

森永正彦

学歴

1969年3月 京都大学工学部冶金学科 卒業
1971年3月 京都大学大学院工学研究科修士課程冶金学専攻 修了
1971年4月 京都大学大学院工学研究科博士課程冶金学専攻 進学
1972年6月 同上 休学、渡米 (1975年6月 同上 退学)
1978年6月 ノースウエスタン大学大学院博士課程材料科学専攻 修了、Ph. D.

職歴

1978年7月 ノースウエスタン大学 研究員
1979年4月 豊橋技術科学大学工学部 講師
1983年4月 豊橋技術科学大学工学部 助教授
1991年9月 豊橋技術科学大学工学部 教授
1994年10月 名古屋大学工学部 教授
1997年4月 名古屋大学大学院工学研究科 教授
2010年4月 国立高等専門学校機構 岐阜工業高等専門学校
産学官連携総括コーディネーター、客員教授
2013年4月 公益財団法人 豊田理化学研究所 フェロー

個人情報

森永 正彦

(主な公職と民間団体役職歴)

第57代 (2008年度)	社団法人 日本金属学会 会長
2004年 - 2010年	日本学術振興会 産学協力研究委員会「加工プロセスによる材料新機能発現第176委員会」 委員長
2004年 - 2010年	DV-X α 研究協会 会長
2010年 - 現在	(公益財団法人) 本多記念会 理事

(受賞)

表彰年月日	表彰業績名称	表彰主体	受賞者
平成元年4月4日	功績賞	日本金属学会	本人
平成3年3月19日	学術賞	永井科学技術財団	本人
平成13年8月1日	学術賞	DV-X α 研究協会	本人
平成20年3月26日	谷川・ハリス賞	日本金属学会	本人
平成20年11月7日	Best Paper Award	17 th International Forgemasters Meeting	本人他
平成21年5月20日	Lee Hsun Lecture Award	中国科学院 金属研究所	本人
平成22年3月28日	増本量賞	日本金属学会	本人
平成24年8月8日	協会賞	DV-X α 研究協会	本人

(公職と民間団体役職歴)

(大学等関係)

- ・非常勤講師 (北海道大学工学部、広島大学工学部、名古屋工業大学工学部、九州大学大学院総合理工学研究科、鳥取大学工学部、東京工業大学大学院理工学研究科、岐阜工業高等専門学校)
- ・外部評価委員 (東北大学金属材料研究所、大阪大学接合科学研究所、広島大学大学院工学研究科)
- ・委嘱教授 (東北大学金属材料研究所)

(文部科学省関係) 大学設置・学校法人審議会 専門委員

(大学評価・学位授与機構関係) 学位審査会 専門委員

(日本学術振興会関係) 特別研究員等審査会 専門委員、科学研究費委員会 専門委員

- #### (経済産業省関係)
- ・NEDO 研究評価分科会長 (「水素先端科学基礎研究事業」中間評価および最終評価)
 - ・NEDO 採択審査会委員長 (「燃料電池自動車用水素貯蔵材料」に関する調査研究)

(学協会関連) 社団法人 日本金属学会 理事、副会長、会長、DV-X α 研究協会 運営委員、副会長、会長

(財団法人) (公益財団法人) 稲盛財団「京都賞」先端技術部門 選考委員

(研究・国際会議)

(科学研究費補助金) 基盤研究 (S) 平成17年度—21年度 研究代表者 「電子密度分布に基づく水素貯蔵材料の統一的な理解と量子材料設計への新しい展開」 他

(国際会議開催) ・ The 5th International Conference on DV-X α Method (DV-X α 2008) 委員長

- ・ The 4th International Symposium on Designing, Processing and Properties of Advanced Engineering Materials (ISAEM-2008) 委員長 他

研究成果

森永正彦

1970年代に、米国のノースウエスタン大学において、X線散漫散乱を測定して、金属酸化物（例：バナジウム酸化物、安定化ジルコニア）の中の結晶欠陥の微細構造を調べた[1-3]。帰国後、1980年頃に、DV-X α 分子軌道法を用いてジルコニア（ZrO₂）の電子状態を初めて計算し、その明快さに驚いた[4]。これがきっかけになり、「電子レベルからの合金設計」の研究を始めた。後述するように、New PHACOMPやd電子合金設計法を提唱し、これまでその普及に努めてきた。最近では、原子化エネルギーの計算を基に、新しい材料設計を探究している。

1. 電子レベルからの合金設計

合金は多成分元素からなる複雑系であるため取り扱いが難しい。合金設計のための最初の計算は、ニッケルクラスター中に合金元素を入れた簡単なもので、「合金元素の個性を表す2つの合金パラメータ」を求めた。一つは合金元素と母金属元素の間の結合次数（*Bo*）であり、他は合金元素のd軌道エネルギーレベル（*Md*）である。金属学の古い歴史にもかかわらず、合金効果を表すパラメータがなかったので計算から求めたわけである[5]。この合金パラメータは、周期表を反映している電子パラメータであるため、物性の評価に有効である。

この新しいパラメータを用いて、これまで理論的な取り扱いが難しかった遷移金属（鉄、ニッケルなど）の合金固溶体の元素の固溶限を定量的に評価した[6]。そして、1984年に、New PHACOMP (Phase Computation:相計算)を提唱した[7]。これは、ニッケル合金中に脆化相（例：シグマ相）を生成させない合金組成の新しい予測法であり、今では世界に広まっている。これを基に、「d電子合金設計法」を提唱し、その普及に努めてきた[8-10]。

