

# 安定性予測に法則

層間化合物 物質探索を効率化 東大

東京大学の川口直登  
大学院生と柴田基洋助  
教、溝口照康教授は、  
層間化合物の安定性を  
予測する法則を発見し  
た。層間化合物は層状  
物質の隙間にイオンが  
挿入された物質で、電  
池や超電導に利用され  
ている。単純な数式で  
安定性を予測できると  
物質探索を効率化でき  
る。

密度汎関数理論で7

てデータセットを作成  
する。挿入エネルギー  
は有機錯体の安定性に  
関わるHSA B則を参  
考にした。イオン半径  
と標準生成ギブズエネ  
ルギーで線形多項式を  
作り、データセットに  
当てはめると高精度で  
予測できた。  
酸的層状物質とアニ  
オンの組み合わせでは  
予測精度を表す決定係  
数が0.98、塩基的層  
状物質とカチオンでは  
0.89と高い。錯体化  
学と無機化学で共通の  
知見を適用できた。  
電池などの材料開発  
において、単純な予測  
式で候補物質を絞り込  
めるようになる。物質  
探索の効率化につなが  
る。