



東京大学工学系研究科総合研究機構 第13回次世代ジルコニアセミナー

高イオン伝導体の探索と構造解析

八島 正知

東京工業大学 理学院 教授

本講演ではイオン伝導体の探索と構造解析に関する我々の研究について述べる。講演者の研究の原点はジルコニアセラミックスの合成、相転移、状態図、結晶構造解析である。その後さまざまなセラミックスの結晶構造解析、特に高温での精密構造物性の研究を行い、最近では結晶構造に基づいたイオン伝導体の探索を行っている。結晶構造データベースICSDに登録されている69種類のDion-Jacobson相に関する、83個の結晶学データに対して、結合原子価法によるスクリーニングを実施することにより、Dion-Jacobson相で初めての酸化物イオン (O^{2-}) 伝導体CsBi₂Ti₂NbO_{10-δ}の発見した[1]。また、300°C付近で酸化ビスマスの伝導度より高い酸化物イオン伝導体Ba₇Nb_{3.9}Mo_{1.1}O_{20.05}も発見した (Fig. 1右) [2]。Ba₇Nb_{3.9}Mo_{1.1}O_{20.05}は六方ペロブスカイト関連酸化物であり、1073 Kで高温その場測定した中性子回折実験と最大エントロピー法により解析した結晶構造と中性子散乱長密度分布から、本質的な酸素欠損層において準格子間機構により酸化物イオンが拡散する直接的かつ実験的な直接証拠が得られた (Fig. 1左と中央)。従来のセラミックプロトン (H⁺) 伝導体ではアクセプタードーピングが必要であるが、ドーピング無しに高いプロトン伝導度を示す新型プロトン伝導体Ba₅Er₂Al₂ZrO₁₃ [3]、β-Ba₂ScAlO₅ [4]等を発見し、第一原理分子動力学計算と中性子回折等によりプロトン伝導機構を明らかにした。例えばβ-Ba₂ScAlO₅では水の取り込みが本質的な酸素欠損層で起こり、BaO₃が最密充填したScO₆八面体層をプロトンが高速移動する[4]。

文献[1] *Nat. Comm.*, 11, 1224 (2020). [2] *Nat. Comm.*, 12, 556 (2021). [3] *J. Am. Chem. Soc.*, 142, 11653 (2020). [4] *Adv. Funct. Mater.*, 33, 2206777 (2023).

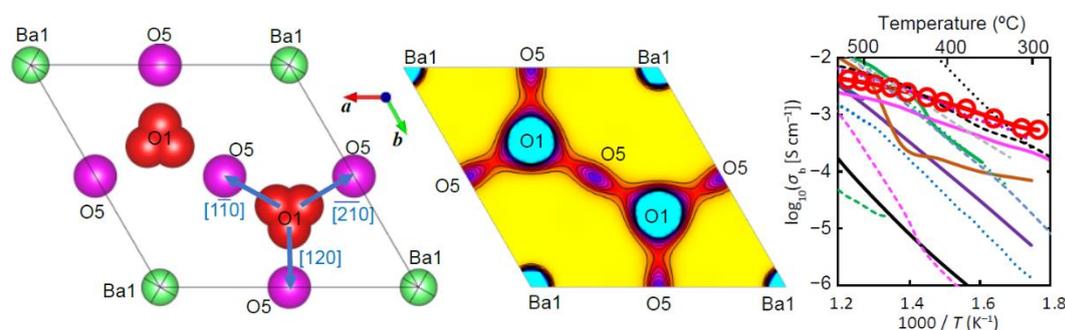


Fig. 1: High oxide-ion conduction (right) and the refined structure (left) and MEM NSLD distribution (centre) on the (001) plane of Ba₇Nb_{3.9}Mo_{1.1}O_{20.05} at 1073 K [2].

日時：2023年5月10日(火) 14:00~15:30 Zoom開催
主催：東京大学「次世代ジルコニア創出」社会連携講座

問合せ先：ngzirconia@gmail.com