



LaScO₃系ペロブスカイト型酸化物の放射光高温 XRD 測定

井田 隆¹, 野村 勝裕²

1 名古屋工業大学先進セラミックス研究センター, 2 産業技術総合研究所

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。ペロブスカイト型酸化物 LaScO₃ の La サイトを Sr で置換固溶した (La_{0.8}Sr_{0.2})ScO_{3-δ} は 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²。LaScO₃系ペロブスカイト型酸化物の電気伝導性に関する報告は多いが、結晶構造に関するものは限られている^{3,4}。本研究では Sr 置換固溶無しの LaScO₃ の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

測定用粉末試料はLa₂O₃, Sc₂O₃を出発物質として用い、固相反応法にて合成した。合成した試料を粉碎し、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、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 700 °C で測定した LaScO₃ の XRD プロファイルを示す。室温~700 °C で得られた全ての回折プロファイルについて、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。測定温度の範囲で相転移の存在は確認されなかった。リートベルト解析

(RIETAN-FP⁵) による構造精密化の結果、温度上昇とともに *a*, *b*, *c* 軸ともに軸長が長くなり、結晶を構成する各原子 (La, Sc, O) の等方性原子変位パラメータが増加することが分かった。今後、Sr を固溶させた (La_{0.8}Sr_{0.2})ScO_{3-δ} について同様に高温測定を行い、比較検討を行う予定である。

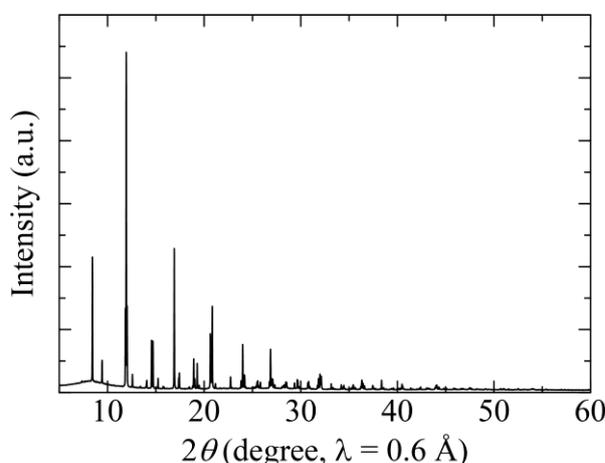


Fig. 1 LaScO₃ の 700 °C における XRD プロファイル

4. 参考文献

1. Ed. by M. Marrony, "Proton-Conducting Ceramics: From Fundamental to Applied Research", pp.73-87, Pan Stanford Publishing (2016).
2. K. Nomura et al., *Solid State Ionics*, **175**, 553-555 (2004).
3. K. Nomura et al., *Solid State Ionics*, **162-163**, 99-104 (2003).
4. R. P. Liferovich, R.M. Mitchell, *J. Solid State Chem.*, **177**, 2188-2197 (2004).
5. F. Izumi, K. Momma, *Solid State Phenom.*, **130**, 15-20 (2007).