H25.3.12 化学工業日報（9面 エレクトロニクス）

ペロブスカイト型水素化物
東北大など合成に成功

東北大学金属材料研究所、東北大学原子分子材料科学高等研究機構、日本原子力研究開発機構は、ペロブスカイト型水素化物である水素化リチウムニッケル（$LiNiH_3$）の合成に成功した。固溶体水素化物（$Li_yNi_{1-y}H$）が前駆体となり、3段階的で進む反応過程も解明した。ペロブスカイト型水素化物は機能性に富む材料として知られるが、形成過程が不明で新しい化合物の開発が停滞していた。新しい化合物開発の指針になる成果とみられ、今後、水素貯蔵や超伝導などエネルギー材料開発が加速することが期待される。

ペロブスカイト化合物は、超伝導、強誘電性、イオン伝導など多様な物性・機能性を示し、酸化物は圧電素子などへの利用も進んでいる。酸素原子を水素原子で置き換えた水素化物は、これに加えて水素貯蔵特性などもあり、より多様な物性、機能を示す材料として期待されているが、これまで合成に成功した水素化物は限られていた。

同グループでは今回、第一原理計算法により求めた予測に基づいて$LiNiH_3$の合成に成功した。LiHとNi金属の混合粉体を高温高圧水素流体によって水素化する手法により焼結体を得ることができた。

高輝度放射光X線回折測定により、まずニッケル水素化物（NiH）が形成され、次に水素化リチウム（LiH）とNiHの固溶体$Li_yNi_{1-y}H$ができることが分かった。最後に固溶体が水素吸収し$LiNiH_3$となる。

得られた化合物は、従来のメカノケミカル法（原料を金属製ボールを容器中で混ぜて合成する手法）と比べて結晶性がよく、純度も高かった。

形成過程が解明したことで、今後固溶体水素化物ができる元素の組み合わせがペロブスカイト型水素化物の合成につながるとみられる。同グループでも新化合物の開発を進めるとともに、$LiNiH_3$の水素貯蔵や超伝導などの機能性の評価も行っていく予定。