

分子トライボロジーための大規模吸着系へのコンピュータ化学計算

○ 周 慧¹、亀井大輔¹、遠藤 明¹、久保百司¹、今村 詮²、宮本 明^{1,3}

¹ 東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07)

² 広島国際学院大学工学部 (〒739-0321 広島市安芸区中野 6-20-1)

³ 東北大学未来センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07)

「緒言」:

金属表面と有機分子との吸着特性に関する知見は、電極反応、触媒反応、及び潤滑剤としての特性を理解する上で重要である。本研究では、数種類の有機化合物を用い、密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理量子化学計算及び我々の研究室で独自に開発した大規模周期境界量子分子動力学計算 **Colors** プログラムを用いて、計算を行った。

「計算方法」

周期的第一原理量子化学計算には、**CASTEP** と **Dmol3** を用いた。遷移金属表面上での吸着分子の構造最適化には **CASTEP** で求めた構造に基づき電荷を求めるために **Dmol3** を用いた。全ての計算には、一般化密度勾配近似(GGA)を用いた。更に、我々の研究室で開発した大規模周期境界量子分子動力学計算プログラム **Colors** を用い、計算を行った。

「結果及び考察」

我々は既に量子化学計算より得られた **Al**、**Fe** 表面上への有機分子の吸着エネルギーを指標として、化学吸着の強さを検討している[1、2]。**Au** 清浄表面と欠陥を持つ表面への **C₂H₄**、**CH₃OH**、**CH₃SH** 分子の吸着特性について検討したところ、欠陥を有する表面への有機分子の吸着が清浄表面より強いことが分かった。また、周期的第一原理量子化学計算では、大きな有機分子を取り扱えないため、実験の再現や予測ができない。当研究室で開発した **Colors** を用いて、ベンゼンとシクロヘキサンの **Fe** 表面上での吸着挙動に関して計算を行った。結果として、ベンゼンの方が飽和環状構造を持つシクロヘキサンより、吸着エネルギーが大きいことが分かった。これは実験値と一致している。更に、**Colors** プログラムを用いることで、大きなモデル(Fig.1)による金表面上でのベンゼン、シクロヘキサン分子の吸着状態の計算に初めて成功した。金表面への吸着結果から、鉄表面と違って、シクロヘキサンの方がベンゼンより吸着しやすいことが分かった。その電子レベル的な解析結果は発表当日に報告する。

参考文献:

[1] H.Zhou et al.: Appl. Surf. Sci., 158 (2000) 38.

[2] H.Zhou et al.: Jpn. J. Appl. Phys., 39 (2000) 4275.

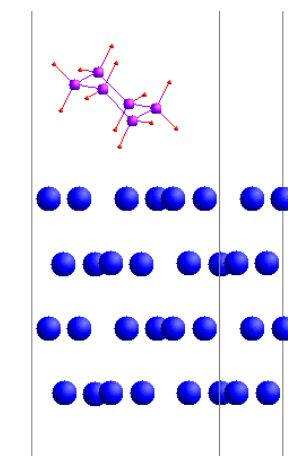


Fig. 1: Model of Au (100)-C₆H₁₂ system