



研究課題名 高密度水素化物の材料科学
—水素の結合自由度を利用したハイドライド・ギャップの克服

東北大学・原子分子材料科学高等研究機構(WPI-AIMR)・教授 おりも しんいち
折茂 慎一

研究分野： 材料工学、材料化学

キーワード： エネルギー材料、無機材料創成・合成プロセス、原子・電子構造評価

【研究の背景・目的】

水素の高密度化が困難なために「ハイドライド・ギャップ」とよばれてきた $3d$ 遷移金属群。これらが主相となる新たな水素化物を合成して、量子ビームでの解析やデータベースの構築、そしてエネルギー関連機能の強化などにより、「高密度水素化物の材料科学」を飛躍的に発展させる。

具体的には、“水素の結合自由度”を反映した水素ダイアグラム (図1) や計算材料科学に基づく特性予測、水素流体での高圧合成、多様な量子ビームによる水素化反応過程や原子・電子構造の解析、などの要素研究を融合して、従来技術では合成できないペロブスカイト・錯体水素化物を系統的に探索する。さらに水素化物中の水素やリチウムのダイナミクス測定もふまえて、高密度水素貯蔵材料や高速イオン伝導材料などとしての組成最適化を進める。

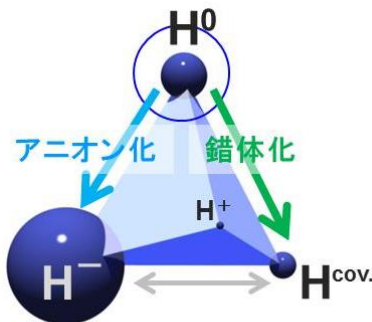


図1 水素ダイアグラムの概念図

【研究の方法】

1. 水素の結合自由度の制御:

水素のアニオン化 (H^-) によるペロブスカイト水素化物や錯体化 ($H^{cov.}$) による錯体水素化物の合成を目指して、理論・実験両面から水素の結合自由度の解析を進め、出発物質や候補水素化物を選定する。

2. ハイドライド・ギャップの克服:

電子ドナー添加技術や高圧水素化技術を確立して、鉄やニッケルなどを中心とした $3d$ 遷移金属群を含む高密度水素化物を広く探索・合成する。

3. エネルギー関連機能の強化:

出発物質や合成条件、水素化反応過程や原子・電子構造の解析結果などを統合したデータベースを構築することで、水素貯蔵やイオン伝導などの機能強化に向けた開発指針の解明と組成最適化を進める。

これらの研究の方法や展開を図2にまとめる。

水素の高密度化が困難な $3d$ 遷移金属群

1. 水素の結合自由度の制御

水素のアニオン化/錯体化
第一原理計算での予測
多様な合成技術

2. ハイドライド・ギャップの克服

第一原理計算での予測
多様な合成技術
高密度化の達成

3. エネルギー関連機能の強化

高密度水素貯蔵→次世代水素利用技術
高速イオン伝導→革新電池技術
水素化物超伝導→新研究領域開拓

「高密度水素化物の材料科学」

図2 研究の方法や展開

【期待される成果と意義】

水素化物に関わる従来研究を水素の結合自由度の観点で抜本的に見直すことで、元素戦略上も極めて重要な $3d$ 遷移金属群 (およびそれらの水素化物) の社会的・学術的価値を格段に高めることができる。これにより、燃料電池や二次電池などに代表されるエネルギー関連産業の活性化や国際競争力の向上、さらに水素が関与する超伝導や量子性などの未解明の学術課題の解決と新たな研究領域の開拓に資する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- M. Matsuo et al., “Experimental studies of complex hydride YMn_2H_6 on formation kinetics and X-ray absorption fine structure analyses”, Appl. Phys. Lett., 100 (2012) 044101.
- S. Takagi et al., “Theoretical investigation of Fe substitution for Mn in complex hydride YMn_2H_6 ”, Appl. Phys. Lett., 100 (2012) 021908.

【研究期間と研究経費】

平成 25 年度—29 年度
158,300 千円

【ホームページ等】

<http://www.hydrogen.imr.tohoku.ac.jp/>
orimo@imr.tohoku.ac.jp