

## 中温型燃料電池材料のキャリアであるイオン、 プロトンの構造解析および導電機構の解明

Studies of crystal structure and conduction mechanism  
of intermediate temperature type SOFC materials

白崎 紗央里<sup>1)</sup> 伊藤 孝憲<sup>1)</sup> 佐久間 隆<sup>2)</sup> 高橋 東之<sup>2)</sup> 井川 直樹<sup>3)</sup>  
Saori SIRASAKI Takanori ITOH Takashi SAKUMA Haruyuki TAKAHASHI Naoki IGAWA

<sup>1)</sup>AGC セイミケミカル(株) <sup>2)</sup>茨城大学 <sup>3)</sup>原子力機構

中温型固体酸化物燃料電池 (SOFC) の電解質材料 ( $\text{Sn}_{0.9}\text{In}_{0.1}$ )  $\text{P}_2\text{O}_7$  に重水素ドーブし 300K、500K における高分解能粉末中性子回折測定を行った。それらのデータを用いてリートベルト/MEM 解析を行うことによって、格子中の重水素の位置を直接確認した。

**キーワード** : 燃料電池 SOFC リートベルト MEM

### 1. 目的

現状の SOFC の最も重要な課題は作動温度の低温化にある。その課題解決のためには SOFC 構成材料の材料設計が重要となる。しかし、SOFC 材料はセルとしての評価が主であり、材料自身の物性測定やキャリアであるイオン、プロトンの結晶中での構造、挙動が明らかにされていない。本研究は高分解能粉末中性子回折 (HRPD) を用い、またそれらのデータをリートベルト/MEM (最大エントロピー法) 解析を行うことで、X 線回折では観測できない、プロトンの座標、熱振動パラメータについて明らかにする。それらの結果と物性測定、第一原理計算の結果から SOFC の作動温度を低温化させる材料設計を行う。

### 2. 方法

固相法によって合成した ( $\text{Sn}_{0.9}\text{In}_{0.1}$ )  $\text{P}_2\text{O}_7$  を  $\text{D}_2\text{O}$  処理することによって重水素 (D) ドープを行った。D ドープ、ドープなしの各試料を 300K、500K において HRPD を用いて、粉末中性子回折測定を行った。これらのデータを用いて RIETAN-FP<sup>[1]</sup>によってリートベルト解析、PRIMA<sup>[2]</sup>によって MEM 解析、これらの結果を VESTA<sup>[1]</sup>を用いて可視化した。

### 3. 研究成果

図に 300K における MEM 解析によって得られた散乱長密度分布を示す。空間群 : Pa-3 によって構造パラメータが精密化でき、格子定数は 7.830 (1) Å となった。はじめのリートベルト解析では D の位置を設定せずに解析を行った。MEM 解析を行うと、(0.158, 0.640, 0.065) の位置に散乱長密度を確認した。D をこの位置に設定し再度解析を行うと、R 値は低下した。最終的な D のサイト占有率は 0.03 程度となった。

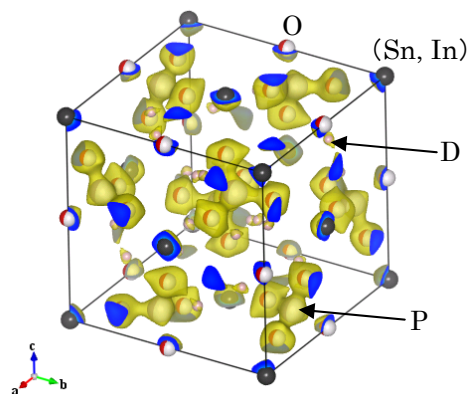


図 散乱長密度分布

### 4. 結論・考察

中性子回折データをリートベルト/MEM 解析することは D の位置を議論するには有効であることが確認された。現在、この D 位置が安定サイトであるか否か平面波基底を用いた第一原理計算 (WINE2k) によって確認中である。※本報告書は平成 19 年度 (下期) に実施した実験データを含む。

### 5. 引用(参照)文献等

- [1] F. Izumi et al., Proc. XX Conf. Appl. Crystallogr., Solid State Phenom. Vol. 130 (2007) 15-20.  
[2] F. Izumi et al., Recent Research Developments in Physics, Vol. 3, Transworld Research Network, Trivandrum, 2002, pp. 699-726.