

電子やイオン等の能動的制御と反応
2019 年度採択研究者

2021 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。水素リッチな酸水素化ランタン($\text{LaH}_{3-2x}\text{O}_x$, $x < 0.25$)のバルク焼結体を水素雰囲気下でポストアニールすることで 99%以上のイオン輸率を保ちつつ、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ことが分かった。また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、3-4 個のヒドライドイオンが玉突き運動を繰り返す準格子間拡散機構によって高い伝導度が実現しているがわかった。また、酸素量に大きく依存する可動な水素欠損の生成エネルギーが本化合物の活性化エネルギーと前指数因子に大きな影響を及ぼすことも明らかになった。さらに酸水素化イットリウム薄膜の製膜に成功し、気相中の水素からパラジウム電極を介してヒドライドイオンの連続的脱挿入にも成功した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Room-Temperature Fast H^- Conduction in Oxygen-Substituted Lanthanum Hydride”, J. Am. Chem. Soc., vol. 144, pp.1523-1527, 2022.
- 2) “Characteristic mechanism for fast H^- conduction in $\text{LaH}_{2.5}\text{O}_{0.25}$ ”, Acta Mater., vol. 230, pp.117825-1-12, 2022.
- 3) “Characteristic Resistive Switching of Rare-Earth Oxyhydrides by Hydride Ion Insertion and Extraction”, ACS Appl. Mater. Interfaces, vol. 14, pp.19766-19773, 2022.