

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		触媒機構の解明を目指した無機-有機複合クラスターのソフトランディング技術の開発			
研究テーマ (欧文) AZ		Development of soft-landing technique for inorganic-organic composite clusters			
研究氏 代 表 名 者	カタカナ CC	姓) クドウ	名) サトシ	研究期間 B	2008 ~ 2010 年
	漢字 CB	工藤	聡	報告年度 YR	2010 年
	ローマ字 CZ	KUDOH	Satoshi	研究機関名	独立行政法人 理化学研究所
研究代表者 CD 所属機関・職名	独立行政法人理化学研究所 イノベーション推進センター ナノ粒子測定技術研究チーム・研究員				
概要 EA (600字~800字程度にまとめてください。)					
<p>金属クラスター触媒の触媒反応機構を理解するためには、金属クラスターと相互作用している分子の構造を知る必要がある。本研究者は、有機分子と金属クラスターの複合クラスターの構造を調べるために、複合クラスターの低温孤立状態での赤外スペクトルを測定することを目指している。低温孤立状態での複合クラスターの赤外スペクトルの測定には、低温マトリックス単離赤外分光法を用いる。低温マトリックス単離赤外分光法では、気相中で作成した試料を低温の基板に堆積させてマトリックスを作成する。複合クラスターは非常に不安定であることが予想されるので、吹き付けの際に複合クラスターが分解しないようにする必要がある。そこで、複合クラスターを希ガス固体にソフトランディングする技術を開発することを目指した。</p> <p>本研究では、複合クラスターを構成する有機分子としてはエタノール、金属原子としては銀を用いた。金属クラスターによるアルコールの酸化反応については、数多くの研究が報告されている。そこで、今回は、蒸気圧が高くて実験に利用しやすく、また、赤外スペクトルの解釈が容易なアルコールとしてエタノールを用いた。また、銀原子は電子線エバポレーターによって容易に生成することができるのでこれを用いた。ソフトランディングさせるために希ガスよりも内部自由度が多く熱容量の大きいペンタンをエタノールと混合して液体窒素温度に冷却したヨウ化セシウム基板に吹き付けてマトリックスを形成させた。さらに吹き付け中に銀原子を混合した。赤外吸収スペクトルを測定したところ、銀原子を混合したときには、混合しないときに比べて、エタノールのO-H伸縮振動の相対強度が増加した。これは、複合クラスターの形成を示唆するものと考えられる。エタノールと銀原子のクラスターに対する分子軌道法による赤外吸収スペクトルの計算結果もこれを支持している。</p>					
キーワード FA	クラスター	赤外分光	マトリックス単離法		

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要 EZ

In heterogeneous catalysis, the first step of reactions is adsorption of reactants on the surface of catalysts. Adsorption causes changes in the molecular structures of the reactants. It is important to know the structures of the reactants that interact with metal clusters to understand the mechanisms of metal cluster catalysis. Infrared spectroscopy is one of the most useful spectroscopic techniques because it provides structural information. Therefore, I have tried to measure the infrared spectra of the complexes of organic molecules and metal clusters in low-temperature matrices in order to determine the structure of these complexes.

In this study, silver atoms and ethanol molecules were used as metal atoms and organic molecules respectively. Pentane vapor, which has a larger heat capacity than rare gases, was mixed with ethanol vapor to achieve a soft-landing. A Mixture of pentane and ethanol was deposited on a CsI window at a liquid nitrogen temperature. In addition, silver atoms were codeposited on the CsI window with the mixture. Infrared spectra were measured by FTIR spectrometer. In the infrared spectrum obtained after codeposition, the intensity of O-H stretching band increased. This is probably due to formation of ethanol-silver complexes.