

電子やイオン等の能動的制御と反応
2019 年度採択研究者

2020 年度
年次報告書

飯村 壮史

物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点
主任研究員

準格子間拡散を利用した中温域高速ヒドライドイオン伝導体の創製と拡散機構の解明

§ 1. 研究成果の概要

本研究の目的は、複数のイオンが相互作用しながら物質内を高速に拡散する準格子間機構に着目し、中低温域で高いヒドライドイオン伝導度を示す新材料を設計合成しつつ、その拡散機構を解明していくことである。

2020年度は主に低温高ヒドライドイオン伝導を示す新規水素化物の探索に取り組み、100°C以下で99%を超えるイオン輸率を保持しつつ、室温で 10^{-3}Scm^{-1} 、60°Cで 10^{-2}Scm^{-1} を超えるヒドライドイオン伝導度を示す材料を見つけることが出来た。電子伝導が出やすい水素化物に対しても合成後に水素雰囲気下のポストアニールを施すことで高いイオン輸率を得ることが出来ることが分かったことも収穫であった。また、共同研究として進めている中性子準弾性散乱および分子動力学シミュレーションを用いた伝導メカニズムの解析から、複数のイオンが共同で動く拡散モードと局在モードがあり、これらがカップルした準格子間拡散機構によって高い伝導度が実現していることが分かった。また水素可逆電極であるPdの製膜条件を最適化することで交流電気伝導度測定から見積もったイオン伝導度とほぼ同等のヒドライドイオン電流を水素雰囲気下の直流電圧印加時でも得られるようになった。

今後は、これら電解質、電極を利用して反応制御に向けた検討を行う。

【代表的な原著論文情報】

1) “Stabilization Factor of Anion-Excess Fluorite Phase for Fast Anion Conduction”, Chemistry of Materials, vol. 33, pp.1867-1874, 2021.