16}O$ 分子の角度および速度分布を、衝突エネルギーの関数として測定する。

期待される成果：　反応の起こる条件を探索し、これを見出す。その結果、気相分子の関与する反応（Eley-Rideal 機構）の活性化エネルギーや反応動力学についての知見を得る。この結果と、これまでに金属表面上に共吸着したＣＯ(a)分子とＯ(a)原子の反応（Langmuir-Hinshelwood 機構）について結果得られた知見とを合わせて、金属触媒表面上で進むＯ原子とＣＯ分子の反応系のポテンシャルエネルギー面と反応動力学に関する詳しい知見を得る。

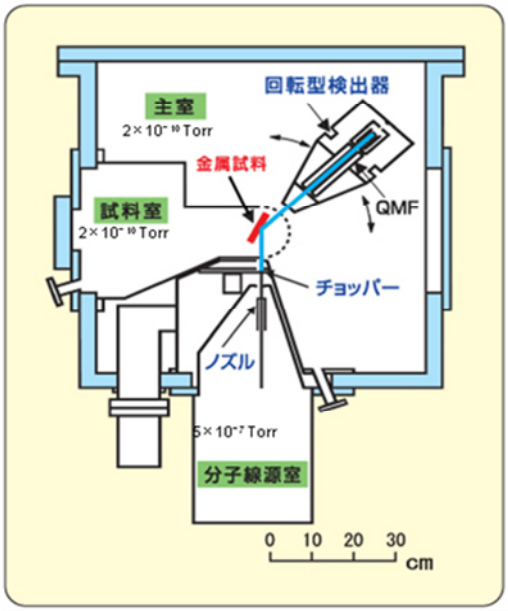

図 1. 分子線-表面衝突反応解析装置.