

層状ペロブスカイト酸化物イオン伝導体の高分解能 X 線回折データに基づく 結晶構造解析

Crystal structure analysis based on high resolution X-ray diffraction data of layered perovskite oxide-ion conductors

藤井孝太郎, 八島正知

東京工業大学・理学院・化学系

〒152-8551 東京都目黒区大岡山 2-12-1-W4-17

Kotaro FUJII, Masatomo YASHIMA

2-12-1-W4-17, O-okayama, Meguro-ku, Tokyo, 152-8551, Japan

1 はじめに

酸化物イオン伝導体は固体酸化物形燃料電池や触媒、酸素分離膜等への応用が可能である重要な材料である。イオン伝導度は結晶構造と密接な関係があることが知られており、これまで蛍石型やペロブスカイト型構造など特定の結晶構造ファミリーに属する材料が高い酸化物イオン伝導度を示すことがわかっている。しかしながら、多くの研究がこのような特定の構造ファミリーに集中していることが問題である。近年、我々は層状ペロブスカイト構造をもつ材料の中から高い酸化物イオン伝導度を示す材料を発見した。^[1,2] これに続き、最近もいくつかの新しい層状ペロブスカイト構造をもつイオン伝導体を見つけることに成功している。このような材料におけるイオン伝導の機構を考えるためには、結晶構造の情報が必要である。特に、精度よく結晶構造を調べるためには、放射光を利用した高分解能の回折測定が必要になる。本課題では、我々が発見した層状ペロブスカイト構造をもつ酸化物イオン伝導体について、その結晶構造を室温から高温について明らかにする目的で、放射光を利用した回折実験を行った。

2 実験

高角度分解能放射光 X 線粉末回折測定を高エネルギー加速器研究機構(KEK)の PF BL-4B₂ に設置されている検出器多連装型回折計を用いて行った。試料を平板型のホルダーに充填し、反射法により波長 1.2 Å の X 線を利用して回折データを測定した。自作の高温炉^[3,4]を用いて、空气中で高温での回折測定を実施した。

3 結果および考察

図 1 に測定した層状ペロブスカイトの酸化物イオン伝導体の放射光 X 線回折パターンを示す。温度変化に伴い、反射の位置が低角側にシフトしている様子が確認された。大きな構造の変化は確認されなかったものの、200 °C から 400 °C になる際、わずかに反射の出現条件が変わっていることが確認され、構造変化の可能性が示唆された。高分解能 X 線回折測定を行ったことによってはじめて明らかにできた

ことである。現在、リートベルト法による結晶構造解析を進めており、細かい構造の変化を今後明らかにしていく予定である。

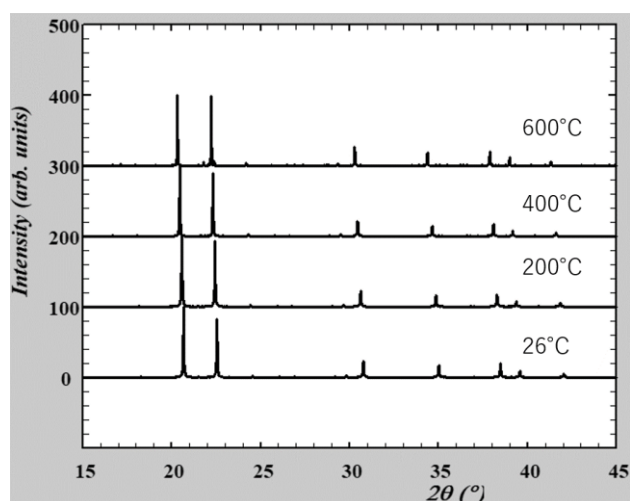


図 1 : 我々が発見した層状ペロブスカイト構造をもつ酸化物イオン伝導体の放射光 X 線回折パターン

参考文献

- [1] W. Zhang *et al.*, *Nat. Commun.* **11**, 1224 (2020).
- [2] M. Yashima *et al.*, *Nat. Commun.* **12**, 556 (2021).
- [3] M. Yashima *et al.*, *J. Appl. Crystallogr.*, **38**, 854 (2005).
- [4] M. Yashima *et al.*, *J. Am. Ceram. Soc.*, **89**, 1395 (2006).

成果

1. Zhang, W., & Yashima, M. (2022). *Ceramics International*, 48(12), 16522-16528.
2. Yaguchi, H., Fujii, K., Tsuchiya, Y., Ogino, H., Tsujimoto, Y., & Yashima, M. (2021). *ACS Applied Energy Materials*, 5(1), 295-304.
3. Suzuki, Y., Murakami, T., Fujii, K., Hester, J. R., Yasui, Y., & Yashima, M. (2022). *Inorganic Chemistry*, 61(19), 7537-7545.

kfujii@cms.titech.ac.jp