

**白金表面における振動励起したメタン分子の解離吸着反応****Quantum state-resolved CH<sub>4</sub> dissociation on Pt(111): coverage dependent barrier height**北大低温研<sup>1</sup>, スイス連邦工科大学ローザンヌ校<sup>2</sup> ◯植田 寛和<sup>1</sup>, Li Chen<sup>2</sup>, Rainer D. Beck<sup>2</sup>ILTS, Hokkaido Univ.<sup>1</sup>, EPFL<sup>2</sup>, ◯Hirokazu Ueta<sup>1</sup>, Li Chen<sup>2</sup>, Rainer D. Beck<sup>2</sup>

E-mail: hirokazu@lowtem.hokudai.ac.jp

水蒸気改質過程における律速段階はメタンの C-H 結合分解であり, メタンの解離反応を理解することは, 学術的な興味だけでなく, 産業的にも重要なものである. また, メタンは単純な 2 原子分子より大きな多原子分子であるが, 高度な理論計算で十分に扱えるサイズであるため, 近年の理論計算研究の発達に伴いこの反応系の研究が盛んに行われている.

本講演では, 白金表面における振動励起メタンの解離吸着反応について発表する. 超音速分子線技術を用いて, メタンの並進運動エネルギーを制御し, さらに赤外レーザーを用いてメタンの非対称伸縮モードを励起させた. また, メタン照射中に解離生成物であるメチル基を反射型赤外分光で検出した. 生成したメチル基の対称伸縮モードに対応する赤外吸収ピーク強度をメチル基の表面被覆率に変換することで, 照射量—表面被覆率のメタン解離吸着曲線が得られる. 過去の研究では, 主に清浄表面における初期吸着確率に着目されてきたが, 一連の解離吸着曲線を得ることで, 初期吸着確率だけでなく吸着確率の被覆率依存性および飽和被覆率を決定することが可能となった. この結果より, 初期吸着確率と飽和被覆率に相関があることが明らかになった.

また, H を D に部分的に置換した同位体メタン (CH<sub>3</sub>D, CH<sub>2</sub>D<sub>2</sub>, CHD<sub>3</sub>) を用いて同様に C-H 伸縮モードを励起させて白金表面に解離吸着させた. この結果より, 振動励起による結合選択的な解離吸着が明らかになった.