

【燃料電池・水素特集】水素貯蔵物質

## 化合物の新しい結晶形が、水素貯蔵物質の研究を推進 (EU)

水素化物の新しい結晶形<sup>1</sup>がヨーロッパ放射光施設 (ESRF: European Synchrotron Radiation Facility) の科学者によって発見された。この結晶形は、水素を燃料とする自動車の水素貯蔵に使用できる可能性がある。

この物質は水酸化ホウ素リチウム ( $\text{LiBH}_4$ ) であり、有望なエネルギー貯蔵物質であると考えられる。その理由は、水酸化ホウ素リチウムは 18 重量パーセントの水素を含んでおり、水素を燃料とする自動車で使用するのに魅力的な物質だからである。

しかし、この物質の欠点は、極めて高温 (300 以上) においてのみ、水素を放出することである。ESRF の研究チームは、より穏やかな条件で水素を放出する可能性のある、この化合物の新しい形状 (form) を発見した。

理論的には予測できないものであったこの発見は、アンゲヴァンテ・ケミー誌<sup>2</sup> (Angewandte Chemie) に、非常に重要な論文として発表された。

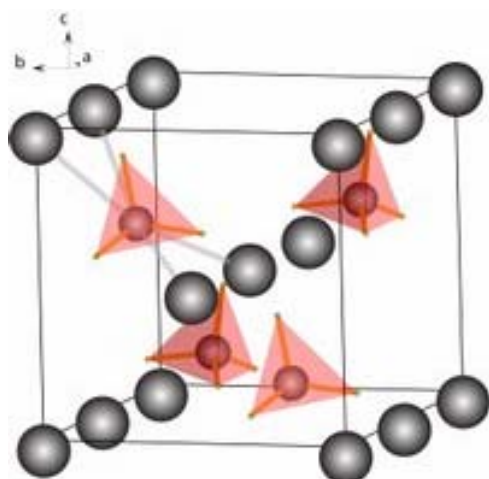
自動車産業界は水素を有望なエネルギー担体と考えている。もし良い水素貯蔵材料が開発されれば、自動車用ガソリンをクリーンな水素エネルギーで置き換えることができる。走行距離の点で、5kg の水素は 20 リットルのガソリンに相当する。現在、比較的多量の水素を貯蔵し、あるいは容易に放出する、いくつかの興味深い化合物が知られている。しかし、貯蔵と放出の双方を実用的なレベルで実現できる物質は今のところ、無い。

ESRF スイス / ノルウエー実験ステーション (ビームライン) の研究者は、水素を含んだいくつかの化合物と、異なった圧力と温度の下でその化合物がとる様々な形状について研究している。水酸化ホウ素リチウム ( $\text{LiBH}_4$ ) は重量比で 18% の水素を含んでおり、現在研究中の化合物の一つである。科学者はこの化合物の新形状を発見したばかりだが、それは不安定 (unstable) なように思われ、水素貯蔵物質として有望である。今日に至るまで、この物質の形状として知られているものは、全て極めて安定であり、それは水素を容易に放出しないことを意味する。

論文の著者である Yaroslav Filinchuk は、「新しく見つかった結晶形状は、全く予期しなかったものであるが、非常に有望である」と述べている。

<sup>1</sup> 物質には、化学組成は同じだが結晶構造が異なるものが存在する。

<sup>2</sup> ドイツ化学会誌であり、アメリカ化学会誌などと並び、化学分野における最高レベルの学会誌である。



**図 1 : LiBH<sub>4</sub> の新しい結晶構造**

(Credit: Y. Filinchuk, D. Chernyshov, A. Nevidomsky, and V. Dmitriev: High-Pressure Polymorphisms a Step towards Destabilization of LiBH<sub>4</sub>. *Angew. Chem. Int. Ed.* 46 (2007), DOI: 10.1002/ange.200704777. Copyright Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Reproduced with permission).

水素化ホウ素リチウムの新しい結晶系を得るために、研究チームはサンプルに対して最高 20 万バールまでの圧力を加えた。この圧力の大きさは、エベレスト山の下地の地殻に加わる圧力 (2,500 バール) の 80 倍に達する。(ただし、ESRF の実験施設では、この圧力は記録的なものではない。) また、発見された材料中の原子配置を決定するために、シンクロトロン光の回折が使われた。

以上のような過程を経て、水素化ホウ素リチウムの新しい二つの構造が見つかった。この内の一つは類を見ない斬新なものであり、水素元素間の極めて短いコンタクトを現わしている。実験と理論的考察の結果、水素化ホウ素リチウムの新しい結晶系は、より低い温度で水素を放出できることがわかった。

Filinchuk は語る。「新しい結晶形が既に 10 バールの圧力で現れることを考えると、この物質はさらに魅力的なものになる。10 バールは製薬会社が丸薬を製造する際に加える圧力に相当する。」

本論文の著者は、常圧において化学的置換により、この形状を安定化できると考えている。研究チームの次の目標は、通常の下で、この化合物に化学工学的な処理を加えて固定化し、水素貯蔵物質として純粋な水素化ホウ素リチウムよりも好ましい性質を示すかどうかを試験することである。通常、水素は X 線では検出できないものだが、この研究に携わった科学者達は ESRF の優れたシンクロトロン光のおかげで、かろうじてその配置を検出することができた。

ESRF スイス / ノルウエー実験ステーション ( ビームライン ) の研究チームは、一見したところでは予測できなかったこの新しい結晶系の研究開発を続ける予定である。

出典 :

<http://www.esrf.eu/news/pressreleases/hydrogen/hydrogen>

( Copyright © 2008 ESRF Used with Permission )

翻訳 : NEDO 情報・システム部