

密度汎関数理論を用いた金属表面吸着分子のポテンシャル曲面解析
Analysis of potential energy surface of small molecules adsorbed on metal surfaces

京都大学 理学系研究科 化学専攻理論化学分科 倉重佑輝

研究成果概要

本研究においては、金属表面に吸着した分子のポテンシャルエネルギー曲面解析を行うために、令和5年10月より京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの利用を開始した。研究遂行において、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムは主に **Material Studio** の GUI を用いて金属表面の切り出しや分子吸着など初期構造のモデリングに利用した。具体的には、まず京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムで作成した初期構造をもとに、平面波基底と擬ポテンシャルを用いた密度汎関数理論により、周期境界条件のもとでの時間非依存シュレディンガー方程式の近似的な固有状態の計算を行うことで、Pt 金属切り出し表面の緩和構造を求めた。まずバルク構造の構造最適化を行い、スラブモデルを用いて切り出し表面のモデリングと構造緩和では、バルク構造からの変位が十分に小さくなるまでスラブモデルに用いる金属の層の数を増やしていきスラブモデルによる近似の影響が小さくなるよう精度の担保を確認した。また得られた切り出し表面の緩和構造をもとに、同じく京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの **Material Studio** を用いて例えば水分子など吸着分子を種々の吸着サイトに吸着された初期構造モデリングを行い、またそれをもとに平面波基底と擬ポテンシャルを用いた密度汎関数理論により構造最適化を行うことで、吸着エネルギーや基準振動解析を行い、金属表面に吸着した分子の挙動や相互作用に関する解析を行った。