

## 熱的条件下における貴金属クラスターの光電子イメージング

(東大院総合) ○山口 雅人, 立川 慧太郎, 永田利明, 宮島 謙, 真船 文隆

Photoelectron Spectroscopy of Precious Metal Clusters under Heating Conditions

(The University of Tokyo) ○Masato Yamaguchi, Keitaro Tatsukawa, Toshiaki Nagata, Ken Miyajima, Fumitaka Mafuné

The adsorption forms of reactants on catalysts are important for their reactivity. In this study, we focused on how the electronic/geometric structures were changed after the clusters underwent heating. The  $\text{Rh}_3\text{NO}^-$  clusters were generated by laser ablation of a Rh rod in the presence of a He/NO mixture in the gas phase. The clusters were heated and then spatially separated by TOF-MS before being irradiated with a laser (355 nm, 3.55 eV) to obtain photoelectron images using velocity map imaging (VMI). The heating of the  $\text{Rh}_3\text{NO}^-$  clusters induced some changes in the photoelectron spectrum; a peak around 2.1 eV in binding energy decayed gradually with increasing temperature up to 500 K.

**Keywords :** Gas-Phase Cluster, Photoelectron Spectroscopy, Precious Metal

本研究では小分子の吸着したクラスターが熱的条件下でどのような電子・幾何構造変化を起こすのかに着目した。NO/He 混合気体存在下で Rh 金属試料をレーザー蒸発することで  $\text{Rh}_n\text{NO}^-$  を生成した。生成したクラスターは温度制御した加熱管を通過した後、TOF-MS によって空間的に分離された。目的のクラスターに対し、光電子脱離用レーザー(355 nm, 3.55 eV)を照射し、velocity map imaging (VMI)により光電子スペクトルを取得した。 $\text{Rh}_3\text{NO}^-$  は加熱することで特定の結合エネルギーのピークが消滅する[1–2]。50 K 刻みで室温から 800 K まで温度を変更しながら光電子スペクトルを取得し比較を行った。その結果、2.1 eV 付近に観測されたピークは室温から加熱すると徐々に強度が減少しほぼ 500 K で消失した(Figure 1)。一方、>2.3 eV のピークは加熱によって線幅が広がるなどの形状変化は見られるものの、他のピークとの相対強度が大きく変わることはなかった。これらの観測結果を時間依存密度汎関数法 (TD-DFT) による量子化学計算と合わせて議論する。

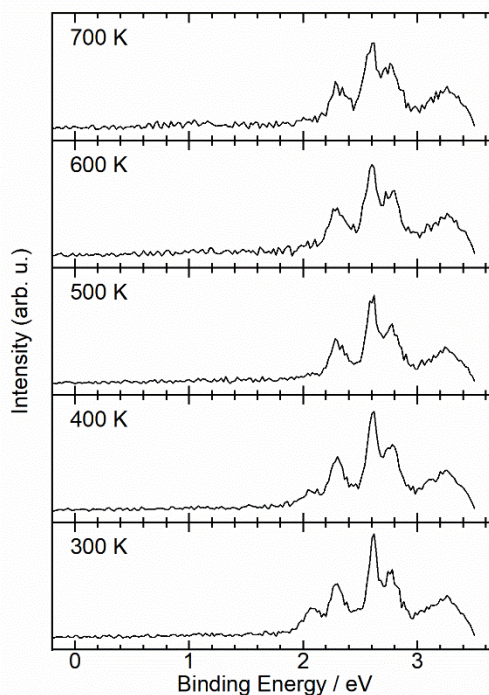


Figure 1. Temperature dependence of photoelectron spectra of  $\text{Rh}_3\text{NO}^-$ .

[1] 山口 雅人, 日本化学会 第 102 春季年会, F102-1am-08 (2022)

[2] 立川 慧太郎, 第 16 回分子科学会, 1B01 (2022)