

水素吸着による AI 及び AIB ナノワイヤーの電子状態変化に関する

理論的研究

(京大院工) 福島 啓悟、土井 謙太郎、立花 明知*

*akitomo@scl.kyoto-u.ac.jp

【背景】

近年、新しいエネルギー源として水素エネルギーが注目されている。しかし、水素は常温で気体であるために安全な貯蔵が困難であり、さまざまな問題解決を視野にいれた研究が盛んに行われている。その中でも一次元微細構造はその体積に比べて表面積が大きいことや、結晶構造と異なる性質を示すことから、水素貯蔵に適していることが示唆されている。われわれはこれまで、AI、AIB ナノワイヤー及びカーボンナノチューブといった一次元微細構造体へ解離吸着させる方法に着目し研究を行ってきた[1-3]。過去の研究において、CNT にAI ナノワイヤーを内包することによるCNT 表面の水素分子吸着および脱離に対する活性化エネルギーの低減を明らかにした[1]。AI ナノワイヤーをモデル化し、第一原理計算よりその安定構造の存在を示し[2]、ワイヤー表面での水素分子の解離吸着に関する計算を行ってきた[3]。またAI ナノワイヤーの構造を基にしてAIB ナノワイヤーをモデル化し、水素吸着材料としての理論的研究を行なっている。本研究では水素吸着がナノワイヤーの電子状態に与える影響について考察する。

【計算方法】

本研究では右図に示す周期的境界条件を課したナノワイヤーモデルに対して、密度汎関数法による変分計算を行い、電子状態を求めた。スーパーセルの体積は $8.361 \times 8.361 \times L$ [\AA^3]及び $10.58 \times 10.58 \times L$ [\AA^3] (L はパラメータ)の二つを用いる。前者はAIB ナノワイヤー(図1 a,b) の計算に用いるスーパーセルであり、後者はAI ナノワイヤー(図1 c)に用いるものである。荷電子の波動関数は平面波で展開し、そのカットオフエネルギーは30 [Ry]及び80 [Ry]である。さらに、波動関数から運動エネルギー密度、張力密度、およびストレステンソル密度といった密度量[4]を計算することにより、空間に分布する電子の物理的特徴を明らかにする。

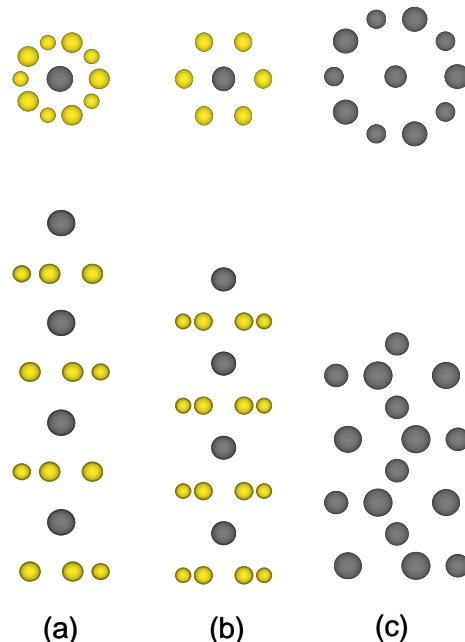


図 1. ナノワイヤーモデル.

(a)五員環構造を持つAIBナノワイヤー(b)六員環構造を持つAIBナノワイヤー(c)五員環構造を持つAIナノワイヤー

【結果と考察】

下図はモデルc及び水素が吸着した状態における状態密度(DOS)及び電子密度である。電子密度はナノワイヤーモデルの軸を含む断面のものである。

DOSの図における青い点線はフェルミ準位を表している。図2(a)が吸着前のもので、図2(c)が吸着後の図である。モデルcの状態密度は金属的であり、図2(b)の電子密度に関しては、ナノワイヤー全体に広がっている。一方、水素が吸着したあともDOSは金属的である。しかし、図2(d)の電子密度は水素原子周辺及び軸上のAl-Al間で増加しているのが分かる。この電子状態の違いはナノワイヤーの伝導性や電場応答に大きな影響を与えるものと考えられる。詳細については当日発表する。