この設計法を用いて、ニッケル基単結晶超合金、フェライト系耐熱鋼をはじめとして、いろいろな合金を開発した[11]。例えば、チタン合金[12,13]の設計にこの方法が使われ、生体用チタン合金[14]や多機能ゴムメタル（チタン合金）[15]が開発されている。

Fig.1は、「合金設計の木」であり、この木は分子軌道理論の土壌の上に現在も

すくすくと成長している。種々の遷移金属の合金のみならず、アルミニウム合金やマグネシウム合金などの軽合金の果実も実っている[16,17]。

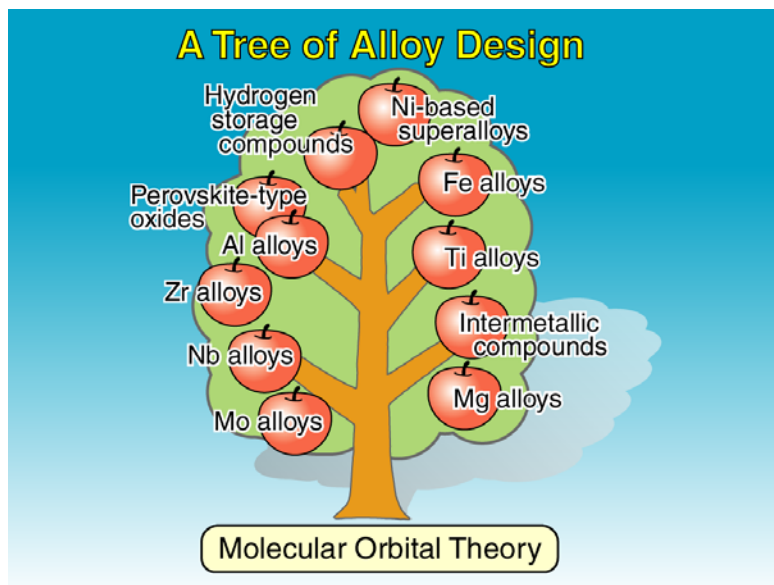


Fig.1 A tree of ally design growing on the basis of molecular orbital theory.

この外、長年の電子状態の計算結果を整理し、電子密度分布についての物質共通の「ユニバーサルな関係」を発見している。Fig.2に示すように、最近接原

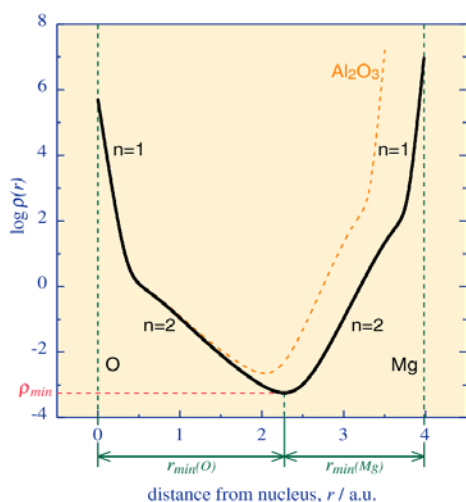


Fig.2 Electron density vs distance from O and Mg nuclei in MgO. Electron density minimum, ρ_{\min} and the distances, $r_{\min}(\text{O})$ and $r_{\min}(\text{Mg})$ are defined in this plot.

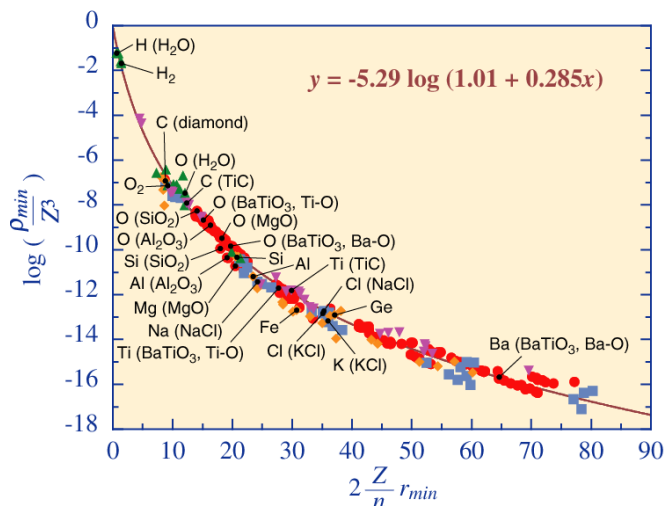


Fig.3 A universal relation between $\log(\rho_{\min}/Z^3)$ and $2(Z/n)r_{\min}$. Every material is located on the curve and its numerical expression is given in the figure. Here, Z is the atomic number and n is the principal quantum number.

子間の電子密度が最小値 ρ_{\min} を取る位置を r_{\min} (原子半径またはイオン半径) と定義し、 $\log(\rho_{\min}/Z^3)$ と $2(Z/n) r_{\min}$ (ただし、 Z : 原子番号、 n : 主量子数) を両軸にとりプロットすると、Fig.3に示すように、気体・液体・固体を問わず、あらゆる物質が一つの曲線上にのり、その曲線は簡単な式で表される [18]。

2. 原子化エネルギーによる材料設計

(1) 原子化エネルギー

最近の材料科学の分野では、物質の全エネルギー計算がよく行われている。しかし、Wigner と Seitz が 1955 年に予言したように、全エネルギー計算のみでは、多くの場合、実験から分かっていることを確認しているのみである。全エネルギーのさらなる解析が望まれている。

