

平成22年5月10日現在

研究種目：基盤研究（A）

研究期間：2007-2009

課題番号：19206007

研究課題名（和文） 固体表面・サブ表面・バルクにおける水素の量子状態の解明

研究課題名（英文） Quantum states of the hydrogen atom on solid surfaces, in sub-surfaces and in bulk crystals.

研究代表者 笠井 秀明 （KASAI HIDEAKI）

大阪大学・工学研究科・教授

研究者番号：00177354

研究成果の概要（和文）：表面・サブ表面・バルク領域にわたる水素原子の量子状態を探る第一原理量子ダイナミクス計算手法および共鳴核反応による観測実験手法を開発した。開発したシミュレーションおよび観測実験手法を Pd(111) および Pd₃X (X=Ag, Cu, Ni) 合金(111) 表面系に適応して、金属の表面からサブ表面における水素の量子状態および、表面からサブ表面への水素拡散の量子ダイナミクスを解明した。

研究成果の概要（英文）： We developed the first principles quantum dynamics simulation methods and the nuclear resonance reaction measurement methods for the quantum states of the hydrogen on solid surfaces, in sub-surface and in bulk crystals. By use of our developed simulation and experimental methods, we studied the hydrogen quantum dynamics from surface to the subsurface areas of the Pd and Pd₃X (X=Ag, Cu, Ni) alloys.

交付決定額

(金額単位：円)

| | 直接経費 | 間接経費 | 合計 |
|--------|------------|------------|------------|
| 2007年度 | 14,800,000 | 4,440,000 | 19,240,000 |
| 2008年度 | 17,500,000 | 5,250,000 | 22,750,000 |
| 2009年度 | 5,000,000 | 1,500,000 | 6,500,000 |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 総計 | 37,300,000 | 11,190,000 | 48,490,000 |

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎

キーワード：水素・表面・サブ表面・量子ダイナミクス・共鳴核反応法
走査トンネル顕微鏡法・拡散・水素吸蔵

1. 研究開始当初の背景

現在、クリーンエネルギーシステム構築の社会的要請を受けて、水素関連の技術開発が脚光を浴び、水素吸蔵反応、燃料電池の電極反応およびプロトン輸送反応など水素の運動に関わる反応の研究が盛んになされている。しかしながら、本来その中核となるべき水素の状態観測は、特に水素が固体表面上、

サブ表面内、バルク内といった環境にあるとき極めて困難であり、原理原則に従った各種反応の機構解明、それをうけた反応プロセスの改良等は望むべくも無かった。

2. 研究の目的

本研究では水素状態の直接観察手法による強力な実験のバックアップを基に第一原

理(電子状態)計算手法を援用したフィッティング・パラメータを排除した水素の量子ダイナミクス・シミュレーション手法の開発を行い、実験と理論の両面から協力して固体表面・サブ表面・バルクにおける水素の量子状態を解明する。

3. 研究の方法

(1) 様々なマテリアルの表面・サブ表面・バルク環境下での水素の運動を支配するマテリアル依存性のあるポテンシャル・エネルギー超曲面の第一原理計算手法

(2) 原子核に量子力学を適用した水素運動の量子ダイナミクス・シミュレーション手法

(3) 共鳴核反応法(NRA)による水素の運動量分布および空間分布の観測手法

この3つの要素技術を駆使して、固体表面・サブ表面・バルク環境下における水素の量子状態を解明する。

4. 研究成果

4.1 表面・サブ表面における水素の量子状態

4.1.1 Pd(111)系

表面領域からサブ表面領域にわたる水素の量子状態を探る第一原理量子ダイナミクス計算手法を発展させ、Pd(111)表面系へ応用を試みた。水素原子の表面吸着サイトは、fcc ホローサイトであった。この吸着状態から、縦振動の励起状態までの励起エネルギーを計算したところ 134meV であった。HREELS による実験結果は、124meV であったので実験との一致は極めて良い。この表面 fcc ホローサイトから内部への拡散経路として、Pd 第一層と第二層間の正八面体サイト(1st OH)、次に第二層と第三層間の正四面体サイト(2nd TH)を通過する経路が見出された。この経路は幅が狭いため、量子論による活性化障壁は古典論によるものより大きく、また、同位体効果も大きい。たとえば、表面 fcc ホローサイトからPd第一層と第二層間の1st OHへは、第一原理電子状態計算によるポテンシャル障壁の 579 meV に対し、第一原理量子ダイナミクス計算手法では、軽水素原子で 598meV、重水素原子で 646meV であった。実験グループでは、水素の運動量分布を求める共鳴核反応法を確立した。Pd 表面に吸着した水素原子の運動量状態を測定した結果、シミュレーション結果と誤差範囲で一致する結果が得られた。また、同方法でサブ表面内での水素の分布状況を測定することにも成功した。

