

Pd 系合金における水素吸蔵特性 および電子構造に関する理論検討

○ 屋山 巴^{1,2}, 石元孝佳^{1,2}, 古山通久^{1,2,3}

¹九州大学 稲盛フロンティア研究センター (〒819-0395 福岡市西区元岡 744)

²JST-CREST (〒102-0076 東京都千代田区五番町 7K's 五番町)

³九州大学 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)

【緒言】

Pd は単体で水素吸蔵能を有する金属として知られている。固体への水素貯蔵が実用化にいたるためには、水素吸蔵量を高めた水素吸蔵材料の開発が課題である。これに対し、異種元素を Pd に固溶させた合金では水素吸蔵量が増加することが知られている[1]。近年では、ナノ粒子化および水素プロセスを経ることにより、元来固溶しない元素間の合金の作製例が報告されており、中には単体 Pd ナノ粒子に比べて水素吸蔵量が向上した例も示されるなど、新規水素吸蔵合金創製への期待が高まっている[2-4]。本研究では、Pd 系固溶体における水素吸蔵特性への異種元素の寄与を解明するため、第一原理計算を用いた検討を行った。

【方法】

$\text{Pd}_{1-x}\text{M}_x$ ($\text{M}=\text{Ir}, \text{Pt}, \text{Au}$) 固溶体モデルを用いて水素吸蔵エネルギーおよび状態密度を計算した。合金モデルとして Pd 3 原子, M 1 原子の計 4 原子 ($x=0.25$) からなる fcc ユニットモデルを用いた。計算には密度汎関数法に基づく第一原理計算パッケージソフトウェア VASP を用いた。

【結果】

図 1 に水素 1 原子の吸蔵エネルギーの固溶元素依存性を示す。Pd のみによって構成される八面体サイトに水素が吸蔵されるとき、水素吸蔵エネルギーは安定な順に Pd_3Au_1 , Pd 単体, Pd_3Pt_1 , Pd_3Ir_1 となった。さらに、異種元素を含むサイトにおいて、いずれの元素についても水素の吸蔵は不安定である。このように、Pd 系合金の水素吸蔵エネルギーは固溶元素に応じて変化することがわかった。このとき、水素原子は Pd のみで構成される格子間サイトに吸蔵される可能性が示唆された。

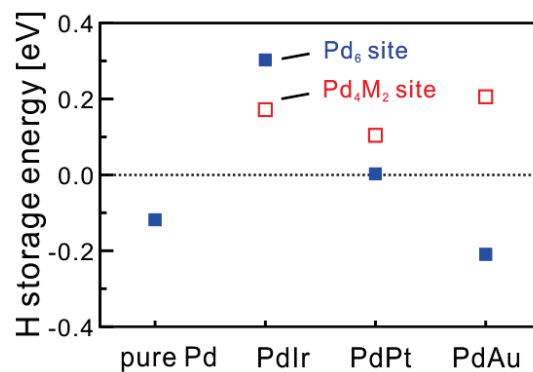


図 1: 水素吸蔵エネルギーの固溶元素依存性。

【謝辞】

九州大学稲盛フロンティア研究センターの研究活動は京セラ(株)の支援により行われた。

【参考文献】

- [1] M. Lukaszewski *et al.*, J. Solid State Electrochem. **7** (2003) 69.
- [2] H. Kobayashi, *et al.*, J. Am. Chem. Soc., **132** (2010) 5576.
- [3] H. Kobayashi, *et al.*, J. Am. Chem. Soc., **133** (2011) 11034.
- [4] 日本化学会編, 『金属および半導体ナノ粒子の科学』, 化学同人, 2012.