

固体高分子形燃料電池要素材料・水素貯蔵材料の知的設計

Computational Materials Design, Case Study 1 : Intelligent/Directed Materials Design for Polymer Electrolyte Fuel Cells and Hydrogen Storage Application

Hideaki Kasai
Muneyuki Tsuda

笠井秀明 津田宗幸

A5判・並製・144頁 定価(本体1700円+税)



新規材料開発などのため、量子力学に基づく実験に頼らない高信頼性シミュレーションが求められている今日、第一原理を根幹とした計算機マテリアルデザインによる知的設計が産業へ応用展開されることが期待されている。

本書は、大好評を博した『計算機マテリアルデザイン入門』(笠井秀明ほか編)につづき、計算機マテリアルデザインによる先端研究事例として、現在、研究開発が急速に進んでいる「固体高分子形燃料電池」および「水素貯蔵材料」の知的設計について詳説した、研究者・開発技術者必読の一冊である。

1. 先端研究事例 I

- 1-1 固体高分子形燃料電池の仕組み
- 1-2 水素貯蔵技術
- 1-3 計算機マテリアルデザインを活かすには

2. 固体高分子形燃料電池の電極触媒

- 2-1 合金化・歪み効果
 - 2-1.1 白金と一酸化炭素との相互作用における合金化・歪み効果
 - 2-1.2 歪みやCO吸着のある白金上における水素分子隔離吸着
- 2-2 鉄ヒドロゲナーゼ系材料
- 2-3 ヘム系材料
 - 2-3.1 ヘム上における酸素分子解離の配向依存性
 - 2-3.2 ヘム上における酸素分子解離のスピン状態依存性
 - 2-3.3 金属ポルフィリン上における酸素分子解離に対する比較検討
 - 2-3.4 コバルトポルフィリンベースのカソード触媒設計

3. 固体高分子形燃料電池の電解質膜

- 3-1 界面における水素原子の振る舞い
- 3-2 プロトン移動の推進力
- 3-3 溶媒効果
- 3-4 吸着酸素へのプロトン移動

4. 水素貯蔵材料

- 4-1 シクロヘキサン系材料
- 4-2 水素化マグネシウム系材料
 - 4-2.1 水素化マグネシウムクラスターからの水素分子脱離
 - 4-2.2 3d遷移金属を触媒とした水素化マグネシウムのMg-H結合解離
 - 4-2.3 磁化および電荷された水素化マグネシウムベースの水素貯蔵材料

5. 量子ダイナミクス

- 5-1 白金表面上における水素分子の解離吸着反応の量子ダイナミクス
- 5-2 白金表面上における水素原子の拡散反応の量子ダイナミクス

ご注文書

ご注文はこちらまで >>>> FAX 06-6877-1614

2008年4月新刊	計算機マテリアルデザイン先端研究事例 I □ 固体高分子形燃料電池要素材料・水素貯蔵材料の知的設計 A5判・並製・144頁 定価(本体1700円+税) ISBN 978-4-87259-254-2	冊
好評発売中	□ 計算機マテリアルデザイン入門 笠井秀明 赤井久純 吉田 博 編 A5判・並製・400頁 定価(本体2500円+税) ISBN 978-4-87259-152-1	冊

ご住所

お名前

TEL

○お支払いは書籍とともに郵便局振替用紙を同封致しますので、到着後ご入金ください。



大阪大学出版会
Osaka University Press

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘2-7 大阪大学ウエストフロント
TEL/FAX 06-6877-1614 E-mail: info@osaka-up.or.jp