4.1.2 Pd₃X 2元合金(111)系

Pd₃X 合金(111)表面系(X=Ag, Cu, Ni)の水素原子の量子状態を調べた結果、水素原子が表面第一、二層間のサブ表面領域へ拡散する過

程において第一原理電子状態計算手法によって得られた断熱ポテンシャルエネルギー障壁[Pd: 574 meV, Pd₃Ag:381 meV]より、第一原理量子ダイナミクス計算手法によって得られた活性化エネルギー障壁[Pd:308 meV(トンネル過程), 468meV(非トンネル過程), Pd₃Ag:257meV(非トンネル過程)]のほうが小さくなった。なお、Pd₃Ag(111)表面に対してはトンネル過程による拡散経路は見あたらなかった。第一原理電子状態計算によって計算したサブ表面領域への拡散過程における断熱ポテンシャルエネルギー障壁の大きさは[Pd₃Ag]<[Pd]<[Pd₃Cu]<[Pd₃Ni]の順であることが示された。これは実験で観測された水素透過能 [Pd₃Ag]>[Pd]>[Pd₃Cu]>[Pd₃Ni]の順であることに一致している。拡散のしやすさは、この場合は主に格子定数の増加に伴い fcc hollow サイト近傍の空間(キーホール)が開き、水素-金属イオンコア間の距離が大きくなることによってポテンシャル障壁が減少し、その結果水素原子が金属原子間を通り易くなり水素透過能が上昇したことに起因している。どの合金においても、表面上及びサブ表面領域を問わず、異元素原子間より Pd 原子間のキーホールが水素の拡散経路として有効であることがわかった。

4.1.4. Pd ナノ結晶系

水素吸蔵反応における Pd 粒子のサイズ効果を調べるため、格子定数を変えながらPd(111)表面およびサブ表面における水素の量子状態を第一原理電子状態計算及び第一原理量子ダイナミクス計算手法を援用して調べた。その結果、格子定数の値が増加するに従って表面上から表面第1・2層間への拡散に必要なポテンシャル障壁が減少した。これは合金化の時と同様に、水素-パラジウムイオンコア間の距離が大きくなることによって、それらのコア間の反発相互作用が抑えられたためと考えられる。

実験ではアルミナ上の Pd ナノ結晶を水素に曝露させると、オレフィンの水素化反応においてバルクには無い特異な高い活性を持つことを見いだした。

4.2 表面からサブ表面への水素拡散の量子ダイナミクス

表面系における水素の波束の時間発展を追跡するシミュレーションのプロトタイプを完成させ、Pd(111)系へ適応をこころみた。最初に、初期状態を表面吸着状態に設定し表面垂直方向に対して 308meV の入射エネルギーを与えると、水素原子の波動関数の波束は表面1・2層間まで進み、第2層におけるポテンシャル障壁に反射されることを確認した。次に、664meV と第2層におけるポテンシャル障壁を越えるのに十分な入射エネルギーを与えたが、波束は同様に表面第2層で反

射された。また、初期状態を水素原子が表面1・2層間における局在状態に設定し、同じく第2層におけるポテンシャル障壁を越えるような入射エネルギー352meVを与えると、今度は典型的な量子効果である回折をしながら、入射水素原子の波束は表面2・3層間へ広がった。これは表面1・2層間から表面2・3層間への拡散経路が大きく湾曲しているため、水素原子が高い入射エネルギーを持つ場合には曲り切れないためと考えられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計17件)

