

fcc 鉄(111)表面上及びサブ表面領域における水素原子の吸着状態 Adsorption States of Hydrogen Atoms on fcc-Fe(111) Surfaces and in its Subsurfaces

北大院工エネマテ °國貞 雄治, 坂口 紀史

Hokkaido Univ., °Yuji Kunisada¹, Norihito Sakaguchi²

E-mail: kunisada@eng.hokudai.ac.jp

クリーンな水素エネルギー社会の実現のため、高効率な水素貯蔵・輸送技術の確立が求められている。現在、高圧水素ガスタンクを用いた貯蔵・輸送方法や、水素ステーションへパイプラインネットワークを利用して水素を供給する方法等が検討されている。これらのような水素環境下にある材料の長寿命化の実現のためには、材料劣化[1]の主な要因となる水素脆化のメカニズム、及び耐水素脆化性の決定要因の解明が必要不可欠である。また、原子炉の炉心用構造材料においても、その高い中性子照射環境のため、水素原子やヘリウム原子が材料中に多量に導入され、材料劣化を促進する要因となっている。これらの高圧水素ガスタンク、パイプライン用材料、原子炉炉心用構造材料には、安価に大量生産が可能であり、高耐腐食性、高耐照射性という優れた特性を持つオーステナイト系ステンレス鋼が用いられることが多い。また、超高真空実験において、ステンレス鋼真空チャンバー中に存在する水素原子が主な残留ガスの要因となり得る。そのため、基礎科学的な観点からもステンレス鋼中での水素原子の挙動の理解が重要な課題となっている。そこで本研究では、水素脆化に関する電子・原子スケールの知見を得るため、まず水素原子の材料中への侵入過程及び材料中での吸着状態の原子論的理解を目指す。本研究では、オーステナイト系ステンレス鋼のベンチマークとして、fcc 鉄(111)表面上及びサブ表面領域における水素原子の吸着状態を調査した。

本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算を援用して研究を行った。fcc 鉄(111)表面について、5 原子層から構成される 2×2 スーパーセルを用いたスラブ構造でモデル化した。水素原子の吸着サイトとして、面内方向に 12 点 \times 12 点、面直方向に 40 点のグリッドを考慮し、fcc 鉄(111)表面上及びサブ表面領域における水素原子のポテンシャルエネルギー表面(PES)を得た。その結果、fcc 鉄(111)表面上の対称性の高い top, bridge, fcc-hollow, hcp-hollow の 4 つの吸着サイトでの安定な吸着位置における吸着エネルギーがそれぞれ、-2.07, -2.63, -2.78, -2.77 eV であることを明らかにした。その後、独自に開発した水素原子核の量子様態計算[2,3]を援用し、水素原子の量子性を考慮した吸着状態[4]を明らかにした。

[1] Y. Sun, Q. Peng, and G. Lu, Phys. Rev. B 88 (2013) 104109

[2] N. Ozawa, T. A. Roman, H. Nakanishi, and H. Kasai, Surf. Sci. 600 (2006) 3550.

[3] Y. Kunisada and H. Kasai, J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 023601.

[4] Y. Kunisada and N. Sakaguchi, in preparation.