研究成果報告書

(国立情報学研究所民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

| 研究テーマ (和文) | | Pt 族金属ナノ粒子の水素吸蔵におけるサイズ効果 | | | | | | | | | | |
|---------------------------|-----------------|--|------|--------|------------|---|--|--|--|--|--|--|
| AB 研究テーマ (欧文) AZ | | Size effects on the hydrogen storage in platinum-group metal nanoparticles | | | | | | | | | | |
| 研 究氏 | ከ 9ከታ CC | 姓)ヤマウチ | 名)ミホ | 研究期間 B | 2003~ 2005 | 年 | | | | | | |
| 代 | 漢字 CB | 山内 | 美穂 | 報告年度 Y | 2005 | | | | | | | |
| 表名 者 | □-マ字cz | Yamauchi | Miho | 研究機関名 | 九州大学 | | | | | | | |
| 研究代表者 C | | | | | | | | | | | | |

概要 EA(600字~800字程度にまとめてください。ワープロ作成原稿の切り貼りで結構です。)

金属ナノ粒子は離散的な電子準位に起因する特異的物性を示す。金属の水素吸蔵においても吸蔵量や吸蔵圧力にナノ粒子特有の性質が強く反映されると考えられる。本研究では、白金族を中心とした金属ナノ粒子の水素吸蔵におけるサイズ依存性を明らかにすることを目的とする。

はじめに、金属ナノ粒子の水素吸蔵特性におけるサイズ依存性を系統的に研究するため、バルク状態で水素を高密度に吸蔵するPdの粒径2~7 nmのナノ粒子を作製し、その水素吸蔵量を測定した。その結果、Pdのサイズが減少するにしたがって、水素吸蔵量および平衡水素圧力が低下することが明らかになった。また、測定データの詳細な解析により、金属の水素吸蔵における熱力学量にはサイズ依存性があることがわかった。この結果は、金属の水素吸蔵特性においてサイズ依存性を定量的に決定した初めての結果である。Pdナノ粒子に吸蔵された重水素の固体NMR測定を極低温まで行ったところ、ナノ粒子試料には、バルクにはない緩和過程が存在することが明らかになった。また、周波数依存性および金属サイズ依存性も観測され、ナノ粒子試料における緩和は重水素のトンネリングによるものということがわかった。

Pdナノ粒子の外側にPtのシェルを持つPd/Ptナノ粒子を水素ガス1気圧、373 Kでアニールすることで、バルクにはない新規な構造を有するPdPt合金ナノ粒子の創製に成功した。バルクのPdPt合金においてPdとPtは相分離し、水素との反応では各々の金属の特性を維持したままであり、合金中のPt濃度が高くなるにつれて水素吸蔵量が減少することが知られている。さらに、PdPt合金ナノ粒子の水素吸蔵特性を調べたところ、バルクでは水素を吸蔵しないPtを含めた一金属当たりの水素の吸蔵量は、コア部のPdナノ粒子よりも大きいことが明らかとなった。

本研究の結果より、金属ナノ粒子は、バルク金属とことなる水素吸蔵特性を示すことがわかった。金属ナノ粒子は、これまでのバルク金属にない新奇の水素機能性材料となることが期待できる。

(以下は記入しないでください)

| 助成財団コード ⊤△ | | | 研究課題番号 🗚 | | | | | |
|------------|--|--|----------|--|--|--|--|--|
| 研究機関番号 AC | | | シート番号 | | | | | |

| 発表文献(この研究を発表した雑誌・図書について記入して下さい) | | | | | | | | | | | |
|---|------------------------|---|---------------------|--|------|-----|---|--------|-----|--|--|
| | 論文標題 GB | Hydrogen Absorption in Size-Controlled Pt Nanoparticle | | | | | | | | | |
| 雑 | 著者名GA | M. Yamauchi and H. Kitagawa | 雑誌名GC | 誌名 G C CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS | | | | | | | |
| 誌 | ページGF | ~ | 発行年GE | 2 0 0 5 巻号 GD | | | | | | | |
| | 論文標題 GB | Hydrogen Absorption of the Polymer-coated Pd Nanoparticle | | | | | | | | | |
| 雑 | 著者名GA | M. Yamauchi and H. Kitagawa | 雜誌名GC Synth. Metals | | | | | | | | |
| 誌 | ページGF | 353 ~ 356 | 発行年GE | 2 | 0 | 0 | 5 | 巻号 GD | 153 | | |
| | 論文標題 GB | Isotope effect in hydrogen/deuterium-absorbing Pd nanoparticles revealed by X-ray powder diffraction and by a multi-component MO method | | | | | | | | | |
| 雑 | 著者名GA | M. Yamauchi et al. 雑誌名GC J. Phys. Soc. Jpn | | | | | | | | | |
| 誌 | ページGF | 1775 ~ 1780 | 発行年GE | 2 | 0 | 0 | 4 | 巻号 GD | 73 | | |
| 図 | 著者名HA | 藤島 武蔵、山内 美穂、北川 宏 | | | | | | | | | |
| | 書名HC | 水素エネルギーと材料技術 | | | | | | | | | |
| 書 | 出版者HB | シーエムシー出版 | 発行年HD | 2 | 0 | 0 | 5 | 総ページHE | 13 | | |
| 図 | 著者名HA 小林 浩和、山内 美穂、北川 宏 | | | | | | | | | | |
| | 書名HC | 金属ナノ粒子の合成・ | 調製・コントロ | ール技行 | 析と応用 | 月展開 | | | | | |
| 書 出版者HB 技術情報協会 発行年HD 2 0 0 4 総ページ HE 15 | | | | | | | | | 15 | | |