- (1) Yuji Kunisada, Hirofumi Kishi, Fajarisandi Dimas, Melanie Yadao David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Takuma Asari, Shigeo Hayashi, Adsorption properties of BF_4^- anions on graphene, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 49, pp. 02BB04-1-3 (2010)
- (2) Do Ngoc Son, Hideaki Kasai, Proton transport through aqueous Nafion membrane, The European Physical Journal E: Soft Matter and Biological Physics, Vol. 29, pp. 351-361 (2009)
- (3) Do Ngoc Son, Hiroshi Nakanishi, Melanie Yadao David, Hideaki Kasai, Oxygen Reduction on Pt(111) Cathode of Fuel Cells, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 78, pp. 114601 (2009)
- (4) Tanglaw Roman, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, High-uptake graphene hydrogenation: a computational perspective, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 21, pp. 474219 (2009)
- (5) Tanglaw Roman, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Halogen-assisted Copper Atom Abstraction: A Computational Perspective, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 48, pp. 095501 (2009)
- (6) Tanglaw Roman, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Kunihiro Nobuhara, Tsuyoshi Sugimoto, Kyouchi Tange, Stability of three-hydrogen clusters on graphene, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 78, No. 3, pp. 35002 (2009)
- (7) Mary Clare Sison Escaño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Pt monolayer on Fe(001) as an alternative cathode catalyst: a first principles study, Surface and Interface Analysis 40 (2008) 1085-1087
- (8) Nobuki Ozawa, Nelson Buntimil Arboleda Jr., Hiroshi Nakanishi, Nobuaki Shimoji, Hideaki Kasai, Adsorption and diffusion property of a hydrogen atom on a $\text{Pd}_3\text{Ag}(111)$

surface, Surface and Interface Analysis 40 (2008) 1108-1112

- (9) Nobuki Ozawa, Nelson Buntimil Arboleda Jr., Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, First principles study of hydrogen atom adsorption and diffusion on $\text{Pd}_3\text{Ag}(111)$ surface and in its subsurface, Surface Science, 602(2008) 859-863
- (10) M. Wilde, K. Fukutani, M. Naschitzki, H.-J. Freund, Hydrogen absorption in oxide-supported palladium nanocrystals, Phys. Rev. B 77 (2008) 113412.
- (11) Z. Liu, S. Ito, M. Wilde, K. Fukutani, I. Hirozawa, T. Koganezawa, A hydrogen storage layer on the surface of silicon nitride film, Appl. Phys. Lett. 92 (2008) 192115.
- (12) K. Niki, T. Kawauchi, M. Matsumoto, K. Fukutani, T. Okano, Mechanism of the ortho-para conversion of hydrogen on Ag surfaces, Phys. Rev. B 77 (2008) 201403(R).
- (13) Nobuki Ozawa, Tanglaw Roman, Nelson Buntimil Arboleda Jr., Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Quantum states of hydrogen atom motion on the Pd(111) surface and in the subsurface, Journal of Physics: Condensed Matter, 19 (2007) 365214-365224
- (14) Tanglaw Roman, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Kunihiro Nobuhara, Tsuyoshi Sugimoto, Kyouchi Tange, Identifying hydrogen atoms on graphite, Journal of the Physical Society of Japan, 76 (2007) 114703-01-04
- (15) Nobuki Ozawa, Tanglaw Roman, Nelson Buntimil Arboleda Jr., Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Potential energy of hydrogen atom motion on Pd(111) surface and in subsurface- A first principles calculation, Journal of Applied Physics, 101(2007) 123530-1-6
- (16) M. Fukuoka, M. Okada, M. Matsumoto, S. Ogura, K. Fukutani, T. Kasai, Location of Hydrogen Adsorbed on Rh(111) Studied by Low-Energy Electron Diffraction and Nuclear Reaction Analysis, Physical Review B, 75(2007) 235434-1-9
- (17) K. Fukutani, S. Ogura, M. Wilde, M. Matsumoto, Doppler analysis of hydrogen motion on Pt(111)-Sn surface alloys using the $^1\text{H}(^{15}\text{N}, \alpha \gamma)^{12}\text{C}$ nuclear reaction, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 261 (2007) 494-497

〔学会発表〕(計45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 (岡山市)

