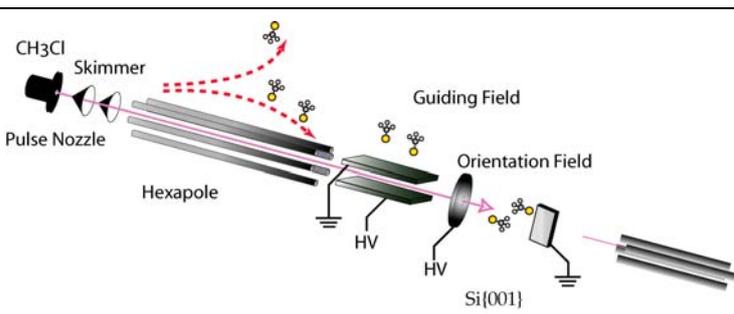


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	3. 凝縮系の物性と機能
中項目	3-1. 表面・界面
小項目	3-1-2. 配向分子線による表面反応研究

概要（200字以内）

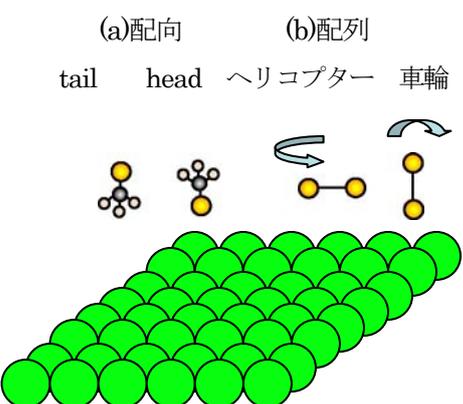
表面化学反応の反応選択性を決める要因の一つに、反応に関与する分子軌道の形状を考慮に入れた「分子の形」が挙げられる。表面が飛来してくる「分子の形」をどのように認識して、化学反応が進むのかを理解することが重要である。入射分子の配向や配列に依存した表面化学反応の研究は、最近第一歩を踏み出したばかりである。将来は、入射分子の配向・配列情報の化学反応過程への伝達を理解して、表面反応を制御する方向に向かう。



配向分子線による表面反応研究

現状と最前線

表面化学反応の反応選択性を決める要因の一つに、反応に関与する分子軌道の形状を考慮に入れた「分子の形」が挙げられる。表面に飛来する「分子の形」を表面がどのように認識し化学反応が進むのかについて理解することが、表面化学反応の制御につながる。例えば、CO の場合、結合に関与する5σ軌道はC端に大きな分布をもっており表面原子との相互作用がC端で引力的となることが期待される。表面原子から見た「分子の形」は、並進・振動・回転運動にともない時間に依存した変化をしているので化学反応の理解にはダイナミクスの理解が必要不可欠となる。



(a)配向 tail head (b)配列 ヘリコプター 車輪

図1. 入射分子の配向と配列

反応過程入り口における分子の状態を「分子の形」という観点から眺めた場合、図1(a)の分子配向と(b)の分子配列の制御が考えられる。分子配向制御は、対称コマ型分子のように分子のheadとtailの反応性の違いが期待される場合に重要となる。一方、分子配列制御は等核二原子分子のように分子のbroad-side（ヘリコプター型）とlong-side（車輪型）の反応性の

違いが期待される場合に重要である。分子配向を制御できる配向分子線技術が分子-表面相互作用の研究に導入されたのは 1980 年代後半であるが、特殊な装置のため研究例は少なく、対象も NO や N₂O と金属表面の組み合わせに限定された。2005 年になってやっと分子の解離吸着の問題に配向分子線技術が応用され、表面化学反応研究への第一歩が踏み出された。現在、欧米の研究グループが、この研究領域から完全に撤退したため、唯一大阪大学のグループがこの問題にチャレンジしている。配列分子線技術に関しては、2004 年にイタリアのグループにより表面化学反応研究に応用され研究は始まったばかりである。酸素分子や炭化水素と金属表面の反応において配列効果が見いだされている。国内でも、この方向を目指した研究装置の立ち上げ準備が大阪大学で進んでいる。

将来予測と方向性

- ・ 5 年後までに解決・実現が望まれる課題

配向・配列分子線を用いた表面化学反応研究において、表面上の反応生成物を分光学的手法によりモニターし反応分岐の分子配向・配列依存性を解明していることが望まれる。また、気相への反応生成物の同時モニターにより、反応ダイナミクスを相補的に理解することを可能にする必要がある。これにより、飛来分子の配向・配列制御による表面反応選択性制御の可能性を明らかにする事が課題である。

- ・ 10 年後までに解決・実現が望まれる課題

配向・配列分子線を用いた表面化学反応研究において蓄積された理解をもとにした表面反応のデザインが期待される。ランダムな向きの分子が飛来した場合でも、ある向きの分子だけが、ある特定の表面化学反応を選択的に引き起こせるような表面物質相を構築できることを期待する。

キーワード

配向分子線、配列分子線、表面化学反応、反応ダイナミクス

(執筆者： 岡田 美智雄)