

自己評価報告書

平成 23 年 4 月 22 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(A)

研究期間：2008 ~ 2011

課題番号：20246011

研究課題名(和文)

ナノ空間における水素のオルト-パラ転換と分子形成

研究課題名(英文)

Ortho-para conversion and molecule production of hydrogen in nano-space

研究代表者

福谷克之(FUKUTANI KATSUYUKI)

東京大学・生産技術研究所・教授

研究者番号：10228900

研究分野：表面界面物性

科研費の分科・細目：薄膜・表面界面物性 ・ 表面

キーワード：表面、水素、核スピン、氷

1. 研究計画の概要

本研究では、イオン性物質である氷やイオン結晶および炭素系物質表面における水素分子の吸着状態を詳細に明らかにするとともに、水素分子オルト-パラ転換と分子形成機構の解明を行う。特にアモルファス氷やカーボンナノチューブに存在するナノ細孔に焦点を当てて研究を進める。ナノサイズの細孔内では、分子の回転運動が制限を受け、さらに電気双極子場の影響で強い四重極相互作用が働く。これらの制限空間効果の影響を明らかにすることでナノ空間の果たす役割を解明する。

2. 研究の進捗状況

ナノ空間を有する試料として、アモルファス氷および炭素ナノチューブ、さらに NaCl 蒸着膜の作製を行った。アモルファス氷試料における水素のオルト-パラ転換時間を、レーザー共鳴分光法を用いて測定し、H₂ 分子の転換時間が 370(+340,-140)s、D₂ 分子の転換時間が 1220(+2980,-580)s であることを明らかにした。さらに、転換機構として、氷表面の電場効果を考慮した理論モデルの構築を進めた。イオン結晶試料として NaCl 蒸着膜への水素分子吸着の実験を行い、赤外吸収分光を用いて水素分子の伸縮振動に起因する吸収ピークを観測した。水素分子は赤外不活性であるが、イオン結晶表面の電場により誘導双極子が誘起され、これにより赤外活性になったと考えられる。炭素ナノチューブへの水素分子吸着について極低温熱脱離分光を用いて調べた。窒素分子との共吸着効果を調べることで、ナノチューブグループサイトとナノチューブ内側サイトへの吸着を弁別できることを示した。水素分子の内部状態を観

測する実験手法であるレーザー誘起蛍光法の圧力依存性を調べ、蛍光強度と蛍光寿命が分子の回転状態に依存することを見いだした。

3. 現在までの達成度

①当初の計画以上に進展している。

(理由)

ナノ空間でのオルト-パラ転換時間の測定に成功し、実験結果を説明する新たな電場誘起モデルの構築を行った。吸着状態の赤外吸収スペクトル測定にも成功し、分子形成を表す内部状態分布も測定しており、当初の目的はほぼ達成した。スピン転換速度が当初の予測とは大きく異なる結果となり、新規理論モデルの提案につながった点は当初の予想を超える成果である。

4. 今後の研究の推進方策

新たに発見した電場誘起スピン転換について、よりイオン性の大きな物質である ZnO と TiO₂ ナノチューブについて実験を行うとともに、分子の励起状態間の結合を定量的に評価することでさらに理論考察を深める。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 5 件)

①Y. Kunisada, H. Kishi, F. Dimas, M.-Y. David, H. Nakanishi, H. Kasai, T. Asari, S. Hayashi, Adsorption properties of BF₄⁻ anions on graphene, Jpn. J. Appl. Phys. 49, 02BB04 (2010) 査読有

②K. Niki, S. Ogura, M. Matsumoto, T. Okano, K. Fukutani, Effects of coadsorbed O₂ on hydrogen ortho-para conversion on Ag surfaces, Phys. Rev. B 79, 085408 (2009) 査読有

③ T. Sugimoto, T. Okano, K. Fukutani,
Problem of Gas Dose with Micro-Capillary
Array, J. Vac. Soc. Jpn., 52(2009)
査読有

④ S. Arima, S.-K. Lee, Y. Mera, S. Ogura,
K. Fukutani, Y. Sato, K. Tohji, K. Maeda,
Electron-stimulated Defect Formation in
Single-walled Carbon Nanotubes Studied by
Hydrogen Thermal Desorption Spectroscopy,
Appl. Surf. Sci. 256(2009) 1196. 査読有

⑤ D. Son, H. Nakanishi, M. David, H. Kasai,
Oxygen Reduction on Pt(111) Cathode of
Fuel Cells, J. Phys. Soc. Jpn. 78, 114601
(2009) 査読有

[学会発表] (計6件)

① 國貞雄治, Wilson Agerico Diño, 中西寛,
笠井秀明, 金属表面に吸着した水素分子の
核スピン転換機構, 日本物理学会第65回
年次大会, 2010年3月20-23日, 岡山大学

② 尾澤伸樹, 中西寛, 笠井秀明, Pd(111)表
面及び表面内部領域に入射した水素原子の
量子ダイナミクス, 第50回真空に関する連
合講演会, 2009年11月4-6日, 学習院大学

③ 國貞雄治, Wilson Agerico Diño, 中西寛,
笠井秀明, 金属表面上での水素分子のオル
ソ・パラ転換ダイナミクス, 第50回真空に
関する連合講演会, 2009年11月4-6日, 学
習院大学

④ 尾澤伸樹, 中西寛, 笠井秀明, Pdクラスタ
ー表面近傍における量子様態の解析, 日本物
理学会2009年秋季大会, 2009年9月25-28
日, 熊本大学

⑤ 國貞雄治, 中西寛, 笠井秀明, Ag表面上で
の水素分子のオルソ・パラ転換, 日本物理学
会2009年秋季大会, 2009年9月25-28日,
熊本大学

⑥ 笠井秀明, 理論物性学入門—水素の豊富
な物理とその周辺—, 第4回水素若手研究
会, 2009年8月31日-9月2日, 関西大学

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

名称：
発明者：
権利者：

種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況 (計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

[その他]