(2) Do Ngoc Son, Hideaki Kasai, Oxygen Reduction over Pt(111) Surface, 2010 Annual Meeting of Asian CORE Program "Frontiers of Materials, Photo-, and Theoretical Molecular Sciences", 2010年2月28-3月2日, Taipei, Taiwan

(3) 笠井秀明, 水素と固体の相互作用 (理論), 日本表面科学会・真空協会合同研究会 "水素関連研究の最先端", 2010年2月5日, 名城大学 名駅サテライト (名古屋市)

(4) Eric Magno Dona, Eben Sy Dy, Hideaki Kasai, Density Functional Theory Study on Oxaliplatin Hydrolysis and Complex Formation with Guanine, International Symposium of Electronic Structure Calculations -Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods-, 2009年12月7-9日, 東京大学 (東京)

(5) Nobuki Ozawa, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, A study of incident hydrogen atom behaviors into the Pd(111) surface via quantum methods, Second International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, 2009年11月25-26日, Osaka University Nakanoshima Center

(6) Nghiem Thi Minh Hoa, Melanie David, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Quantum simulation of STM image of magnetic atoms adsorbed on surface at high temperature, Second International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, 2009年11月25-26日, Osaka University Nakanoshima Center

(7) Emi Minamitani, Hiroshi Nakanishi, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, Spectroscopic profiles of the interference between the Kondo effect and the spin ordering effect by the RKKY interaction, Second International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, 2009年11月25-26日, Osaka University Nakanoshima Center

(8) Wahyu Tri Cahyanto, Eben Sy Dy, Susan Aspera, Rachid Belkada, Hiroshi Nakanishi, Ellod Gyenge, Hideaki Kasai, PtRu Anode Catalysts for Direct Methanol Fuel Cells: A Density Functional Study, Second International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, 2009年11月25-26日, Osaka University Nakanoshima Center

(9) Mary Clare Sison Escaño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Tuning Pt surface reactivity using ligand effects and strain on Pt/Cr and Pt/Ni systems: applications to fuel cell cathode catalyst design, Second International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, 2009年11月25-26日, Osaka University Nakanoshima Center

(10) Do Ngoc Son, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Reaction Pathway for Hydronium Ion on Pt(111) surface in Oxygen Reduction, Second International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology 2009年11月25-26日, Osaka University Nakanoshima Center

(11) Tien Quang Nguyen, Mary Clare Sison Escaño, Shinichi Kunikata, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hiroyoshi Maekawa, Kazuo Osumi, Yoshihisa Tashiro, DFT Study of Oxygen Vacancy Formation in A Diesel Oxidation Catalyst: Pt/CeO₂(111), AVS 56th International Symposium and Exhibition, 2009年11月8-13日, San Jose, U. S. A

(12) 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

(13) 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

(14) Hideaki Kasai, Computational Nano Materials Design From Basics to Actual Applications, The 11th ISSP International Symposium (ISSP-11) on Hydrogen and Water in Condensed Matter Physics, 2009年10月12-16日, Chiba, Japan

(15) Nobuki Ozawa, Tanglaw Roman, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Quantum dynamics of a hydrogen atom into the Pd(111) subsurface, The 11th ISSP International Symposium (ISSP-11) on Hydrogen and Water in Condensed Matter Physics, 2009年10月12-16日, Chiba, Japan

(16) Do Ngoc Son, Melanie David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Oxygen Reduction in Presence of Hydronium Ion on Pt(111) surface, The 11th ISSP International Symposium (ISSP-11) on Hydrogen and Water in Condensed Matter Physics, 2009年10月12-16日, Chiba, Japan

(17) Tanglaw Roman, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hydrogen interaction with graphene and platinum: a computational

perspective, The 11th ISSP International Symposium (ISSP-11) on Hydrogen and Water in Condensed Matter Physics, 2009年10月12-16日, Chiba, Japan

(18) Handoko Setyo Kuncoro, Rachid Belkada, Melanie David, Eben Sy Dy, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, A Theoretical Study on the Formation and Binding Energies of Small Water Cluster Systems, The 11th ISSP International Symposium (ISSP-11) on Hydrogen and Water in Condensed Matter Physics, 2009年10月12-16日, Chiba, Japan

