

課題番号	研究課題名	研究代表者	評価結果
17106008	電子密度分布に基づく水素貯蔵材料の統一的理解と量子材料設計への新しい展開	森永 正彦 (名古屋大学・大学院工学研究科・教授)	A
<p>化学結合様式が異なる水素化物について、独自に「原子化エネルギー」値を計算し、各種水素化物の統一的理解に成功している。さらに、「原子化エネルギー」を用いて、マグネシウム水素化物における触媒効果についても定量的評価に成功していること等は、高く評価できる。それが、ペロブスカイト型水素化物やアラネートの水素貯蔵能力にどのように関係しているのか、また、上位目標である新規な水素貯蔵材料のための量子材料設計指針の提示につながるように、今後の展開に期待したい。</p> <p>従来通りの専門雑誌・論文や学会発表などの従来の成果発表にとどまることなく、プレス発表など、幅広い成果公開にも期待したい。</p>			