

水素吸蔵物質 Y_2CH_x における水素の電子状態

Electronic state of hydrogen in the hydrogen storage material Y_2CH_x

KEK 物構研, TRIUMF¹, 東工大フロンティア研², 東工大元素センター (MCES)³,
物質・材料研究機構 (NIMS)⁴

平石 雅俊, 小嶋 健児¹, 岡部 博孝, 竹下 聡史, 幸田 章宏, 門野 良典, Zhang Xiao², 松石 聡³,
細野 秀雄^{2,3}, 平田 和人⁴, 大谷 茂樹⁴, 大橋直樹⁴

KEK-IMSS, TRIUMF¹, Tokyo Inst. Tech. MSL², Tokyo Inst. Tech MCES³, NIMS⁴

E-mail: hiramasa@post.kek.jp

2次元層状物質である Y_2C は、 $[Y_2C]^{2+}$ の正に帯電した8面体が層状に連なった構造を有する、空間群 $R\bar{3}m$ に属する物質である。DFT 計算やバルク測定、ARPES 測定などから、余った電子が層間に2次元状に広がっていることが提案されており [1-3]、電子がアニオンとして振る舞うエレクトライド物質として注目を集めている。

本物質は水素貯蔵材料や水素が絡んだ触媒反応マトリックスとしての観点から、インタカレートした水素がどのようなサイト・配位で安定化するかに関しても興味を持たれている。我々は、物質中で水素の軽い同位体として振る舞うミュオンに着目し、ミュオンスピン回転実験 (μ SR) を行い、 Y_2C における希薄水素としてのミュオンがどのような局所電子状態にあるかを調べた。その結果、Y サイトに局在する d 電子とミュオンの超微細相互作用の大きさから、ミュオンが当初想定された Y_6 サイトではなく [4]、 Y_4 サイトと呼ばれる Y 四面体の中心位置にいる可能性が高いことが明らかになった。これは、重水素化した試料 Y_2CD_x ($x = 2, 2.55$) における中性子散乱の結果 [5] とも整合し、 Y_6 サイト (Y 八面体中心) よりも Y に近いことから、ミュオンが Y と結合を作っていることを示唆している (この場合、ミュオンはヒドライドイオンと同じく負イオンとして振舞っている可能性が高い)。

発表では、水素化した試料 $Y_2CH_{2.55}$ のミュオン実験の結果も紹介し、 Y_2CH_x ($x = 0, 2.55$) における水素の電子状態に関して議論する予定である。

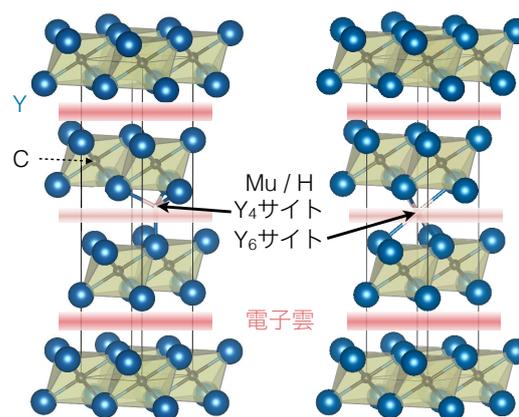


図 1: Y_2C の結晶構造。Y の四面体中心 (Y_4 サイト) と六面体中心 (Y_6 サイト) をピンクの丸で示した。

- [1] T. Inoshita, *et al.*, Phys. Rev. X **4**, 031023 (2014).
- [2] X. Zhang, *et al.*, Chem. Mater. **26**, 6638, (2014)
- [3] K. Horiba, *et al.*, Phys. Rev. B **96**, 045101, (2017)
- [4] M. Hiraishi, *et al.*, Phys. Rev. B **98**, 041104(R), (2018)
- [5] J. P. Maehlen, V. A. Yartys, and B. C. Hauback, J. Alloys Compd. **351**, 151 (2003)