



新規全固体電池用電解質の結晶構造解析 2

橘 慎太郎¹, 折笠 有基²

1 立命館大学大学院生命科学研究科, 2 立命館大学生命科学部

キーワード：全固体電池, 結晶構造

1. 背景と研究目的

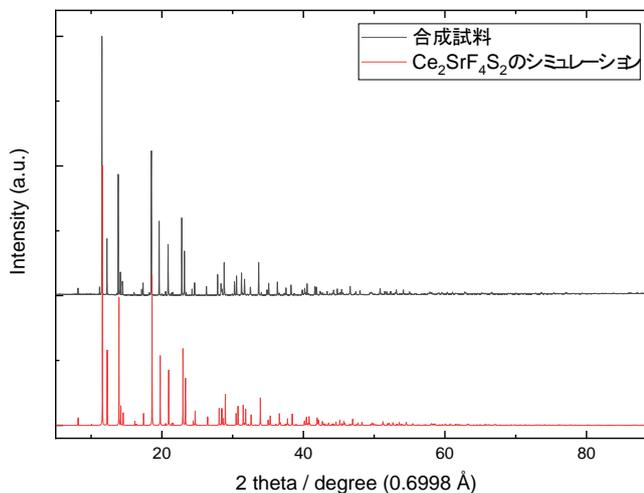
革新型蓄電池の候補としてフッ化物イオンをキャリアとする全固体二次電池が挙げられる。この電池ではカウンターカチオンの多電子移動反応を実現できるため、高エネルギー密度の二次電池になる潜在性を有している[1]。実用化へ向けた最大の課題は、高いイオン伝導率と広い電位窓を持ち合わせた実用レベルの固体電解質が無いことである。これまでに報告されている高い導電率を有するフッ化物イオン伝導体は、 PbSnF_4 や $\text{La}_{0.9}\text{Ba}_{0.1}\text{F}_{2.9}$ のように、フッ化物イオンのみを含んだ単一アニオンの化合物であり[2]、複合アニオン化合物を用いた報告例はほとんどない。本研究では、希土類硫化フッ化物 La-Sr-F-S の固相法による合成を試みた。合成した化合物を X 線回折によって、相同定を行った。

2. 実験内容

Ar 雰囲気下にて La, LaF_3 , Sr, S を乳鉢で混合し、ペレットに成型した。成型後の試料を Ta 製容器に入れ、石英管を用いて真空封入した後、 1000°C 、48 時間の焼成を行った。試料を大気中にて $\phi 0.3 \text{ mm}$ のリンデマンガラスのキャピラリーに充てんし、あいち SR のビームライン BL5S2 にて XRD 測定を行った。デバイシェラー光学系にて、波長 0.7 \AA 、検出器は PILATUS を用いて測定した。

3. 結果および考察

図 1 に合成した試料の XRD パターンを示す。報告されている $\text{Ce}_2\text{SrF}_4\text{S}_2$ の結晶構造からのシミュレーションパターンと良い一致を示しており[2]、正方晶、空間群 $I4/mmm$ で指数付けができた。格子定数を算出した結果、 $a = b = 4.104(2) \text{ \AA}$ 、 $c = 19.69(1) \text{ \AA}$ であった。現在のところ、詳細な構造解析を進めるとともに、イオン伝導率との相関について議論を進める予定である。



4. 参考文献

1. M. A. Reddy and M. Fichtner, *J. Mater. Chem.* **21**, 17059-17062 (2011).

2. A. Demourgues et al, *J. Alloys. Compd.* **323-324**, 223-230 (2001).

図 1 合成試料の XRD パターンおよびシミュレーション