最近、物質の化学結合を「エネルギースケール」で表現する方法を、研究している。すなわち、エネルギー密度解析法[19]を用いて、電子系の全エネルギーを物質中の構成原子に分配して、各構成原子の「原子化エネルギー」(物質中の構成原子を、気体のようにバラバラにするために要するエネルギー) を求めている。本解析を通して、全エネルギー計算のみでは不明であった「構成原子の顔」が見えてくるので、材料設計に応用できる。エネルギースケールで化学結合を表すので、イオン結合、共有結合などの従来の分類はもはや必要ない。

(2) 水素化物への応用

これを水素貯蔵材料として注目されている金属系、無機系、有機系の水素化物に適用し、これらを一枚の「原子化エネルギー図」の中で整理した[20]。面白い図なので、Fig.4 に示す。縦軸は、水素化物中の水素の原子化エネルギー ΔE_H で、横軸は金属(または炭素)の原子化エネルギー ΔE_M である。多様な化学結合を持つ全ての水素化物を、この一枚の図の中で比較できる。

例えば、金属系水素化物はこの図の上方にあり、水素の持つエネルギー ΔE_H が大きい。下方に、無機系(錯体系)水素化物があり、有機系の水素化物(すなわち炭化水素)もその近くにある。炭化水素 (C_mH_n) (例: シクロヘキサン C_6H_{12}) では、実に巧妙な化学結合が形成されている。この分野でよく使われている炭素-炭素間の結合が、1重、2重、あるいは3重結合であるという表現は、原子化エネルギーを使えば、もはや必要ない。

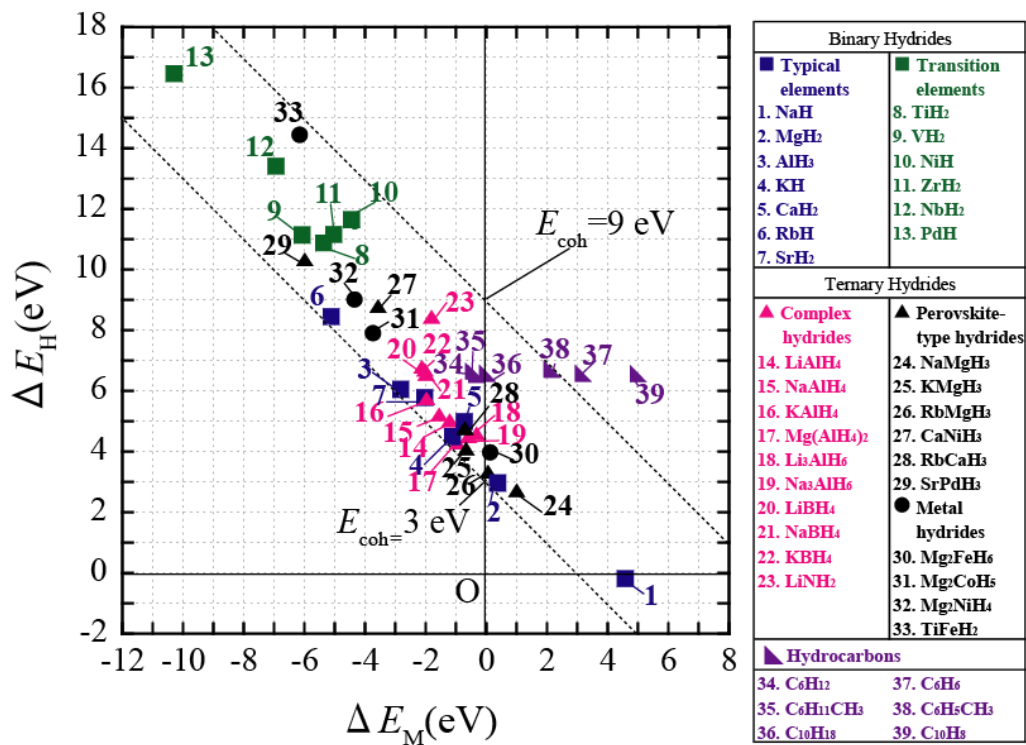


Fig.4 Atomization energy diagram for hydrides and hydrocarbons. Every material is plotted on this figure despite the significant differences in the nature of the chemical bonds between atoms among them.

(3) 酸化物への応用と触媒解析

金属酸化物 $MxOy$ の原子化エネルギー図を Fig.5 に示す[21]。酸化物イオンが持つエネルギー ΔE_O の大きさは酸化物によって違う。例えば、 Al_2O_3 では小さく、 Nb_2O_5 では大きい。

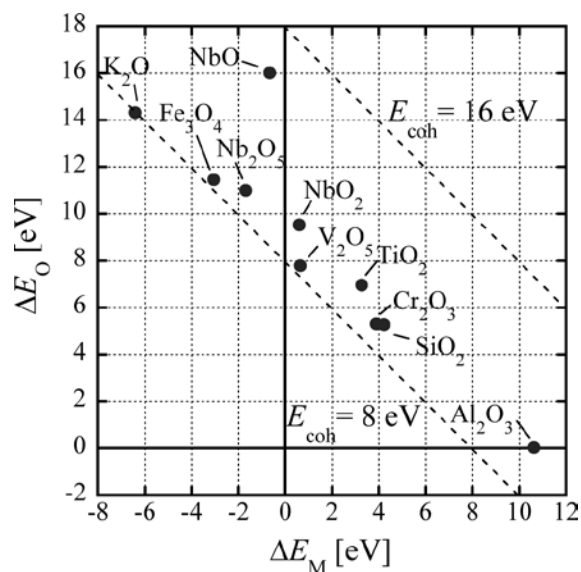


Fig.5 Atomization energy diagram for binary metal oxides.

