

ヒドリドが拓く水素の可能性

回答者：竹入 史隆 (分子科学研究所 助教)

1. 高校の先生に「H-」なんてないぞ！ってバツをつけられた思い出があります。

良いエピソードをご提供いただきありがとうございます。どこかで話のネタにします笑

2. ヒドリドセラミックスの探索は材料の種類や比率だけで焼くときのお温度や圧力は振らないのですか？

もちろん温度や圧力は重要なパラメーターです。それらを最適化することで重量なサンプルが得られます。

3. ヒドリトとセラミックの関係が良くわかりません。ヒドリドを使うとセラミックが効率的に合成できるということですか？

セラミックスは狭い意味では焼き物（陶器）ですが、酸化物をはじめ多くの無機固体化合物の総称として用いられています。粉末だけでなく、焼結体や膜も含まれます。ヒドリドはセラミックスの構成元素（イオン）にあたります。今回は「ヒドリドを含むセラミックス（無機固体）」について発表しました。

4. ヒドリド扱うグローブボックスの大气は不活性なだけならヘリウムなどでもいいのかと思いますが、アルゴンを使う利点があるのですか？

ご指摘の通り、不活性ガスであれば特に種類は問わないので、あとは価格との相談になります。窒素ガスでも良いのですが、リチウム金属などは窒素と反応して容易に窒化物になってしまうので、（より不活性な）アルゴンを使っています。ヘリウムは現在非常に高騰しており、各所で深刻な問題となっています。



5. ヒドリドという名前の由来は何でしょうか？

「ヒドリド」は *hydride* を日本語で読んだものです。国際的には「ハイドライド」と発音しないと通じないと思いますが、日本では昔からの慣習で「ヒドリド」と呼ぶことが多いです。なお、*hydride* は水素 (hydrogen) の化合物 (-ide) である水素化物 (たとえば水素化カルシウム CaH_2) を意味する用語であり、 H^- は水素化物イオン (hydride ion) と呼ぶ方がより正確です。このあたりは酸素 (oxygen) の化合物である酸化物 (oxide)、それに含まれる O^{2-} は酸化物イオン (oxide ion)、といった関係と同様です。

6. 導電性の相転移はフォノン、プラズモンのような素励起が関わっているのでしょうか？

ご指摘の通り、フォノンはイオン導電や相転移に重要な役割を果たしています。その詳細を明らかにするのは今後の課題です。我々が扱っているイオン導電体は自由電子を (ほぼ) 含まないので、プラズモンの影響は無いと考えています。

7. $\text{Ba}_2\text{LiH}_3\text{O}$ 以外にも利用可能な結晶として、どのようなものが挙げられますか。

$\text{Ba}_2\text{LiH}_3\text{O}$ は層状ペロブスカイト型 (K_2NiF_4 型) と呼ばれる結晶構造をとりますが、同じような構造をもつ La_2LiHO_3 や Ba_2YHO_3 といった物質でもヒドリド導電が観測されています。他に蛍石型関連構造の $\text{LaH}_{3-2x}\text{O}_x$ という物質でも高いヒドリド導電率が報告されています。

8. 分子研で続々発見されている理由は为什么呢？

講演でもお話ししましたが、ヒドリドを含む化合物は取り扱いが難しいです。その合成と特性評価をおこなうためには全ての合成や測定を不活性雰囲気でおこなう必要があり、これには相応の設備が必要となります。電極の選び方や測定条件にも細かいコツがあって、安定的にデータを取得するために、現在も試行錯誤を続けています。現時点でヒドリド導電を評価しているグループは日本で3グループほど、世界的にも5グループほどです。私の所属する分子研の小林グループはヒドリド導電体に特化した研究をおこなっており、ほかのグループから試料の測定を依頼されることも多いです。

9. ヒドリドによる電池の優位性を教えてください

現時点で他の電池に対する優位性を示すことは難しいです。それがわかっているならば、もっとたくさんの研究者や企業が参入しているはずですよ。使えるか使えないかよくわからないけど、なんかポテンシャルありそう、というくらいのざっくりした（のんびりした）感覚でやっています。講演でも言いましたが、電池はあくまでもひとつの選択肢であって、他にも色々な展開ができるのではないかと期待（妄想）しながら研究しています。

10. 分子設計はどの程度理論的根拠があるのでしょうか？たとえば高伝導度ヒドリドの設計では、無秩序化くらいの方針が与えられるとその方針を元に第一原理計算で設計シミュレーションすることが可能になるようなイメージなのでしょうか。

秩序/無秩序転移による導電率の向上はヒドリドに限らず幅広いイオン導電体で古くから知られた現象です（たとえばAgI）。どうやって無秩序化させるかについても色々な知見があるので、その点はシミュレーションをする必要性はそれほどないのかもしれませんが。一方で、ヒドリドがどんな経路で拡散するのか、どこがボトルネックなのか（拡散を妨げる要因なのか）といったことを明らかにするためには、計算機を用いたシミュレーションは有効であると考えています。計算によって物質（材料）を設計するというのは最近の世界的なトレンドで、将来はそれが常識になっていくのだと思います。

11. 一緒に使用される元素としてBaやLiが使われていますが、これに辿り着いたのは、どのような理由がありますか。

上にも書いたように、層状ペロブスカイト型（ K_2NiF_4 型）と呼ばれる結晶構造ですでにヒドリド導電体が発見されていました。 Ba_2LiH_3O はそれをベースに元素を置換していった結果辿り着いた組成となります。最初の有望な母物質（母構造）を見つけるのが最も大変で、良いものが見つかった後はしばらくそれで遊べる、というのが我々の感覚です。



12. 新物質のデザイン MI は役に立ちそうでしょうか？

わたしはMIに関してはまったくの素人ですが、10年後にはMIを使うのが当たり前になっているだろうなと思っています。これまで見向きもされなかったような組成や構造にスポットライトが当たることもあると思うので、どんなものが見つかるのか興味があります。

13. ヒドリドの反応の速さは、なん km/sec ですか

「反応の速さ」というトピックを一言でお答えするのは難しいです。直接の回答にはなりません。高圧での合成は30分、金属管やガラス管での合成は6時間～24時間くらいかけておこなっています。