

4H-SiC 表面の水分解反応: 第一原理解析

Water splitting reaction on 4H-SiC surface: A first-principles analysis

岡山大院自然 松岡 良, *鶴田 健二, 新池一央

Okayama Univ., R. Matsuoka, *K. Tsuruta and K. Shinike

E-mail: tsuruta@okayama-u.ac.jp

次世代クリーンエネルギー源である水素を生成する方法として、光触媒材料を用いた水分解反応が注目されている。光触媒水分解材料の代表である酸化チタンは可視光領域の吸収効率が低いため、現状では太陽光による水素生成効率が低い。一方で近年、パワー半導体とも呼ばれ、優れた物性を持つ SiC が新しい光触媒材料として期待されている。Yasuda らの実験報告[1]によれば、SiC の主なポリタイプである 3C-,4H-,6H-SiC の全ての場合において可視光照射下で水分解反応が確認されている。本研究では、特に 4H-SiC 表面における水分解による水素生成過程について第一原理計算法を用いて解析し、水分解反応の素過程解明と反応の高効率化の指針提案を目指す。

解析方法として擬ポテンシャル-平面波基底による第一原理電子状態計算法を用い、汎用ソフトである VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package)によってシミュレートした。まず 4H-SiC のスラブモデルを構成し、上下の表面上に H₂O 分子を 3 つ置き反応過程のシミュレーションを行ったところ、Si 終端表面で H₂ 分子の発生を確認した。一方 C 終端表面では H₂ 分子の発生は確認できず、H₂O 分子が C 原子に H を一つ与えて、別の場所で C-O-H を作る、という過程を繰り返した。さらに、NEB(Nudged Elastic Band)法により Si 終端面での水素生成過程における活性化エネルギーを見積もると、およそ 2.82eV であった。この値は、水の分解に必要なエネルギー(1.23eV)に比べて大きい。水素生成における活性化エネルギーを減らすために、SiC 表面の修飾などによる障壁の変化を検討した。講演では、これらの解析の詳細について報告する。

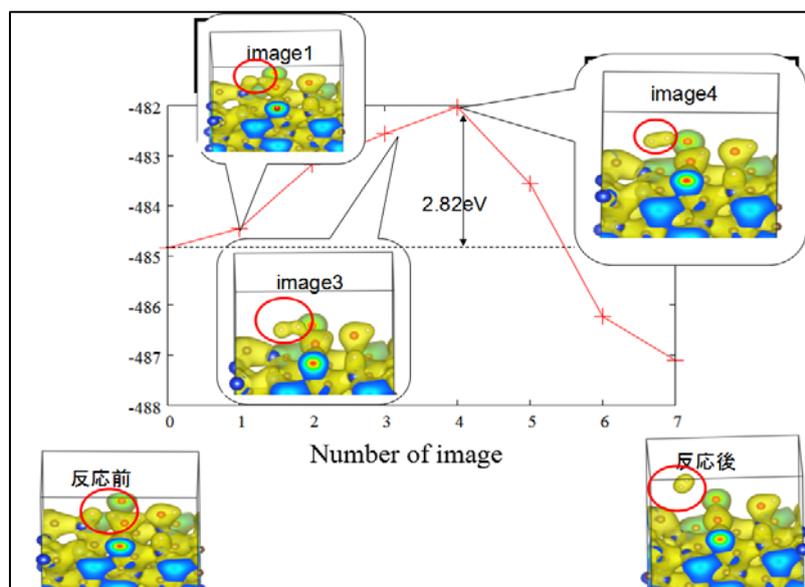


図 1: NEB 法による H₂ 発生過程と活性化エネルギーの見積もり (横軸の 0,7 はそれぞれ初期配置と最終配置)

[1] T.Yasuda, M.Kato, M.Ichimura and T. Hatagaya, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 053902 (2012)