

令和 6 年 6 月 3 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01603

研究課題名（和文）電子と原子核の量子論に基づく水素エネルギー材料の第一原理設計

研究課題名（英文）First-principles design of hydrogen energy materials from quantum modeling of electrons and nuclei

研究代表者

君塚 肇（Kimizuka, Hajime）

名古屋大学・工学研究科・教授

研究者番号：60467511

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,500,000円

研究成果の概要（和文）：水素をエネルギー媒体として利用するための材料技術を確立するには、材料中における水素原子の振る舞いを理解し、材料設計に反映させることが重要である。本研究では、申請者が整備してきた量子論的モデリング手法を発展させることで、計算負荷を大幅に抑えながら、量子効果に由来する水素の特異な挙動を予測的に定量評価できる解析法を構築した。これにより、水素エネルギー材料中の水素の反応・移動過程の自由エネルギー地形の系統的解析を可能にし、水素の存在状態ならびに入出反応・移動過程のキネティクスを明らかにするとともに、水素透過・吸蔵性能の理論予測モデルを構築するための指針を獲得した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

水素を次世代のエネルギー移送・発生の媒体として利用するための取組みが注目されているなか、直接的に検出・測定することが容易ではない材料中の水素の挙動を、理論的に予測・理解するためのアプローチを確立することが重要である。本研究により構築した手法は材料中の水素特性に対して高い予測能力を持ち、水素利用技術の高度化のための材料研究の促進に資するものである。また、本研究による成果は、既存の水素エネルギー材料の性能向上のみならず、新しい候補探索に対して有用な指針を与える。

研究成果の概要（英文）：In order to establish materials technology to utilize hydrogen as an energy medium, it is important to understand the behavior of hydrogen atoms in materials and to reflect it in materials design. In this study, we developed a numerical framework to predict the characteristic behavior of hydrogen atoms due to nuclear quantum effects while reducing the computational cost. This method enables us to systematically analyze the free-energy profiles for the diffusion and reaction processes of hydrogen in solids. As a result, the kinetic and thermodynamic properties of hydrogen and its isotopes in a typical model of hydrogen permeable/barrier materials were determined.

研究分野：計算材料科学

キーワード：水素透過・吸蔵 量子効果 自由エネルギー地形 経路積分解析 レイイベント解析 機械学習ポテンシャル

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C-19、F-19-1、Z-19（共通）

1. 研究開始当初の背景

近年、環境・エネルギー問題への意識の高まりから水素を次世代のエネルギー移送・発生媒体として利用するための取組みが注目されている。これを受けて、材料工学分野では、国内外で水素貯蔵・吸蔵および燃料電池等の水素利用技術の確立と普及のための研究開発が盛んに行われている。これらの水素利用技術においては、種々の水素エネルギー材料（即ち、水素吸蔵・貯蔵材、透過膜材、電解質・電極材等）内における水素原子の挙動を高度に制御することが求められるが、水素の反応・移動現象はそれらの性能を決める重要な因子となるため、材料内の水素の動的過程（例えば吸着、拡散、偏析、吸蔵等）の反応機構を詳細に理解することは水素に対する効率的な制御技術を確立する上で不可欠である。

その一方、材料中の水素の挙動を直接的に検出・測定することは現在でも容易ではなく、その詳細については明らかにされていない部分が多い。次世代を見据えた水素制御技術に関連する材料開発を推進するに当たって、水素の材料内における振る舞いを原子・電子レベルで予測・理解するためのアプローチを確立し、材料性能の理想値を実験とは独立に評価する手段を獲得することが必須であると考えられる。水素の挙動においては原子核の軽量性に起因する量子ゆらぎ（特に、離散的な振動エネルギー準位、トンネル効果等）が室温以上でも無視できない影響を及ぼすため、種々の水素エネルギー材料における水素の反応キネティクスを適切に評価するためには当該効果を陽に取り扱うことが欠かせない。これまで、原子核の量子効果に注目した原子・分子挙動に対する方法論は主に分子科学や表面物理の分野で発展してきたが、水素エネルギー材料系に対して適用が試みられた例は現状では少ない。これは、当該材料は一般に多電子、多原子核で構成されるため、電子論や量子統計力学に基づく量子論解析を直接的に実行することが困難であったことによる。

