

# 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

森永 正彦 (名古屋大学 工学研究科 教授)

## 【概要】

電子密度分布に対して物質共通のユニバーサルな関係を見出している。すなわち、最近接の原子間の電子密度分布が最小値  $\rho_{\min}$  をとる位置を  $r_{\min}$  (原子半径またはイオン半径) と定義する。このとき、 $\rho_{\min}/Z^3$  と  $2(Z/n)r_{\min}$  の間には、 $\log [\rho_{\min}/Z^3] = -5.29 \log [1.01 + 0.285 \times 2(Z/n)r_{\min}]$  の関係が普遍的に成立している ( $Z$ : 原子番号、 $n$ : 主量子数)。本研究では、この発見をもとに水素材料科学の新しいパラダイムを構築する。

そのために、まず 2 原子分子を含む簡単な 2 成分系の水素化物の電子構造を計算し、水素-金属 (又は非金属) 原子間の結合エネルギーと、 $\rho_{\min}/Z^3$ 、 $2(Z/n)r_{\min}$  の間の関係式を導出する。この基本式を用いて、3 成分系の水素貯蔵材料の中の水素-金属 (又は非金属) 原子間の結合エネルギーを求め、水素化物の中の水素の結合の強さの基本ルールを導出する。さらに、水素の結合を、ラマン分光スペクトルの原子振動の実験から明らかにし、化学結合の立場から水素材料科学の基礎を固める。それらの基礎の上に、実用上重要な高容量水素貯蔵材料の設計のための「電子設計マップ」を作成し、量子材料設計プラットフォームを構築する。

## 【期待される成果】

本研究では、水素化物の安定性を支配している水素-最近接原子間の凝集機構を決定している因子の簡明な理解や表現を求める。従来の共有結合やイオン結合のような定性的な表現ではなく、電子密度分布に関する発見をもとに、水素の結合の強さを定量的に求め、広範な水素化物を同じ尺度で評価する「ものさし」を与える。また、実験データのうえで水素-最近接原子間の結合の強さが反映されるラマン分光スペクトルを調べる。そのうえで、材料設計のための電子設計マップを創り、今後の水素貯蔵材料の開発方向を指し示す。本研究は、従来の試行錯誤の水素研究から離れて、合理的な開発基盤を提供するため波及効果は大きい。

## 【関連の深い論文・著書】

M. Yoshino, M. Morinaga et al., "A Universal Relation between Electron Density Minima and Ionic Radii in Ceramics", *Materials Transactions*, 45 (2004), 1968-1972.

【研究期間】 平成 17 ~ 21 年度

【研究経費】 89,500,000 円

【ホームページ】 <http://sigma.numse.nagoya-u.ac.jp/>