

2022 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	小林玄器
研究機関名	理化学研究所
所属部署名	開拓研究本部 小林固体化学研究室
役職名	主任研究員
研究課題名	ヒドリドイオン導電性材料の開拓と新規イオニクスデバイスの創製
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

申請時に予備的結果として得られていた層状ペロブスカイト型の $Ba_{1.75}LiH_{2.7}O_{0.9}$ (BLHO) [1]への元素置換 ($Ba \rightarrow K$, $Li \rightarrow Na$) による相転移温度の低温化 (超イオン導電相の低温安定化) については、データの再現性と相転移挙動の解明により、論文として発表することができた[2, 3]。多元素化に基づく配置エントロピーの効果で相転移温度が低下しただけではなく、元素置換を施す位置と置換種によって導電率の温度依存性に有意な違いが認められた。この点は、格子とキャリアである H の相互作用の違いが導電率の温度依存性に影響を与えていることを示唆しており、H 超イオン導電の機構解明に向けた研究にも活用できる知見である。

[1] F. Takeiri, G. Kobayashi* *et al.*, *Nat. Mater.*, **21**, 325–330 (2022).

[2] K. Okamoto, G. Kobayashi* *et al.*, *Adv. Sci.*, **10**, 2203541 (2023).

[3] K. Okamoto, G. Kobayashi* *et al.*, *J. Mater. Chem. A*, **10**, 23023–23027 (2022).

蛍石型構造の酸水素化物に関しては、電気的陽性なカチオンの固溶による H 輸率の改善を確認した。全固体セルを作製し、Ti の電気化学的な水素化を室温で実現した。

電極材料開発においては、非加熱合成プロセスであるメカノケミカル法を活用することによって、合成時に原料が還元されて金属析出が生じる酸水素化物特有の問題が回避できるようになってきた。これにより、H-導電性材料の分野全体で停滞気味であった遷移金属酸水素化物の物質開発が大幅に進展した。構造、組成、物性の評価ができ次第、随時報告していく。