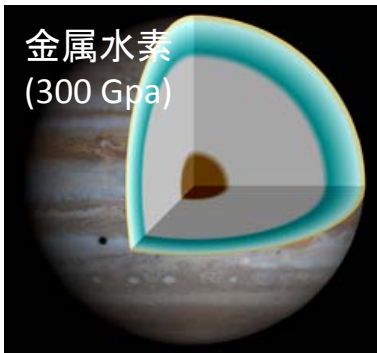


CMRC

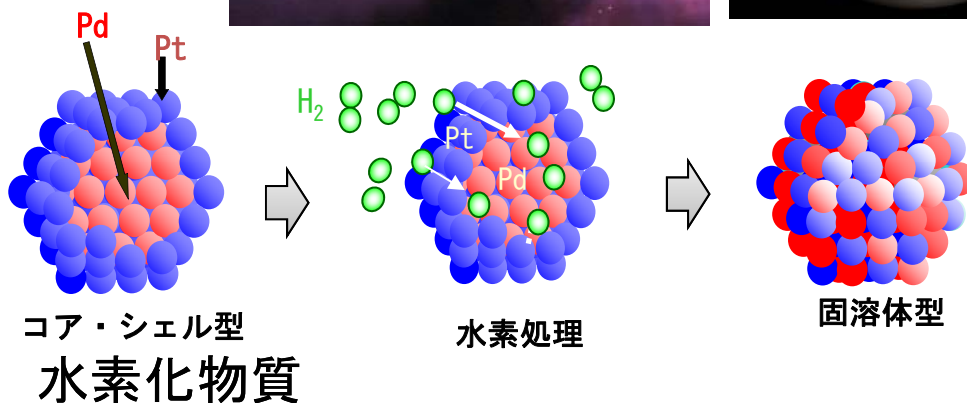
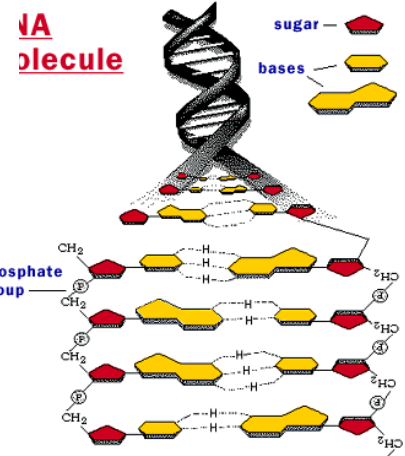
水素量子状態観測プロジェクト

物構研 大友季哉

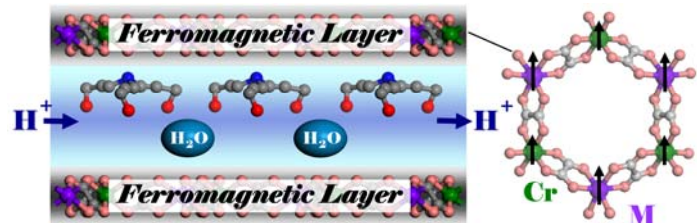
分子形成
(水素スピン)



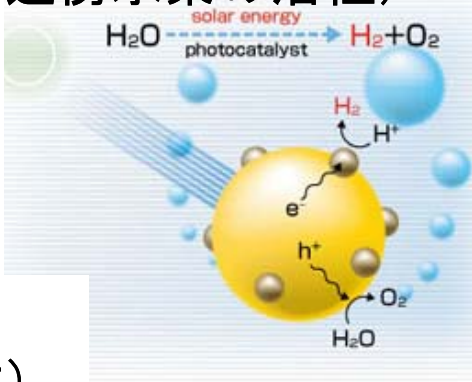
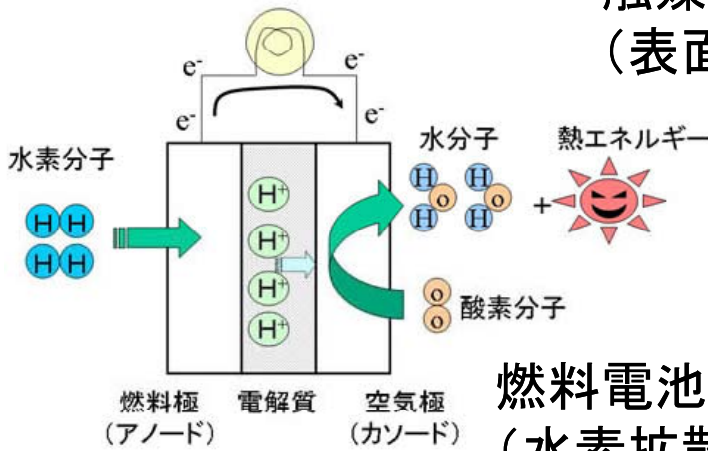
生命活動
(水素結合)