欧文概要 E Z (ワープロ作成原稿の切り貼りで結構です。)

Hydrogen storage materials are indispensable for usage of hydrogen energy. In particular, metal alloys have a blight prospect as a hydrogen reservoir, and some of them have already been used practically, e.g., in the hydrogen storage tank for automobiles, in Ni-MH battery, and so on. Metal nanoparticles, which exhibit different properties from bulk metals, have potential for new functional materials. Since the metal nanoparticles possess large surface area, they are expected to dissociate hydrogen molecules easily and absorb hydrogen at lower temperature and lower pressure. The metal nanoparticles is, therefore, a candidate for a novel hydrogen reservoir.

On the other hand, hydrogen absorption properties of metal nanoparticles contain basically important interests, such as, phase transition in the nanometer-sized condensed matter, quantum mechanical effect of hydrogen in metal nanoparticles, *etc.*

Mono-dispersed palladium nanoparticles, which were coated with polymer, were prepared and their hydrogen absorption properties were investigated. The averaged diameter of the prepared particles was estimated to be 2.6 ± 0.4 nm from a TEM photograph. By measurement of hydrogen pressure-composition isotherms, the hydrogen solubility of the Pd particles was determined to be 0.5 H per Pd. In the isotherms, plateau-like region was observed in the temperature rang of 303 to 393 K, indicating the coexistence of solid solution and hydride phases in the Pd nanoparticles in this temperature range.

Bulk Pd shows a hydrogen-storage property, while bulk Pt does high catalytic ability for hydrogen dissociation and high hydrogen permeability. Pd/Pt bimetallic nanoparticle with a Pd-core/Pt-shell structure is expected to exhibit great efficiency in hydrogen storage. In this study, to elucidate structural change of Pd nanoparticle and Pd/Pt bimetallic nanoparticle with hydrogen, the *in-situ* synchrotron powder diffraction experiments were carried out while introducing hydrogen in the same sample. From the measurements, it was revealed that there was no change in the lattice constant even if Pd/Pt nanoparticle absorbs hydrogen.

会計報告書

研究(代表)者 山 内 美 穂 印

単位 円

| 使 途 別 | 助成金支出 計画書 (a) | 実 績 (b) | 差 異 (a) — (b) | 差異の理由 |
|--|------------------|-------------|------------------|---------------------------------|
| 備品 E5061A-1. 5GHz | 300, 000 | 1, 399, 755 | -1, 099, 755 | 本研究の遂行に必須な固体 NMR 測定用のネットワークア |
| network analyzer 消耗品 | 400, 000 | 0 | 400, 000 | ナライザーを購入した為。 備品費の不足分に補填の為 |
| 国内旅費 | 100, 000 | 0 | 100, 000 | 備品費の不足分に補填の為 |
| 海外旅費 | 600, 000 | 0 | 600, 000 | 備品費の不足分に補填の為 |
| 書籍 「分散型エネルギ | 100, 000 | 63, 472 | | |
| ーシステムと燃料 電池」 「Single Organic | | 18, 717 | | |
| Nanoparticles」 「 Molecular Devices and | | 19, 073 | | |
| Machines」 「A Journey into | | 19, 621 | | |
| the Nanoworld」 | | | -20, 883 | |
| その他諸経費 全学協力事業経費 | 100, 000 | 65, 000 | | |
| 理学研究院研究協力資金 | | 26, 000 | 9, 000 | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | | | | |
| | 1, 600, 000 | 1, 611, 638 | -11, 638 | |

^{*}本報告書に領収書を添付する必要はありません。