2. 研究の目的

本研究では、材料中の水素制御技術の高度化のための研究開発に貢献するため、原子核の量子効果に由来する水素の特異な挙動を、短時間で予測的に定量評価するための量子論的モデリング法を構築する。これにより、合金系の水素エネルギー材料の典型モデルにおける水素の吸着、溶解、拡散、水素化合物形成等の反応過程に関する詳細を獲得し、水素特有の量子的振る舞いが当該材料に与える影響を明確にする。さらには、得られた物理データを基礎とした水素透過・吸蔵特性の予測モデルを構築することで、当該性能向上のための設計指針を得る。

3. 研究の方法

水素エネルギー材料は一般に多電子、多原子核で構成されるため、電子論や量子統計力学に基づく量子論解析をそのまま実行することは容易ではない。申請者らが構築してきた現行の解析手法（第一原理経路積分法）は経路積分計算と電子状態計算を直接連結しており、原子核と電子の双方の量子効果を高精度に採り入れることができるものの、膨大な計算量を必要とする。種々の材料に対する系統的解析やスクリーニングを展開するためには、(a)対象材料におけるポテンシャル場を短時間で精度よく評価できること、(b)当該材料内の量子効果を考慮した水素の振る舞いを適切に記述できること、(c)材料内水素の反応素過程を原子レベルの空間・時間スケールで抽出できること、を同時に満足した数値モデリングの枠組みを構築する必要がある。

本研究は、(1)水素エネルギー材料に対する高精度・高効率な量子論的モデリング手法の構築、(2)水素エネルギー材料中の水素の反応・移動過程のキネティクスの解明、(3)第一原理データに立脚した水素透過・吸蔵性能の予測モデルの構築、の3つのフェーズで実施する。

(1) 水素エネルギー材料に対する高精度・高効率な量子論的モデリング手法の構築

上述の(a)、(b)に関しては、「機械学習を活用したレア・イベント解析手法の構築」および「量子論的モデリング手法の高効率化」を実現することで、量子効果に由来する水素の特異な挙動を適切かつ効率よく記述する。(c)に関しては、原子運動の時間スケールでは極めて稀にしか検出できないが物性を支配する重要な事象を重点的に抽出するための統計力学的手法（すなわち、レア・イベント解析手法）を活用するとともに、当該手法の高度化に取り組む。これにより、材料中の多様な水素の反応・移動過程に関する自由エネルギー地形を高精度かつ高効率に評価するための「第一原理レア・イベント解析」を実現する。これにより、計算負荷の低減を図りつつ、材料中の多様な水素の反応・移動過程に関する自由エネルギー地形を有限温度下で評価する。

(2) 水素エネルギー材料中の水素の反応・移動過程のキネティクスの解明

構築した手法を活用して、水素エネルギー材料における主要なモデル合金系の材料表面における水素分子の解離・吸着過程および材料内部への侵入・拡散過程における自由エネルギー地形を第一原理的に評価し、水素透過・吸蔵性能を律速する因子の詳細を獲得する。さらには、これらに対する合金元素と格子ひずみの影響を明らかにし、水素反応性・移動性向上の指針となる物理的シナリオを明確化する。

(3) 第一原理データに立脚した水素透過・吸蔵性能の予測モデルの構築

水素エネルギー材料における水素透過特性を予測するための数理モデルを構築する。水素透過は、水素の材料への「溶解」と材料中の「拡散」の重ね合わせで表せることから、対象材料における水素の溶解度と拡散係数を定量評価するためのモデルを統計力学と遷移状態理論に基づいて定式化する。ここで、現象を記述する際の要となるモデル内のパラメータは、(1)と(2)に基づいて第一原理的に獲得する。

気相水素圧に対する水素溶解度は、低濃度では一般にジーベルツ則（すなわち、材料中の水素濃度が熱力学平衡にある気相水素圧の平方根の差に比例）に従うものの、高濃度では水素原子間の相互作用等の影響のためにずれが顕在化する。本研究では、対象材料への水素溶解の自由エネルギーならびにその水素濃度依存性を系統的に解析することで、溶解過程において非線形的な振る舞いをもたらす水素間相互作用の影響の詳細を明らかにする。

