

【部門構成員】

教授：戸叶 一正、 助教授：折茂 慎一、 助手：中森 裕子、Petre Badica (2003.8～2005.3)、
講師（研究機関研究員）：横山 昌樹、 その他（事務補佐員 1 名）

【研究成果】

引き続き、超伝導材料および水素エネルギー関連材料の開発とその学理探求を進めた。
超伝導材料に関しては、2つの材料系に注目した。超伝導材料 MgB_2 は 39K の高い臨界温度をもつため、冷凍機冷却のみならず来るべき水素社会に関連して液体水素 (20K) 中での応用も検討されている。しかし、現在試作されている MgB_2 線材は、磁界をかけると臨界電流密度が急激に減衰する問題があり、これを解決するためには有効な磁束ピン止め点を導入する必要がある。そのためにナノレベルの異相の添加、非平衡プロセス（ミリング技術、薄膜技術）の導入による結晶粒のナノサイズ化などの試みを行ってきており、磁界中での臨界電流密度を飛躍的に高めることに成功した。また、新しい超伝導材料を見出す目的でリチウムやマグネシウムなどの軽量金属を含む硼化物、硼炭化物などに着目した研究開発を進めていて、その過程で $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ という新しい硼化物超伝導材料 (8 K) を発見した (Ref.1)。アルカリ金属を含む硼化物としては初めての超伝導性の確認であること、 Pd_6B の歪んだ八面体構造から形成される特異な結晶構造をもつことから (Ref.2)、新しい物質群の開発につながるものとして注目されている。

水素エネルギー関連材料に関しては、リチウムやマグネシウムなどの軽量金属を主相とする錯体水素化物の合成と機能化の研究を鋭意推進した。まず、従来の液相反応とは異なる気相・固相系での金属工学的な合成技術を世界に先駆けて錯体水素化物に適用し、これまでにない多様な錯体水素化物を合成することに成功した。さらに、合成した一連の錯体水素化物では、軽量金属からの電子供与によって高密度水素を含む N-H や B-H などの錯イオンとしての原子集団が固体状態で安定化することを解明した (Ref.3)。さらにこれらの研究をもとにした価電子制御技術 (Ref.4) や複合化技術 (Ref.5) を取り入れた材料開発を進めることにより、次世代の水素貯蔵材料としても有望な新しい錯体水素化物の合成と機能化に成功した（例えば、多量の水素を可逆的に貯蔵できるリチウム-マグネシウム系錯体水素化物を合成するとともに、この錯体水素化物が工業化にも適した窒化物系材料からも容易に合成できることなども実証した）。これらの軽量金属を主相とする新しい錯体水素化物を中心とした研究に関しては、国際エネルギー機関 (IEA) での新たな研究プログラムとして認定されるとともに、2004 年度だけで 7 件の国際会議での招待・基調講演の依頼を受けた。

1. K. Togano, P. Badica, Y. Nakamori, S. Orimo, H. Takeya and H. Hirata,
"Superconductivity in the Metal Rich Li-Pd-B Ternary Boride",
Phys. Rev. Lett., 93 (2004), 247004.
2. P. Badica, T. Kondo, T. Kudo, Y. Nakamori, S. Orimo and K. Togano,
"Magnetization measurements on $\text{Li}_2\text{Pd}_3\text{B}$ superconductor",
Appl. Phys. Lett., 85(2004), 4433-4435.
3. S. Orimo, Y. Nakamori and A. Zuttel,
"Material properties of MBH_4 (M = Li, Na, and K)",

Mater. Sci. and Eng. B, 108 (2004), 51-53.

4. Y. Nakamori and S. Orimo,
"Destabilization of Li-based complex hydrides",
J. Alloys Compd., 370 (2004), 271-275.
5. Y. Nakamori, G. Kitahara and S. Orimo,
"Synthesis and dehydriding studies of Mg-N-H systems",
J. Power Sources, 137 (2004), 309-312.

【研究計画】

これまでの研究成果をさらに発展させながら、「環境・エネルギー関連材料としての多様な軽量水素化物に関わる材料開発とその学理探求」を今後の主要な研究計画として設定したい。特に、アルカリ（土類）金属をはじめとする軽量金属と硼素・炭素・窒素などの軽量非金属との組み合わせによって多様な新規水素化物を合成して、水素貯蔵を中心とするそれらの潜在的機能を抽出することにより、先導性・革新性のある材料開発とその学理探求を進める。具体的には、関連の深い他の研究部門や研究施設と連携しながら、以下の研究を推進する。

- a) 新たな錯体水素化物や合金水素化物の合成：高圧水素中での反応合成や雰囲気制御ミリング、さらには反応蒸着や CVD などの成膜技術などを組み合わせて、新たな原子構造や電子構造を有する錯体・合金水素化物を創製する。
- b) "適材適所"の水素貯蔵材料の開発：錯体・合金水素化物のなかには次世代の水素貯蔵材料として期待される材料群があり、上述した多様な合成技術を用いて、自動車・二輪車、モバイル機器あるいは定置用機器などにおける"適材適所"の水素貯蔵材料としての開発を進める。
- c) 原子構造の実験的解析とそれに基づく材料開発：新たに合成した錯体・合金水素化物の原子構造を、放射光 X 線回折測定や中性子回折測定などにより実験的に解析する。特に原子構造の特異性から中性子遮蔽材料として期待される材料群に関しては、その応用展開も進める。
- d) 電子構造の実験的・理論的解析とそれに基づく材料開発：新たに合成した錯体・合金水素化物の電子構造を、帯磁率や電気抵抗・ラマン分光などを含めて可能な限り水素中 (*in-situ*) で実験的に解析する。さらに、計算材料科学を取り入れながら超伝導材料や触媒材料としての可能性を広く探る。

金属系材料や無機系材料、そしてそれらの複合系材料など、本所で研究対象とされている多様な材料系の内部・界面・表面での水素化物に関わる研究を推進することにより、当該部門（分野）としての環境・エネルギー関連材料の研究領域を拡大してゆく。