

銅表面に吸着したメタノール合成反応中間体の電子状態計算

Electronic-state calculations of reaction intermediates of methanol synthesis adsorbed on Cu surfaces

京都大学 大学院理学研究科 化学専攻 分子分光学研究室

小坂谷 貴典

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、メタノール合成反応中間体であるホルメート(HCOO)の、単結晶銅表面 (Cu(111), Cu(100), Cu(110), および Cu(221)) における吸着構造および分子振動モードを明らかにするため、密度汎関数法による第一原理計算を実施した。

ホルメートの吸着エネルギーは面方位に大きく依存し、ステップサイトや Cu(110)など配位不飽和なサイトに強く結合することが明らかとなった。また、分子間相互作用も吸着エネルギーに影響を与え、基本的にはファンデルワールス相互作用による引力が働くが、分子間の距離が近くなると静電反発相互作用が顕著になり、吸着エネルギーは下がることが分かった。また、ホルメート間の分子間相互作用がホルメート OCO 対称伸縮振動モードのエネルギーに大きく影響を与えることも明らかとなり、そのことから実験で測定した赤外振動スペクトルに関して新たな解釈が得られた。

発表論文(謝辞あり)

H. Yasumura et al., *J. Phys. Chem. C*, **129**, 1216-1227, 2025.