

変幻自在な水素を「使いこなす」ためのサイエンス

Hydrogenomics

News Letter



CONTENTS

- P1 A03-2 計画研究紹介
- P3 A05-2 計画研究紹介
- P5 第3回ハイドロジェノミクス研究会 / 物理学会秋季大会 共催シンポジウム
第6回若手育成スクール / ハイドロジェノミクス紹介動画
- P6 若手サイエンティストのご紹介
- P7 研究ハイライトのご紹介 / 直近の論文投稿 / 今後の予定



計画研究 A03-2 「高速・局所移動水素と電子との カップリングによる 新発想デバイスの設計」

分子科学研究所 准教授 小林 玄器

～ヒドリド伝導材料・ヒドリド
超イオン伝導材料を利用した
新発想デバイスの設計～

1. ヒドリドイオン導電体とヒドリド 電気化学デバイスについて詳しく教 えて下さい。

水素は様々な物質中に存在し、結合状態に応じて、プロトン(H^+)、水素原子(H^0)、水素化物イオン(ヒドリド; H^-)、共有結合水素(H_{cov})などの多様な状態をとることができます。固体内におけるイオン導電においては、 H^+ を導電種とする物質が、ポリマー、酸化物、固体酸など、材料系を問わず数多く存在し、燃料電池やセンサーへの応用を指向した H^+ 導電体の研究開発が長年に渡っておこなわれてきました。一方、我々は、 H^- を導電種となるイオン導電体の物質開発をおこなっています。

H^+ と H^- は、同じ水素ではありますが、電荷担体としての特徴が大きく異なります。電荷の正負が逆であるだけでなく、 H^+ が電子のない点電荷のように振る舞うのに対し、 H^- はHeと同じ電子配置をとり、第二周期の O^{2-} や F^- と同程度のイオン半径を有します。このイオン半径の違いは、導電機構などに大きく影響します。電荷密度の高い H^+ は H_3O^+ や OH^- として物質中に存在し、

水や酸化物イオンを介して導電しますが、イオン半径を持つ H^- は単独で欠陥や格子間サイトを介して導電する、 O^{2-} や F^- などの他のアニオンと似た拡散機構をとると考えられます。この特徴により、 H^- は無加湿下でも高速イオン導電できるため、水の揮発により H^- 導電が難しいとされる中温域(200~400°C)で作動する固体電解質への応用が期待できます。一方で、 H^+ を含有できる物質が無数に存在するのに対し、 H^- を含有する物質は僅かしかなく、また、大半の物質が大気下で不安定であるため、物質探索とデバイス開発が困難です。

H^- 導電体の研究が確立されてきたのは比較的新しく、 H^- 導電現象が実験的に証明されたのはIrvineらによって BaH_2 の H^- 輸率が確認された2015年のことです。我々は、水素化物ではなく、酸化物の格子内に H^- を共存させた酸水素化物を対象にして H^- 導電体の物質探索をおこなっています。その主な理由は、物質設計の自由度が高いからです。一般に、酸化物は水素化物と比較して元素選択性が高く結晶構造も多彩で、欠陥の許容量も大きい。つまり酸水素化物では、酸化物と同様に元素置換や欠陥量の制御が容易なので、イオン導電体にとって導電率向上に必要な不可欠なキャリア濃度制御や拡散パスの設計が可能になり

ます。実際に、2016年に我々が報告した K_2NiF_4 型構造のLi系酸水素化物では、 La_2LiHO_3 の La^{3+} を Sr^{2+} に置換することで電荷補償により格子内の H^- 量を増やすことができ(図1、一般式: $La_{2-y}Sr_yLiH_{1+y}O_{3-y}$)、さらに、 O の量を固定してLa/Sr比を変えることでアニオン欠損を導入できます(一般式 $La_{2-x-y}Sr_{x+y}LiH_{1-x+y}O_{3-y}$ ($0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 2$), 以下LSLHO)。イオン導電率は、 H^- 量の増加(y の増加)とアニオン欠損の導入(x の増加)によって向上します。一方で、大気への安定性については、酸素量の多い組成の方が高くなり、安定性と導電率はトレードオフの関係にあります。LSLHOのもう一つの特徴には固体電解質としての機能があります。LSLHOを固体電解質に用いた全固体セルTi|LSLHO|TiH₂は定電流放電によってTiH₂からの水素脱離とTiへの水素吸蔵を示しました。現段階では H^- 導電性固体電解質としての機能を実証したに過ぎませんが、電池反応が観測できたことは、ハイドロジェノミクスで H^- 導電型デバイスの開発を目指す根拠となっています。本領域の中では、格子内に H^- と O^{2-} が共存させることが固体電解質としての電気化学的安定性(電位窓や電極界面との安定性)に与える影響なども明らかにしていきたいと考えています。また、最近の成果では、250~350°Cで H^- 超イオ