4. 研究成果

水素利用技術の高度化のための研究開発に貢献するため、原子核の量子効果に由来する水素の特異な挙動を予測的かつ定量的に評価するための量子論的モデリング法を構築した。これにより、合金系等の水素エネルギー材料の典型モデルにおける水素の反応・移動過程のキネティクスに関する詳細を獲得し、水素特有の量子的振る舞いが当該材料に与える影響を明確にした。これまでに、以下に挙げる課題に取り組み成果を得た。

(1) 水素エネルギー材料に対する高精度・高効率な量子論的モデリング手法の構築

- ① 水素透過・吸蔵材料の典型系であるパラジウムを対象に、電子状態計算に基づく原子配置と系のエネルギーの対応関係をデータベース化し、これを人工ニューラルネットワークに学習させた原子間ポテンシャル（機械学習ポテンシャル）を構築した。これにより、電子状態計算の精度を維持しながら従来よりも高効率にパラジウム中の水素同位体の拡散係数を定量評価することに成功した。さらに、計算コストの高い経路積分計算を代替・補完する目的で、量子熱浴法のソフトウェア実装を進め、基礎的な系を対象に検証を行った。
- ② 水素の溶解・拡散現象が重要視される種々の体心立方金属を対象に、電子状態計算データに基づいて機械学習ポテンシャルを構築した。これにより、電子状態計算の精度を維持しながら従来よりも高効率に当該金属中の水素同位体の拡散係数を定量評価することに成功した。
- ③ 水素原子核の量子効果が振動特性に与える影響を精密に解析するための新規の準古典ダイナミクスシミュレーション手法を構築し、基礎的な系を対象に検証を行った。さらに、当該手法に対して機械学習ポテンシャルを適用することで、水素透過膜材料の基材として重要なパラジウムを対象に、パラジウム中水素の非弾性散乱スペクトルを定量的に評価することに成功した。

(2) 水素エネルギー材料中の水素の反応・移動過程のキネティクスの解明

構築した手法を活用して、水素エネルギー材料における主要なモデル合金系の材料表面における水素分子の解離・吸着過程および材料内部への侵入・拡散過程における自由エネルギー地形を第一原理的に評価し、水素透過・吸蔵性能を律速する因子の詳細を獲得した。具体的には、以下の課題に取り組んだ。

- ① 実用水素透過金属膜材料の一つである B2 型 PdCu 合金を対象に、水素の拡散・捕獲過程におけるエネルギー地形を第一原理的に評価し、水素透過性能を律速する因子（特に PdCu 合金におけるアンチサイト原子、空孔等の点欠陥）の詳細を獲得した。我々は、非化学量論的な B2 型 PdCu 合金において、Cu 空孔に類似した原子配置を持つ新しいタイプの欠陥複合体が生成する“double defect”機構を提案し、Cu 空孔と double defect の双方が強力な水素捕獲サイトとして働く結果、水素拡散率が著しく低下することを見いだした。さらに、B2 型 PdCu 合金における Pd 空孔、Cu 空孔、double defect の形成に及ぼす水素の影響を明らかにした。本研究により得られた知見は、Pd 系膜の水素透過性を阻害する格子欠陥を同定する際の理論的裏付けとなる。
- ② 水素拡散特性に優れるバナジウムを対象に、バナジウム中の水素同位体の格子拡散および空孔へのトラップに関する自由エネルギー地形を評価することで、水素の溶解状態と拡散機構等の量子描像を明らかにした。加えて、これらの情報をパラメータとして適用した動的モンテカルロ解析により、水素濃度と空孔濃度に依存した水素拡散係数のアレニウスプロットを予測することに成功した。

(3) 第一原理データに立脚した水素透過・吸蔵性能の予測モデルの構築

水素透過・吸蔵材料の典型系である第 5 族金属を題材に、水素透過・吸蔵特性を記述するための数理モデルの構築と第一原理データの整備を進めた。加えて、気体状態における水素の化学ポテンシャルをモデル化することで、温度・水素圧に依存した水素溶解特性を評価した。

