

## 反応物理化学研究室

教授：笠井俊夫、准教授：大山 浩、講師：岡田美智雄、  
助教：蔡 徳七

URL: <http://www.chem.sci.osaka-u.ac.jp/lab/kasai/main.html>

E-mail: [tkasai@chem.sci.osaka-u.ac.jp](mailto:tkasai@chem.sci.osaka-u.ac.jp)



### 化学反応の立体ダイナミクス

原子や分子そして分子クラスターは、それぞれに固有の形を持っています。化学反応における反応機構、反応速度、そして反応分岐比は、化学種のどの部分が互いに接して化学結合を形成するのかという「立体効果」に大きく左右されます。当研究室では、環境化学、燃焼化学やクラスター化学、そして表面化学などの各分野の化学的に重要な反応についての「立体効果」の研究を進めています。まず反応に先立って、六極電場、六極磁場、偏光レーザーを用いて分子の配向を制御します。その後、相手分子と衝突させ反応を観測します。また、六極電場用いると、不安定な分子クラスターの双極子モーメントの値や構造解析も行えます。このようにして見出した立体効果を利用して、化学反応を制御することも将来の目標です。

### 超高真空中の表面における吸着と反応の立体効果

当研究室で新規に開発した、超高真空対応配向分子線化学反応装置の外観を図に示します。装置は配向分子線源、表面反応および分析室で構成されており、配向制御した分子をシリコン表面や金属表面に照射して、その表面と反応させることができます。この装置を用いて、金属や半導体表面で起こる反応の立体効果、さらに表面構造の変化のダイナミクスについて原子レベルで解明しています。これらの研究は、金属酸化薄膜形成や合金触媒活性の発現に関連する「ボトムアップの化学」研究と言うこともできます。

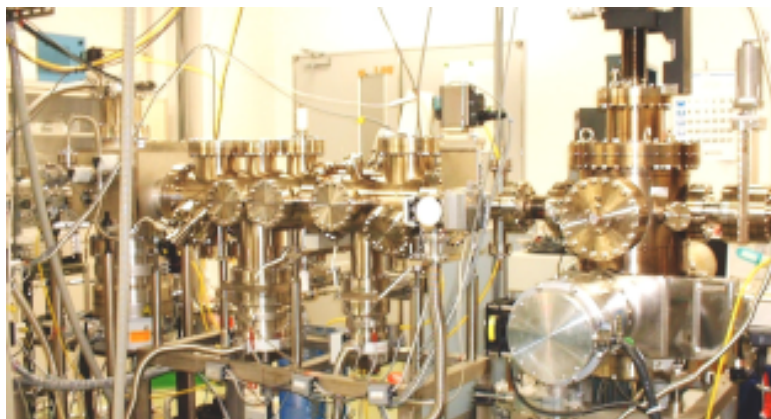


図1 超高真空対応配向分子線化学反応装置

### エネルギー移動反応の立体ダイナミクス

準安定励起希ガス原子と分子間で起こるエネルギー移動反応は、化学反応の基礎研究テーマとして重要かつ興味深いものです。この反応は多様な反応分岐を起こすので、原子分子レベルの反応機構を明らかにするための格好の研究対象です。例えば、ペニングイオン化反応は電子交換機構でエネルギー移動してイオン化すると考えられており、プラズマ化学や星間物質の研究と深く関連しています。当研究室では配向分子線を用いて、素反応過程における立体効果を解

明します。反応断面積は衝突エネルギーにも強く依存します。これらの反応ダイナミクスの研究から、分子間相互作用の異方性の観測や立体効果の発現機構を明らかにすることができます。また、CH や OH ラジカルの反応の解明も行っていきます。このように、完全配向実験の独創的な研究手法（図2）で、化学反応の立体効果を原子分子レベルで詳細に解明しています。

