

## La<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>Co<sub>1-y</sub>Fe<sub>y</sub>O<sub>3-δ</sub>系酸化物イオン・電子混合伝導体の合成と MD-RMC 法による局所構造解析

(東理大理工<sup>1</sup>) ○渡邊将志<sup>1</sup>・北村尚斗<sup>1</sup>・石橋千晶<sup>1</sup>・井手本康<sup>1</sup>

Synthesis of La<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>Co<sub>1-y</sub>Fe<sub>y</sub>O<sub>3-δ</sub> oxide ion-electron mixed conductors and local structural analysis using RMC (<sup>1</sup>Tokyo University of Science) ○Masashi Watanabe,<sup>1</sup>Naoto Kitamura,<sup>1</sup>Chiaki Ishibashi,<sup>1</sup>Yasushi Idemoto<sup>1</sup>

Solid oxide fuel cells (SOFC) are attracting attention as power generation devices with high energy conversion efficiency and low environmental impact. LaCoO<sub>3</sub> system, which exhibits excellent ion-electron mixed conductivity as an air electrode material, is attracting attention, and the conductive properties are improved by various partial substitutions. However, the correlation between crystalline and electronic structures and conductivity remains unclear. Therefore, in this study, we focused on (La,Sr)(Co,Fe)O<sub>3-δ</sub> mixed conductors, and investigated the effects of substitution on mean/local structure and oxide ion conductivity using Rietveld analysis using synchrotron radiation X-ray diffraction measurement and total scattering measurement. In addition, Rietveld analysis using synchrotron X-ray diffraction (Fig. 1) was performed. As a result, relatively good fitting was obtained as shown in Fig. 1. Using this result, MD calculation was performed. As a result, remarkable oxide conductivity was confirmed from the mean squared displacement of each element.

**Keywords :** solid oxide fuel cell, air-electrode material, conduction properties, RMC method

固体酸化物型燃料電池 (SOFC) はエネルギー変換効率が高く、環境負荷の小さい発電装置として注目を集めている。現在、空気極材料として優れたイオン・電子混合伝導性を示す LaCoO<sub>3</sub>系が注目されており、種々の部分置換による導電特性の改善が図られている。しかし、結晶・電子構造と導電特性の相関関係については依然不明な点が多い。そこで、本研究では、(La,Sr)(Co,Fe)O<sub>3-δ</sub>系混合伝導体に着目し、置換による平均・局所構造と酸化物イオン伝導性への影響について、放射光 X 線回折測定を用いた Rietveld 解析と全散乱測定を用いて検討を行った。

La<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>Co<sub>1-y</sub>Fe<sub>y</sub>O<sub>3-δ</sub>(x=0.3 y=0.8), La<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>CoO<sub>3-δ</sub>(x=0.3), LaCoO<sub>3-δ</sub>を固相法により合成し、得られた焼結体について導電率を測定した結果、Sr、Fe 置換することにより導電率は向上した。

また、放射光 X 線回折(Fig.1)を用いた Rietveld 解析を行った。結果として Fig.1 に一例を示したように比較的良好なフィッティングが得られた。この結果を利用して、MD 計算を行った。その結果、各元素の平均二乗変位から顕著な酸化物伝導性を確認できた。

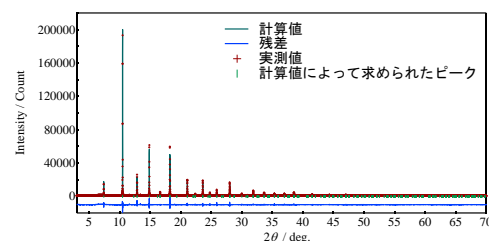


Fig.1 La<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>CoO<sub>3-δ</sub>(x=0.3)の Rietveld 解析パターン

1) P. Amin et al., *Int. J. Hydrog. Energy* 35(17), 9398-9400 (2010)