

論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称	博士（理学）	氏名	SINGH PANKAJ KUMAR
学位授与の要件	学位規則第4条第①・2項該当		
論文題目			
Modification of Kinetics and Thermodynamics by Various Oxides Addition and Composite Formation for Magnesium-Hydrogen System (マグネシウム-水素系における酸化触媒添加及び複合体形成による動力学及び熱力学制御)			
論文審査担当者			
主査	准教授	宮岡 裕樹	印
審査委員	教授	鈴木 孝至	印
審査委員	教授	鬼丸 孝博	印
審査委員	教授	中島田 豊	印
審査委員	先進理工系科学研究科教授	市川 貴之	印
〔論文審査の要旨〕			
<p>化石燃料の利用に伴い排出される二酸化炭素(CO₂)は、温暖化を始めとした気候変動の要因の一つであるため、再生可能エネルギーを利用した脱炭素社会の確立を目指した研究開発が進められている。水素は、変動性及び偏在性を有する再生可能エネルギーを効率的に利用するための媒体として注目されている。これまで、常温常圧で気体である水素を高体積密度に貯蔵する方法として、様々な水素貯蔵材料の研究が行われてきた。中でも、マグネシウム(Mg)は資源的な優位性及び高い水素貯蔵容量を有するため、典型的な水素貯蔵材料として広く研究されている。</p> <p>本論文の著者は、Mgの水素吸蔵/放出反応に関して、酸化物触媒を用いた動力学特性の制御、及び異種の水素化物との複合化による熱力学特性の制御を目的とした研究を行った。</p> <p>論文の詳細は以下に示すとおりである。</p> <p>第1章では、本研究の背景として、化石燃料利用の課題や再生可能エネルギーの重要性、水素貯蔵材料の基礎や先行研究について述べた。第2章では、Mgの水素貯蔵材料としての課題に対する本研究のアプローチについて説明した上で、研究目的が述べられている。第3章では、本研究に使用した試料及びその合成方法、実験方法、分析装置やその原理が記述されている。特に、水素吸蔵/放出特性評価に用いた熱分析や化学状態評価に用いたX線光電子分光(XPS)について詳細に述べられている。</p> <p>第4章は本論文の骨子であり、実験結果及び考察が詳細に記述されている。</p> <p>4.1では、Mgの水素放出反応において酸化物が高い触媒能を発現するための制御因子を明らかにすることを目的とし、高い触媒活性を示すことが知られるNbを中心とした4-6周期、4-6族元素の酸化物に対し系統的な触媒特性評価が行われた。熱分析により得られた水素放出温度と、粉末X線回折測定の結果を基に推測されたMg表面における酸化物触媒の分散状態との関係から、高い触媒活性を示すTiO₂、V₂O₅、CrO₃、ZrO₂、Nb₂O₅は分</p>			

散度が高いことが示された。一方、 MoO_3 については、高分散状態が示唆されたにもかかわらず触媒活性が低かったことから、その他の制御因子として酸化物の化学状態が予想された。Mg 上に分散させた酸化物触媒の XPS 測定結果、及びデータベースを用いた反応予測から、 HfO_2 を除くすべての酸化物触媒は試料合成過程で還元されており、特に触媒活性の高い酸化物は、2 価及び 3 価といった中間的な酸化状態をとることが示唆された。以上の結果から、Mg 表面での分散状態及び化学状態が酸化物触媒活性の重要な制御因子であると結論付けられた。

4.2 節では、4.1 節で得られた結果を基に行った酸化物触媒の特性制御に関する研究結果及び考察が述べられている。

4.3 節では、既存技術より簡便な方法で、水素吸蔵/放出活性の高い触媒添加 Mg を合成する手法の確立を目的とし、ゾル-ゲル法を用いて合成した酸化物を添加した Mg 試料を製作したところ、高活性な Mg 試料が得られた。合成過程を含めて特性を評価した結果、ゲル酸化物は OH 基を含有した準安定状態であり、Mg への分散過程で容易に活性状態を形成することが明らかとなった。これにより既存技術の 1/10 の処理時間で高活性 Mg 試料を合成することが可能となった。

4.4 節では、 MgH_2 に CaH_2 を複合化した試料の特性評価を行い、Mg 及び Ca より安定な Mg_2Ca 相が生成することで熱力学的に水素放出温度が低温化することを示した。

第 5 章では以上の研究で得られた結果を総括している。

以上のように本論文の著者は、Mg-H 系の動力学特性及び熱力学特性を向上させることを目的とした研究を多角的なアプローチで実施し、特に、これまで統一的に議論されてこなかった Mg の水素放出反応における酸化物の触媒能を制御する因子を系統的研究から明らかにした。故に、本論文の著者は博士（理学）の学位を受けるのに十分な資格を有するものと判断する。

備考 審査の要旨は、1,500 字程度とする。