

Title	化学劣化に強い水素透過フィルタの開発：水素及び一酸化炭素の表面吸着メカニズム解明
Sub Title	Development of hydrogen permeation filters with a high chemical stability : revealing the adsorption mechanism of hydrogen and carbon monoxide
Author	豊島, 遼(Toyoshima, Ryo)
Publisher	福澤基金運営委員会
Publication year	2022
Jtitle	福澤諭吉記念慶應義塾学事振興基金事業報告集 (2021. )
JaLC DOI	
Abstract	<p>本研究では、パラジウム(以下、Pd)合金を用いた化学劣化に耐性を持つ水素透過フィルタの実現を目的とした。現在の主たる水素生産プロセスは化石燃料の改質であり、生成した水素ガス中には副生成物の一酸化炭素(以下、CO)や原料の有機分子などが混在している。Pdフィルタ表面は水素分子よりもCO分子と結合を形成しやすいため、水素ガスの透過性能は経時によって次第に低下する。この現象を化学劣化と呼ぶ。</p> <p>本研究では、CO吸着を抑制して化学劣化に強い長寿命な水素透過フィルタの開発を目指した。その手段として、CO吸着抑制に効果的と考えられるAu、Ag、Cuなどを組み合わせたPd合金を作製した。Au、Ag、CuはCOとの反応性が低く、かつPdに比べて原子半径の大きいことからCO表面吸着に伴う化学劣化の抑制と共に結晶格子を膨張の効果によって水素透過特性の向上に取り組んだ。</p> <p>表面分析と数値シミュレーションから合金表面に対する水素及びCO分子吸着特性を調べた。特にCOガスの吸着が抑制されることが期待されるPd-Ag合金を対象として、その表面状態をX線光電子分光や赤外反射吸収分光と言った表面敏感な分析手法を用いて、COガス存在下におけるその場測定を実施した。その結果、当初の予想通りPd-Ag合金表面ではCO分子の吸着が効果的に抑制されており、水素透過フィルタとして高い機能を発揮することが見出された。シミュレーションからPd-Ag合金表面ではPdとAgの合金組成に依らず、Agが表面に偏析することで表面が安定化され、CO分子との相互作用が弱まることで、CO表面吸着に伴う化学劣化が進行しづらいことを明らかにした。</p> <p>The main subject of this study was to realize a hydrogen permeable filter with a high resistant to chemical degradation using palladium (Pd) based alloy. Present main hydrogen production process is the reforming of petroleum, and the hydrogen gas produced contains a several by-products such as carbon monoxide (CO) and organic molecules. Since the Pd filter surface is more likely to form bonds with CO molecules than with hydrogen molecules, the hydrogen gas permeability gradually degrades over time (chemical degradation).</p> <p>In this study, we aimed to develop a long-life hydrogen permeable filter that suppresses CO adsorption and has resistant to chemical degradation. To achieve our objectives, Pd alloys were alloyed with Au, Ag, and Cu, which are considered to be effective in suppressing CO adsorption, because they have low reactivity with CO and a larger atomic radius than Pd.</p> <p>Hydrogen and CO molecular adsorption properties on the alloy surface were investigated by surface analysis and numerical simulation. In particular, for Pd-Ag alloys, which are expected to suppress CO gas adsorption, the surface conditions were measured in situ in the presence of CO gas using surface-sensitive analytical techniques such as X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and infrared reflection absorption spectroscopy (IRAS). As a result, it was found that the adsorption of CO molecules was effectively suppressed on the Pd-Ag alloy surface, as initially expected, and that the alloy functions well as a hydrogen permeable filter. The first-principles simulations revealed that on the Pd-Ag alloy surface, regardless of the alloy composition of Pd and Ag, the Ag segregation on the surface stabilizes the surface and weakens the interaction with CO molecules, making it difficult for the chemical degradation associated with CO surface adsorption to progress.</p>
Notes	申請種類：福澤基金研究補助
Genre	Research Paper
URL	<a href="https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=KO12003001-20210002-0045">https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=KO12003001-20210002-0045</a>

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the Keio Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

