

ペロブスカイト型水素化物の形成機構を解明

東北大・原子力機構が世界初

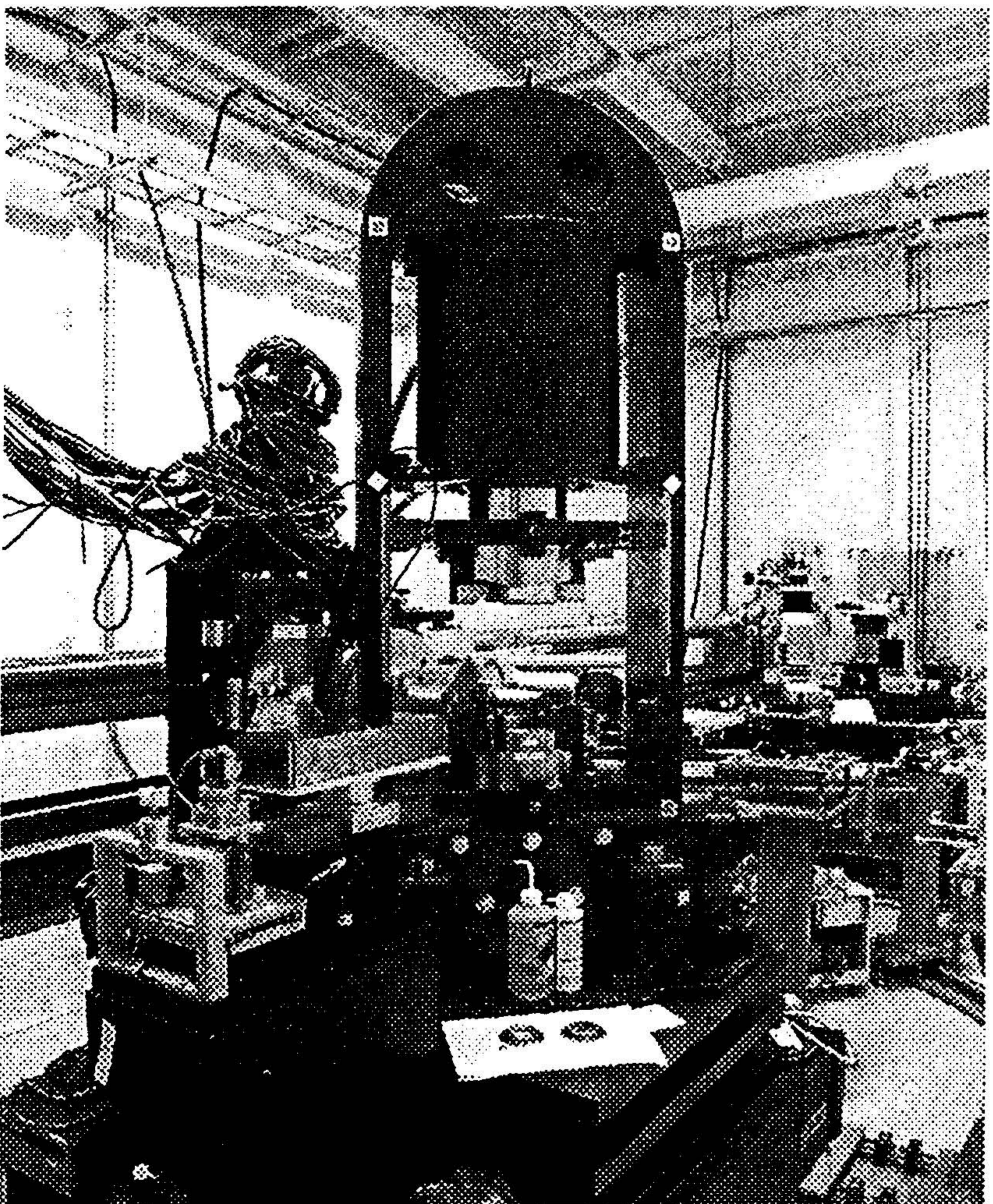
酸化物に代表されるペロブスカイト構造を持つ化合物では、超伝導・強誘電性・イオン伝導などの重要な性質が知られている。ペロブスカイト型水素化物においても同様の性質の発現が期待される一方、その形成機構はこれまで未解明で、選定に労力を費やしていた。東北大金属材料研究所(東北大金研)、同原子分子材料科学高等研究機構、日本原子力研究開発機

構の研究グループは、ペロブスカイト型水素化物の形成機構を『Springer』の高輝度放射光X線を

用いて世界で初めて解明することに成功した。研究グループは、第一原理計算(原子核と電子それぞれの間で働く相互作用から量子力学に基づいて物質の結晶構造や電子状態を理論計算する手法)での予測、高圧技術での材料合成、放射光などの量子ビームでの測定などの高度な融合によって、新たなペロブスカイト型水素化物(LiNiH₃)を合成した。その合成過程は、水素化リチウム(LiH)とニッケル(Ni)金属が水酸化反応によって直接ペロブスカイト型水素化物が形成されるのではなく、3段階のステップで進むことが明らかとなった。まずステップIで、Niの水素化による水素化物NiHを形成、ステップIIによりLiHとNiHの固溶体(Li_{1-y}Ni_yH)を形成、そしてステップIIIで固溶体の水素吸収によりLiNiH₃の形成となる。

研究グループの一人、東北大金研の折茂慎一教授の話「形成機構の一端が解明されたことで、元素選定の指針を得ることができました。今後、ペロブスカイト型水素化物の材料バリエーションを広げ

るとともに、LiNiH₃に特に期待される様々なエネルギー関連の性質(例えば、リチウムイオン伝導や水素貯蔵)などの評価も進めたいと考えます」。



ペロブスカイト型水素化物LiNiH₃の形成過程の測定に使用された放射光X線回折装置