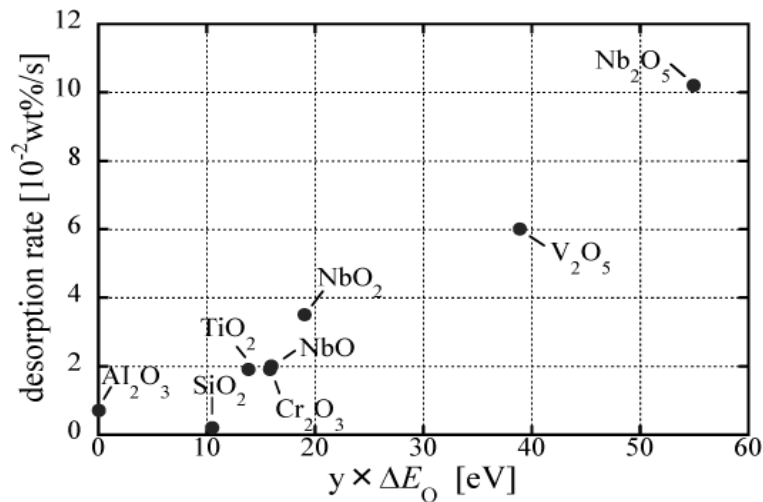


Fig.6 Correlation of the desorption rate of MgH_2 with $y \times \Delta E_O$ for metal oxides.

マグネシウム水素化物の脱水素化反応 ($MgH_2 \rightarrow Mg + H_2$) を促進させるため用いる種々の金属酸化物(例、 Nb_2O_5)の触媒効果を定量的に評価できる[22]。Fig.6に示すように、脱水素化反応速度は、金属酸化物 M_xO_y 中の y 個の酸化物イオン(O)が持つエネルギー ($y \times \Delta E_O$) と共に増加する。このエネルギー値が大きいくほど、 M_xO_y 中の酸化物イオン(O)と MgH_2 の水素(H)との間の O-H 相互作用が大きくなり、脱水素化が進むものと考えられる[23]。

(4) 各種金属化合物への応用

金属化合物は変化に富む物性を示す。強磁性、強誘電、超伝導、プロトン伝導、水素貯蔵、触媒活性など、その物性は実に多様である。例えば、ホウ化物では、超伝導を示す MgB_2 や超強力磁石の $Nd_2Fe_{14}B$ がある。最近、発見された鉄系超伝導体(例： $LaFeAsO_{1-x}F_x$)には、ヒ素、酸素、フッ素あるいはリン等の非金属元素が含まれている。

これらのことを踏まえて、最近、種々の金属化合物(ホウ化物、炭化物、窒化物、酸化物、フッ化物、リン化物、硫化物)、 M_mX_n と略記 ($M=Ti, Cr, Fe$ 等の3d遷移金属元素、 $X=B, C, N, O, F, P, S$ 等の非金属元素) に対して、「原子化エネルギー」による解析を始めている。化合物形成に対する各種非金属元素の役割を再評価し、非金属元素側から見た機能性材料の設計基盤を作ることを目指している。

21世紀においては、従来の試行錯誤の材料開発から脱却して、合理的な「ものづくり」が必要である。特に、電子レベルからの材料設計が、今後、ますます重要になる。

参考文献

- [1] M.Morinaga, J.B.Cohen and J.Faber Jr, X-Ray Diffraction Study of Zr(Ca,Y)O_{2-x}, I. The Average Structure, Acta Cryst. A35 (1979), 789-795.
- [2] M.Morinaga and J.B.Cohen, The Defect Structure of VO_x, II. Local Ionic Arrangements, Acta Cryst. A35 (1979), 975-989.
- [3] M.Morinaga, J.B.Cohen and J.Faber Jr, X-Ray Diffraction Study of Zr(Ca,Y)O_{2-x}, II. Local Ionic Arrangements, Acta Cryst. A36 (1980), 520-530.
- [4] M.Morinaga, H.Adachi and M.Tsukada, Electronic Structure and Phase Stability of ZrO₂, J. Phys. Chem. Solids, 44 (1983), 301-306.
- [5] M.Morinaga, N.Yukawa and H.Adachi, Alloying Effect on the Electronic Structure of Ni₃Al (γ'), J.Phys.Soc.Japan, 53 (1984), 653-663.
- [6] M.Morinaga, N.Yukawa, H.Ezaki and H.Adachi, Solid Solubilities in Transition-Metal Based FCC Alloys, Phil. Mag. A51 (1985), 223-246.
- [7] M.Morinaga, N.Yukawa, H.Ezaki and H.Adachi, New Phacomp and Its Applications to Alloy Design, Superalloys 1984, Eds. M. Gell et al., The Metallurgical Society of AIME, pp. 523-532 (1984).
- [8] M.Morinaga, Y.Murata and H.Yukawa, "Recent Progress in the New Phacomp Approach", in "Materials Design Approaches and Experiences", Eds. J.-C. Zhao et al., TMS (2001), pp.15-27.
- [9] M.Morinaga, Y.Murata and H.Yukawa, "Hartree-Fock-Slater Method for Materials Science", Eds. H. Adachi et al., Part II – 2, Alloy Design Based on the DV-X α Cluster Method, Springer (2005), pp.23-48.
- [10] M.Morinaga, Y.Murata and H.Yukawa, "Applied Computational Materials Modeling-Theory, Simulation and Experiment-", Eds. Bozzolo Guillermo et al., Chapter 8: Molecular Orbital Approach to Alloy Design, Springer (2007), pp. 255-306.
- [11] M.Morinaga, J.Saito, N.Yukawa and H.Adachi, Electronic Effect on the Ductility of Alloyed TiAl Compound, Acta Metall. Mater., 38 (1990), 25-29.
- [12] M.Morinaga, N.Yukawa, T.Maya, K.Sone and H.Adachi, Theoretical Design of Titanium Alloys, Proc. Sixth World Conference on Titanium, Cannes, France, June 6-9, 1988, Societe Francaise de Metallurgie, pp.1601-1606.