水素移動
(特異な表層構造)



触媒反応
(表面近傍水素の活性)



燃料電池
(水素拡散)

水素貯蔵

- 錯体水素化物 (MHx)-
- 誘電体 (BaTiO₃) H-
- 高压化での金属-水素相関

水素誘起磁性 (ナノ粒子)

水素誘起超伝導 (逆同位体効果)

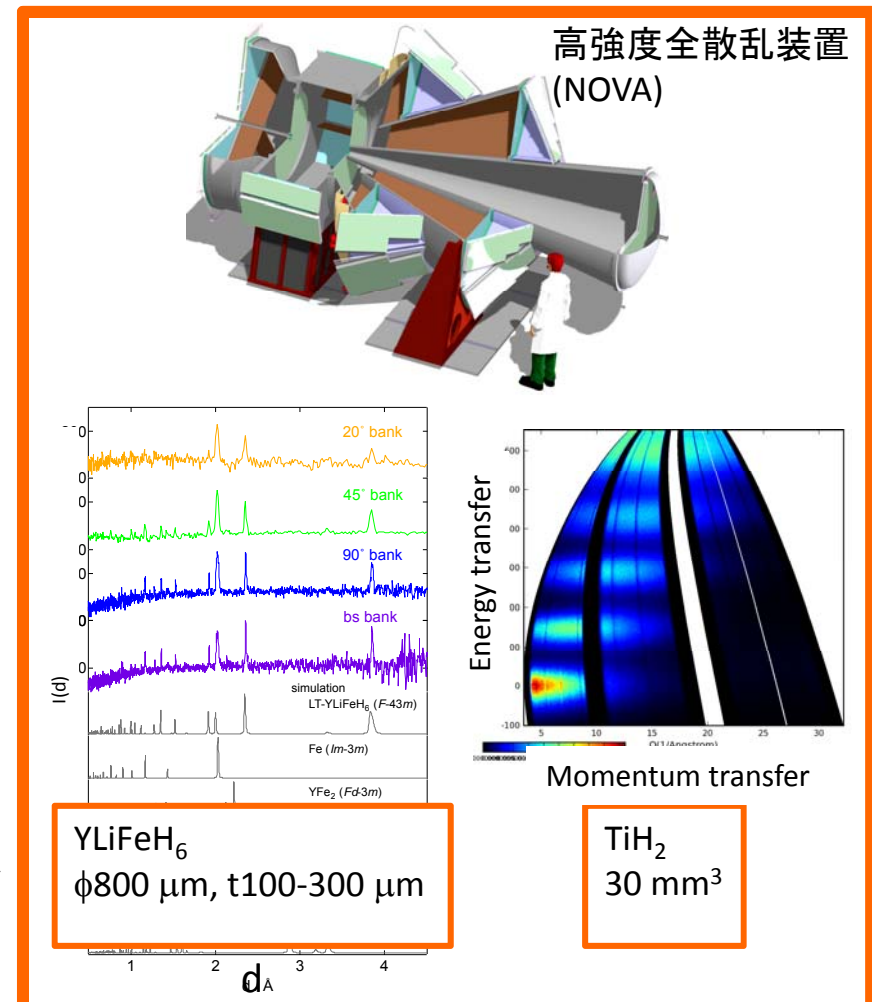
- Pd-H Tc ~ 9K
- Tc (PdH) < Tc (PdD)