ン導電性 ($\sigma \geq 10^{-2} \text{ S} \cdot \text{cm}^{-1}$, $E_a < 30 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$)を示す物質の開発にも成功しているので、中温作動型の電気化学デバイスへの応用を検討していきたいです。

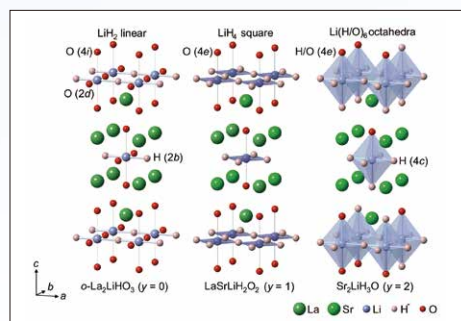


図1. (左) $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1-x+y}\text{O}_{3-y}$ ($x=0, 0 \leq y \leq 2$)の結晶構造

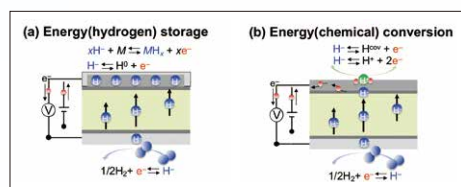


図2. H⁻導電型の電気化学デバイスの概念図

H⁻導電体を固体電解質に用いた電気化学デバイスの開発については、大きく分けて2タイプのデバイスを検討していますが、いずれも試行錯誤の段階で、詳しいことをご説明できないのが残念です。ここでは、研究の方向性についてご紹介いたします。

一つ目は水素貯蔵デバイスです(図2(a))。このデバイスでは、現在試作デバイスを作製し、電気化学反応によって金属への可逆的な水素吸蔵放出に成功しています。今はまだ可逆性などに大きな問題がありますが、電極/電解質界面設計や低温作動化を実現して性能向上を目指すと共に、作動電位の起源など、基礎的な知見も深めたいと考えています。将来的には、高電位が得られる化合物系電極へのH⁻インターカレーション反応を実現し、水素を電力として貯蔵するシステムの構築を目指しています。二つ目は、ヒドリド導電現象と電気化学触媒反応を使った物質変換デバイスです(図2(b))。近年、北野先生や島先生を始め、複数のグループからH⁻が関連した優れた触媒反応が報告されています。我々は、

触媒反応場に電気化学的にH⁻供給するデバイスの開発を目指しています。

2.異分野と多くの連携研究を進められていますが、手応えはいかがですか。

材料研究に関しては、私が研究対象としている物質が、リチウムや水素を含む無機固体材料であるため、その構造や結合状態の評価に中性子や放射光X線を用いた実験は必要不可欠です。必然的に連携研究が増えてきた経緯があり、私としては異分野との連携という認識はもっていません。中性子回折については、KEKの神山先生に学生時代から御世話になっておりますし、本領域での連携研究を通して大友先生と池田先生との共同研究も始まりました。チームラインごとに得意とする温度や測定(高分解能測定や全散乱によるPDF解析など)が異なるので、双方の特徴を活かしながらH⁻導電機構や超イオン導電体への相転移挙動などをより深く調べていきたいと思っています。また、最近では、H⁻導電機構をより詳細に調べるために、固体NMR、中性子準弾性散乱などの実験手法と、理論計算などを新たに取り入れています。本領域では、杉野先生と春山先生にご尽力いただいております。超イオン導電状態、つまりイオンが“集団運動”した状態に新たな洞察を加えられることを期待しています。

デバイス開発については、一杉先生と連携しております。我々が開発した電解質に緩衝層や電極を成膜していただく計画を立てており、ハイドロジェノミクスの期間内にデバイス開発をどこまで進められるかは私自身とても楽しみです。

リアクターデバイスの電極上で生じる触媒反応については、まだ具体的に研究は進んでおりませんが、山内先生とご相談しながら研究を進める計画を立てております。まずは電極の候補となる材料を創出したいと考えています。

