

金属ナノ粒子の水素化状態と物性に関する理論解析

○石元孝佳、安高美奈子、Mahesh Bhatt、古山通久

九州大学稲盛フロンティア研究センター

九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所

(〒819-0395 福岡市西区元岡 744)

JST-CREST (〒102-0076 東京都千代田区五番町 7 K' s 五番町)

【緒言】

金属ナノ粒子は、燃料電池電極触媒や排ガス浄化触媒などの環境エネルギーやエレクトロニクスといった幅広い分野で利用されており、現在多くの研究者がバルク金属では見られない金属ナノ粒子特有の新たな化学的・物理的性質の探索に取り組んでいる。近年京都大学・北川グループでは、金属ナノ粒子に水素を作用させることで本来混ざるはずのない異種金属同士が固溶したり、金属の物理的・化学的性質が劇的に変化する現象を実験によって見出した[1,2]。しかしながら、金属ナノ粒子における固溶体形成や新機能の発現の際に水素の果たす役割は解明されていない。今後自在に金属ナノ粒子の性質を制御するためにも水素化による電子状態や物性の詳細な解析は不可欠である。そこで本研究では、金属ナノ粒子の水素化による電子状態や構造、物性の変化について密度汎関数理論(DFT)を利用して解析した。

【方法】

Ag/Rh・Pd/Ptの固溶型金属ナノ粒子やNi・Rhナノ粒子のfcc/hcp構造の水素化による電子状態や物性変化を解析するために、クラスターモデルの他、周期境界条件を考慮したセルモデルを使用し、密度汎関数プログラムであるDMol³およびCASTEPによる計算を実行した。

【結果】

単体では水素を吸蔵しないAgとRhを固溶させることで発現する水素吸蔵特性の機構を解明するために、図1には、Ag_{0.5}Rh_{0.5}固溶型ナノ合金に対する水素吸蔵サイトと水素吸蔵エネルギーを示す。オクタヘドラルとテトラヘドラルサイトへの水素吸蔵を仮定した場合、水素吸着エネルギーはそれぞれ-0.59、

-0.44eVであった。これは水素吸蔵により系が安定化していることを意味しており実験結果を再現した。また吸蔵サイトはオクタヘドラルサイトのほうがわずかに安定であり、fcc構造の水素吸蔵サイトとも定性的に一致した。水素化による電子状態変化、構造・物性等の詳細な解析および他の水素化金属ナノ粒子の解析については当日報告する。

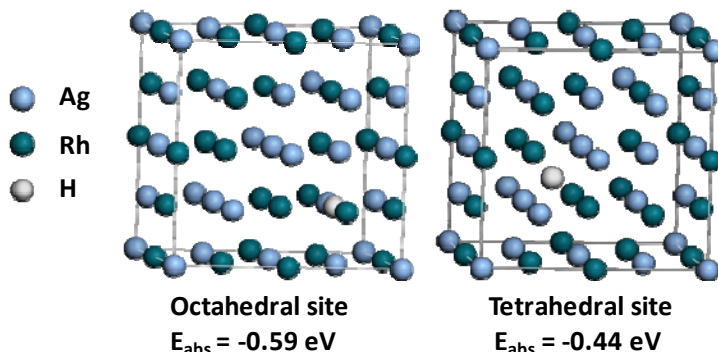


Fig. 1 Hydrogen absorption energy of Ag_{0.5}Rh_{0.5} alloy.

【謝辞】

本研究の一部は京セラ(株)の支援により行われた。関係各位に感謝する。

【参考文献】

- [1] H. Kobayashi, M. Yamauchi, H. Kitagawa, Y. Kubota, K. Kato, and M. Tanaka, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 5576 (2010).
 [2] K. Kusada, M. Yamauchi, H. Kobayashi, H. Kitagawa, and Y. Kubota, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 15896 (2010).