

グラフェンの量子トンネル効果による水素同位体分離

Hydrogen Isotope Gas Separation by Quantum Tunneling Effect of Graphene

原子力機構¹, 北大², 阪大³, 東大⁴ ○保田 諭¹, 松島永佳², 矢野雅大¹, 寺澤知潮¹, 朝岡秀人¹, J. S. Gueriba³, W. A. Diño³, 福谷克之^{1,4}

JAEA¹, Hokkaido Univ.², Osaka Univ.³, Univ. of Tokyo⁴ Satoshi Yasuda¹, Hisayoshi Matsushima², Masahiro Yano¹, Tomo-o Terasawa¹, Hidehito Asaoka¹, J. S. Gueriba³, W. A. Diño³, Katsuyuki Fukutani^{1,4}

E-mail: yasuda.satoshi@jaea.go.jp

【序論】水素(H₂)の同位体である重水素(D₂)は、半導体・光ファイバー製造、重水素標識医薬品の開発、核融合の燃料に必須の材料である。近年、単層のグラフェンが常温でD⁺よりもH⁺をより多く通す性質があることが示唆され、常温かつ高いH/D分離能をもつ分離材料として注目されている。その分離機構について数多くの理論計算により検証され、ゼロ点振動エネルギー差による速度論的同位体効果やH⁺とD⁺の波動性の量子トンネル効果の寄与が示唆されている。しかしながら、実験系の構築や精密測定の高信頼性の高い実験的検証例が極めて少ないため、そのH/D分離機構について未だ論争が続いており結論が得られていない。本研究では、電気化学的手法および理論の両アプローチによりグラフェンのH/D分離機構を解明することを試みた。

【実験】電気化学水素ポンピング法を適用し、アノードには膜状のグラフェン(Gr)上にPd膜(6nm)を蒸着したPdGrを用いた。カソードはPtナノ微粒子がカーボン材料に担持したPt/Cを用いた。アノードにH₂とD₂の混合ガスを供給し電圧を印加すると、Pdから放出されるH⁺とD⁺イオンがグラフェンを透過、カソードでH₂とD₂分子に再度、変換される。この透過過程で”ふるい”にかけられた水素同位体ガス量を質量ガス分析により評価し、H/D分離能を評価した(Fig. 1(a))。

【結果】観察されたグラフェンのH/D分離能の電圧依存性をFig. 1(b)に示す。電圧が低い場合には高いH/D値を示すが、電圧が大きくなると減少していく電圧依存性が観察された。理論計算の結果、電圧が小さい場合、H⁺(D⁺)がグラフェン透過の活性化障壁を主に量子トンネル効果により透過することで大きなH/D分離能が発現するが、印加電圧が大きくなると活性化障壁を乗り越える古典的反応の寄与が大きくなりH/D値が減少することが示された(Fig. 1(c))。以上、グラフェンのH/D分離能は量子トンネル効果に起因することを明らかにし、常温で高いH/D分離能を有する水素同位体分離デバイス創製的设计指針を得た¹⁾。

¹⁾S. Yasuda et al., *ACS Nano*, **16**, 14362 (2022).

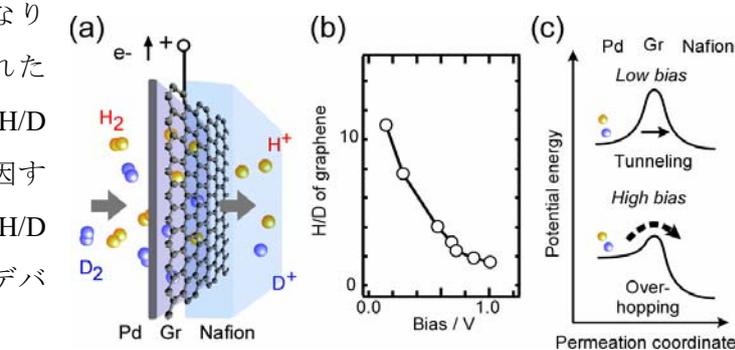


Fig.1 (a) Schematic illustration of PdGr anode and (b) H/D of graphene. (c) Schematic diagram of the quantum-to-classical transition mechanism for hydrogen ion transfer through the graphene.