

目 次

第1章 水素機能材料に求められる特性	1
1.1 水素用構造材料 —水素に長期間耐える—	1
1.1.1 はじめに	1
1.1.2 高压水素用材料の種類	1
1.1.3 水素用構造材料に求められる特性	2
1.1.4 おわりに	3
1.2 水素透過材料 —水素が自由に通り抜ける—	3
1.2.1 はじめに	3
1.2.2 水素透過材料の種類と透過反応機構	4
1.2.3 金属系の水素透過材料に求められる特性	5
1.2.4 金属系の水素透過材料の用途・応用	6
1.2.5 おわりに	6
1.3 水素貯蔵材料 —水素がたくさん貯まる—	7
1.3.1 はじめに	7
1.3.2 水素貯蔵材料の種類と貯蔵機構	8
1.3.3 水素貯蔵材料に求められる特性	9
1.3.4 おわりに	10
1.4 燃料電池材料 —水素でクリーンに発電する—	10
1.4.1 はじめに	10
1.4.2 固体高分子形燃料電池の構造と発電機構	11
1.4.3 固体高分子形燃料電池材料に求められる特性	12
1.4.4 おわりに	12
文 献	12

第2章	水素機能材料の特性を引き出す解析	15
2.1	水素用構造材料 — 高压水素と液体水素にどの程度耐えうるか—	15
2.1.1	はじめに	15
2.1.2	高压水素用材料	15
2.1.3	液体水素用材料	21
2.1.4	おわりに	24
2.2	水素透過材料 — 水素はどのように通り抜けるか—	24
2.2.1	はじめに	24
2.2.2	測定方法	24
2.2.3	解析方法	27
2.2.4	おわりに	35
2.3	水素貯蔵材料 — 水素はどのように貯まるか—	35
2.3.1	はじめに	35
2.3.2	熱力学的特性	36
2.3.3	水素吸蔵・放出速度とサイクル特性	43
2.3.4	おわりに	45
2.4	燃料電池材料 — 水素は発電中にどうなっているか—	46
2.4.1	はじめに	46
2.4.2	触媒表面	46
2.4.3	電解質膜	49
2.4.4	燃料電池ガス流路	53
2.4.5	おわりに	56
文 献		57
第3章	多面的な水素の解析	
	— 水素機能材料のさらなる高度化を目指して—	61
3.1	昇温脱離による解析 — 水素の存在状態を調べる—	61
3.1.1	はじめに	61
3.1.2	原理と装置	61
3.1.3	水素の存在状態	69
3.1.4	欠陥検出	74

3.1.5	水素の存在位置解析	76
3.1.6	おわりに	76
3.2	電子顕微鏡による解析 —水素を直接見る—	78
3.2.1	はじめに	78
3.2.2	原理と装置	78
3.2.3	結晶中水素原子の観察	85
3.2.4	おわりに	89
3.3	陽電子消滅による解析 —ナノ欠陥と水素との関係を調べる—	90
3.3.1	はじめに	90
3.3.2	原理と装置	91
3.3.3	結晶格子欠陥	96
3.3.4	水素吸蔵に伴う結晶格子欠陥形成	101
3.3.5	水素化に伴う原子空孔形成機構	105
3.3.6	おわりに	107
3.4	イオンビーム・電子ビームによる解析 —表面での水素の出入りを調べる—	108
3.4.1	はじめに	108
3.4.2	原理	109
3.4.3	装置と分解能・感度	114
3.4.4	核反応による実験例—Pd 表面での水素吸放出	116
3.4.5	おわりに	120
3.5	X線・中性子線による解析 —水素の配置と結合性を調べる—	121
3.5.1	はじめに	121
3.5.2	原理と装置	122
3.5.3	散乱と回折	123
3.5.4	全散乱法	125
3.5.5	X線吸収微細構造測定による物質の局所構造解析	128
3.5.6	おわりに	133
3.6	計算科学による解析 —水素の特性を理解・予測する—	134
3.6.1	はじめに	134
3.6.2	電子状態計算と分子動力学の原理	135

目 次

3.6.3	結晶構造	138
3.6.4	格子振動の予測と赤外吸収・Raman 散乱	140
3.6.5	零点エネルギーを考慮した水素化反応の生成熱	142
3.6.6	拡散, イオン伝導	143
3.6.7	吸着, 触媒, 化学反応	144
3.6.8	水素の量子化	145
3.6.9	おわりに	146
文	献	148
索	引	155