水素をキーワードとするテーマは数多く存在する

水素プロジェクト

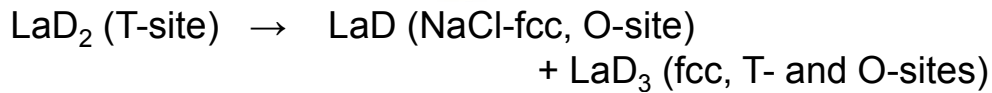
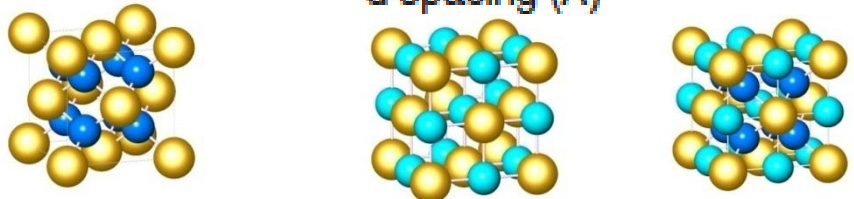
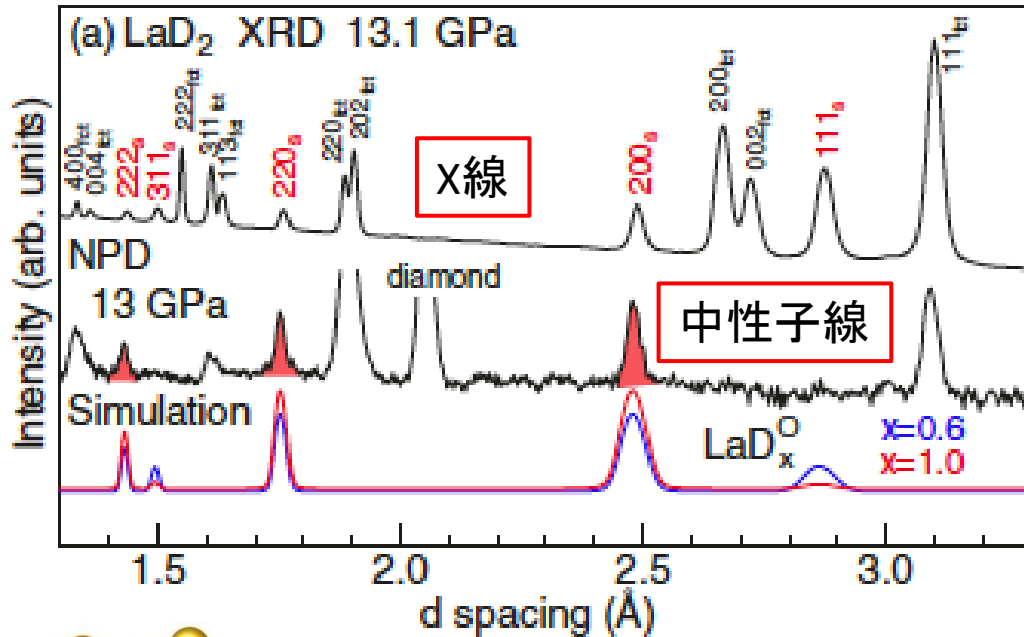
量子ビームの相補的利用による電子・水素・格子の同時観測

- 中性子＝電子が見えない
 - 原子核位置 H & D
 - 水素-水素相関
 - 偏極中性子、試料核スピン偏極(開発中)
- 放射光＝プロトンが見えない
 - 電子分布
 - XAFS
 - 内核電子励起
- ミュオン＝トラップ位置がわからない
 - 水素準位
 - 超低速ミュオン(ミュオングループ建設中)
- 計算科学
 - 測定結果の理論的裏付け・解釈
 - 複数の量子ビーム測定結果の統合的解釈