- [13] M.Morinaga, M.Kato, T.Kmimura, M.Fukumoto, I.Harada and K.Kubo, Theoretical Design of β -Type Titanium Alloys, Proc. 7th World Conference on Titanium, San Diego, California, June 29-July 2, 1992, TMS, pp.217-224.
- [14] D.Kuroda, M.Niinomi, M.Morinaga, Y.Kato and T.Yashiro, Design and Mechanical Properties of New Beta-Type Titanium Alloys for Implant Materials, Materials Science and Engineering, A243 (1998), 244-249.
- [15] T.Saito, T.Furuta, J.H. Hwang et al., Multifunctional Alloys Obtained via a Dislocation-free Plastic Deformation Mechanism, Science 300 (2003), 464-467.
- [16] M.Morinaga, S.Nasu, H.Adachi, J.Saito and N.Yukawa, Alloying Effect on the Electronic Structure of Aluminium, J. Phys.:Condens.Matter, 3 (1991), 6817-6828.
- [17] M.Morinaga, N.Yukawa and H.Adachi, Electronic Structure of Magnesium Containing Various Alloying Elements, J. Less-Common Metals, 141 (1988), 295-307.
- [18] M.Yoshino, M. Morinaga, A. Shimode, K. Okabayashi, H. Nakamatsu and R. Sekine, A Universal Relation between Electron Density Minima and Ionic Radii in Ceramics, Materials Transactions, 45 (2004), 1968-1972.
- [19] H.Nakai, Energy Density Analysis with Kohn-Sham Orbitals, Chem. Phys. Lett., 363 (2002), 73-79.
- [20] Y. Shinzato, H. Yukawa, M. Morinaga, T. Baba and H. Nakai, A Unified Approach to the Analysis of the Chemical Bond in Hydrides and Hydrocarbons, Acta Materialia, 55 (2007), 6673-6680.
- [21] Y.Shinzato, Y.Saito, M.Yoshino, H.Yukawa, M.Morinaga, T.Baba and H.Nakai, Energy Expression of the Chemical Bond between Atoms in Metal Oxides, J. Phys. Chem. Solids, 72 (2011), 853-861.
- [22] H.Hirate, Y.Saito, I.Nakaya, H.Sawai, Y.Shinzato, H.Yukawa, M.Morinaga, T.Baba and H.Nakai, Quantitative Approach to the Understanding of Catalytic Effect of Metal Oxides on the Desorption Reaction of MgH_2 , International Journal of Quantum Chemistry, 109 (2009), 2793-2800.
- [23] H.Hirate, H.Sawai, H.Yukawa and M.Morinaga, Role of O-H Bonding in Catalytic Activity of Nb_2O_5 during the Course of Dehydrogenation of MgH_2 , International Journal of Quantum Chemistry, 111 (2011), 2251-2257.

主要論文・著作物等

森永 正彦

(主な著書)

1. 足立裕彦、森永正彦、那須三郎、「金属材料の量子化学と量子合金設計」三共出版 (1997).
2. 森永正彦、「材料システム学」(分担) pp.324-344、共立出版 (1997).
3. 森永正彦、「水素吸蔵合金—基礎から最先端技術まで—」(分担) pp.314-326、エヌ・テイ・エス (1998).
4. 森永正彦、二宮隆二、「マグネシウム技術便覧」(分担) 合金設計、pp. 97-104、カロス出版 (2000).
5. 森永正彦、「高分子材料の最先端技術」尾崎邦宏監修、松浦一雄編著、(分担) pp. 43-55、工業調査会 (2007).
6. 森永正彦、古原忠、戸田裕之 編、「金属材料の加工と組織」共立出版 (2010).
7. M.Morinaga, Y.Murata and H.Yukawa, “Materials Design Approaches and Experiences”, Eds. J.-C. Zhao et al., Recent Progress in the New Phacom Approach”, TMS (2001), pp.15-27.
8. M.Morinaga, Y.Murata and H.Yukawa, “Hartree-Fock-Slater Method for Materials Science”, Eds. H. Adachi et al., Part II – 2, Alloy Design Based on the DV-X α Cluster Method, Springer (2005), pp.23-48.
9. M.Morinaga, Y.Murata and H.Yukawa, “Applied Computational Materials Modeling-Theory, Simulation and Experiment-”, Eds. Bozzolo Guillermo et al., Chapter 8: Molecular Orbital Approach to Alloy Design, Springer (2007), pp. 255-306.
10. M.Morishita, Y.Muramatsu, K.Ogasawara and M.Morinaga (Guest Editors), Proceedings from the Fifth International Workshop on DV-X α Materials Science and X-ray Spectroscopy, International Journal of Quantum Chemistry, vol.109, No.12 (2009).

著書数 16 冊

(主な論文)

1. M.Murakami, O.Kawano, Y.Murakami and M.Morinaga, On the Determination of the Spinodal Temperature in an Aluminium 6.8 at.% Zinc Alloy, Acta Metall., 17 (1969),1517-1521.
2. M.Hayakawa,M.Morinaga and J.B.Cohen, The Defect Structure of Transition Metal Monoxides, Battelle Conf. on Defects and Transport in Oxides, 1974, (eds. M. S. Seltzer and R. I. Jaffee), Plenum Press, pp.177-199.
3. M.Morinaga and J.B.Cohen, Determination by X-ray Diffraction of the Interstitial Concentration of Vanadium Ions in Disordered VO_x, Acta Cryst. A32 (1976), 387-395.
4. M.Morinaga and J.B.Cohen, The Defect Structure of VO_x, I. The Ordered Phase, VO_{1.30}, Acta Cryst. A35 (1979), 745-756.
5. M.Morinaga, J.B.Cohen and J.Faber Jr, X-Ray Diffraction Study of Zr(Ca,Y)O_{2-x}, I. The Average Structure, Acta Cryst. A35 (1979), 789-795.
6. M.Morinaga and J.B.Cohen, The Defect Structure of VO_x, II. Local Ionic Arrangements, Acta Cryst. A35 (1979), 975-989.