3.研究室での研究の様子を教えてください。

今年度の研究室メンバーは、私と助教、秘書、技術支援員2名、博士課程学生4名の計9名です。研究室発足当時は以前おこなっていたリチウム二次電池関連の研究も実施していましたが、今はH⁻導電体の研究に注力していることもあり、基本的には所属学生全員がH⁻導電体関連の研究に携わっています。学生・スタッフ共に情報を共有しながら日々研究に取り組んでいます。グループが小さいので、密に意見交換しながら研究を進められるのは当グループの良いところだと思っています。現在の研究テーマは、主に、新物質探索、イオン導電機構解析、デバイス開発の3つに分類されていますが、学生達には「物質を合成し、結晶構造と物性を評価してその相関を調べ、電池などの電気化学デバイスに応用する」という一連の研究の流れに対応できるように指導をしています。可能な限り自分たちで実験を立ち上げて新しいことにチャレンジする姿勢がオリジナリティの根源になると考えています(少なくとも私はそう信じています...)。また、先に述べた通り、放射光や中性子実験施設を頻繁に利用するので、出張実験は多い方だと思います。研究室発足から7年が経ち、実験設備も整ってまいりました。ハイドロジェノミクス内の共同研究に加え、共同利用研究機関として協力研究も実施しておりますので、高压合成や中低温・雰囲気制御下での電気化学測定等に興味がある方は是非お声かけ下さい。



図3. 分子研正門前にて:
小林研究室のメンバー(2020年3月撮影)



計画研究 A05-2 「水素の先端計算による 水素機能の高精度予測」

日本原子力研究開発機構 研究主幹 志賀 基之

～計算物性物理・経路積分 分子動力学計算～

志賀先生がPIMDを開発された経緯を
教えてくださいませんか。

PIMDは並列分子シミュレーションのオープンソース・ソフトウェアで、2016年から日本原子力研究開発機構(原子力機構)のホームページで公開しているものです。PIMDの開発は、私が日本原子力研究所(原研、原子力機構の旧名)に就職したころに始め、20年ほど続いています。PIMDの名は、経路積分分子動力学(Path Integral Molecular Dynamics)の略語で、水素をはじめとする軽元素の量子統計的振る舞いを扱う計算手法に由来します。ところが、拡張をどんどん重ねるうちに(MPI Fortran90で30万行規模の)汎用コードになりましたので、もともとの名の意味は薄れつつあります。

PIMDは計算手法と原子間ポテンシャルの組み合わせから構成されています。計算手法については、経路積分分子動力学法のほか、リングポリマー・セントロイド分子動力学法(半古典動力学)、メタダイナミクス法・平均力動力学法(自由エネルギー計算)、サーフェス・ホッピング法(光反応などの非断熱動力学)、マルチスケール法

(複雑分子系の計算)、レプリカ交換法(構造サンプリング)、ストリング法(反応経路探索)などの機能が備わりました。ポテンシャルについては、第一原理計算(量子化学計算およびバンド計算)、半経験的電子状態計算、古典力場が利用可能です。第一原理計算についてはSMASHが内蔵されているほか、CP2K、Quantum Espresso、VASPなどを外部ルーチンとして結合できます。GaussianやTurbomoleなども使えますが、今のところ並列計算には未対応です。最新バージョンでは、機械学習ポテンシャルのAENETを利用できるようになりました。利用者が国内外で増えつつあるようで、嬉しいことです。

このPIMDを用いて第一原理経路積分分子動力学シミュレーションを行い、白金吸着水素における量子多体効果の存在を明らかにされたのですね。

ハイドロジェノミクスでは、常行真司先生を代表とする「水素の先端計算による水素機能の高精度予測」の研究分担者として、第一原理経路積分法を用いた水素材料の計算を担当しています。第一原理計算では原子核を古典的質点として扱うのが普通ですが、この方法では、経路積分

