

ディビジョン番号	18
ディビジョン名	環境・安全化学・グリーンケミストリー・サステイナブルテクノロジー

大項目	3. 資源・エネルギー
中項目	3-1. 電池
小項目	3-1-7. 新規酸化物イオン伝導体の開発

<p>概要（200字以内）</p> <p>現在、酸化物イオン伝導体としては、蛍石型構造を有する4価の金属酸化物が主に使用されており、ZrO₂が主に使用されている。一方、新しい酸素イオン伝導体としてLaGaO₃などのペロブスカイト型酸化物が知られている。今後はペロブスカイトやペロブスカイト類縁化合物で、新規な酸化物イオン伝導体の開発が行われるとともに、低温作動化への要求から、これらの新規酸素イオン伝導体の応用が始まると期待される。</p>	
<ul style="list-style-type: none"> ・材料探 ・新機軸る 設計 ・新物類派 の確 ・本格 ・オオ々効果 ・燃電の用 ・熱分野の開 	
<p>現状と最前線</p> <p>(現状)</p> <p>酸素欠陥を導入することで、蛍石型構造を有する4価の金属酸化物が現在、酸化物イオン伝導体として使用されており、とくにY₂O₃を添加した安定化ZrO₂が酸化物イオン伝導体として、広範囲で、使用されてきた。図1には現状で、知られている酸化物イオン伝導体の比較を示した。酸素イオン伝導性はBi₂O₃>>CeO₂>ZrO₂>ThO₂>UO₂の順にイオン伝導度が向上することがわかっているが、これらの酸化物では酸化物イオン伝導性が高くなるほど、還元に伴う電子伝導が発現し易くなる。そこで、現状では広い酸素分圧下で使用可能な酸素イオン伝導体としてはZrO₂のみである。しかし、安定化ZrO₂において、酸化物イオン伝導が高くなる温度は800℃以上と高く、応用の期待される燃料電池や各種センサーにおいて低温作動化が要求されており、新規な酸化物イオン伝導体の開発が要求されている。このような状況下で、近年、LaGaO₃やBa₂In₂O₅などのペロブスカイトまたはペロブスカイト類縁酸化物で、優れた酸化物イオン伝導が報告されるに伴い、新しい酸素イオン伝導体の開発が期待されるようになって来た。</p> <p>(最前線)</p> <p>現在、新しい酸素イオン伝導体としてLaGaO₃などのペロブスカイト型酸化物が期待され、その周辺化合物において、新規な酸化物イオン伝導体の開発が行われているが、今後は周辺化合</p>	

物とくに、 K_2NiF_4 などの構造を有する新規な酸素イオン伝導体の開発が活発化すると期待される。この K_2NiF_4 型酸化物ではペロブスカイトと岩塩型構造からなる複合酸化物であり、近年、優れた酸素イオン伝導性が報告され始めている。従来の酸化物では酸素欠陥を導入し、この酸素欠陥を通して、酸素イオンが移動することがわかっているが、この K_2NiF_4 型酸化物では、酸素欠陥より、むしろ岩塩型構造中に導入された格子間酸素が移動すると言われており、今後はこのような格子間酸素を利用した新規な高酸化物イオン伝導体の開発が行われると期待されている。

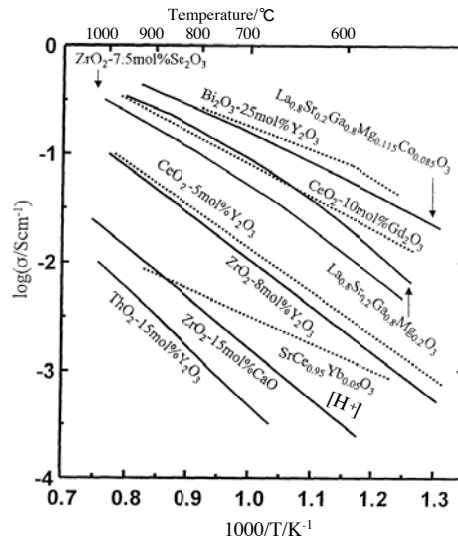


図1 新規イオン伝導体と従来材料

現状では La_2NiO_4 系などで比較的、大きな酸素の拡散性が報告されているが、これらの酸化物は主に混合伝導性なので、今後は酸化還元されにくく元素から構成された K_2NiF_4 型構造の酸化物などの開発が活発化するであろう。一方、同様な格子間酸素イオン伝導体としてアパタイト型構造の $La_{10}Si_6O_{27}$ などが報告されているが、これらの酸化物も新しい酸素イオン伝導体として期待できる。

また、新たにナノレベルでの酸化物膜の製膜方法が開発されつつあることから、格子を設計して、作成する人工格子に基づく新規な酸素イオン伝導体が開発されることを期待したい。このような人工格子の実現には計算機科学による支援と物性予想が必要であり、この分野の発展も期待される。

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題
 - 新規な構造の酸化物イオン伝導体の設計指針の確立と新規な組成の材料開発
 - 酸化物イオンの移動度の正確な測定手法の確立と伝導機構の解明
 - 計算機を用いる材料設計と物性予想
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
 - 人工格子による新規材料の開発
 - 新規酸化物イオン伝導の結晶配向制御による低温イオン伝導の達成

キーワード

酸化物イオン伝導・ペロブスカイト型・ K_2NiF_4 型・格子間酸素イオン・新規機能材料

(執筆者：石原 達己)