

Présentation de l'institut

La recherche en chimie

Accueil > Espace communication > En direct des laboratoires > Oxyhydrure

Laboratoires de l'institut

Informations pratiques aux laboratoires

Politique industrielle

Europe et international

Carrières et emplois

Espace communication

En direct des laboratoires de l'institut de Chimie

Des hydrogènes hyper mobiles dans un oxyhydrure de BaTiO_3

Dans les oxydes cristallins, la substitution de l'anion O^{2-} par d'autres anions (F^- , S^{2-} , N^{3-} , etc.) est bien connue pour potentiellement générer de nouvelles propriétés. Cependant la substitution chimique de l'oxygène par l'anion hydrure H^- , donnant lieu à la formation d'un oxyhydrure, est rare. Un nombre extrêmement restreint d'oxyhydrures comportant des quantités significatives d'anions H^- a été rapporté dans la littérature.

En partant du titanate de Baryum (BaTiO_3), matériau très utilisé dans l'industrie électronique, abondant et non toxique, la réduction chimique par l'hydrure de calcium CaH_2 à moyenne température (moins de 600°C) a permis d'isoler des composés de formule supposée $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$. Grâce notamment à la complémentarité de la diffraction du rayonnement synchrotron et des neutrons sur poudre, la coexistence sur le même site cristallographique d'anions hydrure et oxygène a pu être mise en évidence, conduisant à la stœchiométrie $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$. Les concentrations en ions H^- peuvent atteindre des valeurs très élevées (jusqu'à 20% d'occupation du site anionique) et les degrés d'oxydation du titane ($\text{Ti}^{3+/4+}$) sont ceux qu'il présente usuellement.

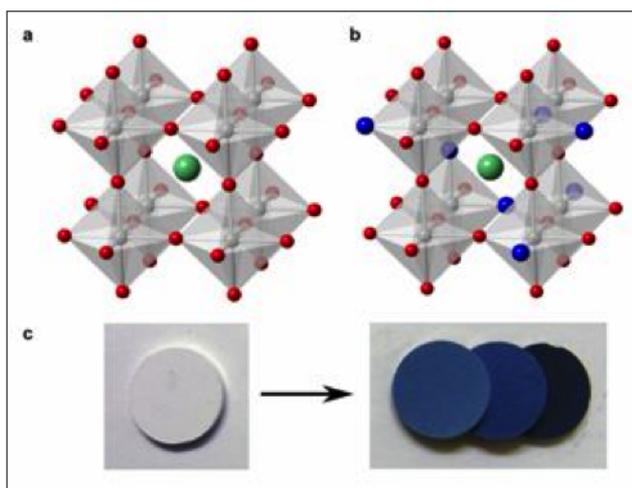
$\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$ se révèle être un semiconducteur relativement stable et l'espèce hydrure s'avère échangeable en quelques heures avec l'hydrogène gazeux, et ce dès 400°C . Cette mobilité remarquable des anions hydrures dans ce solide est tout à fait inattendue à une température aussi basse étant donné le nombre négligeable de lacunes, nécessaires à une mobilité ionique efficace. Au-delà d'une concentration seuil en H^- , la mise en jeu de mécanismes originaux de diffusion ultra-rapide de l'hydrogène doit donc être envisagée, avec des implications évidentes dans le domaine des conducteurs protoniques.

Même s'il faut maintenant comprendre et expliquer l'origine de cette mobilité exceptionnelle des hydrures, on peut déjà imaginer une famille de nouveaux oxyhydrures de métaux de transitionaux propriétés électroniques ou magnétiques originales, utilisables sous forme de céramiques ou de couches minces.

Liens utiles et partenaires

Rechercher sur ce site

ok



BaTiO_3 et son oxyhydrure. **a** De structure perovskite typique, BaTiO_3 est formée par des octaèdres TiO_6 reliés par les sommets entourant les cations Ba en vert. **b** L'oxyhydrure $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$ où les anions oxydes en rouge ont été remplacés statistiquement par des anions hydrures en bleu. **c** Le changement de couleur accompagnant la réduction et l'insertion d'hydrures. Les trois pastilles bleu-noir sont de compositions approximatives (de la gauche vers la droite) $\text{BaTiO}_{2,9}\text{H}_{0,1}$, $\text{BaTiO}_{2,7}\text{H}_{0,3}$ et $\text{BaTiO}_{2,5}\text{H}_{0,5}$.

© CNRS / O. Hernandez

Référence

Y. Kobayashi, O. J. Hernandez, T. Sakaguchi, T. Yaiima, T. Roisnel, Y. Tsujimoto, M. Morita, Y. Noda, Y.

Mogami, A. Kitada, M. Ohkura, S. Hosokawa, Z. Li, K. Hayashi, Y. Kusano, J.E. Kim, N. Tsuji, A. Fujiwara, Y. Matsushita, K. Yoshimura, K. Takegoshi, M. Inoue, M. Takano, H. Kageyama

An oxyhydride of BaTiO₃ exhibiting hydride exchange and electronic conductivity

Nature Materials **15** Avril 2012.

Contacts chercheurs

Olivier Hernandez, Sciences Chimiques de Rennes

Courriel : olivier.hernandez@univ-rennes1.fr

Tél : 02 23 23 56 35

Thierry Roisnel, Sciences Chimiques de Rennes

Courriel : thierry.roisnel@univ-rennes1.fr

Tél : 02 23 23 59 02

Contacts institut

Christophe Cartier dit Moulin, Jonathan Rangapanaiken

16 avril 2012



[Les actualités d'autres laboratoires](#)