

混合導電性 SrFeO_{3-δ}の酸化物イオン欠損構造と高酸素透過特性

(名古屋工業大学物質工学専攻) ○白川史朗・籠宮功・柿本健一

〈背景〉

混合導電性酸化物は、酸素の分圧差を利用することで試料内を酸化物イオンが伝導することができる。この材料は燃料電池の空気極や酸素分離膜への応用が期待され、実用化に向けて酸化物イオン伝導性の向上が課題となっている。

酸素透過性向上のために酸化物イオンの輸送経路の短縮化が有効であると考えている。そこで本研究では、高い酸化物イオン伝導性を持つ SrFeO_{3-δ} に注目し単結晶 X 線回折測定・単結晶中性子回折測定から結晶構造解析を行い、酸化物イオンの欠損構造及び、輸送経路を議論する。

〈実験方法〉

(1) 試料準備

原料粉となる SrCO₃, Fe₂O₃ を秤量後、ボールミルを行い 1000 °C × 12 h か焼した。その後、仮焼粉を白金坩堝に入れて、融液法により単結晶の作製を行った。得られた試料は加圧熱処理を加えることで非双晶化を行った。

(2) 測定

非双晶化された単結晶を、単結晶中性子回折測定により空間格子の決定を行った。その後、単結晶 X 線回折測定による反射データを用いて結晶構造解析ソフト JANA2006 で構造の精密化を行った。

〈実験結果〉

中性子回折における空間格子の判定によれば、この非双晶化した試料は単斜晶 (*C2/m*) であることが分かった。この空間群により、精密化した結晶構造を Fig. 1 に示す。この構造は規則的な酸素欠損により Fig.1 の黒丸で囲まれたチャンネル構造が生成していることが分かる。この一方向のチャンネル構造内で酸素が抜けやすい構造をとっているため、酸化物イオンが輸送しやすい可能性が考えている。詳細な酸化物イオンの輸送経路については当日議論する。

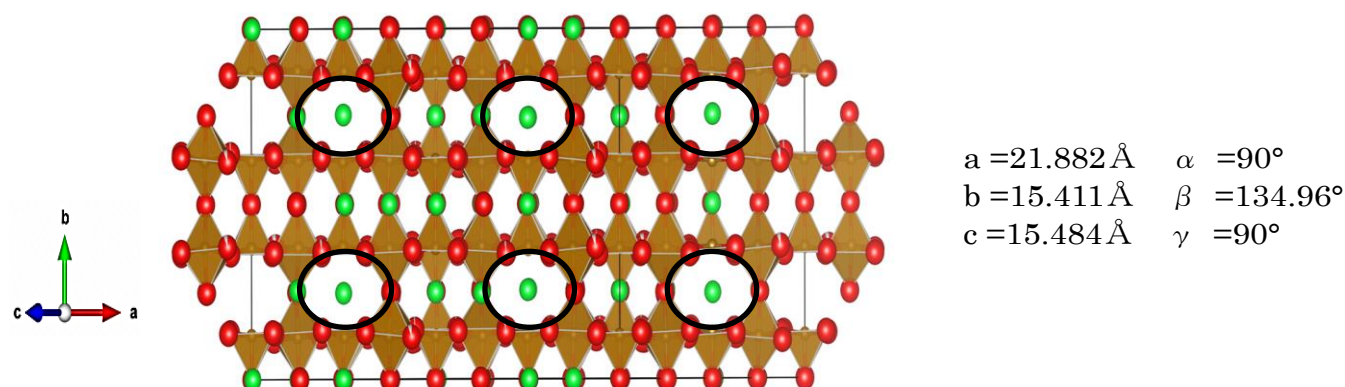


Fig.1 SrFeO_{3-δ}の結晶構造

Fig. 1 SrFeO_{3-δ}の結晶構造 (緑色 : Sr 黄色 : Fe 赤 : O 白抜き : 酸素欠陥)

○の部分は酸素欠損により生じたチャンネル構造