



LaScO₃系ペロブスカイト型酸化物の放射光高温 XRD 測定

野村 勝裕¹, 井田 隆²

1 産業技術総合研究所, 2 名古屋工業大学先進セラミックス研究センター

キーワード：ペロブスカイト型酸化物, LaScO₃, プロトン伝導体, 高温 XRD 測定

1. 背景と研究目的

500~700 °Cの中温域で作動する固体酸化物形燃料電池 (SOFC) の電解質材料として、近年、プロトン伝導体が注目されている¹。我々は、これまでにペロブスカイト型酸化物 LaScO₃の La サイトを Sr で 20 mol%置換固溶した(La_{0.8}Sr_{0.2})ScO_{3-δ} (以下 LSS) が 600 °Cで約 6×10⁻³ S/cm の比較的高いプロトン伝導度を示すことを報告している²。LSS は酸素空孔を有し、加湿雰囲気中では 800 °Cより低い温度で H₂O を結晶構造中に取り込み、プロトン伝導が発現する。本研究では、LSS の高温における結晶構造に関する知見を得ることを目的として、室温~700 °Cの温度範囲で放射光 XRD 測定を行い、得られた回折データについてリートベルト法による構造精密化を行った。

2. 実験内容

測定用LSS粉末試料はLa₂O₃, SrCO₃, Sc₂O₃を出発物質とし、固相反応法により合成した。合成した試料を粉砕し、φ0.1 mmの石英ガラス製キャピラリーに充填し、回転させながら、波長0.6 Åにて、室温~700 °Cの温度範囲でXRD測定を行った。室温 (27 °C) での測定後、一旦700 °Cに昇温し、その後、500 °C、300 °C、室温 (27 °C) と温度を下げながら測定を行った。回折X線は4連装PILATUS100K (カメラ長340 mm) により検出し、室温では最低角検出器を 0°, 12.5°, 25° で、高温ガス吹き付け時には 0°, 12.5° でデータを記録した。

3. 結果および考察

Fig. 1 に 27 °Cで測定した昇温前の LSS の XRD プロファイルを示す。いずれの回折線も空間群 *Pnma* (No.62) として指数付け可能であり、斜方晶系 GdFeO₃型ペロブスカイト型構造を持つことが分かった。700 °Cに昇温した後の XRD プロファイルについては、いずれも全ての回折線を空間群 *Pnma* (No.62) の単一相として指数付け出来なかった。この原因として、700 °Cに昇温した際、結晶構造中に含まれていた水素の一部がペロブスカイト型構造を形成する酸素と共に H₂O を形成して脱離し、その結果、酸素欠損量の多いペロブスカイト相と酸素欠損量の少ないペロブスカイト相が共存することが考えられる。現在、昇温後の XRD プロファイルについて、複数のペロブスカイト相の存在を仮定したリートベルト解析を継続している。

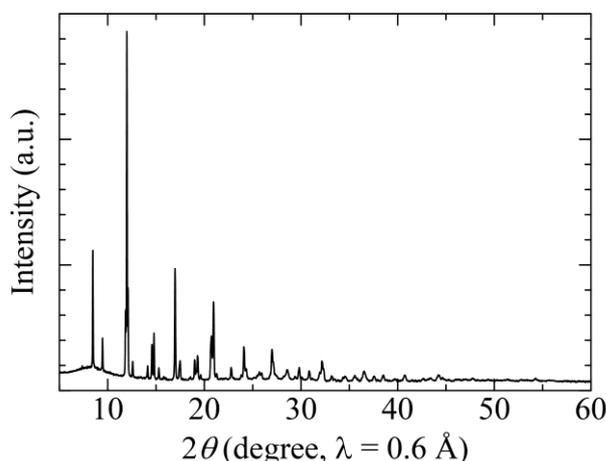


Fig. 1 (La_{0.8}Sr_{0.2})ScO_{3-δ} (LSS) の 27 °C における XRD プロファイル

4. 参考文献

- Ed. by M. Marrony, "Proton-Conducting Ceramics: From Fundamental to Applied Research", pp.73-87, Pan Stanford Publishing (2016).
- K. Nomura et al., *Solid State Ionics*, **175**, 553-555 (2004).