



第 154 回触媒化学研究センター談話会

演 題：金属表面上の小分子(CO, N₂, N₂O)の吸着：昇温脱離法と DFT 計算

講 師：折田秀夫 先生

(産業技術総合研究所 物質プロセス研究部門 触媒・膜システムグループ主任研究員)

日 時： 2003 年 9 月 25 日 (木) 13:30-15:00

会 場： 理学部本館 S302

要旨：金属表面上の小分子(CO, N₂, N₂O, NO)の吸着は吸着系のモデルケースとして、多くの実験が行われている。また、表面構造に対する吸着サイトの依存性は興味深いテーマのひとつである。しかしながら、吸着構造の詳細な解析は、実験的には未だに難しく、放射光などの大規模な研究施設が必要である場合が多い。計算による吸着特性の解析は、計算ソフトやハードの飛躍的な進歩により、高精度な計算が可能になり、実験との比較・検討が行われている。低指数面での計算は多くの研究があるが、高指数面のステップ表面等については余り行われていないのが現状である。

本講演では、ステップ構造を持つ Ni (755)面上での CO, N₂ と N₂O 吸着の計算結果について

発表する。昇温脱離法による脱離エネルギーの測定等から、CO ではテラスである(111)面とほとんど脱離エネルギーの変化がなく、N₂では大きくなり、N₂Oではステップで分解することを見いだしていた。実験では決められなかった、最安定吸着サイトの同定が計算により可能になった。パラジウム表面上でのベンゼンと酸素の反応によるフェノール合成に関する DFT 計算についても講演する予定である。

<連絡先> 北大触媒化学研究センター 表面反応ダイナミクス分野
松島龍夫 (TEL:706-3695)