

金属化合物の化学結合のエネルギー表現と 水素貯蔵化合物の量子設計への応用

公益財団法人 豊田理化学研究所

フェロー 森永 正彦

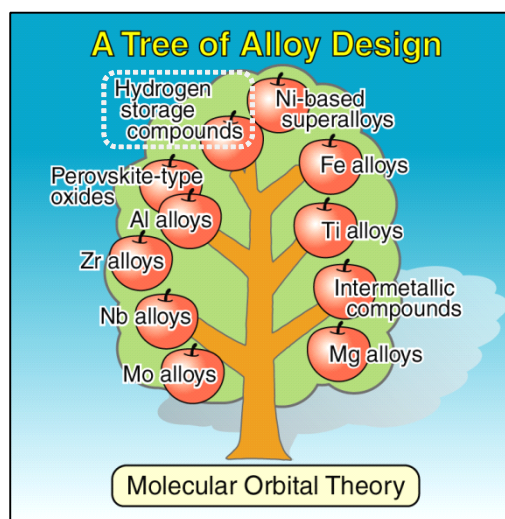
目的

多様な化学結合をもつ各種金属化合物(ホウ化物、炭化物、窒化物、酸化物、フッ化物、硫化物他)の化学結合を、原子化エネルギーを用いて統一的に表現し、それぞれの非金属元素の個性を抽出する。そして、非金属元素側からの「量子材料設計基盤」を構築し、自動車用水素貯蔵化合物の探索に応用する。

方法

エネルギー密度解析法を用いて、金属化合物(MX)の全エネルギーを構成原子X、Mへ分配し、非金属元素X、金属元素Mの原子化エネルギー ΔE_X 、 ΔE_M を求める。それらは次式で表される。 $\Delta E_X = E_X^{atom} - E_X^{MX}$ 、 $\Delta E_M = E_M^{atom} - E_M^{MX}$ 。ここで、 E_X^{atom} 、 E_X^{MX} は、それぞれ孤立中性原子およびMX中のXのエネルギーである。 E_M^{atom} 、 E_M^{MX} も同様の意味である。凝集エネルギー、 E_{coh} は、 $E_{coh} = \Delta E_X + \Delta E_M$ と表せるので、 ΔE_X 、 ΔE_M は、凝集エネルギーの2つの成分である。 ΔE_X 、 ΔE_M を通して、全エネルギー計算のみでは分からなかった「構成原子の顔」が見えるので、材料設計が可能となる。

本解析を通して、非金属元素側から見た金属化合物の考え方を導出し、非金属元素を含む水素貯蔵材料の設計に応用する。



期待される成果

これまでほとんど行われていない非金属元素側からの量子材料設計基盤を構築することによって、機能性金属化合物の開発を支援する。新規な高容量の水素貯蔵化合物の開発に取り組み、水素を利用した社会システムの発展に資する。