

# グローバルCOE講演会報告書

大学院理学研究科 鈴木 俊法

研究集会名： グローバルCOE講演会

講演者： Prof. Elliot R. Bernstein, (Colorado State University, U.S.)

演題： “Heterogeneous catalysis with clusters of transition metals and transition metal compounds and hydrogen storage in clusters”

場所： 京都大学大学院理学研究科 6号館 272号室

日時： 2012年1月10日 16:00 - 18:00

参加者： 化学専攻・教員、博士研究員、大学院生、学部生

参加者総数： 10名

講演内容： Bernstein 教授は、クラスター科学において著名な研究者であり、赤外から真空紫外領域までのレーザー光を用いて気相クラスターの構造や反応性の研究を精力的に行っている。講演では、金属クラスターの触媒反応や水素吸蔵についての最近の研究成果を報告された。波長が 193nm(6.4 eV)、118 nm(10.5eV)および 46.9nm(26.5eV)の深紫外・真空紫外レーザーをイオン化光源にした質量分析装置を用いて、以下の反応について調べた結果を示された。

- 1)  $Au_n(CO)_m + O_2$  (金クラスターによる一酸化炭素の酸化反応)
- 2)  $Co_nNi_m + H_2$  (窒化コバルトクラスターによるアンモニア生成反応)
- 3)  $V_nS_m + C_2H_4 + H_2$  (バナジウム-硫黄混合クラスターによるエチレンの水素付加反応)
- 4)  $Al_nC_m, Mg_nC_m, Be_nC_m + H_2$  (カーバイドクラスターによる水素吸着反応)

観測された質量スペクトルと密度汎関数法(Density Functional Theory:DFT)による反応経路解析から、反応性がクラスターサイズ毎に大きくことなることが明らかになった。特に 4)の反応については、近年開発が急務とされている大容量の水素吸蔵化合物になり得るポテンシャルを秘めていることが示された。講演の最後では、多数の質問が寄せられ、盛況のうちに講演会は終了した。

