

アルカリイオン伝導体としての新規水素化物アンチペロブスカイト化合物

(京都大学¹・JFCC²・東北大学³・東京工業大学⁴) ○タッセル
セドリック¹・高勝寒¹・ブルーチボー¹・藤井進²・山本健太郎¹・肖
遥¹・及川格³・高村仁³・生方宏樹¹・渡邊雄貴¹・藤井孝太郎⁴・八島
正知⁴・桑原彰秀²・内本喜晴¹・陰山洋¹

New Alkali Hydride Antiperovskites as Fast Ionic Conductors (¹Kyoto University,
²Japan Fine Ceramics Center, ³Tohoku University, ⁴Tokyo Institute of Technology)
○Cédric Tassel¹, Shenghan Gao¹, Thibault Broux¹, Susumu Fujii², Kentaro
Yamamoto¹, Yao Xiao¹, Itaru Oikawa³, Hitoshi Takamura³, Hiroki Ubukata¹, Yuki
Watanabe¹, Kotaro Fujii⁴, Masatomo Yashima⁴, Akihide Kuwabara², Yoshiharu
Uchimoto¹, Hiroshi Kageyama¹

The antiperovskite (AP) structural type is a vast family of materials which can be described as charge inverted perovskites where anions occupy the cuboctahedral and octahedral sites and cations sit at the corner of octahedra. It has been suggested that soft anionic body centered cubic sublattice, as observed in AP, could be interesting towards the development of alkali metal ionic conductors. From this, we explored the use of the highly polarizable hydride H⁻ anion in AP and discovered a new series of alkali rich ion conducting structures (A₃HX, A = Li, Na and X = S, Se, Te) via high pressure synthesis.^[1] In this presentation, the structure, stability and ionic transport properties of the new materials will be discussed.

Keywords : Perovskite; Antiperovskite; Hydrides; Ionic conductivity

アンチペロブスカイト (AP) 構造は、通常のペロブスカイト構造の電荷反転型構造として説明できる。一般式は M₃BA と書かれ、M が陽イオン、A、B は陰イオンである。陰イオン A、B は、それぞれ立方八面体サイトと八面体サイトを占有し、カチオンは B 中心八面体の頂点に位置する。ペロブスカイト型化合物と同様に、単純な構造と組成を併せ持つため、新物質探索に有望な化合物群である。また、AP 構造で見られるような柔軟なアニオン体心立方副格子においては、優れた陽イオン伝導性の発現が期待できる。本研究では、高い分極率を有する水素化物イオン H⁻を含む新規 AP 型化合物 A₃HX (A = Li, Na; X = S, Se, Te) の高圧合成およびイオン伝導性を報告する。^[1]当日は、理論計算の結果も交えて、構造安定性、構造とイオン伝導性の相関について議論する。

[1] Hydride-based antiperovskites with soft anionic sublattices as fast alkali ionic conductors. S. Gao et al. *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 201.