

力機 原子 原と 大開 北究 東研

# ペロブスカイト型水素化物

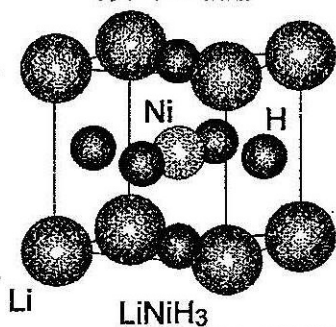
## 形成機構初めて解明

東北大学金属材料研究所の研究グループは、同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との共同研究により、ペロブスカイト型水素化物の形成機構を、新規開発した結晶性に優れ、純度の高い形成手法と、大型放射光施設SPRING-8の高輝度放射光X線を用いた解析により世界で初めて解明した。

ペロブスカイト構造は化

学式  $AB_3X_3$  で表される化合物で、異種金属の正イオンA、Bと酸素原子などの負イオンXがイオン結合して結晶が構成される。結晶構造は、立方体の各頂点に金属Aイオン、中心に金属Bイオン、各面の中心に負

得られた結晶



(出所：東北大学)

イオンが配置。ペロブスカイト型酸化物は結晶構造がシンプルながら、多様な電氣的・磁氣的性質を

示すことから、物性・機能性の宝庫と呼ばれており、圧電性を示すチタン酸バリウムや超伝導特性を示す酸化物高温超電導体など多種合成されている。

負イオンの一部、あるいは全部を水素原子イオンにすることによる、物性・機能性に富んだペロブスカイト型水素化物の合成の試みが最近行われている。

### 多様な物性・機能性

このペロブスカイト型水素化物は、それ自体が持つ水素貯蔵材料の機能に加えて、多様な物性・機能性を示すものと期待されている。

研究では、理論計算により、新規で安定なペロブスカイト型水素化物の探索を行い、新しい合成手法の開発と、高輝度放射光X線回折測定によるペロブスカイト型水素化物の形成機構の解明実験を実施した。

実験では、水素化リチウムとニッケルが水素化反応によってペロブスカイト型水素化物に変化する過程を高輝度放射光X線回折測定によって観測した。形成過程は、ペロブスカイト型水素化物形成が完了するまでの250分間にわたって観測し、プロファイルの解析から3段階で進む形成機構が解明された。