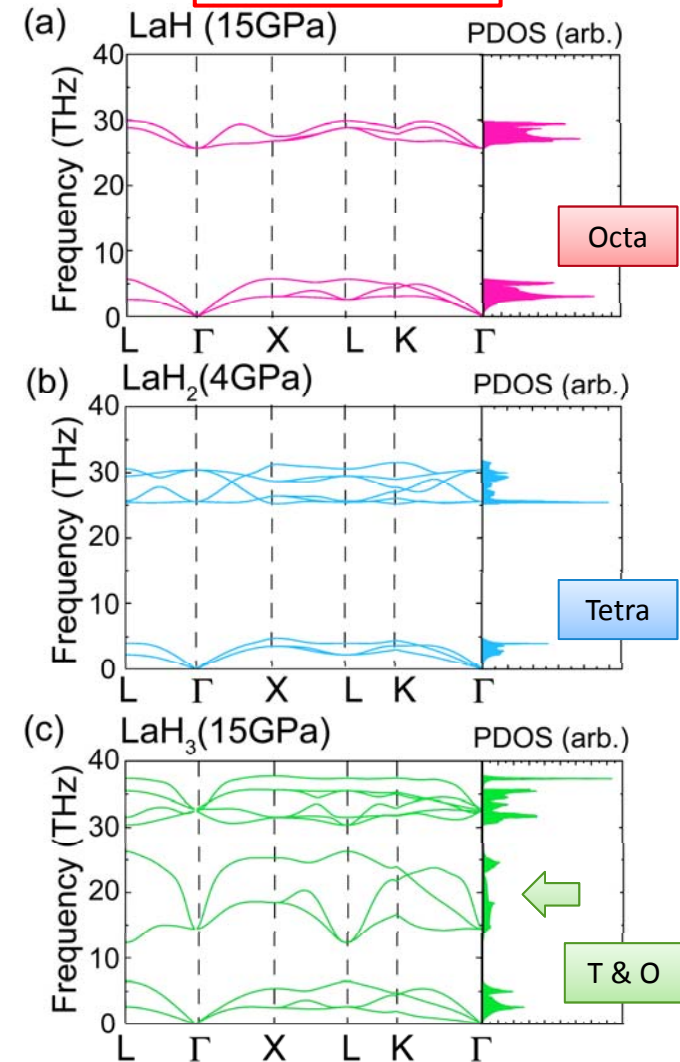
高水素密度材料開発のための高圧化での水素安定サイトの解析 (LaD₂)

11万気圧以上で、岩塩 (NaCl) 構造をもつレアアースメタルの水素化物(LaD)が存在することを発見



中性子回折とX線回折によるLaD形成の観測
第1原理計算による高圧下でのLaDの安定性の検証

第1原理計算



Phys. Rev. Lett.
108, 205501 (2012).



