

表面反応の量子ダイナミクス

Quantum Dynamics of Surface Reactions

阪大院工¹, アトミックデザイン研究センター² ◯笠井 秀明^{1,2}, 清水康司¹
 Osaka Univ.¹, Center for Atomic and Molecular Technologies², ◯Hideaki Kasai^{1,2} Koji Shimizu¹
 E-mail: kasai@dyn.ap.eng.osaka-u.ac.jp

原子や分子の表面界面ダイナミクスに現れる量子効果について例示したい。

1. 水素分子の解離吸着反応 [1-3]: 水素分子の表面上での解離吸着反応に量子トンネル効果が現れる。固体高分子形燃料電池 (PEMFC) のアノード反応を例にとると、量子トンネル効果が燃料電池の動作温度付近で重要な役割を担っている。
2. 水素原子の吸着状態 [4, 5]: 遷移金属や貴金属表面上の水素原子の吸着位置はポテンシャルエネルギー極小点とは必ずしも一致しない。さらに、波動関数の非局在性が現れる。
3. 酸素分子の解離吸着反応 [6]: 酸素分子の表面上での解離吸着反応にも量子トンネル効果が現れる。燃料電池のカソード反応を例にとると、燃料電池の動作温度付近で量子トンネル効果が重要となる。また、律速反応の速度向上につながる材料開発に新たな指針を与える。
4. プロトン伝導 [7-10]: 水素吸蔵金属やプロトン透過膜・分離膜で起こる、水素原子の表面とサブサーフェース間の吸収・放出過程においても量子効果が現れる。
5. 酸素イオン伝導 [11, 12]: 電解質膜中を酸素イオンが伝導する固体酸化物形燃料電池 (SOFC) では、材料中に存在する酸素欠損を介した酸素イオン伝導が起こる。動作温度 (700-1000°C) においても、酸素イオン伝導に量子効果が現れ、酸素イオンの伝導性を高める材料開発に新たな指針を与える。
6. リチウムの表面拡散 (リチウムイオン電池) [13]: リチウムも軽元素であり量子効果を顕著に示す。グラフェン上でのリチウムの拡散係数は、量子状態を考慮することで実験結果と良い一致が得られる。また、リチウムは古典的な描像とは異なった拡散経路を通る。
7. NO 分子の回転虹散乱 [14]: 金属表面での、回転虹散乱にはポテンシャルエネルギー曲線の形状や古典的禁制領域の影響が現れる。
8. 酸素の界面移動 [15]: 電極と金属酸化物の界面での酸素の移動が抵抗変化メモリのスイッチングを担う。

デバイスサイズがナノメートルから原子スケールになると、量子効果が顕在化し、材料とデバイスを混然一体化させ、デバイス開発を困難にしているが、一方、量子効果をうまく制御し活用すれば、新しい量子デバイスが実現出来る [16-19]。燃料電池はそのような量子デバイスであると考えられる。

参考文献

- [1] H. Kasai, A. Okiji, Prog. Surf. Sci. 44 (1993) 101.
- [2] W.A. Diño, H. Kasai, A. Okiji, Prog. Surf. Sci. 63 (2000) 63.
- [3] N.B. Arboleda Jr., H. Kasai, W.A. Diño, H. Nakanishi, Thin Solid Films 509 (2006) 227.
- [4] K. Nobuhara, H. Kasai, H. Nakanishi, A. Okiji, Surf. Sci. 507-510 (2002) 82.
- [5] N. Ozawa, T. Roman, H. Nakanishi, W.A. Diño, H. Kasai, Phys. Rev. B 75 (2007) 115421.
- [6] K. Shimizu, W.A. Diño, H. Kasai, J. Vac. Soc. Jpn. 56 (2013) 425.
- [7] K. Nobuhara, H. Kasai, W.A. Diño, H. Nakanishi, A. Okiji, Jpn. J. Appl. Phys. 42 (2003) 4630.
- [8] N.B. Arboleda Jr., M. Tsuda, H. Kasai, e-J. Surf. Sci. Nanotech. 4 (2006) 640.
- [9] N. Ozawa, T. Roman, N. B. Arboleda Jr., W.A. Diño, H. Nakanishi, H. Kasai, J. Appl. Phys. 101 (2007) 123530.
- [10] K. Shimizu, W.A. Diño, H. Kasai, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 013601.
- [11] T.P.T. Linh, M. Sakaue, M. Alaydrus, T.D.K. Wungu, S.M. Aspera, H. Kasai, T. Mohri, T. Ishihara, J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 84702.
- [12] M. Alaydrus, M. Sakaue, S.M. Aspera, T.D.K. Wungu, T.P.T. Linh, H. Kasai, T. Ishihara, T. Mohri, J. Phys.: Condens. Matter 25 (2013) 225401.
- [13] Y. Kubota, N. Ozawa, H. Nakanishi, H. Kasai, J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010) 014601.
- [14] H. Kasai, W. Brenig, H. Müller, Z. Phys. B 60 (1985) 489.
- [15] S.M. Aspera, H. Kasai, H. Kishi, N. Awaya, S. Ohnishi, Y. Tamai, J. Electro. Mater. 42 (2013) 143.
- [16] 笠井秀明、赤井久純、吉田博 共編 「計算機マテリアルデザイン入門」 (大阪大学出版会、2005).
- [17] 笠井秀明、津田宗幸 共著 「固体高分子形燃料電池要素材料・水素貯蔵材料の知的設計」 (大阪大学出版会、2008).
- [18] 笠井秀明、坂上護 共著 「表面界面の物理」 (朝倉書店、2013).
- [19] 笠井秀明、岸浩史 共著 「抵抗変化メモリの知的材料設計」 (大阪大学出版会、2012).