計算と電子状態計算を同時に行い、全ての原子核も含めて「まるごと」量子論で解きます。計算による水素材料の精緻な物性予測を行う目的において、最終的手段と言っても良いかと思います。実は2000年にこの計算手法の基盤自体こそ完成していたのですが、当時の計算機環境が実行に不十分でした。例えば、水分子2個の水素結合クラスターを半年以上かけて計算している状況でした。ところが、その後、大型計算機(超並列スカラー計算機)が発展しました。そこで、2016年にその性能を引き出せるようなコードに作り変えて、構造サンプリングと電子状態計算を階層的並列化してみたら、計算が百倍くらい加速しました。それまで無理だと思っていた大規模計算があつという間に終わるので、私自身かなり驚きました。これをきっかけに、ハイドロジェノミクスがまさに始まった頃から、応用範囲が劇的に広がりました。バルク水溶液の水素結合構造(2018年)、パラジウム中の水素拡散(2018、2019年)などで第一原理経路積分シミュレーションが実現しました。こうして、凝縮相の様々な水素材料における量子物性が予測可能になってきたところです。このような時代の流れは私にとっては想定外で、とても感慨深いです。

最近、東京大学の杉野修先生のグループと共同して、白金表面への水素吸着状態を第一原理シミュレーションで調べましたので、ここで簡単に紹介いたします。水素吸着状態は、電極触媒活性を利用した燃料電池における水素発生・水素酸化反応メカニズムを理解する手がかりとして重要です。白金単結晶の(111)表面を使った基礎的実験によると、fcc(F)、hcp(H)、atop(T)サイトへの水素吸着が電極電位に応じて変化します。水素発生反応に進むアンダーポテンシャル下ではTサイト、水素酸化反応に進むオーバーポテンシャル下ではFサイトなどに吸着しているのではないかとされています。

このことは水素被覆率によってサイトが異なっていることを示唆しますが、それがなぜなのかは明らかではありませんでした。そこで、これを確かめるためにシミュレーションを行うことにしました。

結果を図1に示します。この図は白金(111)面上の水素密度分布を表したもので、左列には原子核を古典論で扱った場合(通常的第一原理分子動力学法による結果)、右列には量子論で扱った場合(第一原理経路積分分子動力学法による結果)を示し、それらを比較しています。上段と中段には水素被覆率1および2/3における真空に接した白金表面の場合、下段には水素被覆率2/3における白金・水界面の場合の結果を示しています。いずれの場合も古典論と量子論では結果が著しく異なることがわかります。全体として、古典論ではTサイトが最安定となって局在化した結果となる傾向があります。これに対して、量子論では水素が複数のサイト間に大きく非局在化され、全体としてFサイトやHサイトの安定性を増すように補正されます。これは水素の量子ゆらぎ(零点振動やトンネル効果)による影響を示しています。また、被覆率の違いは水素間反発力の

有無による多体効果の違いとして現れます。多体効果が弱まった被覆率が2/3の状態では、水素の量子ゆらぎと相まって、白金表面上を広く運動することができるようになります。このように、水素吸着状態を決定づける因子として、水素の量子ゆらぎと多体効果が欠かせない存在になっていることが明らかになりました。

研究環境について、お話しできますか。

私の所属する原子力機構のシステム計算科学センターは、東大柏の葉キャンパス駅前サテライト(つくばエクスプレス 柏の葉キャンパス駅のバスロータリーに面したビル)の4階にあります。ハイドロジェノミクスに携わる研究スタッフは、私と、博士研究員でデンマーク出身のBo Thomsenさんの二人です。また、東京大学大学院新領域創成科学研究科から修士課程の学生2人(近藤さん、赤沢君)を研究開発アシスタントとして受け入れています。原子力機構のICE-Xや東京大学のOakbridge-CXなどの大型計算機を用いて第一原理シミュレーションを実行し、研究室のワークステーションで結果を解析しています。普段とは違い、今はテレワークが主で、ネット会議などで連絡を取り合っています。こんな時代の中ですが、みんな明るく元気に研究や学習に取り組んでいる様子なので、それが私にとって救いです。

志賀先生ご自身のご経歴を聞かせてください。

私は早稲田大学と東京工業大学で学生時代を過ごしました。早稲田大学の伊藤礼吉研究室では量子化学、東京工業大学の岡崎進研究室では分子動力学を学びました。1999年に東京工業大学で博士号取得後、同じ年に原研の研究員と

なりました。以後は、二つの学際的分野に当たる第一原理シミュレーションの開発と応用に取り組んでいます。研究対象は様々ですが、水溶液系、金属材料系、有機物質系などが主です。著した論文はJ.Chem.Phys.誌がもっとも多く、その他APS系列とACS系列のジャーナルが半々程度です。あなたはphysicistかchemistか、と聞かれることがあります。ドイツ・ルール大学のDominik Marx研究室に留学していたことがありますが、着任にあたってこの質問を投げかけられました。戸惑っていたところ、それは研究室のみんなも困る問題だと言って笑われました。というわけで、計算物理学が理論化学あたりが専門ということにいたします。

