

## 学位論文内容の要旨

学位申請者	<p style="text-align: center;">松田 彩 【理学専攻 平成25年度生】</p>	要 旨
論文題目	<p style="text-align: center;">相対論的電子論に基づく Pd/Pt ナノ粒子の水素吸蔵特性に関する考察</p>	<p>持続可能な社会を指向しクリーンな水素エネルギーに注目が集まっている。水素は常温常圧で気体である為に、水素エネルギーを活用した水素社会の到達を実現させる上で「水素貯蔵」法の確立は欠かすことができない。そのため、これまでに様々な水素吸蔵材料が開発されてきた。中でも、遷移金属を用いた水素吸蔵材料は、常温における水素の「吸蔵・放出」能力に長ける。だが、その水素吸蔵量においては、実用に向けた目標値には及ばず、更なる改良が求められている。</p> <p>上記背景下、本論文では、金属のナノ粒子化・ナノ合金化による水素吸蔵特性の変化に関する相対論的電子論および分子動力学法による検討を行なっている。金属のナノ粒子化は、バルク状態では存在しなかった吸着サイトの出現や比表面積の増大、即ち水素吸蔵特性の向上をもたらすと期待される。だが、その電子状態が相対論効果により支配されることから取り扱いが困難であり、その理論的検討の例は無かった。第一章では、水素エネルギーと水素吸蔵材料の開発現状をまとめ、研究の目的が記されている。第二章では、純 Pd および Pt ナノ粒子それぞれの電子状態と水素吸蔵特性の関係について近年開発された高速な相対論的量子化学計算を用いて調査した。その結果、これらのナノ粒子の水素吸蔵特性の違いが、ナノ粒子内の閉殻電子密度分布 (ELF) により説明できること、また、吸蔵水素の荷電状態の違いからバルクとナノ粒子の違いについても説明できることを示した。続く第三章では、同様な議論が Pd/Pt 合金ナノ粒子においても拡張的に成り立つことを示した。第四章では、分子動力学計算により、水素吸蔵速度が Pd ナノ粒子の露出面により異なることを初めて理論的に説明した。第五章ではこれらの成果を総括し、最終章では関連する電子状態理論をまとめている。</p> <p>これらの成果は、新奇水素吸蔵性ナノ合金の更なる探索に向けて、理論的な材料設計指針を示したものである。本論文は基礎化学の立場から材料化学、エネルギー科学の分野にも有用な基盤情報を提供している。</p>
審査委員	<p>(主査) 准教授 森 寛敏</p>	
	<p>教授 鷹野 景子</p>	
	<p>教授 近藤 敏啓</p>	
	<p>教授 益田 祐一</p>	
	<p>教授 小林 功佳</p>	