

研究タイトル：水素吸蔵性固体内での水素の量子状態にかんする理論的研究



氏名：	土屋賢一 / TSUCHIYA Ken-ichi	E-mail：	tsuchiya@tokyo-ct.ac.jp (%を@に置換して下さい)
職名：	教授	学位：	博士(工学)
所属学会・協会：	JCF, ISCMNS		
キーワード：	水素吸蔵金属、水素エネルギー		
技術相談 提供可能技術：	<ul style="list-style-type: none"> ・金属への水素吸蔵能の向上に関する相談。 ・ ・ 		

研究内容：

Pd 等の水素吸蔵性金属は大量の水素や重水素を内部に取り込む。特に Pd の場合は他の金属よりもこの性質が強く、最大で、水素と Pd の原子比が 1:1 を超すことが知られている。このことは、水素エネルギーを利用する上で特に興味深いことである。しかし、Pd は Pt や Au に次ぐほど高価であり、この金属を使って水素を吸蔵するのは工業的には難しい。そこで、本研究では、水素吸蔵効果の高い新規材料を探し、そこに水素を吸蔵することを考える。そのために、そもそも水素が金属内でどのような状態にあるのかを理論的に考察する。

この研究を行う上で重要なのは、水素が最も小さな原子であり、量子力学的性質も顕著なことである。このため、水素の存在状態をシュレディンガー方程式を解いて調べる必要がある。しかし、多くの水素が金属中の狭い隙間に存在するからには、多体効果も考慮しなければならない。これらが解決すれば、何故水素が Pd 中に多量に急増されるかも解明され、さらに Pd 以外の安価な金属や合金でも同様のことが起こることを予測できると思われる。

本研究においては、金属中の水素や重水素の存在状態を数値計算で求めることを試みる。そのためには、電荷分布とポテンシャルがリンクしており、これらに自己矛盾が起きないように逐次代入法を用いなければならない、また、全ての水素間の相互作用も盛り込まなければならない。これらは、大変厄介なことであり、効率よく計算ができるよう、新しい方法を考案中である。

提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	