(19) 岸浩史, 国方伸一, 中西寛, 笠井秀明, 計算機マテリアルデザイン 先端研究事例～脱貴金属ナノ粒子自己形成触媒, 大阪大学サイバーメディアセンター平成21年度スーパーコンピュータシンポジウム 2009年10月8-9日, 大阪大学 (吹田市)

(20) Emi Minamitani, Hiroshi Nakanishi, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, Observation of the two-impurity Kondo effect in the STS spectra, 11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICESS11), 2009年10月6-10日, Nara, Japan

(21) Nghiem Thi Minh Hoa, Melanie David, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Kondo resonance and magnetic properties of two magnetic atoms on a metal surface: QMC simulation, 11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (ICESS11), 2009年10月6-10日, Nara, Japan

(22) 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 (熊本市)

(23) 足立駿介, 中西寛, 笠井秀明, 第一原理計算によるTiO₂表面上への水分子吸着過程の解析 II, 日本物理学会2009年秋季大会, 2009年9月25-28日, 熊本大学 (熊本市)

(24) Tanglaw Roman, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, High-uptake graphene hydrogenation: a computational perspective, 13th Osaka University-De La Salle University Academic Workshop, 2009年9月21-23日, De La Salle University (Manila, Philippines)

(25) Mary Clare Sison Escaño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Tuning Pt surface reactivity using ligand effects and strain on Pt/Cr and Pt/Ni systems: applications to fuel cell cathode catalyst design, 13th Osaka University-De La Salle University Academic Workshop, 2009年9月21-23日, De La Salle University (

Manila, Philippines)

(26) Tanglaw Roman, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Kunihiro Nobuhara, Tsuyoshi Sugimoto, Kyouichi Tange, Saturating graphene with chemisorbed hydrogen, 20th European Conference on Diamond, Diamond-Like Materials, Carbon Nanotubes, and Nitrides, 2009年9月6-10日, Athens, Greece

(27) Hirofumi Kishi, Melanie Yadao David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, The analysis of the intelligent catalyst in automotive emission control, 5th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, 2009年9月1-3日, 大阪大学 (吹田市)

(28) Do Ngoc Son, Melanie David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, OH Formation in Oxygen Reduction Reaction on Pt(111) Surface, 5th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, 2009年9月1-3日, 大阪大学 (吹田市)

(29) Masahiro Chikaishi, Rachid Belkada, Shinichi Kunikata, Ferensa Oemry, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hiroyoshi Maekawa, Kazuo Osumi, Yoshihisa Tashiro, Dissociative adsorption of O₂ on a single Pt atom coated g-Al₂O₃(111) and Pt(111) surfaces: A DFT study, 5th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, 2009年9月1-3日, 大阪大学 (吹田市)

(30) Triati Dewi Kencana Wungu, Susan Menez Aspera, Hermawan Kresno Dipojono, Melanie Yadao David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Electronic Structure of Lithium Adsorbed on Montmorillonite: A Density Functional Theory (DFT Study), 5th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, 2009年9月1-3日, 大阪大学 (吹田市)

(31) Susan Menez Aspera, Melanie David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, First Principles Study of Water Adsorption on Tri-s-Triazine (Heptazine) Based Graphitic Carbon Nitride (g-C₃N₄), 5th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, 2009年9月1-3日, 大阪大学 (吹田市)

(32) Ferensa Oemry, Mary Clare Sison Escaño, Hirofumi Kishi, Shinichi Kunikata, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hiroyoshi Maekawa, Kazuo Osumi, Yoshihisa Tashiro, NO Adsorption on Pt₄ Tetramers Coated g-Al₂O₃(111) Surface, 5th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, 2009年9月1-3日,

大阪大学 (吹田市)

(33) Wahyu Tri Cahyanto, Eben Sy Dy, Susan Aspera, Melanie David, Hideaki Kasai, Density functional study of the methanol adsorption on the Platinum-Ruthenium alloy surfaces, 5th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, 2009年9月1-3日, 大阪大学 (吹田市)

(34) 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 (吹田市)

(35) Nobuki Ozawa, Tanglaw Roman, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Quantum dynamics behaviors of a hydrogen atom near the surfaces of bulk and crystalline Pd, The 26th European Conference On Surface Science (ECOSS26), 2009年8月31-9月4日, Parma, Italy

