

中性子回折を用いた酸化物イオン伝導体の構造物性 Structure Science of Oxide-ion Conductors using Neutron Diffraction

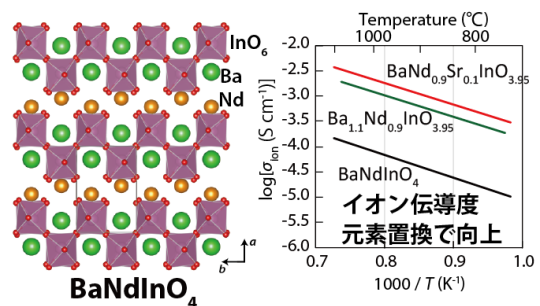
藤井 孝太郎, 八島 正知(東京工業大学 理学院)

酸化物イオン伝導体は固体酸化物形燃料電池の固体電解質等への応用可能な材料である。そのイオン伝導度は結晶構造と密接な関係があり、イオン伝導度と構造の関係を明らかにすることや、イオン伝導経路を明らかにすること、また構造に基づいて新しい酸化物イオン伝導体を設計することは、次世代の酸化物イオン伝導体開発には必要不可欠なことである。金属酸化物の結晶構造を精確に解析するためには、酸素の散乱能が比較的大きい中性子回折法を用いることが必要である。我々の研究グループでは、これまで新しい構造をもつ酸化物イオン伝導体 BaNdInO_4 およびそのドーパ体に関する研究^[1-4]や、新しい酸化物イオン伝導体 SrYbInO_4 ^[5], BaR_2ZnO_5 (R : 希土類)^[6]の研究, $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ における酸化物イオン伝導経路の可視化^[7], アパタイト型酸化物イオン伝導体の研究^[8]などを粉末および単結晶中性子回折法を用いて進めてきた。本発表では中性子回折を用いた酸化物イオン伝導体の最近の研究成果について紹介する。

[1] K. Fujii et al., *Chem. Mater.*, 2014, 26(8), 2488. [2] K. Fujii et al., *J. Mater. Chem. A*, 2015, 3(22), 11985., [3] M. Shiraiwa et al., *J. Electrochem. Soc.*, 2017, 164(13), F1392. [4] K. Fujii et al., *J. Ceram. Soc. Jpn.*, 2018, 126(10), 852. [5] A. Fujimoto et al., *J. Phys. Chem. C*, 2017, 121(39), 21272. [6] K. Nakamura et al., *J. Ceram. Soc. Jpn.*, 2018, 126(5), 292., [7] W. Uno et al., *J. Ceram. Soc. Jpn.*, 2018, 126(5), 341. [8] K. Fujii et al., *J. Mater. Chem. A*, 2018, 6(23), 10835.

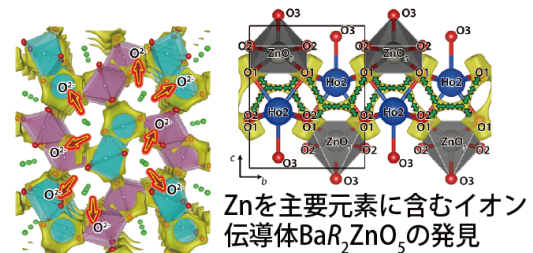
構造型酸化物イオン伝導体

- ・イオンサイズに注目した構造設計で見出す
- ・粉末中性子回折データからの未知構造解析
- ・元素置換で伝導度向上 / 構造的要因解明



新酸化物イオン伝導体の探索

- ・新しい酸化物イオン伝導体の発見
- ・中性子回折を利用した構造解析



CaFe_2O_4 型新物質の酸化物イオン伝導体 SrYbInO_4

イオン伝導機構の解明

- ・単結晶中性子回折法を用いて研究

