

第一原理計算と量子ビームによる 高密度水素化物探索

Exploration of Hydrogen-Rich Materials Utilizing First-Principles Calculations and Quantum Beams

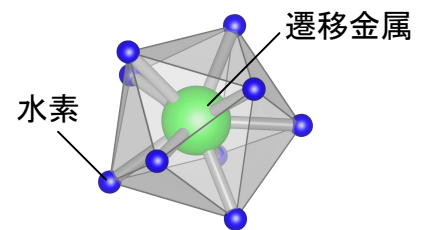
高木成幸¹、齋藤寛之²、池田一貴³、大友季哉³、折茂慎一^{1, 4}

1 東北大金研、2 原子力機構、3 高エネ機構、4 東北大 WPI-AIMR

水素は周囲の環境に応じて様々な存在状態を示し、中性水素が金属格子間に侵入した金属水素化物や、ヒドリドイオンを有するイオン結合性水素化物、共有結合性水素を多数含む錯体水素化物など、多彩な水素化物を形成する[1]。水素の結合多様性を反映し、これらの水素化物においては水素貯蔵や高速イオン伝導、磁性、金属-絶縁体転移などの多様な物性・機能が発現する。特に最近、共有結合性水素を高密度に含む硫化水素が超高压下にて超伝導転移の高温記録(203K)[2]を更新したことを受け、高密度水素化物に対する関心が急速に高まっている。

こうした背景のもと、発表者らは第一原理計算と量子ビームを活用した錯体水素化物の探索研究を進めている。錯体水素化物は、遷移金属に多数の水素が配位した錯イオンと、アルカリ金属やアルカリ土類金属などの陽イオンからなる代表的な高密度水素化物であり、水素の配位構造により多様な電子状態を形成する。

本発表では、第一原理計算による理論予測にもとづき、発表者らが合成に成功した高水素密度の錯体水素化物群(例えば引用文献[3])の結晶構造、特に中性子回折により決定した水素の配位構造と電子状態の相関を議論するとともに、さらなる高水素密度化に向けた最近の取り組みについて紹介する。



遷移金属に9つの水素が配位した高水素配位錯イオン

参考文献

- [1] S. Takagi, S. Orimo, Scripta Mater. (Viewpoint paper) 109, 1 (2015).
- [2] A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, S. I. Shylin, Nature 525, 73 (2015).
- [3] S. Takagi, Y. Iijima, T. Sato, H. Saitoh, K. Ikeda, T. Otomo, K. Miwa, T. Ikeshoji, K. Aoki, S. Orimo, Angew. Chem. Int. Ed. 54, 5650 (2015).