

小 林 玄 器（特任准教授（若手独立フェロー））（2013 年 9 月 1 日着任）

A-1) 専門領域：無機固体化学，固体イオニクス，電気化学，蓄電・発電デバイス

A-2) 研究課題：

- a) H⁻ 導電性酸水素化物の物質探索
- b) H⁻ 導電性酸水素化物のイオン導電機構解析
- c) H⁻ のイオン導電現象を利用した新規イオニクスデバイスの創成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) H⁻ 導電体の物質探索が進展し，新たに $\text{Ba}_2\text{LiH}_{3-2x}\text{O}_{1+x}$ と Ba_2MHO_3 ($M = \text{Sc}, \text{Y}$) の合成に成功した。 $\text{Ba}_2\text{LiH}_{3-2x}\text{O}_{1+x}$ は，300 °C で $10^{-2} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ を越える極めて高い H⁻ 導電特性を示した。一方， Ba_2MHO_3 ($M = \text{Sc}, \text{Y}$) は，これまで報告された酸水素化物とは異なる H⁻ の配位環境をとることが分かり，今後の酸水素化物の物質設計に資する固体化学的に有益な知見を得た。
- b) $\text{La}_{2-x-y}\text{Sr}_{x+y}\text{LiH}_{1+x+y}\text{O}_{3-y}$ が全固体電池の固体電解質として利用できることを明らかにした。また，水素透過性の Pd を電極に用いた固体電池の電気化学測定から， $\text{H}_2 + 2\text{e}^- \rightleftharpoons 2\text{H}^-$ の反応が Pd 電極で可逆的に進行することを確認した。
- c) H⁻ 導電体を電解質に用いた固体デバイスを作製し，アノード電極での水素化・脱水素化反応を検討し，高速で水素化反応が進行することを見出した。

B-1) 学術論文

K. SOMA, S. KONINGS, R. ASO, N. KAMIUCHI, G. KOBAYASHI, H. YOSHIDA and S. TAKEDA*, “Detecting Dynamics Responses of Materials and Devices under an Alternating Electric Potential by Phase-Locked Transmission Electron Microscopy,” *Ultramicroscopy* **181**, 27–41 (2017).

A. WATANABE, G. KOBAYASHI*, N. MATSUI, M. YONEMURA, A. KUBOTA, K. SUZUKI, M. HIRAYAMA and R. KANNO, “Ambient Pressure Synthesis and H⁻ Conductivity of $\text{LaSrLiH}_2\text{O}_2$,” *Electrochemistry* **85**, 88–92 (2017).

B-3) 総説，著書

小林玄器，「ヒドリドイオン導電体の開発と新型電池への応用可能性」，*応用物理* **86(12)**, 1084–1087 (2017).

小林玄器，「ヒドリドイオン導電性酸水素化物」，*セラミックス* **52(12)**, 829–832 (2017).

B-4) 招待講演（* 基調講演）

G. KOBAYASHI, “Hydride Ion Conduction in Oxyhydrides,” 3rd Solid-State Chemistry & Ionics (SCI) workshop: Bulk diffusion and surface of oxides, Kyusyu University, Fukuoka (Japan), November 2017.*

小林玄器，菅野了次，「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の開発」，平成 29 年度物質科学研究会，フクラシア八重洲会議室 K，東京，2017 年 10 月.*

小林玄器，「ヒドリドイオン導電体の開発と蓄電・発電デバイスへの応用可能性」，第 7 回 CSJ 化学フェスタ 2017，タワーホール船堀，東京，2017 年 10 月.

小林玄器,「H⁻ 導電性酸水素化物の開発と電気化学デバイスへの応用可能性」, 第13回固体イオニクスセミナー, 宮崎フェニックスシーガイアリゾート, 宮崎, 2017年9月.*

G. KOBAYASHI, “Synthesis and H⁻ Conductivity of Ba-Li oxyhydride,” IUMRS-ICAM 2017 15th International Conference of Advanced Materials, Kyoto (Japan), August 2017.

G. KOBAYASHI, “Study on Hydride Ion Conductive Oxyhydrides,” 2017 Hydrogen Metal Systems Gordon Research Conference, Making the Hydrogen Economy Work—New Developments and Recent Applications, Easton, MA (U.S.A.), July 2017.*

G. KOBAYASHI, “Relationship between anion arrangement and H⁻ conductivity in La-Sr-Li oxyhydride system,” 21st International Conference on Solid State Ionics, Padua (Italy), June 2017.

