

電子やイオン等の能動的制御と反応
2020年度採択研究者

2021年度 年次報告書

竹入 史隆

自然科学研究機構 分子科学研究所
助教

複合アニオン固体電解質を用いたヒドリドインターカレーション反応の開拓

§ 1. 研究成果の概要

水素の負イオンであるヒドリド(H⁻)は大きな分極率をもつ1価のアニオンであり、それがイオン導電種としてふるまう物質(ヒドリドイオン導電体)の報告が増えている。本研究課題では、中低温(<500 °C)で高い導電率を示す H⁻導電体を固体電解質として用いたインターカレーション反応を開拓し、通常の焼成反応では得られない新たなヒドリド化合物の創製に挑戦する。得られた化合物では、H⁻の強い還元力や特異な軌道相互作用に起因するユニークな化学・物理機能の発現が期待できる。

2021 年度は、前年度に立ち上げた不活性雰囲気下での電気化学測定系において、ヒドリド固体電解質を用いたインターカレーション反応に着手した。具体的には、電解質材料として中低温で高速 H⁻導電を示す水素化ハロゲン化物 Ba₂H₃X (X = Cl, Br, I)、ホスト物質として種々の遷移金属酸化物、水素源に水素化チタンまたは水素化ランタンを選択し、圧粉セルにおいて定電流を印加した。ホスト物質には層状ペロブスカイトや多量の酸素欠損を含む化合物を用いた。現時点ではいずれの組み合わせにおいても H⁻インターカレーション反応の進行は確認できず、目標とする新規ヒドリド化合物の発見には至っていない。

その原因として、圧粉セルにおいては電解質の作動に 200 °C 程度の加熱が必要であり、電極-電解質界面での副反応が起こりうること、また電解質の電位窓が 1 V 未満であり、ねらった遷移金属イオンの酸化には不十分であることなどが考えられる。そこで、引き続き適切なホスト材料の探索を継続するとともに、新たな電解質材料の利用も検討した。具体的には、室温付近で高いヒドリド導電率を示す蛍石型水素化物に着目し、適切な元素置換によって固体電解質として機能することを明らかにした。今後は本物質を電解質として用いたインターカレーションにも取り組む。