

白金表面における水分子の解離吸着

発表者 古賀暁 古我知史

指導教員 清野光弘 友寄友造

地球温暖化対策のひとつとして、燃料電池の普及が進められている。燃料電池は水素を燃やさずに、酸素との化学反応により電気を取り出すため、二酸化炭素 (CO₂) などの有害な排出物がなく、とてもクリーンな代替エネルギーとして注目を浴びている。その燃料電池に必要な水素を作り出すひとつの方法として、本多 - 藤島効果がある。それは、光触媒である酸化チタン (TiO₂) と白金 (Pt) を利用した電極間で起きる水の電気分解作用のことである。水中に TiO₂ と Pt を抵抗でつないだ閉回路を浸し、TiO₂ 側に光をあけると光触媒作用により抵抗に電流が流れて TiO₂ 側で酸素 (O₂) が発生し Pt 側で水素 (H₂) が発生する。

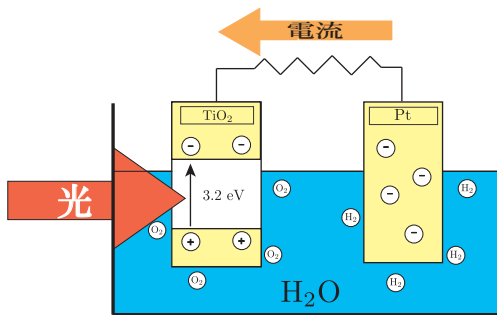


図 1. 本多-藤島効果.

しかし、ミクロな観点での電気分解はまだ詳しくは解明されていない。我々は量子的な立場から陰極側である Pt 表面で起こる水素発生過程を解明するために、図 2 と図 4 のようないくつかのモデルを考えた。

右のグラフで、 E_2 と E_4 はそれぞれ Pt - Pt 間の結合、反結合軌道を表しており、 E_3 、 E_6 、 E_5 はそれぞれ H₂O の反結合軌道、非結合軌道、結合軌道を表している。各原子に 1 つずつ原子軌道があり、軌道 ψ_{H_1}, ψ_{H_2} のサイトエネルギーを E_H 、軌道 ψ_O のサイトエネルギーを E_O 、軌道 ψ_{Pt_1}, ψ_{Pt_2} のサイトエネルギーを E_{Pt} とし、酸素原子と水素原子のトランスファー積分を $-T$ 、水素どうしのトランスファー積分を $-t$ 、水素原子と白金原子を $-V$ 、白金原子どうしを $-U$ とし、ハミルトニアン行列における固有値問題を解くことにより、モデルを検討した。

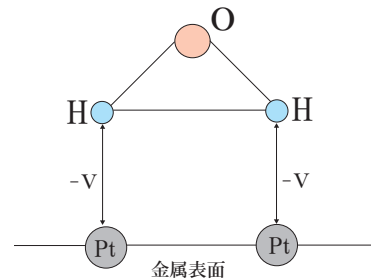


図 2. Pt 表面に近づく水分子のモデル 1.

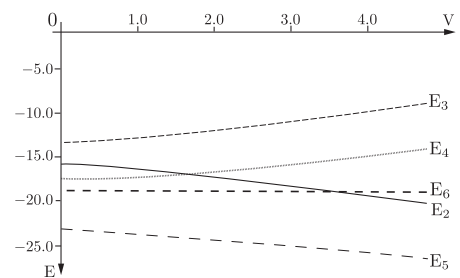


図 3. モデル 1 のエネルギー準位.

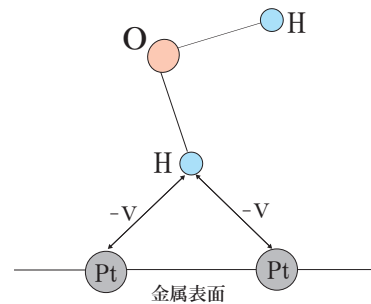


図 4. Pt 表面に近づく水分子のモデル 2.

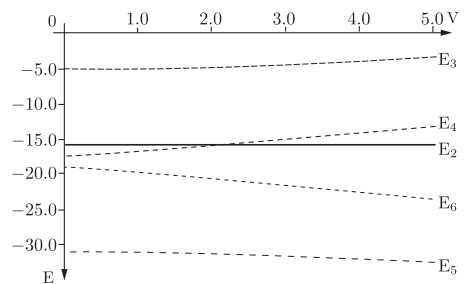


図 5. モデル 2 のエネルギー準位.