

豊橋技術科学大学長 殿

平成 17 年 2 月 28 日

審査委員長 角田 範義







論文審査及び最終試験の結果報告書

このことについて、下記の結果を得ましたので報告いたします。
記

学位申請者	李冠平	学籍番号	第 005042号
申請学位	博士(工学)	専攻名	機能材料工学
論文題目	Phase Relations, Thermodynamic Properties and Electronic Structures of Hydrogen Storage Alloys (水素吸蔵合金の相関係、熱力学特性および電子構造)		
公開審査会の日	平成 17 年 2 月 17 日		
論文審査の期間	平成 17 年 1 月 26 日～平成 17 年 2 月 28 日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 17 年 2 月 17 日	最終試験の結果	合格

論文内容の要旨
水素吸蔵合金を実用化するためには、水素吸蔵・放出の際の温度と圧力を用途に合わせて調整する必要がある。本研究では、一部で実用化されているAB₅型合金より水素容量が大きいAB₂型合金[Ti_xZr_{1-x}(Fe_yMn_{1-y})₂]を対象とし、合金の相関係、熱力学特性および電子構造の相互関係を明らかにし、合金を設計する手法の確立を試みたものである。第1章では、水素吸蔵合金の現状に基づく合金設計の重要性を明らかにし、本研究の目的を示している。第2章では、B元素(Mn)の一部をFe置換したZr(Fe_yMn_{1-y})₂を合成し、元素置換による平衡圧の変化、水素化過程の変化を述べている。第3章では、A元素(Zr)の一部をTiで置換したTi_xZr_{1-x}Mn₂を合成し、Rietvelt解析によって結晶構造を決定し、置換による熱力学特性を論じている。第4章では、第3章で得られた合金と水素化物の精密な結晶構造データを用いてDV-X α クラスター計算を行い、水素化物の熱力学的な安定性について議論している。第5章では、第2章で得られたデータを用い、Bサイト置換による水素化物の熱力学の変化を同様な方法での理論的な検討を行っている。最後に第6章では、本論文の結論を述べている。

審査結果の要旨
水素吸蔵合金の設計に於いては、その合金の水素吸蔵前後の結晶構造と、水素吸蔵反応における精度の高い熱力学的諸量の測定が重要である。しかし、これらの測定は系統的に行われてこなかったのが現状である。本研究では、AB₂型の水素吸蔵合金を対象とし、A元素あるいはB元素の一部置換による水素吸蔵前後の結晶構造をRietvelt法で詳しく解析し、得られた構造パラメーターを用いたDV-X α 法による計算と実測した熱力学データとの考察から、結合次数の差の関数が水素吸蔵エンタルピー変化と直線的関係にあることを見出した。しかし、この関数がB元素置換の場合には必ずしも定量的な解釈までに至らないという取り扱う合金系に依存する点はあるが、相関係・熱力学特性・量子材料計算の三者を結びつけた試みは、限定的ながらも組成予言が可能になり、水素吸蔵合金の実用化に向けた合金設計に大きく貢献するものである。
よって、本論文は博士(工学)の学位論文に相当するものと判定した。

審査委員
角田 範義  亀頭 直樹  印 土谷 浩一  印
西宮 伸幸  印 印 印

(注) 論文審査の結果及び最終試験の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。