

(La, Sr)CoO_{3-δ}の異常分散を用いた結晶構造解析と酸素K吸収端のXANESスペクトル

伊藤孝憲

AGCセイミケミカル(株)CSR室

背景・経緯

これまでに固体酸化物型燃料電池(Solid Oxide Fuel Cell: SOFC)の空気極材料として、期待されている(La_{1-x}Sr_x)CoO_{3-δ}(LSC)の性能と電子構造、電子密度の関係を明らかにするために、SPring-8、Photon Factoryにて、高エネルギーX線によって測定したデータのリートベルト、MEM解析やX線吸収(X-ray absorption spectra: XAS)によってCoの電子状態を議論してきた。しかし、更なる詳細な電子構造、酸素の電子状態を調べるために、異常分散を用いたX線回折をあいちシンクロトロン光センターBL5S2、酸素のK吸収端を同BL7Uにて測定し、解析したので報告する。

結果

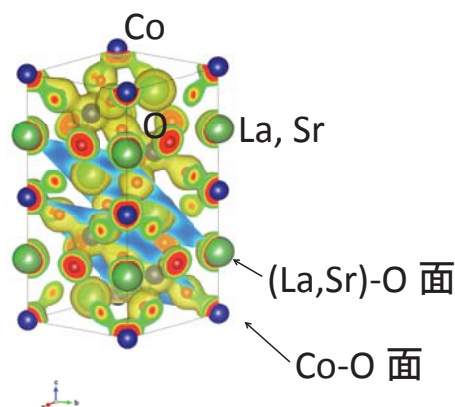


図1 LSC(x=0.25)の電子密度

X線波長1Åにて測定したデータをリートベルト、MEM解析を行った。図1にLSC(x=0.25)の電子密度、図2に(La, Sr)-O面、図3にCo-O面の電子密度を示す。(La, Sr)-O面よりCo-O面の方が共有結合性が強いことが分かる。今後は吸収端エネルギー前後での電子密度を評価し、電子密度変化を議論する。

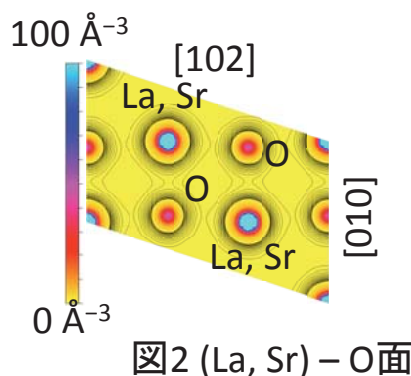


図2 (La, Sr) - O面

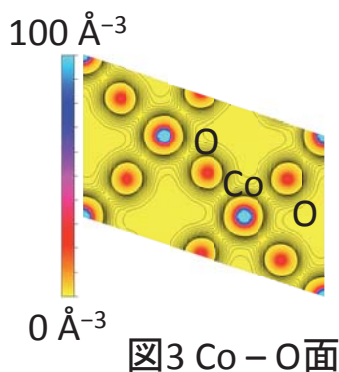


図3 Co - O面

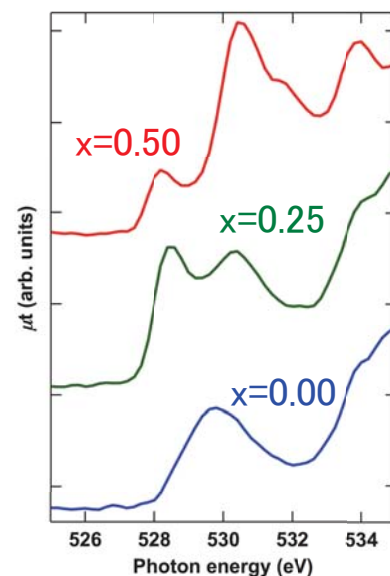


図4 酸素のK吸収端

図4に酸素のK吸収端の結果を示す。組成によって大きく変化し、Coだけでなく、酸素の電子状態も大きく変化していることが分かった。今後はピークフィッティングし、定量的な議論を行う。

期待される効果・社会的インパクト

Co-O結合の吸収端エネルギー前後での電子密度変化、酸素K吸収端からの酸素の電子状態の議論をすることで、LSCの電子構造を更に詳細に理解し、SOFC空気極材料性能向上のための材料設計に活かす。