研究代表者	所属	理工学部	職名	助教(有期)	補助額	1,500 千円
	氏名	豊島 遼	氏名(英語)	Ryo Toyoshima		
研究課題(日本語)						
化学劣化に強い水素透過フィルタの開発:水素及び一酸化炭素の表面吸着メカニズム解明						
研究課題(英訳)						
Development of hydrogen permeation filters with a high chemical stability: Revealing the adsorption mechanism of hydrogen and carbon monoxide						
研究組織						
氏名 Name		所属・学科・職名 Affiliation, department, and position				
豊島遼 (Ryo Toyoshima)		理工学部・化学科・助教				
1. 研究成果実績の概要						
<p>本研究では、パラジウム(以下、Pd)合金を用いた化学劣化に耐性を持つ水素透過フィルタの実現を目的とした。現在の主たる水素生産プロセスは化石燃料の改質であり、生成した水素ガス中には副生成物の一酸化炭素(以下、CO)や原料の有機分子などが混在している。Pd フィルタ表面は水素分子よりも CO 分子と結合を形成しやすいため、水素ガスの透過性能は経時によって次第に低下する。この現象を化学劣化と呼ぶ。</p> <p>本研究では、CO 吸着を抑制して化学劣化に強い長寿命な水素透過フィルタの開発を目指した。その手段として、CO 吸着抑制に効果的と考えられる Au、Ag、Cu などを組み合わせた Pd 合金を作製した。Au、Ag、Cu は CO との反応性が低く、かつ Pd に比べて原子半径の大きいことから CO 表面吸着に伴う化学劣化の抑制と共に結晶格子を膨張の効果によって水素透過特性の向上に取り組んだ。表面分析と数値シミュレーションから合金表面に対する水素及び CO 分子吸着特性を調べた。特に CO ガスの吸着が抑制されることが期待される Pd-Ag 合金を対象として、その表面状態を X 線光電子分光や赤外反射吸収分光と言った表面敏感な分析手法を用いて、CO ガス存在下におけるその場測定を実施した。その結果、当初の予想通り Pd-Ag 合金表面では CO 分子の吸着が効果的に抑制されており、水素透過フィルタとして高い機能を発揮することが見出された。シミュレーションから Pd-Ag 合金表面では Pd と Ag の合金組成に依らず、Ag が表面に偏析することで表面が安定化され、CO 分子との相互作用が弱まることで、CO 表面吸着に伴う化学劣化が進行しづらいことを明らかにした。</p>						
2. 研究成果実績の概要(英訳)						
<p>The main subject of this study was to realize a hydrogen permeable filter with a high resistant to chemical degradation using palladium (Pd) based alloy. Present main hydrogen production process is the reforming of petroleum, and the hydrogen gas produced contains a several by-products such as carbon monoxide (CO) and organic molecules. Since the Pd filter surface is more likely to form bonds with CO molecules than with hydrogen molecules, the hydrogen gas permeability gradually degrades over time (chemical degradation). In this study, we aimed to develop a long-life hydrogen permeable filter that suppresses CO adsorption and has resistant to chemical degradation. To achieve our objectives, Pd alloys were alloyed with Au, Ag, and Cu, which are considered to be effective in suppressing CO adsorption, because they have low reactivity with CO and a larger atomic radius than Pd. Hydrogen and CO molecular adsorption properties on the alloy surface were investigated by surface analysis and numerical simulation. In particular, for Pd-Ag alloys, which are expected to suppress CO gas adsorption, the surface conditions were measured in situ in the presence of CO gas using surface-sensitive analytical techniques such as X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and infrared reflection absorption spectroscopy (IRAS). As a result, it was found that the adsorption of CO molecules was effectively suppressed on the Pd-Ag alloy surface, as initially expected, and that the alloy functions well as a hydrogen permeable filter. The first-principles simulations revealed that on the Pd-Ag alloy surface, regardless of the alloy composition of Pd and Ag, the Ag segregation on the surface stabilizes the surface and weakens the interaction with CO molecules, making it difficult for the chemical degradation associated with CO surface adsorption to progress.</p>						
3. 本研究課題に関する発表						
発表者氏名 (著者・講演者)	発表課題名 (著書名・演題)	発表学術誌名 (著書発行所・講演学会)	学術誌発行年月 (著書発行年月・講演年月)			