

## 重点産業利用課題報告書

実施課題番号：2007A1890

実施課題名：固体酸化物燃料電池（SOFC）電解質材料の原子変位パラメータ温度依存性の考察

実験責任者所属機関及び氏名：AGC セイミケミカル(株)伊藤孝憲

使用ビームライン：BL02B2

実験結果

### 実験

全ての試料は液相法によって合成した。GDC ( $\text{CeO}_2$  doped with 10mol%  $\text{Gd}_2\text{O}_3$ )、製法 A,B。試料：YSZ ( $\text{ZrO}_2$  doped with 8mol%  $\text{Y}_2\text{O}_3$ )、製法 A、B。SDC ( $\text{CeO}_2$  doped with 10mol%  $\text{Sm}_2\text{O}_3$ )、製法 A。YSZ、GDC に関しては全く違う合成法 A と B の試料を用いた。測定条件：室温から 900K まで 100K 毎。用いたリートベルトプログラム：RIETAN-2000[1]。初期条件として ICSD を用いた。YSZ：#90894、GDC：#28796、SDC：#28794。

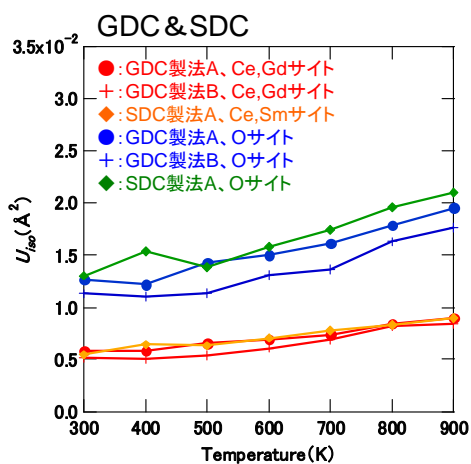
### 結果および考察

図 1(a)に  $\text{CeO}_2$  系 (GDC、SDC) の  $U_{iso}$  を示す。Ce サイトは 300K で  $0.5 \times 10^{-2} \text{Å}^2$ 、O サイトは  $1.3 \times 10^{-2} \text{Å}^2$  となり、両サイトにおいて温度上昇に伴い、増加する傾向にある。また、 $\text{CeO}_2$  系は製法、GDC、SDC に係わらず、同様な値を示した。図 1 (b) に YSZ の  $U_{iso}$  を示す。YSZ 系は Zr サイト、Ce サイトと同様な値を示したが、O サイトに関しては  $\text{CeO}_2$  系の 2 倍程度の値を示した。また、O サイトに関しては製法によって差が出てきている。この差が有効であるかは今後検討が必要である。図 2 に 300K にて規格化した  $U_{iso}$  を示す。 $\text{CeO}_2$  系は 500K 以上の温度に対して、比例関係にあり、3 次元の古典的調和振動子モデルに近いと考えられる。中性子回折によって酸素拡散と  $U_{iso}$  を関係づけた研究は報告されているが、[2]放射光 XRD を用いて精度のよい測定、解析をすることによって酸素拡散と  $U_{iso}$  の関係づけが出来る可能性がある。一方、YSZ は  $U_{iso}$  の明瞭な温度依存性が見られない。原因としては、各サイトが本来の位置 (Zr,Y: 4a サイト、O: 8c サイト) から若干ずれて存在していること等が考えられる。YSZ に関しては今後も解析を継続する。

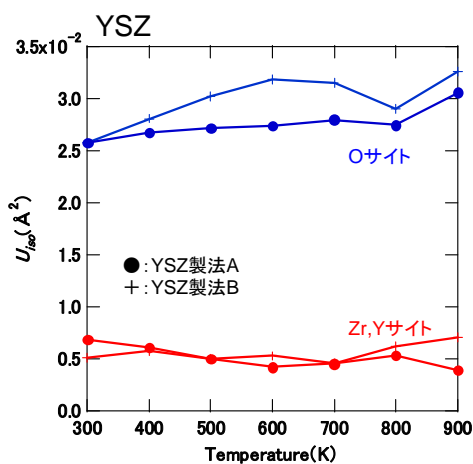
### 参考文献

[1] F. Izumi and T. Ikeda, Mater. Sci. Forum, 321-324 (2000) 198-203.

[2] Masahiro Kajitania, Motohide Matsudaa, Akinori Hoshikawab, Stefanus Harjob, Takashi Kamiyamac, Toru Ishigakib, Fujio Izumid, Michihiro Miyake, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 68 (2007) 758-764.

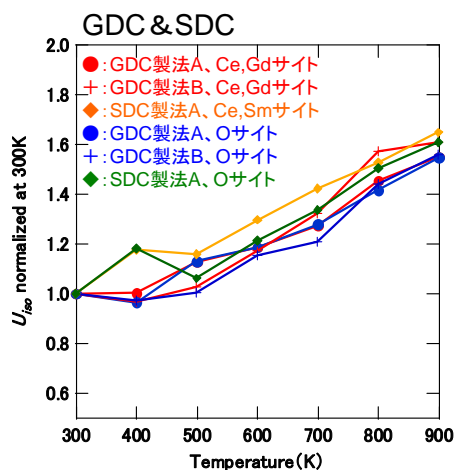


(a)

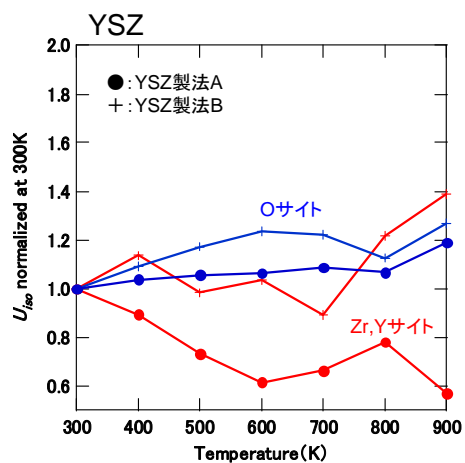


(b)

図1. 等方性原子変位パラメータ( $U_{iso}$ )の温度依存性



(a)



(b)

図2. 等方性原子変位パラメータ( $U_{iso}$ )の温度依存性 (300Kにて規格化)

以上