

革新的 GX 技術創出事業 (GteX) 革新的要素技術研究
「水素」領域
終了報告書

令和 5 年度
研究開発終了報告書

令和 5 年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：宮岡 裕樹]

[広島大学 自然科学研究支援開発センター・特定教授]

[研究開発課題名：錯体水素化物のアンミン錯体形成による高水素密度化]

実施期間：令和 5 年 10 月 1 日～令和 6 年 3 月 31 日

§ 1. 研究実施体制

① 研究開発代表者: 宮岡 裕樹 (広島大学自然科学研究支援開発センター、・特定教授)

② 研究項目

- ・錯体系水素化物のアンミン錯体形成特性評価
- ・*in-situ* 分析を用いたキャラクタリゼーション

§ 2. 研究実施の概要

本研究開発では、種々の錯体水素化物のアンミン錯体形成特性を系統的に評価するとともに、*in-situ* 分析や分子シミュレーションを用いて水素等の化学状態を詳細に解析し、高容量水素貯蔵材料の設計指針を得ることを目的とする。

錯体水素化物として、種々のアミド、ハイドレート、アラネートの NH_3 吸蔵特性を評価した。その結果、 NH_3 と同様に $\text{H}^{\delta+}$ を有する $(\text{NH}_2)^-$ 及び $(\text{OH})^-$ を含む錯体水素化物においては、アンミン錯体が形成されないことがわかった。分子シミュレーションを用い、ボロハイドライドのアンミン錯体形成における電子分布の変化を解析した結果、 NH_3 分子の電子供与的な相互作用による電子分布の変化がアンミン錯体形成に寄与している可能性が示唆された。アミドやハイドレートでは、このような NH_3 による電子供与の効果が得られにくく、そのためアンミン錯体相が形成されないと考えられる。一方、ボロハイドライドと同様に $\text{H}^{\delta-}$ を有するアラネート系試料においては、アンミン錯体相の形成は見られなかったものの、水素生成が観測された。この結果は、 $(\text{AlH}_4)^-$ 錯イオン中の $\text{H}^{\delta-}$ と NH_3 中の $\text{H}^{\delta+}$ の相互作用が存在するものの、アンミン錯体相が不安定であることを示唆している。 LiAlH_4 の分子シミュレーション解析の結果、ボロハイドライドとの主たる差異は、 $\text{H}^{\delta-}$ のチャージの大きさであった。以上の結果から、錯体水素化物のアンミン錯体形成においては、錯イオン中の水素の化学状態が重要であり、これを制御することで、アンミン錯体相の安定性を制御できると考えられる。上記に加え、発展研究として、錯体水素化物を用いた超高压実験やアラネート系材料の水素貯蔵特性評価にも着手した。