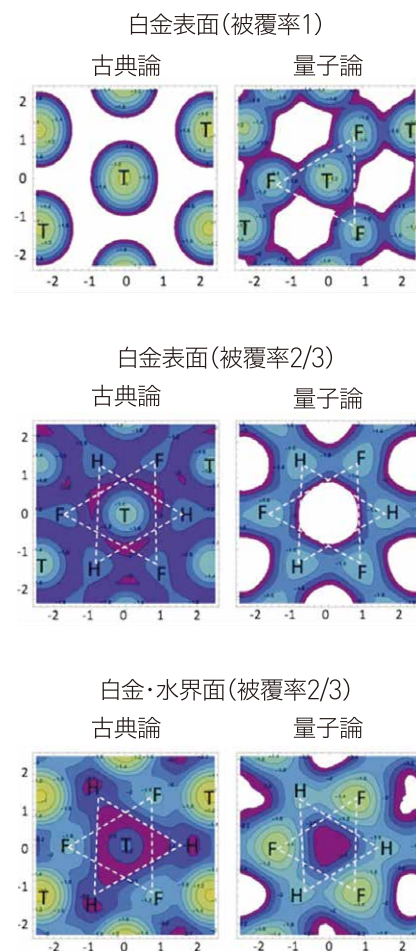
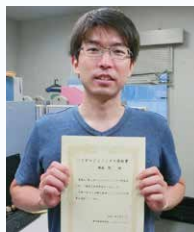


図1: 第一原理シミュレーションで得られた白金(111)面上の水素密度分布。黄、緑、紫、白の順に密度の濃い状態。

第3回ハイドロジェノミクス研究会

2020年8月20日(木)–21日(金)オンラインにて「第3回ハイドロジェノミクス研究会」を開催しました。本領域外からも、広く水素に関心のある研究者を含め、67名が参加しました。招待講演を含めた19件の講演のうち、優秀な講演を行った若手研究者に授与する本年度の「ハイドロジェノミクス奨励賞」は横森 創さん(東京大学物性研究所 森研究室 D3)と佐藤 龍平さん(東京大学理学系研究科 常行研究室 特任研究員)が受賞しました。大変素晴らしいお話をいただきました、おめでとうございます!



横森 創さん

講演題目

新規Znジチオレン錯体結晶における水素結合を介した電子移動がもたらすバイポクロミズム

コメント

この度はこのような栄誉ある賞をいただき、ありがとうございます。本研究はもともと本筋のテーマとは関係なく、ふとした疑問・発見から展開した研究でした。この受賞を励みにこれからも「気づき」を大切に研究に努めたいと思います。



佐藤 龍平さん

講演題目

Li(CB₉H₁₀)系のLi輸送機構に関する分子動力学計算

コメント

この度は、名誉ある賞を頂きありがとうございます。今後もLiCB₉H₁₀の様な実用的な材料開発の理解を深めるため計算科学の観点から貢献できるよう努力していく所存です。よろしくお祈りします。

日本物理学会 2020年秋季大会 共催シンポジウム

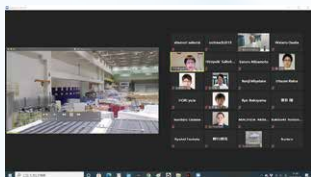
2020年9月10日(木)オンラインにて「日本物理学会 2020年秋季大会 共催シンポジウム」に参画しました。物性科学だけでなく、材料科学、化学、生物に至る幅広い分野にわたる新規機能の開拓を目指した最先端の水素に関わる研究について、各計画研究から7名の先生方にご講演いただきました。約120名の方が参加し、盛況のうちに終了しました。

第6回若手育成スクール

2020年9月30日(水)濱田先生(A05-2)に企画していただき、オンラインにて「第6回若手育成スクール」を開催しました。初めて若手育成スクールに参加する学生を多数迎えて47名が参加しました。各計画研究を代表した5名の招待講演後、古府先生(A01)、宮本先生(A02)、三宅先生(A03-1)、長田さん(A04)による、本領域初企画、バーチャルラボツアーを実施しました。視聴者に分かりやすく伝わるように工夫を凝らした各ラボツアーは大変興味深く勉強になりました。来年度の若手育成スクールがオンサイトで開催できることを期待して、来年度も皆様の積極的なご参加をお待ちしております!



