

## 原子・分子ビームによる表面反応制御とその応用展開

原子力機構 寺岡有殿  
神戸大学 田川雅人

原子・分子ビームを応用した表面反応研究は昨今大きな進歩を遂げている。さらに、表面反応の評価に放射光光電子分光が応用され、表面反応過程の動的観察も進んでいる。そこで、原子・分子ビームによる表面反応制御と評価技術の最先端を俯瞰することで、先端的な先行研究を生み出す契機となることを期待して本シンポジウムを企画した。また今回は原子・分子と材料表面との相互作用研究が重要な応用分野として、宇宙材料分野とのコラボレーションを企画した。宇宙では幅広い速度で原子・分子を含む様々な粒子が宇宙機と衝突し、多くの材料が宇宙環境で特性変化を受けることが明らかになり、宇宙環境という特殊な反応場を再現した地上試験の重要性が近年クローズアップされているためである。

配向分子線について岡田美智雄氏（阪大院理・招待）が「分子の状態制御による表面化学反応」と題して解説した。 $\text{CH}_3\text{Cl}/\text{Si}(001)$  や  $\text{NO}/\text{Si}(111)$  の反応系、 $\text{CH}_3\text{Cl}/\text{HOPG}$  や  $\text{CH}_3\text{Cl}/\text{Si}(111)$  の散乱系で見られた付着確率の配向依存性から、入射分子の配向に依存した相互作用ポテンシャルについて異方性の議論ができることが示された。整列分子線について倉橋光紀氏（NIMS・招待）が「量子状態選別酸素分子ビームによる表面反応スピン・立体効果の観測」と題して解説した。 $\text{O}_2$ 分子の分子軸方位（回転面が表面に平行か垂直か）とスピン状態を選択する技術を紹介し、 $\text{O}_2/\text{Si}(100)$ ,  $\text{Al}(111)$  反応系で  $\text{O}_2$  吸着確率が分子軸方位、および、 $\text{O}_2$ 分子と表面スピンの相対関係に依存することを示した。高岡毅氏（東北大多元研・招待）は「分子線による表面吸着分子の衝突誘起移動」と題して、 $\text{Pt}(997)$  ステップ表面に吸着した  $\text{CO}$  および  $\text{NO}$  分子の吸着サイトが  $\text{Ar}$  原子線を照射することで変化する様子を解説した。佐々木正洋氏（筑波大院数物・招待）は「超音速原子線散乱を応用した表面吸着層の実時間無擾乱計測」と題して  $\text{He}$  原子線散乱法について解説した。 $\text{He}$  原子線が吸着種との衝突で鏡面反射から外れるときの散乱断面積は吸着種の実サイズより大きいため、希薄な吸着種の被覆率やその配置に関してリアルタイムで計測できる利点があることが示された。高橋真氏（コベルコ科研）は「分子衝突による酸素吸着  $\text{Ru}(0001)$  表面構造の変化」と題して、 $\text{O}_2/\text{Ru}(0001)$  反応系の高被覆率領域における  $\text{O}_2$  解離吸着と酸素吸着サイトについて議論した。植田寛和氏（北大低温研）は「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」と題して、水蒸気改質過程における律速段階として知られるメタンの  $\text{C-H}$  結合分解について、解離生成物であるメチル基を反射型赤外分光で検出する手法でメタン分子の振動励起効果（ $\text{C-H}$  伸縮モードを赤外レーザーで励起）を紹介した。

山田哲哉氏（JAXA 宇宙研・招待）は「空力加熱を受ける宇宙機の耐熱材における高温表面反応」と題した講演で、惑星大気に突入する宇宙機に衝突する原子・分子の運動エネルギーが熱エネルギーに変換されることによる空力加熱率が  $20\text{MW}/\text{m}^2 \sim 300\text{MW}/\text{m}^2$  にも及ぶこと

から、耐熱システムの設計には耐熱材の表面反応を正確に予測する必要性を強調した。宮崎英治氏（JAXA 研開本部・招待）の講演では、「宇宙環境の影響による材料表面での変化」について、宇宙環境を地上で模擬する真空複合環境試験設備の紹介と、原子状酸素・電子線・真空紫外線を同時照射する複合宇宙環境地上実験の重要性が強調された。貴傳名健悟氏（兵庫県立大高度研）は「Si 含有 DLC 膜の原子状酸素照射効果」と題して、地上で原子状酸素との衝突を模擬した Si 含有 DLC 膜のグロー放電発光分光法やラザフォード後方散乱分析/弾性反跳検出分析を用いた分析から、宇宙での Si 酸化反応により Si 含有 DLC 膜は高い耐性が期待できることを報告した。

以上のように原子・分子ビームと表面の衝突実験では原子レベルで反応機構が議論されるため、理論計算との協調で反応機構の理解が深まると期待できる。そこで、本シンポジウムでは笠井秀明氏（阪大院工・招待）から「表面反応の量子ダイナミクス」と題して、様々な表面反応系の理論的な解析例、例えば  $H_2$  分子や  $O_2$  分子の解離吸着反応に現れる量子トンネル効果、ポテンシャルエネルギー極小点からずれた金属表面上の H 原子の吸着サイトと波動関数の非局在性、表面とサブサーフェス間のプロトン吸収・放出過程における量子効果、固体酸化物形燃料電池の電解質膜中での酸素イオン伝導における量子効果、グラフェン上でのリチウムの拡散における量子効果、などについて紹介いただいた。また、國貞雄治氏（北大院工）からは「fcc 鉄(111)表面上及びサブ表面領域における水素原子の吸着状態」の詳細な理論解析で得られた吸着エネルギーと、独自開発した H 原子核の量子状態計算によって得られた吸着状態に関する知見が紹介された。

本シンポジウムでは、表面で起こる化学反応の微視的理解を促進する方法や新しい反応制御の発想を想起する効果があったものと期待する。同時に、応用物理学をバックグラウンドに持つ研究者と宇宙工学者の交流の契機ともなっていると期待する。最後に、ご講演を快くお引き受けいただいた先生方、および、ご来場いただきました多くの聴衆の皆様方に厚くお礼申し上げます。