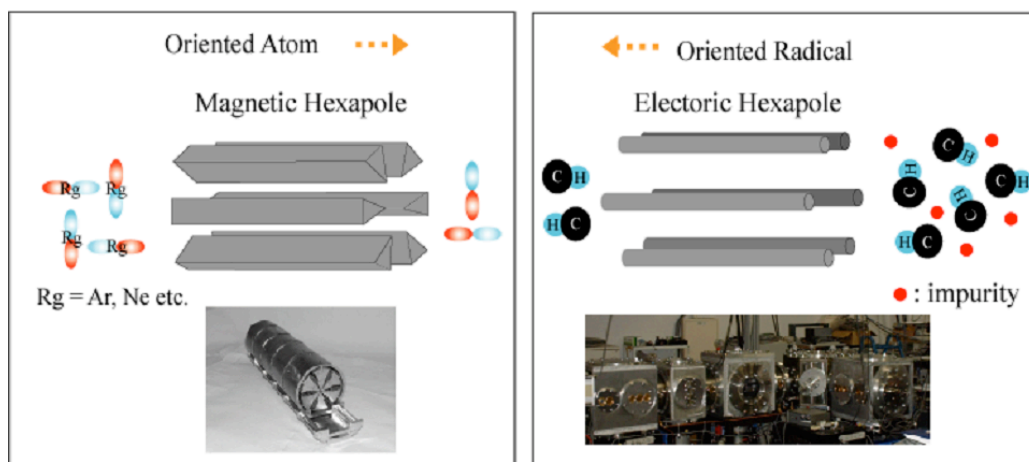


図2 完全配向実験のための原子線用六極磁場（右）と分子線用六極電場（左）

## 参考文献

- (1) Effect of Mutual Configuration between Molecular Orientation and Atomic Orientation in the Oriented  $\text{Ar}(^3\text{P}_2) + \text{Oriented CF}_3\text{H}$ , D. Watanabe, H. Ohoyama, T. Matsumura, T. Kasai. *Phys. Rev. Letters*, **99**, 043201-1-4 (2007).
- (2) Reaction-Path Selection with Molecular Orientation of  $\text{CH}_3\text{Cl}$  on  $\text{Si}\{100\}$ , Michio Okada, Seishiro Goto, and Toshio Kasai, *J. Am. Chem. Soc. (communications)* **129**, 10052-10053 (2007).
- (3) X-ray Photoemission Study of the Temperature-Dependent  $\text{CuO}$  Formation on  $\text{Cu}(410)$  using an Energetic  $\text{O}_2$  Molecular Beam, M. Okada, L. Vattuone, K. Moritani, L. Savio, Y. Teraoka, T. Kasai, M. Rocca, *Phys. Rev. B (Brief Reports)*, 233413-1-4 (2007).
- (4) Location of Hydrogen Adsorbed on  $\text{Rh}(111)$  Studied by Low-Energy Electron Diffraction and Nuclear Reaction Analysis, M. Fukuoka, M. Okada, M. Matsumoto, S. Ogura, K. Fukutani, T. Kasai, *Phys. Rev. B*, **75**, 235434-1-9 (2007).
- (5) Protective Layer Formation during Oxidation of  $\text{Cu}_3\text{Au}(100)$  using Hyperthermal  $\text{O}_2$  Molecular Beam, M. Okada, M. Hashinokuchi, M. Fukuoka, and T. Kasai, K. Moritani and Y. Teraoka, *Applied Physics Letters*, **89**, 201912 (2006).
- (6) Editorial: Stereodynamics of Chemical Reactions, T. Kasai, S. Stolte, D. Chandler, and A. G. Urena, *Euro. Phys. J. D*, **38**, 1-2 (2006).
- (7) Dynamical Steric Effect in Decomposition of Methyl Chloride on Silicon Surface, M. Okada, S. Goto, T. Kasai. *Phys. Rev. Letters* **95**, 176103-1 ~176103-4 (2005).
- (8) Trapping hydrogen with a bimetallic interface, Michio Okada, Kousuke Moritani, Toshio Kasai, Wilson Agerico Dino, Hideaki Kasai, Shouhei Ogura, Markus Wilde, Katsuyuki Fukutani, *Phys. Rev. B (Brief Reports)*, **71** 033408-1 ~ 033408-4 (2005).
- (9) Review: Orienting and aligning molecules for stereochemistry and photodynamics, Vincenzo Aquilanti, Massimiliano Bartolomei, Fernando Pirani, David Cappelletti, Franco Vecchiocattive, Yuichiro Shimizu, and Toshio Kasai, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **7**, 291-300 (2005).