

# 題目：二次元ホウ素カルコゲナイド材料の水素貯蔵機能および機能性ホウ化物の探索

調査研究代表：NIMS 中野智志

NIMS代表者：MANA 超高压構造制御グループ 中野智志

高压合成、構造予測、物性測定のエキスパートの連携により、新規ホウ素カルコゲナイド結晶や新規ナノシートを作成、水素貯蔵機能のほか新規機能を探索する

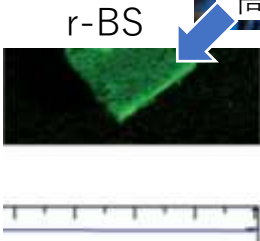
NIMS  
高压合成  
高压水素化反応



AIST  
DFT計算→構造・物性・条件予測

KEK・AIST・NIMS  
高压X線回折測定  
高压分光測定(Raman, IR)

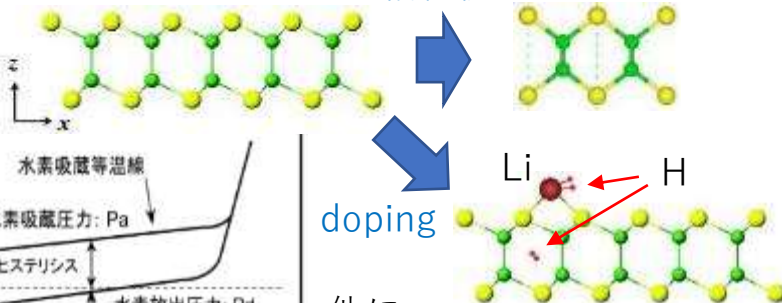
ホウ素カルコゲナイド  
B-S  
B-Se  
B-Te



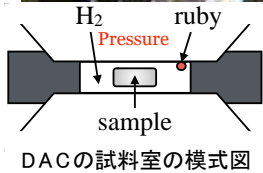
高压合成

剥離

半導体  
二次元BSナノシート  
相転移  
金属→超伝導

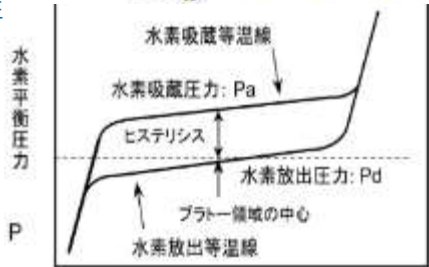


高压X線回折



DACの試料室の模式図

筑波大学  
ナノシート作成  
水素貯蔵機能評価  
その他物性評価



水素吸蔵・放出特性

doping  
他に  
熱電機能、  
光触媒機能  
などの評価

高温高压水素による水素化、  
アルカリ金属ドーピング  
など

【年間活動計画】 構造解析、物性評価、新物質予測を参画機関の連携で実施

- 6-7月 高品位 r-BS 結晶の高圧合成、構造多形の探索・結晶構造解明
- 8-10月 r-BSの水素貯蔵、熱電、光触媒機能等の物性測定（新規機能性探索）  
B<sub>3</sub>Sなど他のB-S系層状化合物、ナノシートの探索（高温高圧合成）
- 11-2月 r-BSおよび新規B-S系層状化合物の圧力誘起相転移、高温高圧水素との反応、アルカリ金属ドーピング  
（構造モデリング、高圧X線・分光測定）
- 3月 B-S系総括、B-Se, B-Te系への展望・展開

【期待される成果】

- ・二次元BSナノシートの水素貯蔵性能のほか新規物性（熱電、光触媒、超伝導）の発見。
- ・ B<sub>3</sub>S, B<sub>2</sub>Sなど新規B-S系二次元ナノシートの開発。
- ・ B-Se, B-Te系を含め、これまで実験研究の少ないホウ素カルコゲナイド二次元シートの合成・物性に関する広範な知見が得られる。
- ・ 従来と異なる系の2D層状材料を提供することにより、新たな機能性材料・デバイス基板材料を提供。新規機能性ホウ化物の創成。

