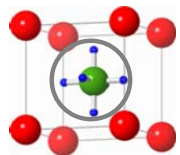


研究開発の概要

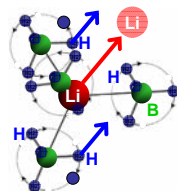
根源的探求

水素の存在状態間の“遷移”や“混在性”など



水素化物に隠された物性と機能性

「たくさんの水素を安全に貯める性質」、
「水素やリチウムなどのイオンを速く動かす性質」など

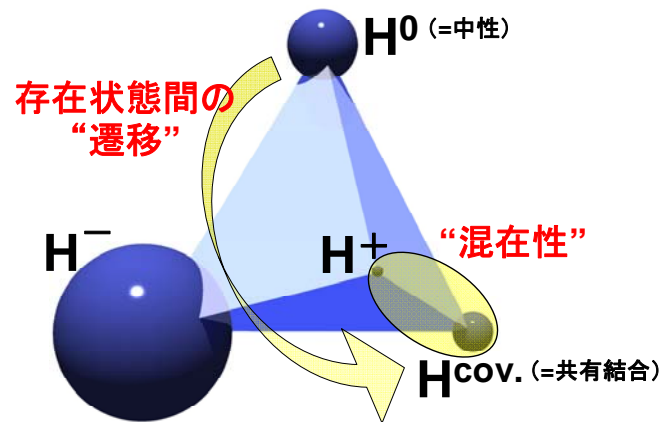


エネルギーデバイス実証

- ① 高密度水素貯蔵材料 ② 高エネルギー密度蓄電技術 ③ 水素化物超伝導

燃料電池や環境対応車の社会普及、次世代蓄電・送電システムの技術革新、
材料開発競争力の強化と新たなシーズや雇用の創出...などの波及効果

水素ダイアグラム (水素の地図)



多様な存在状態を
体系的・一元的に捉える

水素化物	構造	水素の存在状態
金属水素化物 (例. $LaNi_5H_6$)		H^0 (=中性)
錯体水素化物 (例. $LiBH_4$)		$H^{cov.}$ (=共有結合)
ペロブスカイト水素化物 (例. $NaMgH_3$)		H^-

水素化物中の水素は多様な存在状態を示す

IMR 東北大学金属材料研究所
Institute for Materials Research, Tohoku University

水素化物に関する高度な合成・評価解析技術

高純度水素昇圧

マイクロ波照射

溶融-自己組織化

メタセンス反応

アーク溶融

独自の合成技術

顕微ラマン分光

各種熱分析

融合

ラボでの“その場”分析

高輝度X線回折測定
(SPring-8)

中性子回折・散乱測定
(J-PARC)

<共同研究>

金属水素化物

ペロブスカイト水素化物

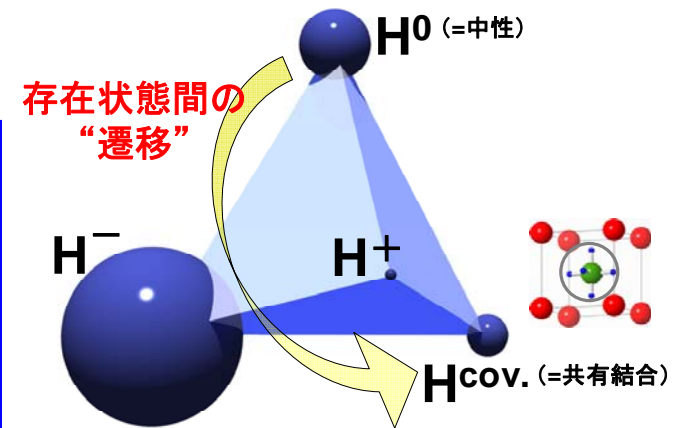
錯体水素化物

ナノ構造～原子構造～電子構造の解析

水素との結合性の自由度が期待できるとともにユビキタス(ありふれた)元素でもあるマンガンに注目して、マンガンを含む金属間化合物を溶製、その後の水素処理によって水素化物を合成しました。そして水素圧力や温度などの外場により誘起される「水素の存在状態の変化」を、粉末 X 線回折測定や X 線吸収微細構造測定、ラマン分光測定や水素定量分析などに基づいて実験的に評価解析するとともに、計算材料科学に基づく熱力学的な物性値の予測なども進めました。

その結果、現在までに以下の研究成果を得ました。

1) マンガンを含む水素化物に対して外場としての水素圧力を適切に制御することで、水素の存在状態を中性原子に近い状態から共有結合状態(水素が高密度化している状態)に変化させることに成功した。これは右図の“水素ダイアグラム”における H^0 から $H^{cov.}$ への変化に対応する。



2) 特に温度が 423K (150°C) の場合には、水素圧力が 50 気圧以下でもこの変化が十分に進行した。この水素圧力は従来報告されていた 1700 気圧と比較すると 1/30 以下と非常に低く、水素化物中の水素の高密度化(すなわち、燃料電池用水素貯蔵材料における水素量の増大やそれにとまなう燃料電池起動時間の向上)を実現するための新たな材料開発指針としてきわめて重要である。

3) 第一原理計算に基づく反応エンタルピーなどの物性値の予測によって、さらに低い水素圧力でもこの変化が進行することがわかった。

現在、マンガン以外の他のユビキタス元素を含む多くの水素化物を対象を拡張して、「水素の存在状態の変化」に関する熱力学的・速度論的な解析や支配因子の解明などを進めています。