G. KOBAYASHI, “Study on H⁻ Conductive Oxyhydrides for Next-Generation Battery Systems,” 21st International Conference on Solid State Ionics, Padua (Italy), June 2017. (Final selection for The ISSI Young Scientist Award)

小林玄器,「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の開発」, 第2回固体化学フォーラム, 東北大学金属材料研究所, 仙台, 2017年6月.

G. KOBAYASHI, “Hydride Ion Conduction Oxyhydrides,” 8th International Conference on Electroceramics, Nagoya (Japan), May 2017.

菅野了次, 小林玄器,「ヒドリドイオンが固体中を動く——新物質創成と電気化学デバイスへの期待」, 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学, 横浜, 2017年3月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の物質開発」, 第163回アドバンスト・バッテリー技術研究会「ポスト電池討論会」, 大阪科学技術センター, 大阪, 2017年3月.*

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発」, 2016年度量子ビームサイエンスフェスタ, つくば国際会議場, つくば, 2017年3月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電性酸水素化物の物質開発」, Workshop on Materials Science under Ultra-High Pressure 2017, 愛媛大学, 松山, 2017年3月.

小林玄器,「ヒドリドイオン導電体の開発とエネルギーデバイスへの応用可能性」, 日本技術士会化学部会講演会, 日本技術士会館, 東京, 2017年1月.*

B-6) 受賞, 表彰

G. KOBAYASHI, International Conference on Materials for Advanced Technologies 2009, Best Poster Award (2009).

G. KOBAYASHI, The American Ceramics Society Spriggs Phase Equilibria Award (2010).

小林玄器, 手島精一記念研究賞(博士論文賞)(2011).

橋本英樹, 小林玄器, 鈴木智子, 第三回ネイチャー・インダストリー・アワード特別賞 (2013).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第51回電池討論会実行委員 (2011).

2013年電気化学秋季大会実行委員 (2013).

第56回電池討論会実行委員 (2015).

第 42 回固体イオニクス討論会実行委員 (2016).

第 58 回高压討論会実行委員 (2017).

B-8) 大学での講義, 客員

東京理科大学理学部, 集中講義「特別研究」, 2017 年 10 月 14 日.

B-10) 競争的資金

科研費新学術領域「複合アニオン化合物の創製と新機能」(公募研究), 「ヒドリド超イオン導電体の物質探索」, 小林玄器 (2017 年–2018 年).

科研費若手研究(A), 「新規イオニクスデバイスの開発に向けたヒドリド導電性物質の探索」, 小林玄器 (2015 年–2017 年).

科学技術振興機構さきがけ研究「新物質科学と元素戦略」, 「ヒドリド酸化物の直接合成による新規機能性材料の探索」, 小林玄器 (2012 年–2016 年).

科研費若手研究(B), 「ヒドリド含有酸化物を基軸とした新規機能性材料の探索」, 小林玄器 (2012 年–2014 年).

科研費研究活動スタート支援, 「逆ペロブスカイト型新規リチウムイオン導電体の創成」, 小林玄器 (2011 年–2012 年).

C) 研究活動の課題と展望

H⁻ 導電性酸水素化物の物質探索および新規イオニクスデバイスの創製

着任時から一貫して取り組んできた H⁻ 導電性酸水素化物の物質探索については, Ba₂LiH_{3-2x}O_{1+x} の合成に成功したことで大きく進展した。Ba₂LiH_{3-2x}O_{1+x} が 300–400 °C で示す H⁻ 導電特性 ($\sigma \geq 10^{-2} \text{ Scm}^{-1}$) は, プロトン (H⁺) による従来の水素のイオン輸送では達成できなかった特性である。プロトン (H⁺) による水素のイオン伝導では, 水または酸化物イオンとの結合を介して H⁺ が伝導するため, 水を固体内に結晶水として留めることができない, または H–O 結合の束縛が強いなどの理由から, 中温域 (200–400 °C) で優れた導電特性が得られない。これに対し, H⁻ はバルク内で欠陥を介してホッピング伝導できるため, この温度域で高い導電率が得られたと考えられる。今後は, 今中性子準弾性散乱, 固体 NMR, 高温中性子回折などを組み合わせ, H⁻ のイオン導電機構を明らかにしたい。

H⁻ のイオン導電現象の電池反応への応用に関しては, 合成した酸水素化物を固体電解質に用いた電気化学デバイスを作製し, 水素化・脱水素化反応への応用を検討した。H⁺ を用いた従来技術と比較して高効率に反応が進行することが明らかとなり, 水素化・脱水素化反応における H⁻ 利用の優位性が認められた。今後は, 反応の原理検証, デバイス構成の最適化, H⁻ が関与する素反応の開拓を目指す。