以上の成果を通じて、構築した手法が材料中の水素特性に対して高い予測能力を持つことを示した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 12件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Motoyuki Shiga, Bo Thomsen, Hajime Kimizuka	4. 巻 109
2. 論文標題 Inelastic neutron scattering of hydrogen in palladium studied by semiclassical dynamics	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 054303-1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.109.054303	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Akihiro Mitsuhashi, Hiroshi Yukawa, Hajime Kimizuka	4. 巻 48
2. 論文標題 Interplay of hydrogen and point defects in B2-type PdCu: A density functional theory study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Journal of Hydrogen Energy	6. 最初と最後の頁 35997-36009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijhydene.2023.06.001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hyukjoon Kwon, Motoyuki Shiga, Hajime Kimizuka, Takuji Oda	4. 巻 247
2. 論文標題 Accurate description of hydrogen diffusivity in bcc metals using machine-learning moment tensor potentials and path-integral methods	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 118739-1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2023.118739	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 志賀基之, トムセンボー, 永井佑紀	4. 巻 25
2. 論文標題 ソフトウェア紹介「PIMD」	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 アンサンブル (分子シミュレーション学会会誌)	6. 最初と最後の頁 303-310
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 三津原 晟弘, 湯川 宏, 君塚 肇	4. 巻 86
2. 論文標題 B2構造のPd-Cu合金の水素透過能, 水素溶解特性, 水素拡散性に及ぼす過剰Cuの影響	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 日本金属学会誌	6. 最初と最後の頁 140-148
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/jinstmet.J2022012	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また, その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hajime Kimizuka, Bo Thomsen, Motoyuki Shiga	4. 巻 4
2. 論文標題 Artificial neural network-based path integral simulations of hydrogen isotope diffusion in palladium	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Energy	6. 最初と最後の頁 034004-1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/2515-7655/ac7e6b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また, その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Motoyuki Shiga	4. 巻 43
2. 論文標題 Path Integral Brownian Chain Molecular Dynamics: A Simple Approximation of Quantum Vibrational Dynamics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1864-1879
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26989	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Bo Thomsen, Motoyuki Shiga	4. 巻 24
2. 論文標題 Structure of Liquid and Aqueous Water Isotopologues at Ambient Temperature from ab initio Path Integral Simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 10851-10859
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CP00499B	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 H. Kimizuka, M. Shiga	4. 巻 5
2. 論文標題 Two distinct non-Arrhenius behaviors of hydrogen diffusivities in fcc aluminum, silver, and copper determined by ab initio path integral simulations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 065406-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.5.065406	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 D. Akazawa, T. Sasaki, M. Nagasaka, M. Shiga	4. 巻 156
2. 論文標題 X-ray absorption spectra of aqueous cellobiose: Experiment and theory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 044202-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0078963	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 B. Thomsen, M. Shiga	4. 巻 115
2. 論文標題 Ab initio study of nuclear quantum effects on sub- and supercritical water	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 194107-1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0071857	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 A. Pal, S. Pal, S. Verma, M. Shiga, N. N. Nair	4. 巻 42
2. 論文標題 Mean force based temperature accelerated sliced sampling: Efficient reconstruction of high dimensional free energy landscapes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1996-2003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26727	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 K. Kobayashi, Y. Nagai, M. Itakura, M. Shiga	4. 巻 155