7. M.Morinaga, J.B.Cohen and J.Faber Jr, X-Ray Diffraction Study of $Zr(Ca,Y)O_{2-x}$, II. Local Ionic Arrangements, *Acta Cryst. A*36 (1980), 520-530.
8. M.Morinaga, H.Adachi and M.Tsukada, Electronic Structure and Phase Stability of ZrO_2 , *J. Phys. Chem. Solids*, 44 (1983), 301-306.
9. M.Morinaga, N.Yukawa and H.Adachi, Alloying Effect on the Electronic Structure of Ni_3Al (γ'), *J. Phys. Soc. Japan*, 53 (1984), 653-663.
10. M.Morinaga, N.Yukawa, H.Ezaki and H.Adachi, New Phacomp and Its Applications to Alloy Design, *Superalloys 1984*, Eds. M. Gell et al., The Metallurgical Society of AIME, pp. 523-532 (1984).
11. M.Morinaga, N.Yukawa, H.Ezaki and H.Adachi, Solid Solubilities in Transition-Metal Based FCC Alloys, *Phil. Mag. A*51 (1985), 223-246.
12. M.Morinaga, N.Yukawa and H.Adachi, Alloying Effect on the Electronic Structure of BCC Fe, *J.Phys. F*, 15 (1985), 1071-1084.
13. H.Ezaki, M.Morinaga, N.Yukawa and H.Adachi, Prediction of the Occurrence of the σ Phase in Fe-Cr-Ni Alloys, *Phil. Mag. A*53 (1986), 709-716.
14. M.Morinaga, K.Ohshima, J.Harada, P.Georgopoulos and J.B.Cohen, Report on a Round-Robin Study of Diffuse X-ray Scattering, *J.Appl.Cryst.*, 19 (1986),188-194.
15. M.Morinaga, K.Ohshima, J.Harada and S.Otani, X-ray Determination of the Atomic Displacements in $NbC_{0.72}$, *J.Appl. Cryst.*, 19 (1986), 417-419.
16. M.Morinaga, N.Yukawa, H.Adachi and T.Mura, Electronic Stability Effect on Local Strain in Martensite, *J. Phys. F: Met. Phys.*, 17 (1987), 2147-2162.
17. M.Morinaga, N.Yukawa, T.Maya, K.Sone and H.Adachi, Theoretical Design of Titanium Alloys, *Proc. Sixth World Conference on Titanium*, Cannes, France, June 6-9, 1988, Societe Francaise de Metallurgie, pp.1601-1606.
18. M.Morinaga, K.Sone, T.Kamimura, K.Ohtaka and N.Yukawa, X-ray Determination of Static Displacements of Atoms in Alloyed Ni_3Al , *J. Appl. Cryst.*, 21 (1988),41-46.
19. M.Morinaga, N.Yukawa and H.Adachi, Electronic Structure of Magnesium Containing Various Alloying Elements, *J. Less-Common Metals*, 141 (1988), 295-307.
20. K.Ohshima, J.Harada, M.Morinaga, P.Georgopoulos and J.B.Cohen, Distortion-Induced Scattering due to Vacancies in $NbC_{0.72}$, *Acta Cryst. A*44 (1988), 167-176.
21. H.Ezaki, M.Morinaga and N.Yukawa, Observation of Omega and H.C.P. Phases in a Quenched Cr-30at.% Ni Alloys, *Phil. Mag. A*57 (1988), 651-659.
22. M.Morinaga, N.Yukawa, H.Adachi and T.Mura, Electronic State of Interstitial Atoms (C,N,O) in FCC Fe, *J. Phys. F: Met. Phys.*, 18 (1988), 923-934.
23. M.Morinaga, J.Saito, N.Yukawa and H.Adachi, Electronic Effect on the Ductility of Alloyed TiAl Compound, *Acta Metall. Mater.*, 38 (1990), 25-29.
24. H.Ezaki, M.Morinaga, M.Kato and N.Yukawa, Electronic and Atomic-Size Effects on the Omega Phase Formation in Transition Metal Based B.C.C. Alloys, *Acta Metall. Mater.*, 39 (1991), 1755-1761.