バーチャルラボツアーの様子



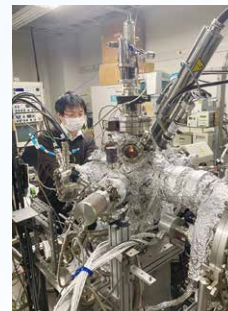
古府先生



宮本先生



三宅先生



長田さん

ハイドロジェノミクス紹介動画

ハイドロジェノミクス紹介動画を作成しました。各種研究会、シンポジウム、会議等にて放映を希望の際は、ハイドロジェノミクス事務局までお申し付けください。





東北大学金属材料研究所 佐藤 豊人

東北大学 金属材料研究所 水素機能材料工学研究部門(折茂研究室)の佐藤豊人と申します。私は、博士課程在学中(スウェーデン スtockホルム大学)から物質中で様々な結合状態で存在する水素に着目した水素化物の合成、結晶構造の解明、原子配列と水素の振動の観点での水素化物形成・分解反応の機構解明を目的とした研究活動に従事しております。特に、新規水素化物の未知結晶構造をX線・中性子回折で観測・解明することを一番の強みにしております。また、中性子非弾性散乱による水素化物中の水素の振動の観測・解明にも取り組んでおります。この両者を用いた研究から、水素が共有結合状態で存在する錯体水素化物の形成反応過程では、中間的な水素の結合状態が存在し、分解反応過程では、分解温度よりも低温領域で水素周りの化学結合が弱体化して水素と元素の共有結合が切断される反応機構を解明しました。最近では、水素が金属間化合物の格子隙間に電荷中性の状態で取込まれ、水素化物を形成し(吸蔵)、ガスとして放出される反応を利用した水素貯蔵合金の物質探索、及び水素吸蔵・放出反応機構解明に関する研究にも従事しております。

本新学術研究領域の目的である「変幻自在な水素の性質を人類が“使いこなす”ための指導原理となる新たな水素科学の構築」に近い研究内容になっておりますので、メンバーの先生方と協力して、本研究の推進に貢献したいと考えております。今後ともご指導・ご鞭撻のほど、何卒宜しくお願い申し上げます。



量子科学技術研究開発機構 押目 典宏

初めまして。量子科学技術研究開発機構(量研)博士研究員の押目と申します。私は水素吸蔵による固体の構造不均一を直接観察すべく、放射光X線を用いたBraggコヒーレント回折イメージング(Bragg-CDI)の技術開発に取り組んでいます。Bragg-CDIは100nm級の結晶性粒子の外形や内部の構造(歪、ドメイン等)を一粒子の表から裏まで非破壊で可視化する技術で、量研が国内で初めて導入しました。1 μ mのオーダーで波面の揃ったX線をナノ結晶に照射し、試料を僅かに回転させて3次元的に取得したコヒーレントX線回折パターンをフーリエ反復の位相回復計算で処理することで、対象とする粒子の外形、内部の位相情報(=歪)等を3次元データで得ることができます。まだ開発途上の技術であり、私自身この研究を始めて半年ですが、A05-1町田上席研究員をはじめ諸先輩方からご指導いただきながら研究を進めております。

今目標としているのは10nm級結晶の非破壊計測です。パラジウムなどのナノ結晶へどのように水素が侵入しているか、Bragg-CDI法で得られた一粒子の内部構造からの議論を試みます。

本新学術領域研究の博士研究員として採用していただいてから半年、計測手法も水素材料も初めてづくしで、毎日新鮮な気持ちで研究に励んでいます。皆様には今後ともご指導くださいますよう、よろしくお願い申し上げます。



筑波大学計算科学研究センター 堀 優太

筑波大学計算科学研究センターの堀優太と申します。専門は、理論化学・量子化学です。主に量子力学を軸に分子の性質や化学反応をコンピュータによる数値計算から明らかにすることを目的として研究を行っています。これまでに、プロトン移動反応やプロトン伝導、金属錯体によるメタン水酸化反応、ヒドロゲナーゼの酵素反応に注目し、その構造や反応中間体・遷移状態の探索を通して、反応機構の解明および触媒や材料設計のための理論計算を行ってきました。