2. 論文標題 Self-learning hybrid Monte Carlo method for isothermal-isobaric ensemble: Application to liquid silica	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 034106-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0055341	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計20件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 君塚 肇
2. 発表標題 種々の金属中の水素の拡散・捕獲過程に関する速度論モデリング
3. 学会等名 日本機械学会計算力学部門2023年度第1回A-TS01-15研究会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 三津原 晟弘, 湯川 宏, 君塚 肇
2. 発表標題 第一原理計算を基礎とした金属中水素の溶解と拡散の計算科学モデリング
3. 学会等名 第1回水素が関わる材料科学の課題共有研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Kimizuka, B. Thomsen, M. Shiga
2. 発表標題 Nuclear quantum effects on hydrogen-isotope diffusion in vanadium and palladium: A path-integral molecular dynamics study
3. 学会等名 The 11th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM11) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 A. Mitsuhashi, H. Yukawa, H. Kimizuka
2. 発表標題 Effects of point defects on hydrogen diffusivity in B2-type PdCu alloys: A kinetic Monte Carlo study
3. 学会等名 The 11th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM11) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Yukawa, T. Kuniyuki, A. Mitsuhashi, H. Kimizuka
2. 発表標題 Effects of heat treatment in hydrogen environment on hydrogen permeability of Pd-40mass%Cu alloy membrane
3. 学会等名 The 11th Pacific Rim International Congress on Advanced Materials and Processing (PRICM11) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 相場 星哉, 湯川 宏, 大戸 達彦, 君塚 肇
2. 発表標題 原子核の量子効果を考慮した金属中水素の拡散・捕獲過程の自由エネルギー解析
3. 学会等名 第33回材料フォーラムTOKAI
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 三津原 晟弘, 湯川 宏, 君塚 肇
2. 発表標題 水素透過合金の探索に向けた水素透過能予測モデルの構築
3. 学会等名 日本金属学会2023年秋期講演大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 村上 賢太, 湯川 宏, 君塚 肇
2. 発表標題 Pd/V/Pd複合膜における相互拡散層の形成と水素透過能の劣化挙動
3. 学会等名 日本金属学会2023年秋期講演大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 三津原 晟弘, 湯川 宏, 君塚 肇
2. 発表標題 動的モンテカルロモデルに基づく点欠陥を含むB2型PdCu合金の水素拡散特性の予測的評価
3. 学会等名 日本材料学会第8回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 H. Kimizuka, M. S. Kim, B. Thomsen, M. Shiga
2. 発表標題 Isotope effect on quantum diffusion of interstitial hydrogen in bcc vanadium and fcc palladium
3. 学会等名 16th International Workshop on Hydrogen Isotopes in Fusion Reactor Materials (HWS-16) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 三津原晟弘, 湯川宏, 君塚肇
2. 発表標題 B2型PdCu合金中の空孔による水素トラップの動的モンテカルロ解析
3. 学会等名 日本金属学会2023年春季講演大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 都築奏汰, 湯川宏, 君塚肇
2. 発表標題 B2型PdCu系合金の水素透過能に及ぼす過剰Cu原子の影響
3. 学会等名 第32回材料フォーラムTOKAI
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 村上賢太, 湯川宏, 君塚肇
2. 発表標題 Pd/V複合膜の高温における水素透過能の劣化因子の解析
3. 学会等名 第32回材料フォーラムTOKAI
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 澁谷勇輝, 湯川宏, 君塚肇
2. 発表標題 Pd/V界面における相互拡散層の原子論的解析に向けた機械学習ポテンシャルの構築
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 三津原晟弘, 湯川宏, 君塚肇
2. 発表標題 Pd-Cu合金中の空孔による水素トラップに関する第一原理的考察
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 君塚肇, 志賀基之
2. 発表標題 機械学習ポテンシャルを用いたパラジウム中水素拡散の同位体効果の量子論的解析
3. 学会等名 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 三津原 晟弘, 湯川 宏, 君塚 肇
2. 発表標題 Pd-Cu合金中の過剰Cu原子が水素透過能に及ぼす影響
3. 学会等名 日本金属学会2022年春季講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 三津原 晟弘, 湯川 宏, 君塚 肇
2. 発表標題 実用PdCu合金膜の低温における水素溶解特性と水素拡散性の定量評価
3. 学会等名 第31回材料フォーラムTOKAI
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 澁谷 勇輝, 湯川 宏, 君塚 肇
2. 発表標題 結晶方位関係の異なるPd-V界面の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第31回材料フォーラムTOKAI
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 三津原 晟弘, 渡邊 晨平, 君塚 肇, 湯川 宏
2. 発表標題 PdCu合金膜の低温における水素透過能定量評価
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期講演大会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 折茂 慎一、福谷 克之、藤田 健一	4. 発行年 2022年
2. 出版社 共立出版	5. 総ページ数 216
3. 書名 “水素”を使いこなすためのサイエンス ハイドロジェノミクス	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	志賀 基之 (Shiga Motoyuki) (40370407)	国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹 (82110)	

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 協力者	湯川 宏 (Yukawa Hiroshi)	名古屋大学・工学研究科・助教 (13901)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------