

機能的材料表面での水素および酸素の反応解析

大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻応用物理学コースナノ理論領域
笠井 秀明, 中西 寛, Nguyen Tien Quang, Saputro Adhitya Gandaryus, Febdian Rusydi, 岡 耕平
Alaydrus Musa, Fadjjar Fathurrahman, Tran Linh Phan Thuy, 岸田 良, 土谷 亮

目的および手法:

表面近傍や表面からバルクへ至る表層における水素・酸素が、特異な束縛量子状態、拡散過程を有していることが知られてきた。これらの特異性が、次世代の省エネデバイスとして期待されている水素貯蔵材料(パラジウムなど)の高い反応活性の起源となっており、また、燃料電池電極膜の酸素イオン伝導に大きく寄与していることが明らかとなり、脚光を集めている。本研究では、量子論に基づいて、水素・酸素の量子効果を勘案した量子ダイナミクスシミュレーション手法を革新し、原子核も含んだ系の波動関数を抽出し、実験と比較検討することで表層系の原子の振る舞いを解明し、高機能材料の知的設計を目指す。

結果:以下に主要な研究結果を記述す。

1. バイオマス由来の燃料ガスには水素分子の他に窒素分子等も含まれるため、水素燃料電池に用いる為には水素精製を行う必要があり、水素分子の選択的な解離吸着・透過特性が要求される。その材料として有望視されるPd(111)とPd₃Ag(111)面について調べ、どちらの表面においても窒素分子の解離は起きづらいという事を示した。また、当研究室の開発したコード[NANIWA]を用いて明らかになった表層でPd₃Ag(111)がPd(111)よりも水素の透過性が優れているという結果と合わせ、Agとの合金化により、Pdに水素精製透過膜材料として望ましい特性を付与できることを示した。また、Pd(110)表面も調査し、水素の透過性の面方位依存性も明らかにした。
2. 固体高分子系燃料電池(PEFC)は発熱量が小さいことから小型化が容易であり、携帯機器などへの応用が期待されている。しかしながら、発電時の化学反応は理論的にほとんど解明されていなかった。また、古典力学を用いた計算では水素や酸素が数百度の高温でないと反応しないと予測されていたが、実際には室温程度でも反応が起こり、理論との不一致が指摘されていた。そこで、密度汎関数法した計算されたポテンシャルエネルギー表面(PES)から反応経路、活性化エネルギーを取得し、カップルドチャンネル法による量子ダイナミクスシミュレーションを行った。その結果、比較的質量が大きく量子効果が働かないと考えられていた酸素原子でも、トンネル効果が顕著に働き、室温でも酸素の反応が起きていることを示した。

利用した計算機: SX-8, SX-9, PCクラスタ, 汎用コンクラスタ
使用メモリ: 120GB
並列化: 16並列

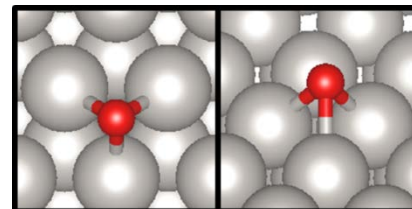


図: Pd(111)への水素の吸着, Top view(左), Side view(右), 銀球: Pd原子, 赤球: H原子