25. M.Morinaga, S.Nasu, H.Adachi, J.Saito and N.Yukawa, Alloying Effect on the Electronic Structure of Aluminium, *J. Phys.:Condens.Matter*, 3 (1991), 6817-6828.
26. M.Morinaga, M.Kato, T.Kmimura, M.Fukumoto, I.Harada and K.Kubo, Theoretical Design of β -Type Titanium Alloys, *Proc. 7th World Conference on Titanium*, San Diego, California, June 29-July 2, 1992, TMS, pp.217-224.
27. M.Morinaga and S.Kamado, An Electronic Approach to the Prediction for the Mechanical Properties of Aluminium Alloys, *Modelling and Simul. Mater. Sci. and Eng.*, 1 (1993), 151-164.
28. H.Ezaki, M.Morinaga and S.Watanabe, Hydrogen Overpotential for Transition Metals and Alloys, and Its Interpretation Using an Electronic Model, *Electrochimica Acta*, 38 (1993), 557-564.
29. J.Kyobu, Y.Murata and M.Morinaga, Computer Simulation of Local Atomic Displacements in Alloys - Application to G.P. Zones in Al-Cu, *J. Appl. Cryst.*, 27 (1994), 772-781.
30. H.Ezaki, M.Morinaga and S.Watanabe, Hydrogen Overpotential for Intermetallic Compounds, TiAl, and NiAl, Containing 3d Transition Metals, *Electrochimica Acta*, 39(11/12) (1994), 1769-1773.
31. Y.Takahashi, H.Yukawa and M.Morinaga, Alloying Effects on the Electronic Structure of Mg₂Ni Intermetallic Hydride, *J. Alloys and Compounds*, 242 (1996), 98-107.
32. Y.Harada, M.Morinaga, J.Saito and Y.Takagi, New Crystal Structure Maps for Intermetallic Compounds, *J.Phys.:Condens. Matter*, 9 (1997), 8011-8030.
33. H.Yukawa and M.Morinaga, The Nature of the Chemical Bond in Hydrogen Storage Compounds, *Advances in Quantum Chemistry*, 29 (1997), 83-108.
34. D.Kuroda, M.Niinomi, M.Morinaga, Y.Kato and T.Yashiro, Design and Mechanical Properties of New Beta-Type Titanium Alloys for Implant Materials, *Materials Science and Engineering*, A243 (1998), 244-249.
35. H.Yukawa, Y.Takahashi and M.Morinaga, Electronic Structures of Hydrogen Storage Compound, TiFe, *Computational Material Science*, 14 (1999), 291-294.
36. K.Nakatsuka, M.Yoshino, H.Yukawa and M.Morinaga, Roles of the Hydride Forming and Non-forming Elements in Hydrogen Storage Alloys, *J. Alloys and Compounds*, 293-295 (1999), 222-226.
37. H.Yukawa, T.Matsumura and M.Morinaga, Chemical Bond State and Hydride Stability of Hydrogen Storage Alloys, *J. Alloys and Compound*, 293-295 (1999), 227-230.
38. Y.Liu, T.Fujiwara, H.Yukawa and M.Morinaga, Lithium Intercalation and Alloying Effects on Electronic Structures of Spinel Lithium Manganese Oxides, *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 62 (2000), 81-87.
39. M.Yoshino, N.Nakatsuka, H.Yukawa and M.Morinaga, Local Electronic Structures around Hydrogen and Acceptor Ions in Perovskite-type Oxide, SrZrO₃ *Solid State Ionics*, 127 (2000), 109-123.
40. Y.Liu, T.Fujiwara, H.Yukawa and M.Morinaga, Lithium Intercalation and Alloying Effects on Electronic Structures of Spinel Lithium Manganese Oxides, *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 62 (2000), 81-87.
41. M.Yoshino, N.Nakatsuka, H.Yukawa and M.Morinaga, Local Electronic Structures around Hydrogen and Acceptor Ions in Perovskite-type Oxide, SrZrO₃ *Solid State Ionics*, 127 (2000), 109-123.
42. H.Yukawa, M.Takagi, A.Teshima and M.Morinaga, Alloying Effects on the Stability of Vanadium Hydrides, *J.Alloys and Compounds*, 330 (2002),105-109.

43. T.Nambu, H.Ezaki, M.Takagi, H.Yukawa and M.Morinaga, Correlation between Electronic Structure and Phase Stability of Metal Hydrides, *J. Alloys and Compounds*, 330 (2002),318-322.
44. M.Yoshino, Yi Liu, K.Tatsumi, I.Tanaka, M. Morinaga and H. Adachi, Local Geometries and Energetics of Hydrogen in Acceptor-doped SrZrO₃, *Solid State Ionics*, 162-163 (2003), 127-133.
45. Yi Liu, H.Yukawa and M.Morinaga, Energetics and Chemical Bonding of Lithium Absorbed Carbon Nanotubes, *Advances in Quantum Chemistry*, 42 (2003), 315-330.
46. H. Yukawa, S. Ito, D. Yamashita and M. Morinaga, Local Electronic Structures of Hydrogen and Phase Stability of Vanadium Hydride, V₂H, *Advances in Quantum Chemistry*, 42 (2003), 263-273.
47. M.Yoshino, M. Morinaga, A. Shimode, K. Okabayashi, H. Nakamatsu and R. Sekine, A Universal Relation between Electron Density Minima and Ionic Radii in Ceramics, *Materials Transactions*, 45 (2004), 1968-1972.
48. M.Yoshino, Yi Liu, K.Tatsumi, I.Tanaka, M. Morinaga and H. Adachi, Local Geometries and Energetics of Hydrogen in Acceptor-doped SrZrO₃, *Solid State Ionics*, 162-163(2003), 127-133.
49. R.Hashizume, A.Yoshinari, T.Kiyono, Y.Murata and M.Morinaga, Development of Ni-based Single Crystal Superalloys for Power-Generation Gas Turbines, *Superalloys 2004*, TMS, (2004), pp.53-62.
50. M. Yoshino, Y. Shinzato, M. Morinaga, Energetics of Native Defects in Al₂O₃ and SiO₂, *Materials Science Forum (Proceedings of the 3rd International Symposium on Designing, Processing and Properties of Advanced Engineering Materials (ISAEM-2003))* (Korea, November 2003) , 449-452 (2004), pp.713-716.
51. Z.Zhou, X. Gao, J.Yan, D.Song, M.Morinaga, A First-principles Study of Lithium Absorption in Boron- or Nitrogen-doped Single-walled Carbon Nanotubes, *Carbon*, 42 (2004), 2677-2682.
52. Z.Zhou, X. Gao, J.Yan, D.Song and M.Morinaga, Enhanced Lithium Absorption in Single-Walled Carbon Nanotubes by Boron Doping, *J.Phys. Chem.B*, 108 (2004), 9023-9026.
53. M.Yoshino, K.Komiya, Y.Takahashi, Y.Shinzato, H.Yukawa and M.Morinaga, Nature of the Chemical Bond in Complex Hydrides, NaAlH₄, LiAlH₄, LiBH₄ and LiNH₂, *Journal of Alloys and Compounds*, 404-406 (2005), 185-190.
54. Z.Zhou, J.Zhao, X.Gao, Z.Chen, J.Yan, Paul von Rague Schleyer and M.Morinaga, Do Composite Single-Walled Nanotubes Have Enhanced Capability for Lithium Storage, *Chem. Mater.*, 17 (2005), 992-1000.
55. X. Shi, M.Yoshino and M.Morinaga, First-principles Study of Protonic Conduction in In-doped AZrO₃ (A=Ca, Sr, Ba), *Solid State Ionics*, 176 (2005), 1091-1096.
56. Z.Zhou, T.Komori, M.Yoshino, M.Morinaga, N.Matsunami, A.Koizumi and Y.Takeda, Enhanced 1.54μm Photoemission from Er-containing ZnO through Nitrogen Doping, *Applied Physics Letters*. 86 (2005), 041107.
57. Z.Zhou, T.Komori, T.Ayukawa, H.Yukawa, M.Morinaga, A.Koizumi and Y.Takeda, Li- and Er-codoped ZnO with Enhanced 1.54μm Photoemission, *Applied Physics Letters*, 87(2005), 091109.
58. Mohamed Abdel-Hady, K.Hinoshita and M.Morinaga, General Approach to Phase Stability and Elastic Properties of β-type Ti-alloys Using Electronic Parameters, *Scripta Materialia* 55 (2006), 477-480.