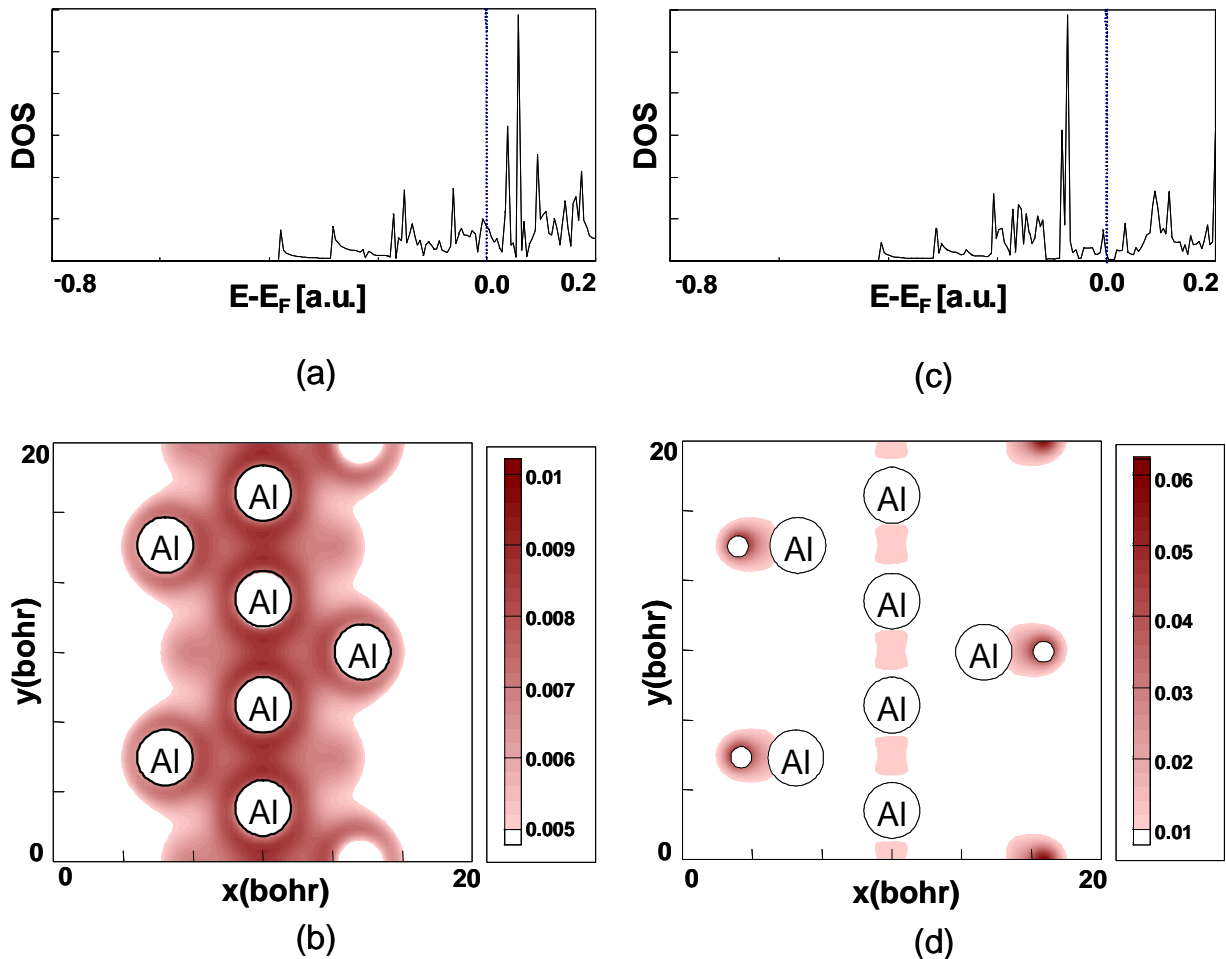


図 2. (a) Al ナノワイヤーの DOS (b) Al ナノワイヤーの軸を含む平面上における電子密度 (c) 水素が吸着した Al ナノワイヤーの DOS (d) 水素が吸着した Al ナノワイヤーの軸を含む平面上における電子密度

【参考文献】

- [1] H. Nakano, H. Ohta, A. Yokoe, K. Doi, and A. Tachibana, *J. Power Sources*, **426-432**, 2399 (2003).
- [2] T. Makita, K. Doi, K. Nakamura, and A. Tachibana, *J. Chem. Phys.* **119**, 538 (2003).
- [3] Y. Kawakami, Y. Nojima, K. Doi, K. Nakamura, and A. Tachibana, *Electrochimica Acta* **50**, 739 (2004).
- [4] A. Tachibana, *J. Mol. Model.* **11**, 301 (2005).