

第一原理計算による表面反応解析 と新規機能性材料のデザイン

大阪大学工学部・工学研究科・笠井研究室

- ✓ 第一原理計算による材料特性の評価と表面反応機構の解明
(密度汎関数法, Quantum Monte Carlo法 etc).
- ✓ 貴金属・有害物質を用いない新規材料の設計.

第一原理計算により触媒表面での原子・分子の吸着・脱離過程の解析を行った。Cu(111)表面およびCu₂O(111)表面での一酸化窒素(NO)分子の吸着を解析した。その結果、Cu終端Cu₂O(111)表面におけるNO分子の吸着は、原子状吸着状態が安定で解離を起こしやすいことが分かった。解離に関する活性化障壁の大きさは、Cu(111)表面と比べてCu終端Cu₂O(111)表面のほうがはるかに低くNO分解触媒として用いられているRh(111)表面と同程度であった。Cu終端Cu₂O(111)表面のCu原子の局所状態密度を解析した結果、d軌道がフェルミ準位近傍へシフトすることが分かった。このd軌道はNOの軌道と混成軌道を形成し、吸着および解離の状態を安定化させており、NO分子の解離吸着に関する活性化障壁の低下に寄与していた。

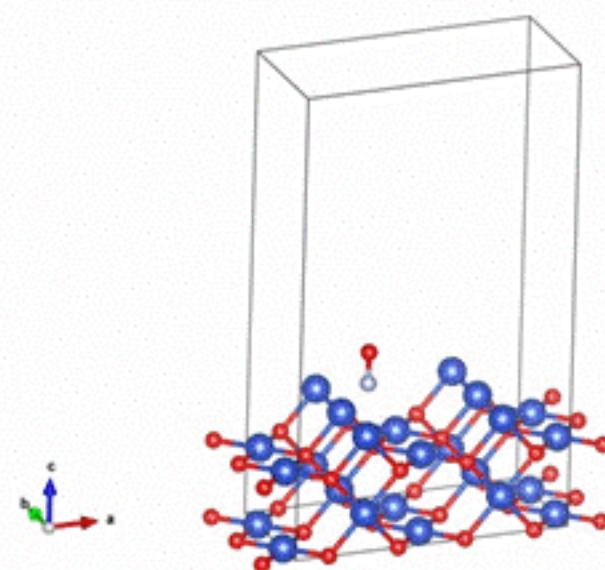


図 Cu終端表面に接近するNO分子
白球:N,赤球:O,青球:Cu

利用者氏名:

笠井 秀明,中西 寛,岡 耕平, Febdian Ryusydi, Alaydrus Musa, Sapro Adhitya Gandaryus, Fadjr Fathuraman, Nguyen Tien Quang, Agusta Mohammad Kemal, Kuncoro Handoko Setyo, Hghiem Hoa ThiMinh