H^-導電性酸水素化物のアニオン配列制御とイオン導電特性

Effect of controlling anion configuration for H^- conductive oxyhydrides on the conduction properties

分子研 [1]，総研大 [2]　○小林 玄器 [1,2]

NINS IMS [1], SOKENDAI[2], Genki Kobayashi[1,2]

E-mail: gkobayashi@ims.ac.jp

水素は電荷自由度を持ち、結晶格子内の配位環境に応じてプロトン(H^+)からヒドリド（H^-）までの多様な状態をとることができる。多くの場合では、H^+または分子（共有結合水素）として存在し、H^-はアルカリ金属水素化物などのイオン結晶中でのみ安定に存在できるということが一般的な認識であった。これに対し、ここ十数年の物質科学の進歩により、酸化物などの物質中においても水素が H^-として安定に存在できることが明らかになり、H^-と酸化物イオン（O^{2-}）が格子内に共存する酸水素化物が新しい物質探索の対象として注目されている。これまで、格子内に電子供与性の強い H^-が導入されることによって、絶縁体から半導体や金属への転移などの興味深い物性が報告されてきたが、我々は、H^-が価数、サイズ、分極率の点で高速イオン導電に適しているという点に着目し、H^-導電性酸水素化物の探索を行ってきた [1-3]。本講演では、これまでに我々が見出した層状ペロブスカイト型構造の H^-導電性酸水素化物（Fig. 1）を対象に、組成、合成条件 [4,5]、温度などに依存して変化するアニオン配列と H^-導電特性との関連性について報告する。

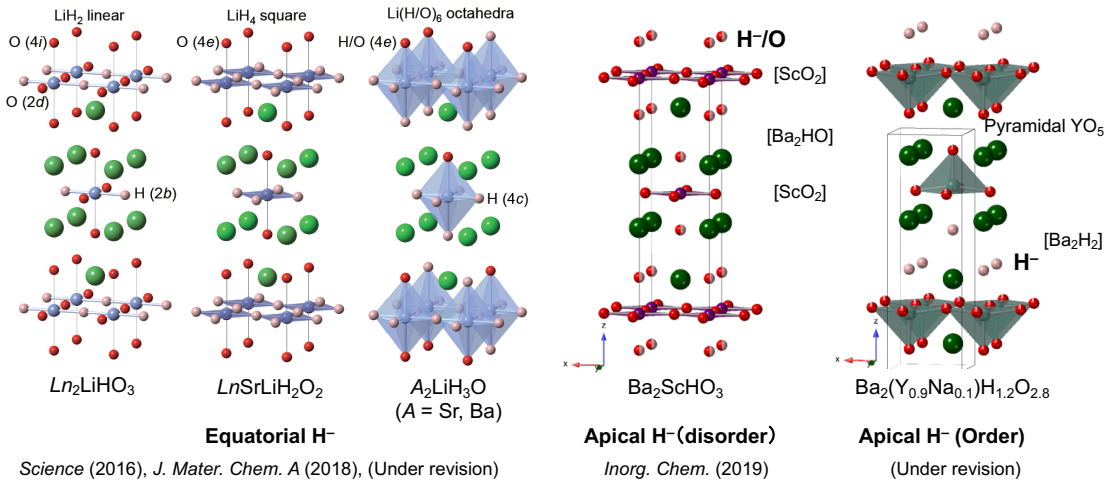

Fig. 1 Crystal structures for K_2NiF_4-type H^- conductive oxyhydrides.

参考文献

1. G. Kobayashi and R. Kanno *et al.*, *Science*, **351**, 1314-1317 (2016).
2. Y. Iwasaki, G. Kobayashi, and R. Kanno *et al.*, *J. Mater. Chem. A*, **6**, 23457-23463 (2018).
3. F. Takeiri and G. Kobayashi *et al.*, *Inorg. Chem.*, **58**, 4431-4436 (2019).
4. Watanabe and G. Kobayashi *et al.*, *Electrochem.*, **85**, 88-92 (2017).
5. N. Matsui, G. Kobayashi *et al.*, *J. Am. Ceram. Soc.*, **102**, 3228-3235 (2019).

© 2019年 応用物理学会