

## 3C-SiC 表面の水分解素過程に関する第一原理解析

An ab initio analysis on elementary processes in  
water-splitting reaction at 3C-SiC surface

岡山大院自然 \*新池一央, 鶴田健二, 石川篤,

Okayama Univ. K. Shinn-ike, K. Tsuruta, A. Ishikawa.

tsuruta@okayama-u.ac.jp

## 1. 研究背景

光触媒による水素生成は、太陽光によってクリーンに水素を生成する有力な手段と考えられ、高い水素生成効率と長期動作に耐え得る安定性の両立が求められる。近年、新たな光触媒材料として 3C-SiC による水素生成が報告された[1]。可視光吸収が可能、化学的に安定で長時間光触媒として稼働するなど優れた物性を有しており、上記の要件を満たす光触媒として期待される。本研究では第一原理シミュレーションを用いて 3C-SiC 表面の水分解反応の素過程を原子レベルで明らかにすることで反応を促進する要素を見出すことを目的としている。

## 2. 解析方法

解析方法として擬ポテンシャル平面波基底を用いた第一原理計算パッケージ VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) を用いて解析を行った。3C-SiC の界面には Si の層と C の層が存在し、それぞれ正と負に分極している。分極の小さい [111] 面の表面に  $H_2O$  分子を配置し分子動力学法を用いて SiC 表面への水分解の第一過程である表面への吸着ならびに  $H_2$  生成反応を解析した。

## 3. 解析結果

Si 表面の  $H_2O$  分子は  $H^+$  と  $OH^-$  に分離し、表面の Si 原子に結合した。結合しなかった Si 原子は負に帯電し、他の  $H_2O$  分子の H 原子を引き付け、更に Si と H の結合を生じた。このことから水分解反応の第一過程である表面への吸着と解離は表面結合に伴う電荷再配置によって続く反応が促進される可能性を示した。また、表面付近に H 原子を追加し、かつ光励起に伴うスラブへのキャリア注入を想定して系全体に過剰に電子を与えたところ、追加した H 原子及び表面付近の  $H_2O$  分子に電子が供給された (図 1)。 $H_2O$  分子の  $H^+$  は H 原子となって分離し付近の  $H_2O$  分子の H と引き付けあい  $H_2$  分子を形成した (図 2)。講演ではこれらの詳細について報告をする。

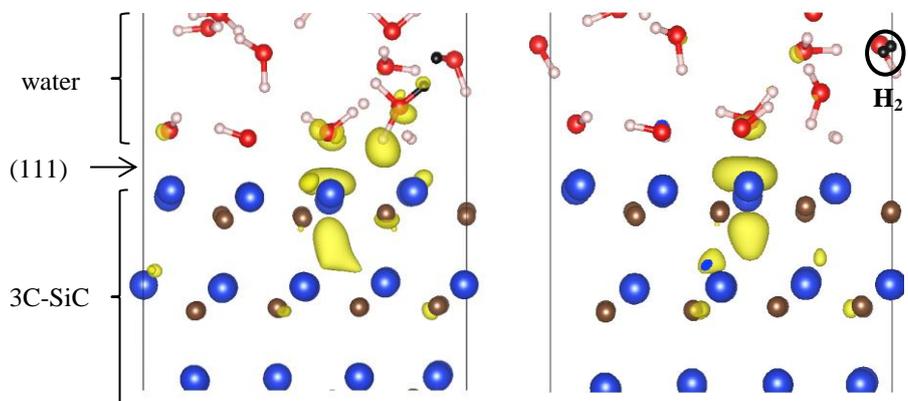


図 1 過剰注入した電子の電荷分布

図 2 水素生成した時の電荷分布

[1] M.Kato, et al., *Int. J. Hydrog. Eng.* **39**, 4845(2014)