

中性子回折による新規イオン伝導体の結晶構造解析

藤井孝太郎(東京工業大学)

1. Introduction

酸化物イオン伝導体は、固体酸化物形燃料電池などに応用が可能な次世代エネルギーの基幹材料である。イオン伝導度は結晶構造と密接な関係があり、特定の構造型でイオン伝導度が高いことが知られている。より良いイオン伝導体が無数にある材料の中には存在すると期待されるが、有望なものを見つけることは容易ではない。我々は最近、新しい酸化物イオン伝導体を発見した。本課題では、これらの新しい酸化物イオン伝導体について、中性子回折を利用した構造解析からイオン伝導と構造の関係を明らかにし、次の材料設計指針を立て、革新的な酸化物イオン伝導体の開発を目指した研究をすすめる。

2. Experiment

2.1 試料 (sample(s))

金属酸塩化物 ($M-O-Cl$)

バリウム希土類酸化物 ($Ba-R-O\cdot R$ は希土類)

金属酸水素化物 ($M-M'-O-H$)

2.2 実験方法(Experimental procedure)

合成した材料は、バナジウム製のサンプルホルダーに充填し測定に用いた。大気中で不安定な化合物については、グローブボックス中にて試料を取り扱った。測定は、MLF BL20 iMATERIAにてダブルフレームモードで実施した。予備測定から各試料の回折強度を調べ、必要な計数時間を見積もったのち、本測定を実施した。試料は、リボルバー式の自動試料交換機を利用して自動的に交換した。得られたデータについては、Z-codeによりリートベルト解析を行い進める予定である。

3. Results

結果の代表例として図1に室温で測定したイオン伝導体の回折パターンを示す。この化合物は、酸塩化物の新しい酸化物イオン伝導体であり、目的の結晶相が得られていることが確認された。現在、細かい構造解析を進めており、特に酸化物イオン伝導体であるため、酸素の原子位置、異方性原子変位パラメーター占有率などを正確に決め、イオン伝導と構造の関係を明らかにする予定である。また、この材料は格子間に過剰な酸素が入る可能性があるため、その可能性についても調べる。

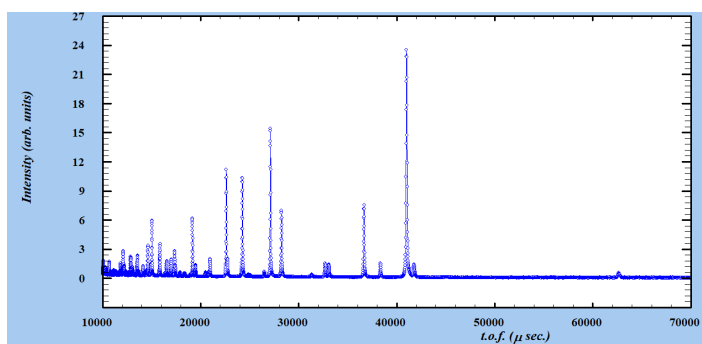


図1:新規酸塩化物の酸化物イオン伝導体の測定した回折データ

4. Conclusion

発見した新しい酸化物イオン伝導体について, iMATERIA において室温での回折測定を実施した. 高構造解析をすすめるには十分なデータ測定ができたと考えられるので, 引き続き構造解析を進め, 新規イオン伝導体における高イオン伝導の構造的要因の解明を行い, さらに次の材料設計の指針につなげたい.