

研究タイトル：水素・リチウム等の量子状態解析

燃料電池・リチウムイオン二次電池材料開発



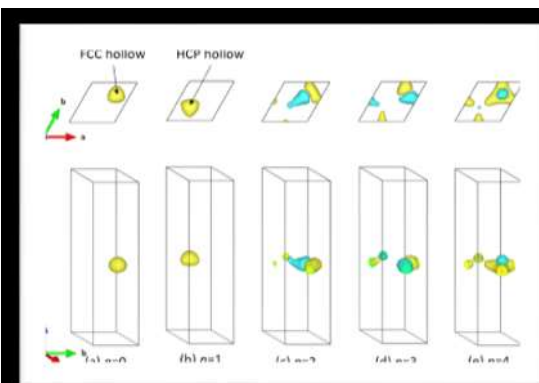
氏名：	中西 寛 / NAKANISHI, Hiroshi	E-mail：	nakanishi@akashi.ac.jp
職名：	教授	学位：	工学博士
所属学会・協会：	日本物理学会, 応用物理学会, 日本表面真空学会, 日本中間子科学会		
キーワード：	燃料電池, リチウムイオン二次電池, 電極触媒反応, 電解質膜、ミュオン		
技術相談 提供可能技術：	<ul style="list-style-type: none"> ・燃料電池の電極表面上、電解質内での水素の量子状態解析 ・リチウムイオン二次電池内の電極内リチウムの量子状態解析 ・上記 拡散、電気化学反応の解析、より好適な電極触媒材料デザイン 		

研究内容：

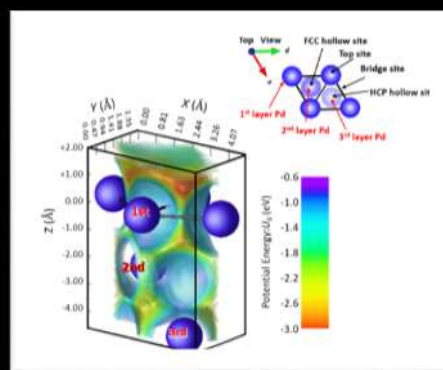
現在、密度汎関数理論を基にした第一原理計算は、現実の物質系に対しある一定の精度で電子状態が計算でき、ある一定の範囲で定量的に物性を評価できる。そのような状況から実験研究においても、まずは参照すべき情報源としての標準理論的な地位を築きつつある。さらに進んで、これを活用した第一原理分子動力学法は、固・液・気・相転移から、化学反応にいたるまでの原子・分子の動力学の研究に活用されている。そこでは、電子系に対しては量子力学が適用されているが、原子核の運動に関してはニュートン力学(古典力学)が適用されている。しかしながら、水素やリチウムの場合、その原子核の質量が小さいため、波動性、トンネル効果など量子効果が顕著になる。このような場合は、原子核に対しても量子力学を使う必要がある。

我々は、電子系に加え、原子核系に対しても量子力学を適用する量子第一原理計算手法を開発し、実際に現在のコンピュータで動くプログラム“Naniwa 浪速”を作成している。また、開発したプログラムを用いて、様々な現実の物質系における水素、リチウム等の量子状態を研究し、燃料電池技術、水素貯蔵技術、水素液化技術など水素関連技術、二次電池・キャパシタ技術等の開発に貢献している。

また、半導体中の微量の不純物として水素、リチウムなどが混入すると電気的特性が著しく変化する場合があるこのような場合の解析や、製造工程の水素処理等の物理的効果の調査にも利用可能である。他に、正ミュオンを核とする水素同位体ミュオニウムの物質中量子状態の研究も本手法で行ってる。



Pd表面上の水素の波動関数



Pd表面でのポテンシャルエネルギー



プログラム特許：特許第 5902495 号、米国特許 US 8,140,467、特許第 4774523 号
水素技術特許：特許第 3765050 号、特許第 4128070 号、特許第 4222932 号、特許第 4223014 号特許第 4691649 号

提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	
量子第一原理計算プログラム	コード "Naniwa 浪速" (自作)