ヒドロゲナーゼは、水素をプロトンと電子に可逆的に変換することができる酵素です。その酵素反応に関与する水素は、プロトン、ヒドリド、水素分子と変幻自在に形を変えるため、反応機構の理解は、ハイドロジェノミクスの推進に大きな役割を持つと考えています。理論計算を用いて、ヒドロゲナーゼ全体の構造から、反応が起こる活性部位の正確な構造を理解し、分子レベルで起こる反応を丁寧に解析することによって、反応機構の詳細を明らかにすることを目標として研究を行っています。

水素の理解には、実験と理論の連携が必要不可欠であると考えております。実験による結果や知見を取り入れ、理論計算に積極的に活用することにより、理論計算の立場からハイドロジェノミクスの学理構築に貢献していきたいと思っております。どうぞよろしくお願い申し上げます。

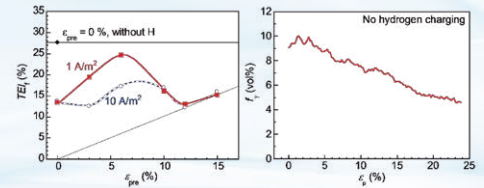


東北大学金属材料研究所 助教 北條 智彦

TRIP型ベイニティックフェライト鋼板に3-10%の塑性ひずみを付与することによって耐水素脆化特性が改善されることを明らかにしました。本研究成果によって自動車用高強度鋼板の水素脆化メカニズムの解明が期待されます。

自動車用高強度鋼板は軽量化による燃費向上と衝突安全性向上の観点から更なる高強度化が求められています。引張強さが1000MPaを超える高強度鋼板は鋼中に侵入した水素によって延性が低下する水素脆化が問題となっています。本研究では、次世代の自動車用高強度鋼板として期待されるTRIP型ベイニティックフェライト(TBF)鋼の水素脆化特性に及ぼす予ひずみ付与の影響を調査し、3-10%の予ひずみによって水素吸蔵後の延性の低下が抑制されることを明らかにしました。また、A01の齋藤先生のグループとの共同研究により放射光X線回折を用いてTBF鋼における引張変形時の残留オーステナイトのマルテンサイト変態挙動を詳細に解析し、予ひずみ付与しない場合には引張変形早期にマルテンサイト変態した残留オーステナイト、または母相/残留オーステナイト界面で水素脆化き裂が発生して延性が低下しますが、3-10%の予ひずみを付与することにより、水素脆化き裂の起点となる残留オーステナイトが減少し、水素脆化が抑制されることを提案しました。

今後もA01の齋藤先生のグループとの共同研究を継続して、TBF鋼の残留オーステナイトの変態挙動、水素脆化挙動を明らかにするとともに、ハイドロジェノミクスの他グループとの連携を強化することにより、水素脆化を抑制可能な材料表面制御、材料中の水素存在状態制御の提案をしたいと考えています。



直近の論文投稿

"Rechargeable Proton Exchange Membrane Fuel Cell Containing an Intrinsic Hydrogen Storage Polymer"

Junpei Miyake, Yasunari Ogawa, Toshiki Tanaka, Jinju Ahn, Kouki Oka, Kenichi Oyaizu, and Kenji Miyatake
Comm. Chem., 3, 138, 2020, DOI: 10.1038/s42004-020-00384

"Polarity reversal of the charge carrier in tetragonal TiH_x (x = 1.6-2.0) at low temperatures"

Ryota Shimizu, Yuki Sasahara, Ikutaro Hamada, Hiroyuki Oguchi, Shohei Ogura, Tetsuroh Shirasawa, Miho Kitamura, Koji Horiba, Hiroshi Kumigashira, Shin-ichi Orimo, Katsuyuki Fukutani, and Taro Hitosugi
Phys. Rev. Research, 2, 033467, 2020, DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.033467

"Application of an iridium complex for detecting hydrogen permeation through pure iron"

Saya Ajito, Tomohiko Hojo, Motomichi Koyama, Ken-ichi Fujita, Eiji Akiyama
International Journal of Hydrogen Energy, 45, 25580-25586, 2020, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2020.06.113

今後の予定

- 2020年11月27日(金)-28日(土) 「第6回全体会議」をオンラインにて開催いたします。
- 2020年12月4日(金)-5日(土) 「第14回物性科学領域横断研究会」をオンラインにて開催いたします。

[東北大学 折茂研究室 テクニカル・マネジメントサポート]

TEL : 022-215-2093

mail : secretary@hydrogenomics.jp

[東京工業大学 一杉研究室 マネジメント・アウトリーチ]

TEL : 03-5734-2636

mail : outreach@hydrogenomics.jp

