

クロムに7つの水素を結合 ハイドライド・ギャップ克服

—東北大などの研究グループが新たな水素化物合成—

東北大学金属材料研究所の高木成幸助教、同大原子分子材料科学高等研究機構(AIMR)の折茂慎一教授らの研究グループは、日本原子力研究開発機構、高エネルギー加速器研究機構、豊田中央研究所と共同で、

水素と結合しにくいと考えられてきたクロム(Cr)に7つの水素が結合した水素化物の合成に成功した。水素を高密度に含む水素化物は、水素貯蔵材料や超伝導材料などエネルギー関連材料としての応用が期待されており、世界各地で材料探索研究が進められている。そうした背景のもと、研究グループは、従来とは一線を画す新たな材料開発を目指し、水素と極めて結合しにくいことから見落とされてきたクロムに着目。理論と実験の両面から、クロムが他の一般的な金属元素よりも多くの水素と結合することを実証した。具体的には、第一計算原理(経験的パラメータや実験データを一切用いない理論計算。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的に基づいて物質の性質を計算する)を用い、まずはクロムと水素が結合する可能性を詳細に調べた。

その結果、クロムの周りに7つの水素が双五角錐状(2つの合同な五角錐を底面同士で貼り合わせた形状をもつ十面体。7つの頂点と10枚の正三角形面から構成される)に配置したとき、クロムと水素が強く結合することが分かった。また、これにより形成されるCrH₇イオンともう1つの水素原子が3つのマグネシウム(Mg)原子から電子を受け取ることで、錯体水素化物Mg₃CrH₇を形成することが明らかとなった。

こうした理論予測を受け、金属クロムとマグネシウム水素化物との混合粉末を5万気圧700℃の水素流体中に4時間保持し、予測された錯体水素化物の合成を試みたところ、クロムに7つの水素が結合したCrH₇イオンの形成を実験的に確認することができた。

高木助教の話「今回の成果によって元素選定の選択肢が広がるとともに、従来よりも水素を高密度に含む材料の設計指針が得られました。今後はさらに水素を高密度に含む材料の開発、ならびにそれらのエネルギー関連の物性評価を進めていく予定です」