(36) Emi Minamitani, Yuji Kunisada, Hiroshi Nakanishi, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, STS Observation of the Interference between the Kondo effects and spin correlation effects by the RKKY interaction, The 26th European Conference On Surface Science (ECOSS26), 2009年8月31-9月4日, Parma, Italy

(37) 尾澤伸樹, Nelson B. Arboleda Jr., 中西寛, 下地伸明, 笠井秀明, Pd表面及び内部における水素原子貯蔵状態の第一原理計算による解析, 日本物理学会第63回年次大会, 2008年3月24日, 近畿大学

(38) Eben Sy Dy, Hideaki Kasai, The design of an artificial hydrogenase H-subcluster (2Fe3S) on calixarenes by density functional theory, 日本物理学会第63回年次大会, 2008年3月25日, 近畿大学

(39) Tanglaw Roman, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Wilson Agerico Diño, Kunihiro Nobuhara, Tsuyoshi Sugimoto, Kyouichi Tang, Discriminating hydrogen structures on graphite, 日本物理学会第63回年次大会, 2008年3月26日, 近畿大学

(40) 尾澤伸樹, Nelson B. Arboleda Jr., 中西寛, 下地伸明, 笠井秀明, 量子力学的手法によるPd(111)表面における水素原子の反応過程の解析, 水素量子アトムクス第6回研究会, 2007年12月14日, 北海道大学学術交流会館

(41) Nelson Buntimil Arboleda Jr., Hideaki Kasai, On Fuel Cell Reactions: Theoretical Investigations on the Hydrogen Interactions with Pt(111), 2nd International Workshop on "Materials Science and Nano-Engineering", 2007年12月1日-5日, Awaji Island, Japan

(42) 尾澤伸樹, Nelson B. Arboleda Jr., 中

西寛, 笠井秀明, 格子緩和効果によるPd(111)表面における水素原子の動的振舞いの変化, 真空に関する連合講演会, 2007年11月14日, 学習院大学

(43) Nelson Buntimil Arboleda Jr., Hideaki Kasai, Tanglaw Roman, Wilson Agerico Dino, Hiroshi Nakanishi, On Fuel Cell Reactions: First Principles Investigations on H₂-Pt(111) Interactions, The 10th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, 2007年10月29日-31日, Hiroshima University

(44) Nobuki Ozawa, Nelson B. Arboleda Jr., Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Quantum mechanical behaviors of hydrogen atom on the Pd(111) and Pd_{0.75}Ag_{0.25}(111) surfaces and in its subsurfaces, International 21st Century COE Symposium for Atomistic Nanofabrication Technology 2007, 2007年10月15日-17日, 大阪大学銀杏会館

(45) Eben Sy Dy, Hideaki Kasai, The Design of an Artificial Hydrogenase H-subcluster (2Fe3S) on Calixarenes by Density Functional Theory, 9th Osaka University-De La Salle University Academic Workshop, 2007年8月10日, De La Salle University- Manila, Philippines

[図書] (計1件)

(1) 笠井秀明・津田宗幸, 固体高分子形燃料電池要素材料・水素貯蔵材料の知的設計, 大阪大学出版会 2008年4月10日

6. 研究組織

(1) 研究代表者

笠井 秀明 (KASAI HIDEAKI)

大阪大学・工学研究科・教授

研究者番号: 00177354

(2) 研究分担者

中西 寛 (NAKANISHI HIROSHI)

大阪大学・工学研究科・助教

研究者番号: 40237326

岡野 達雄 (OKANO TASTSUO)

東京大学・産業科学研究所・教授

研究者番号: 60011219

福谷 克之 (FUKUTANI KATSUYUKI)

東京大学・産業科学研究所・教授

研究者番号: 10228900

大中 幸三郎 (ONAKA KOZABURO)

大阪大学・工学研究科・准教授

研究者番号: 60127199

八木 厚志 (YAGI ATSUSHI)

大阪大学・工学研究科・教授

研究者番号: 70116119

板崎 徳禎 (ITAZAKI NORIYOSHI)

大阪大学・工学研究科・助教

研究者番号: 90223073