

# 分子軌道法による表面の吸着性評価

分子軌道法による計算を用いて、固体表面への分子の吸着性を評価いたします。

## サービスの概要

自動車の排ガス触媒における触媒表面でのガス分子の反応、潤滑油添加剤の基材表面への被覆膜の生成等において、固体表面への分子の吸着性は反応の初期段階における重要なパラメータです。しかしながら、実験的に直接、吸着性を評価することは非常に難しい課題です。

当社では、分子軌道法を用いた数値計算から、実験的には困難な条件下での固体表面への分子の吸着性を評価し、表面で起こっている反応の解析、最適な分子構造の設計などのお手伝いをいたします。

## 固体表面への分子の吸着におけるポテンシャル曲線の計算

### ● 計算モデルの作成

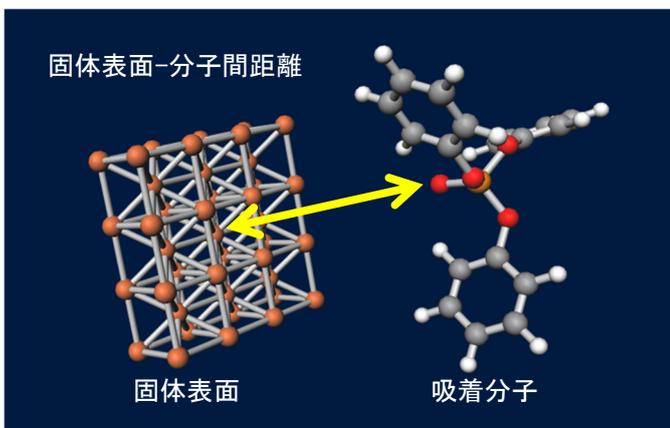
計算モデルの大きさ、必要とされる計算精度、許容される計算時間等から適切な計算方法を選択する必要があります。対象となる固体表面、吸着する分子に合わせて適切な計算モデルを作成いたします。

計算中のパラメータに実験値を用いないため、実験が難しい系であっても対応が可能です。

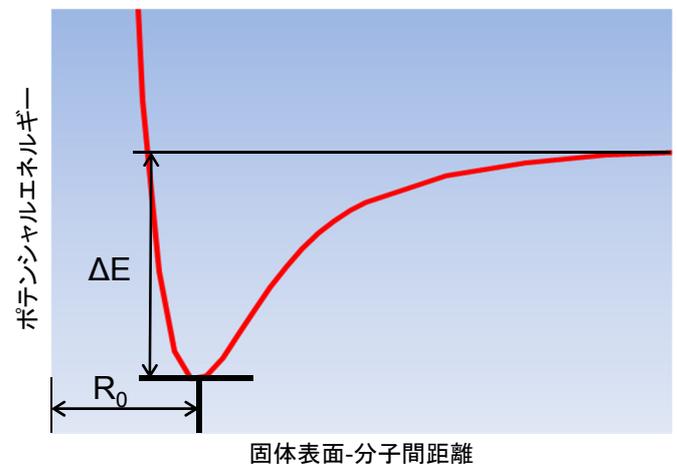
### ● ポテンシャル曲線の計算

ポテンシャル曲線において、ポテンシャルの深さ $\Delta E$ は分子の固体表面への吸着性の強さを、極小点の位置 $R_0$ は吸着した状態での分子と固体表面間の距離を示します。

分子内で固体表面に近接する場所を変えながら計算することによって、どの原子で分子が固体表面に配位していることもわかります。



計算に用いる固体表面-分子間モデルの例



分子軌道法によって計算されたポテンシャルエネルギー曲線の例

## 計算化学分野における当社のCAEソリューション

- 受託解析型(計算モデルを指定して頂いての解析業務)から問題解決型(課題の設定・モデル化から現象の解析まで)のソリューションをご提供いたします。
- 流体力学計算に化学反応を含むような複雑なモデルでも、モデルの検討段階からご相談に応じます。
- EELS(電子エネルギー損失分光スペクトル)等の実験的な測定と組み合わせたご提案も可能です。
- Gaussian<sup>®</sup>、Quantum Espresso<sup>®</sup>、FDMNES<sup>®</sup>等、問題にあわせたソルバを利用可能です。