

金 有洙

## Kim 表面界面科学研究室

埼玉県和光市広沢 2-1

ykim@riken.jp



### 単一分子におけるエネルギー移動・変換

エネルギーの移動や変換の過程を個々の分子に対して詳細に記述することは、分子とエネルギーとの相互作用を理解する上で最も重要な要素の1つである。本研究では、単一分子や分子集合体及び低次元分子性物質の構造と電子物性を明らかにし、エネルギー移動・変換の様子を可視化する手法の開発を目指している。そのため、主に走査トンネル顕微鏡 (STM) による実験と密度汎関数法 (DFT) による理論の両面で、分子・原子レベル研究を行っている。今年度の代表的な成果として、単一分子光化学反応の観察・制御及び機構解明に関する研究を紹介する。

近年、可視光で駆動する太陽電池や光触媒などのエネルギー変換システムに関する研究開発が世界中で盛んに行われている。一方で、これまで固体の金属表面上では、可視光の直接照射による分子の光化学反応は起こらないと考えられてきた。これは、可視光のエネルギーが光化学反応を引き起こすための電子励起に十分でないこと、分子と金属表面原子間の強い軌道混成により分子の励起寿命が短く、反応に至る前に励起状態が緩和してしまうことが主な原因として挙げられる。今回、銀および銅の基板に吸着したジメチルジスルフィド分子が可視光の照射により分解する様子を、STM を用いて分子レベルで観測し、反応挙動を解析した。さらに、STM 実験結果と DFT 計算結果の比較から、分子と金属基板の界面における相互作用によって、化学反応に必要な光エネルギーが減少し、分子の励起寿命が長くなった結果、金属基板上での可視光による新たな反応経路が形成されたことを明らかにした[1]。この研究により、分子の吸着状態により光化学反応のメカニズムを制御できることが初めて実証された。さらに、伝搬光のみならず、STM 探針と基板との間に発生した局所表面プラズモンによる化学反応の場合にも分子の吸着状態が反応経路を支配することを明らかにした[2]。

#### 参考文献

[1] “Direct pathway to molecular photodissociation on metal surfaces using visible light”, Emiko Kazuma, Jaehoon Jung, Hiromu Ueba, Michael Trenary, Yousoo Kim, *J. Am. Chem. Soc.* 139 (2017) 3115-3121.

[2] “Real-space and real-time observation of a plasmon-induced chemical reaction of a single molecule”, Emiko Kazuma, Jaehoon Jung, Hiromu Ueba, Michael Trenary, Yousoo Kim, submitted.