

## 新規モンテカルロ計算プログラムの開発と 水素吸蔵合金の特性評価への応用

○笠原浩太<sup>1</sup>、坪井秀行<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、遠藤 明<sup>1</sup>、久保百司<sup>1,2</sup>、Carlos A. DEL CARPIO<sup>1</sup>、  
宮本 明<sup>3,1</sup>

<sup>1</sup> 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

<sup>2</sup> 科学技術振興機構さきがけ (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

<sup>3</sup> 東北大学未来科学技術共同研究センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

**【緒言】** 水素貯蔵技術のひとつである水素吸蔵合金の実用化は水素エネルギー社会の実現に向けて重要な課題である。しかし金属水素化物の挙動は複雑であり、実験的手法のみでは解決困難な点が多く計算化学への期待が高まっている。本研究では金属水素化物の挙動を原子レベルで解析可能なモンテカルロ計算プログラムの開発を行い、Pd 金属結晶における水素吸蔵特性の評価へと応用した。

**【方法】** 金属結晶の構造変化・膨張・収縮を顕わに取り扱える、水素吸蔵合金特性評価のためのモンテカルロ計算プログラムを開発し、Pd-H 系へと応用した。まず Pd 256 原子からなる結晶中にランダムに H 原子を配置したモデルを用いて、水素吸収に伴う体積変化の解析を行った。また Pd 576 原子からなる結晶の中央部分に集中的に H 原子を配置したモデルを用いて、拡散挙動の解析を行った。

**【結果】** Pd 256 原子モデルでの解析の結果得られた、金属水素化物の水素濃度に対する体積変化率の関係を図 1 に示す。両者は直線的な相関を取ることが実験的にも知られており、本シミュレータではその知見とよく一致した結果を得る事が出来た。次に、Pd 576 原子モデルによる水素拡散シミュレーションの結果を図 2 に示す。H 原子数 24 のモデルでは H 原子は中央付近に留まっているが、より高濃度のモデルではモデル全体に拡散しており、またサイト間部位にも H 原子が分布している様子がわかる。

このように、水素吸蔵に伴う体積変化や拡散現象の原子レベルでの解析が可能となる新規モンテカルロ計算プログラムの開発に成功した。

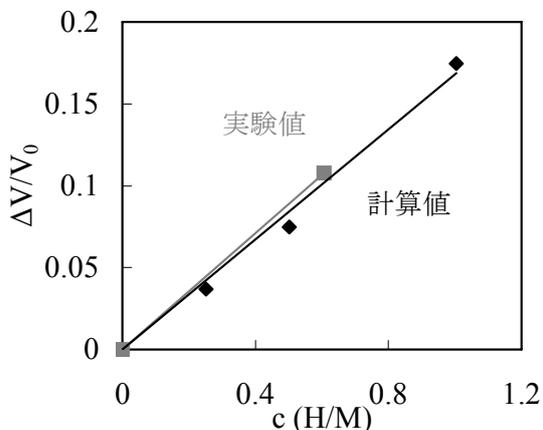


図 1 水素濃度と体積変化率

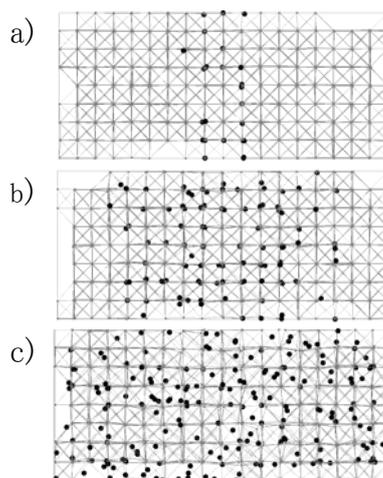


図 2. 拡散シミュレーションの最終構造

a)H 24 原子 b)H 96 原子 c)H 192 原子

●Pd ●H