59. K. Komiya, N. Morisaku, Y. Shinzato, K. Ikeda, S. Orimo, Y. Ohki, K. Tatsumi, H. Yukawa and M. Morinaga, Synthesis and dehydrogenation of $M(\text{AlH}_4)_2$ ($M = \text{Mg}, \text{Ca}$), *J. Alloys and Compounds*, 446-447 (2007), 237-141.
60. Y. Shinzato, H. Yukawa, M. Morinaga, T. Baba and H. Nakai, A Unified Approach to the Analysis of the Chemical Bond in Hydrides and Hydrocarbons, *Acta Materialia*, 55 (2007), 6673-6680.
61. Y. Shinzato, H. Yukawa, M. Morinaga, T. Baba and H. Nakai, New Expression of the Chemical Bond in Hydrides Using Atomization Energies, *Advances in Quantum Chemistry*, 54 (2008), 145-160.
62. Y. Shinzato, K. Komiya, Y. Takahashi, H. Yukawa, M. Morinaga and S. Orimo, Characteristics of Chemical Bond in Perovskite-Type Hydrides, *Advances in Quantum Chemistry*, 54 (2008), 245-253.
63. H. Hirate, Y. Saito, I. Nakaya, H. Sawai, Y. Shinzato, H. Yukawa, M. Morinaga, T. Baba and H. Nakai, Quantitative Approach to the Understanding of Catalytic Effect of Metal Oxides on the Desorption Reaction of MgH_2 , *International Journal of Quantum Chemistry*, 109 (2009), 2793-2800.
64. H. Yukawa, G.X. Zhang, N. Watanabe, M. Morinaga, T. Nambu and Y. Matsumoto, Analysis of Hydrogen Diffusion Coefficient during Hydrogen Permeation through Niobium and Its Alloys, *J. Alloys and Compounds*, 476 (2009), 102-106.
65. H. Hirate, Y. Saito, I. Nakaya, I. Nakaya, H. Sawai, H. Yukawa, M. Morinaga and H. Nakai, Quantitative Evaluation of Catalytic Effect of Metal Chlorides on the Desorption Reaction of NaAlH_4 , *International Journal of Quantum Chemistry*, 111 (2010), 950-960.
66. H. Hirate, H. Sawai, Y. Saito, H. Yukawa, M. Morinaga and H. Nakai, Unusual Energy Balance Between Atoms in Postperovskite MgSiO_3 , *J. Am. Ceram. Soc.*, 93 (2010), 3449-3454.
67. H. Hirate, H. Sawai, H. Yukawa and M. Morinaga, Role of O-H Bonding in Catalytic Activity of Nb_2O_5 during the Course of Dehydrogenation of MgH_2 , *International Journal of Quantum Chemistry*, 111 (2011), 2251-2257.
68. Y. Shinzato, Y. Saito, M. Yoshino, H. Yukawa, M. Morinaga, T. Baba and H. Nakai, Energy Expression of the Chemical Bond between Atoms in Metal Oxides, *J. Phys. Chem. Solids*, 72 (2011), 853-861.

論文数 265 編

(主な特許)

1. フェライト系鉄基合金の製造方法及びフェライト系耐熱鋼 (US Patent No. 5, 888, 318)
2. フェライト系耐熱鋼 (US Patent No. 6, 174, 385、EP 0778356)
3. 強度、耐食性及び耐酸化性に優れたニッケル基超合金 (特許第 4266196 号)
4. 5A族金属系水素分離膜を使用した水素分離システム (特願 2010-007613)
5. 水素分離膜及び水素分離法 (PCT/JP2010/065788)
6. 水素分離膜 (PCT/JP2011/070368)

特許件数 30 件