Osaka University Knowledge Archive

Title	The Effect of Carbon on the Hydride Formation in Metals
Author(s)	原田, 修治
Citation	大阪大学, 1983, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/1820
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

Osaka University

【77】

氏名・(本籍)	原田修治（はらだしゅうじ）
学位の種類	工学博士
学位記番号	第 5957 号
学位授与の日付	昭和58年3月17日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当
学位論文題目	**金属水素化物形成に及ぼす炭素の影響**
論文審査委員	(主査) 教授 藤田 英一 (副査) 教授 長谷田泰一郎　教授 中村 伝　教授 寺西士一郎 教授 菅 宏　助教授 遠藤 将一

論文内容の要旨

水素エネルギー貯蔵用材料として金属水素化物の利用が有力とされているが，金属水素化物の形成機構の原理は未だによく理解されていない。面心立方（fcc）の鉄・ニッケル合金は水素化物を形成するが，これに炭素を固溶したところ，炭素を含まない試料よりも水素吸収量が増加した。一方，水素をよく吸収するパラジウムに炭素を固溶させたところ，水素吸収量は減少した。またニッケルは鉄・ニッケル合金と同じ傾向を示した。これらの新しい事実は，水素の吸収や水素化物形成が侵入水素原子のまわりの格子歪みや，他の侵入原子との弾性的相互作用の大小によって支配されるのではなくて，母格子の電子状態および侵入原子がそれに及ぼす影響に強く依存することを示している。以上の知見を定量的に解析するために，上記の3種の金属の水素吸収量を炭素の有無の条件下で定量し，同時にメスバウアー効果，X線回折，示差走査熱分析（DSC)によって，吸収あるいは放出に伴う局所的な電子状態の変化，格子歪み，結合エネルギー等も測定した。一方，理論的に金属中の水素の状態を周囲の格子歪みエネルギーや電子配置によって決まる結合エネルギーによって記述することを試み，上の測定結果を利用して炭素の有無による水素吸収量の差異を評価した。計算の結果は全体の傾向をよく説明し，また実験結果と半定量的によい一致を与えた。この研究により，金属中の水素の状態がよく理解され固溶炭素の影響もほぼ説明され，また水素貯蔵用材料の開発に新しい考え方を導入することができた。

論文の審査結果の要旨

本論文は金属中で水素化物や固溶体を形成する水素の量，状態などを固溶炭素の有無と関連させて調べ，金属中の水素のエネルギー状態，電子状態を解析し，水素化物形成能を論じたものである。水素化物は水素エネルギー貯蔵用として注目されているにも拘らず，その形成能や形成機構は必ずしもよく判ってはいない。本研究は面心立方のNiとFe-Ni合金の水素吸収量が固溶炭素によって顕著に増すのに対して，Pdでは逆に減少するのを発見した事に端を発している。これは水素吸収に対する侵入型合金元素の影響を示した最初の研究であると共に，水素の入り易さが周りの格子歪みや侵入原子間の弾性的相互作用によって支配されるのではなくて，母格子及び侵入原子の電子状態に強く依存する事を示した点で重要である。以上の知見を定量的に解析する為に炭素の有無による水素吸収量の変化の定量，メスバウア分光，X線回折，示差走査熱分析を行い，局所的な電子状態，格子歪み結合エネルギー等を測定した。一方，理論的に金属中の水素の状態を格子歪みエネルギー，や電子配置によって決まる結合エネルギーで記述し，測定結果を利用して炭素の影響を評価した計算の結果は全体の傾向をよく説明し，実験と半定量的に良い一致を示した。この研究により，金属中の水素の状態が良く理解され，固溶炭素の影響もほぼ説明され，また水素貯蔵用材料の開発に新しい考え方を加えたとえる。よって博士論文として価値あるものと認められる。