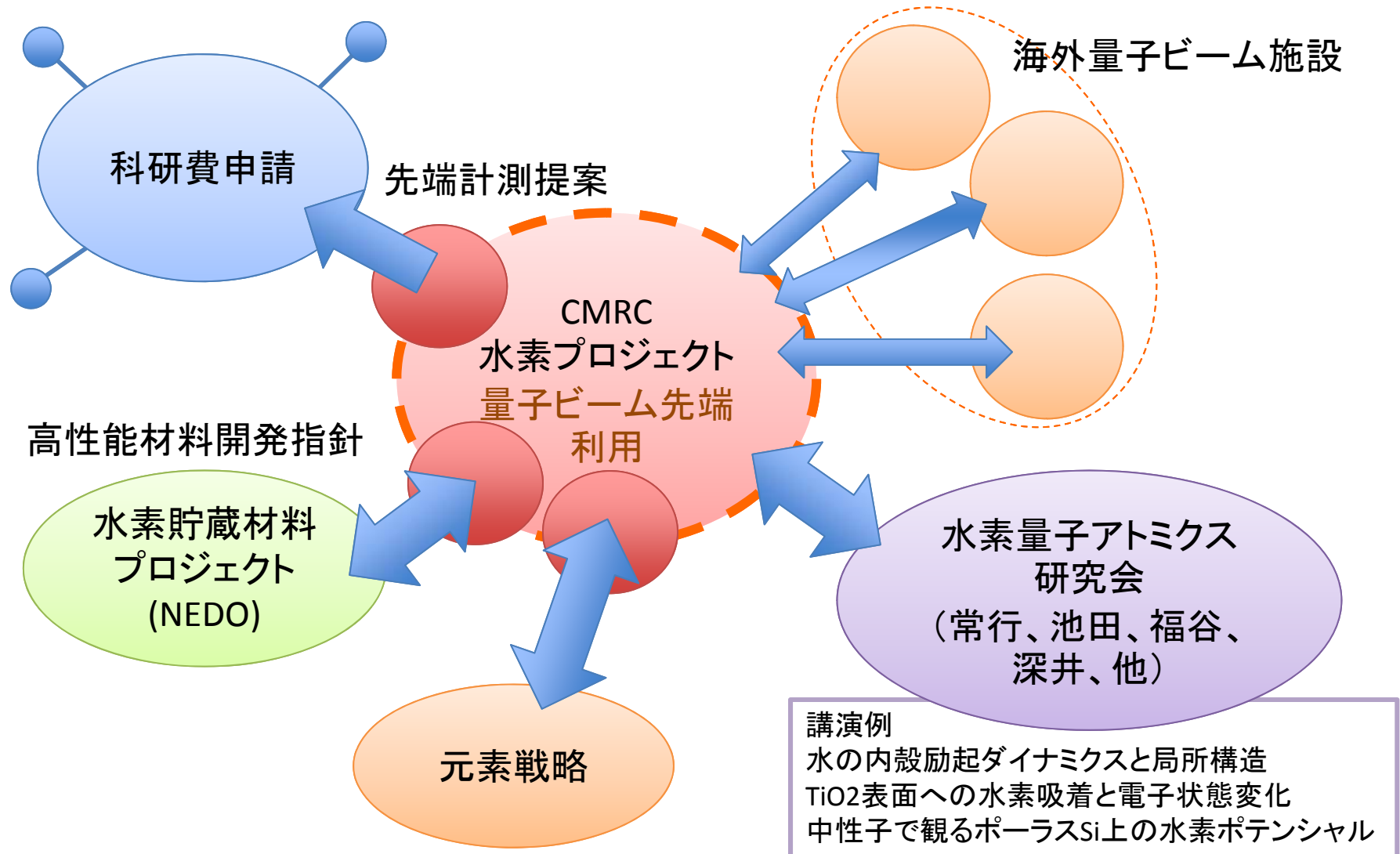
短期テーマ

- 水素化物 NaAlH_4 の構造解析(実施中)
 - 中性子回折(J-PARC BL21)、XAFS(PF BL11)
- 高圧下での希土類金属水素化物(実施中)
 - 中性子回折(J-PARC BL21)、X線回折(SPring-8)
 - 中性子非弾性(検討中)
 - 水素-金属結合状態変化
- 固体中水素拡散・緩和(実施中)
 - 中性子準弾性散乱(NIST、ILL)
 - 金属、ガスハイドレート
- ナノ粒子中水素の解析(検討中)
 - Pt-Pd系ナノ粒子
 - 中性子回折(J-PARC BL21)
- 水素が作り出す新しい物性発現機構の解明
 - 水素誘起磁性、水素誘起超伝導

長期テーマ：“水素の結合と解離”

- 水素の電荷決定法の開発
 - H^- 、 H^0 、 H^+
- 水素結合
 - 電子分布の精密測定
 - 同位体により電子状態はどう異なるのか？
- 表層における水素原子・分子の反応過程
 - 吸蔵・放出プロセスの基本的理解
 - 光触媒、電極反応
 - 有機物合成(水素の吸着しやすさ、離れやすさ)
 - 超低速ミュオン

水素をキーワードとして 研究ネットワークを形成



メンバー

- 水素観測に関わる先端量子ビーム技術の開発・テーマ設定
 - 大友季哉 物構研 中性子:全散乱、非弾性散乱
 - 池田進 物構研 中性子:非弾性
 - 池田一貴 物構研 中性子:その場中性子回折
 - 山室修 東大・物性研 中性子:準弾性散乱、スピンエコー

 - 阿部仁 物構研 放射光:その場電子分光
 - 町田晃彦 JAEA量子ビーム 放射光:高圧構造解析
 - 原田慈久 東大・物性研 放射光:高分解能軟X線発光分光
 - 関場大一郎 筑波大 放射光:高分解能軟X線発光分光

 - 下村浩一郎 物構研 ミュオン
- 連携メンバー(検討中)
 - 物質創成
 - 折茂慎一(東北大)、北川宏(京大)、他
 - 計算科学
 - 笠井、中西(阪大)

今後の予定

- 平成25年度キックオフ・ワークショップ
 - 夏頃
 - 相補的利用による研究テーマの検討
- 年会上に1～2回程度の成果報告会
- NEDO申請(1件申請済)
- 科研費申請
- ビーム課題申請
 - 平成25年の後期:5-6月くらい

まとめ

- 量子ビームの相補的利用による電子・水素・格子の同時観測により、水素の量子状態の観測手法の確立を目指す