



File No.1 理論と光触媒の融合

光触媒界面上の水の振舞いが明らかに

— 第一原理分子動力学シミュレーションによる世界初の試み —

Researcher: 館山 佳尚(たてやま よしたか) / 環境拠点計算グループ



光触媒は光を当てることにより、触媒材料と溶液の界面において有機物や水を分解する・水をなじみやすくするといった機能を持ち、環境問題に大きく貢献しています。しかしその固液界面における化学反応のメカニズムは、固液界面の解析の難しさと相まってまだ決着がつかないのが現状です。

そこで私たちは最も代表的な光触媒系であるTiO₂(二酸化チタン)アナターゼ構造/水H₂Oの固液界面における原子・分子構造や電子状態を明らかにすることを目標に、実験パラメータを用いない高精度理論(密度汎関数理論)をベースにし、かつ触媒動作環境(室温やバルクな水の存在)を的確に取り込んだ第一原理分子動力学シミュレーションに世界で初めて取り組みました。

その結果TiO₂アナターゼ構造/水の固液界面の水分子の振舞いが原子・電子レベルで明らかになりました。

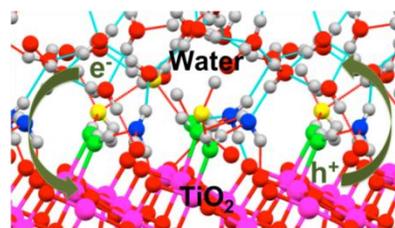


図: 代表的な光触媒系TiO₂アナターゼ(101)/水界面上の水分子の吸着構造と水素結合ネットワーク。

◆ 研究の背景

Background of the research

光触媒は既に実用化されているものの、実は原子・電子スケールでの反応メカニズムはよく分かっていません！光触媒の更なる効率向上が求められている今日、光触媒の界面で原子・電子がどのように振る舞っているかを理解しそれを制御することが大変重要課題となっています。しかしこのような固体と液体が接する固液界面の原子・電子スケールでの実験的観察、理論シミュレーションともまだ大変難しい状況で、それらを実行可能にする新規技術開発が求められています。

◆ 当研究の特徴

Significance of the research

これまでの光触媒界面上の水に関する理論的研究では、真空中に水分子1つまたは1-2層程度の置いた系を調べて、界面上のバルク的な水の振舞いを類推していました。本研究では水としてバルク的な水を直接取り込んだ第一原理シミュレーションを実行することで、TiO₂と水の相互作用を精度良く見積もることができ、触媒動作環境により近い状態での固液界面の原子・電子レベルの理解を進めることができました。また本研究ではNIMSをはじめとするスーパーコンピュータの効率的利用により、膨大な計算量が必要となる固液界面の高精度理論シミュレーションを実現することができました。

◆ 新しい試み/新発見

What's new / What's found

(1)TiO₂アナターゼ界面の方位によって吸着様式が代わり、水H₂Oが分子性を保持したままだったり、H⁺とOH⁻に解離したりすること、(2)その上の水分子とのネットワークにおいて通常の水とは全く異なる強い水素結合と弱い水素結合が存在すること、(3)方位・吸着様式によっては吸着効率が大きく変化すること、(4)純水で覆われた界面は元々親水的と考えられること、などTiO₂アナターゼ構造/水の固液界面における電子・原子レベルの振舞いが明らかになりました。この結果は光触媒系の固液界面反応のメカニズムの理解に一石を投じ、今後の高効率化に対する有用な知見を与えるものとなっています。

◆ 将来展望

Future perspective

本研究で得られた知見は今後の光触媒材料・システムの設計において大変有用であると期待されます。スーパーコンピュータを利用した高精度理論計算シミュレーションは実験では観察しにくい現象を原子・電子スケールから明らかにすることができるため、光触媒に限らずエネルギー・環境問題の様々なメカニズム理解・効率向上において重要な役割を果たすことが期待されます。

本研究は隅田真人博士、胡春平博士との共同研究で行われました。詳細は下記論文をご覧ください。

"Interface Water on TiO₂ Anatase (101) and (001) Surfaces: First-Principles Study with TiO₂ Slabs Dipped in Bulk Water", Masato Sumita, Chunping Hu, and Yoshitaka Tateyama

J. Phys. Chem. C, **2010**, 114 (43), pp 18529–18537 <http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp105364z>

館山 佳尚プロフィール

博士(理学)。青森市生まれ。東京大学大学院理学系研究科修了。科学技術庁金属材料技術研究所、英国ケンブリッジ大学などを経て、現在NIMS-ICNSEE計算グループメンバー、NIMS-MANA独立研究者及びJSTさきがけ研究員