

## 金属表面における水素分子の吸着

発表者: 上里 勝健 上地 佑  
 指導教官: 友寄 友造 清野 光弘

金属表面には化学反応の速度を高める触媒作用を備えているものがあり様々な分野に活用されている。

「本多-藤嶋効果」として知られている光触媒反応は酸化チタン ( $\text{TiO}_2$ ) と白金 ( $\text{Pt}$ ) を電極として利用した水の電気分解作用である。光触媒である酸化チタン側に光を当てることにより、酸化チタン側には酸素 ( $\text{O}_2$ ) が、白金側には水素 ( $\text{H}_2$ ) が発生する。これによって燃料電池等に用いられる水素を水からつくるのが可能になる。また、水の分解を行っても光触媒である酸化チタンは溶解せず表面変化をあまりしないので何度でも光触媒反応を起こすことができる。他にも白金表面に水素を吹き付けるとその触媒作用によって、発火し水素と酸素から水を生成する反応も確認されている。

これらの反応の仕組みを解明するためには、金属表面と分子との間にどのような反応が起こっているかを見る必要がある。表面における触媒反応の重要な過程として解離吸着がある。解離吸着は表面の原子と吸着する分子内の原子との間に強い結合が形成されるとともに、同時に分子内の結合が切断される現象をさす。

そこで今回私達は  $\text{Pt}$  金属表面に水素分子が吸着するモデルを考え、それを用いて反応の様子を計算してみることで吸着の過程を考察することにした。今回用いたモデルは図1で示した  $\text{Pt}$  表面に水素分子が近づく場合を考える。各原子軌道に1つずつ原子軌道があり、水素原子の軌道のサイトエネルギーを  $E_H$ 、白金原子の軌道のサイトエネルギーを  $E_{Pt}$ 、水素原子間のトランスファー積分  $-U$ 、白金原子間のトランスファー積分を  $-T$ 、水素原子と白金原子のものを  $-V$  とし、ハミルトニアン行列による固有値を解くことにより考察する。

図2はこのときの固有値エネルギー  $E$  と相互作用  $V$  の関係を表したグラフである。このとき水素原子と白金原子間の相互作用をヒュッケル近似を用いることによって距離の依存性を見ることができる。

$$V_{H-pt} = \frac{E_H + E_{Pt}}{2} S_{H-Pt}$$

このとき  $S_{H-Pt}$  は重なり積分である。水素類似原子の波動関数を用いることによって数値計算することによって図3が得られる。

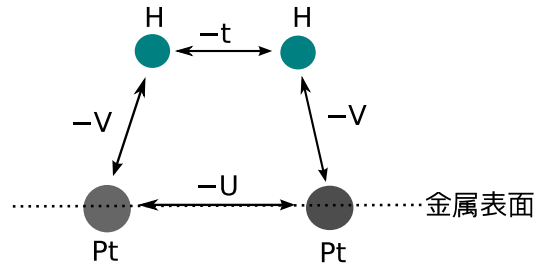


図 1: H-Pt モデル  
 $u$ : 水素間の相互作用,  $T$ : Pt 間の相互作用  
 $V$ : 水素原子と Pt 原子の相互作用

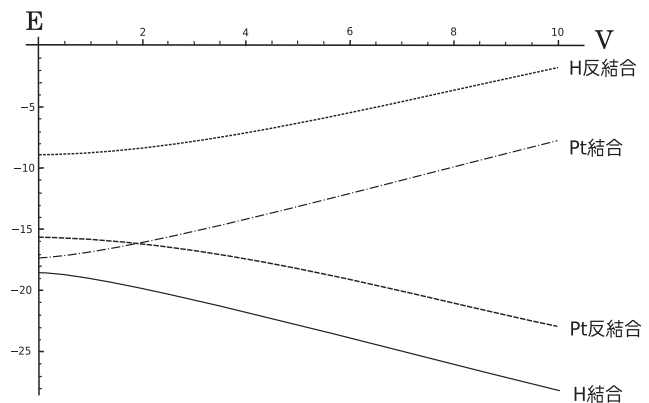


図 2: E-V の関係  
 $E$ : 固有状態のエネルギー [eV]  
 $V$ : 相互作用 [eV]

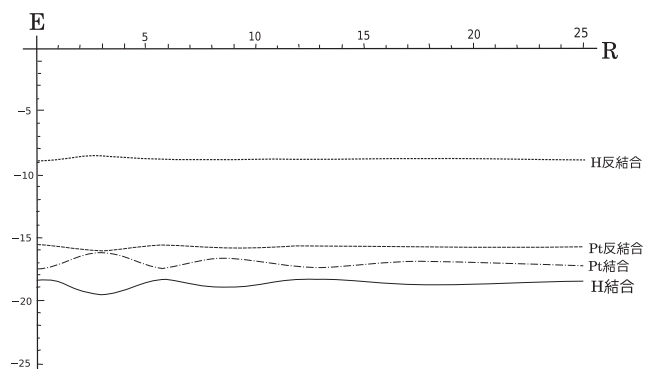


図 3: E-R の関係  
 $E$ : 固有状態のエネルギー [eV]  
 $R$ : 原子間距離  $r/a_0$  ( $a_0$ : ボーア半径 [Å])