

# グローバル COE 講演会報告書

大学院理学研究科 有賀 哲也

研究集会名：グローバル COE 講演会

講演者：Dr. Anton Kokalj (Josef Stefan Institute, Slovenia)

演題：Peculiar behavior of  $N_2O$  on late transition metal surfaces.

場所：理学部 6 号館 2 階 No. 272 セミナー室

日時：2011 年 11 月 4 日 (金) 15:00~17:00

参加者：化学専攻大学院学生、学部生、教員

参加者総数：30 名

講演内容：

遷移金属表面における  $N_2O$  分子の解離反応において、生成物である脱離  $N_2$  分子の運動エネルギー分布は超熱的分布を示し、しかも特定の放出角に集中して非常に鋭い角度分布を示すことが実験的に知られている。この現象は、Pd(110)、Pd(211)、Rh(110)、Rh(100)、Ir(110) 等で観測されている。しかし、そのような特異な分布が生じる機構について、これまでの研究では明らかにされていない。講演者は、ここ数年、密度汎関数法に基づいてこの問題について検討しており、セミナーではその検討状況について紹介し、また討論を行った。

講演者らはまず  $N_2O$  の吸着構造について検討し、N-エンドのリニア型のほかに、二つ以上の原子で表面と吸着する型が存在することを見いだした。後者としては、帽子型（両端の N、O で表面と結合）、馬型（二つの N 原子で結合）、蛇型（3 原子すべてで結合）があることを示した。これらのうち、NN-O 結合の開裂から  $N_2$  の脱離に繋がるのは帽子型のみである。講演者は、この吸着型について解離反応の遷移状態の構造を決定し、遷移状態を過ぎた以降の  $N_2$  分子の挙動について、DFT に基づく分子動力学シミュレーションを行っている。実験結果の特徴の一部を再現することに成功しているが、きわめて鋭い角度分布が生じる理由を十分に説明するには至っていない。共吸着種との相互作用等について、シミュレーション結果に基づいて討論を行った。

