

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

題目(和文)	蛍石型La <sub>0.9</sub> Sr <sub>0.1</sub> O <sub>0.45</sub> F <sub>2</sub> におけるイオン伝導機構の解明
Title(English)	
著者(和文)	日比野圭佑
Author(English)	Keisuke Hibino
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第11901号, 授与年月日:2021年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:八島 正知,小松 隆之,植草 秀裕,沖本 洋一,前田 和彦
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11901号, Conferred date:2021/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	要約
Type(English)	Outline

## ○論文の要約

本論文は、中性子回折などの実験により  $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  の結晶構造、伝導イオン種、及びイオン伝導経路を明らかにした研究をまとめたものである。本論文は「蛍石型  $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  におけるイオン伝導機構の解明」と題し、全5章で構成されている。

### 第1章「序論」

本研究の背景、目的および研究手法の概要について述べている。

第1節では背景について述べており、イオン伝導体の研究における結晶構造の重要性について触れた上で、蛍石型イオン伝導体に関する既往の研究について概観している。さらに、イオン伝導性複合アニオン化合物の重要性について触れ、蛍石型構造あるいは蛍石関連構造をもつイオン伝導体である  $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_{1+2x}$  及び  $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  に関する既往の研究の問題点を指摘している。これを踏まえて第2節では本研究の目的について記している。第3節では本研究で用いた手法の概要について記している。

### 第2章「 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$ の結晶構造の決定」

$\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  および  $\text{LaOF}$  の中性子および放射光 X 線粉末回折実験および結晶構造解析の研究について記している。

第1節では  $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  の結晶構造を調べる意義と目的について述べている。第2節ではその具体的な実験方法、すなわち合成方法と回折実験の方法について述べている。第3節では回折データを用いた結晶構造の精密化の結果について記している。その中で、室温 (294 K) および低温 (30 K) において測定した  $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  の中性子粉末回折データを8つの結晶構造モデルを用いて解析し、どの結晶構造モデルが妥当であるか論じている。さらに、 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  の結晶構造を  $\text{LaOF}$  と比較している。 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  の結晶構造における原子の占有率、原子間距離及び結合原子価の総和 (BVS) から結晶構造解析の結果が妥当であることを確認している。第4節ではこれらを総括し結論を述べている。

### 第3章「 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$ における伝導イオン種の研究」

$\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  において伝導するイオンが何であるのかを明らかにするため、実験を中心とした研究を行っている。

第1節ではイオン伝導体の可動イオン種を調べることの意義について述べている。第2節では行った実験等の具体的な方法を記している。第3節では得られた結果から伝導イオン種が何であるかを論じている。第4節ではこれらを総括し、結論を述べている。

### 第4章「 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$ におけるイオン伝導経路とイオン伝導機構の解明」

$\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  におけるイオン伝導機構を明らかにするために、 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  の結晶構造と中性子散乱長密度の解析を行っている。

第1節では、イオン伝導機構やイオン伝導経路を調べる意義について述べている。第2節では、行った実験の具体的な方法について記している。第3節では、結晶構造解析と中性子散乱長密度解析の結果を示している。中性子散乱長密度の解析により  $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  におけるアニオン拡散経路を可視化している。また、この結果から、 $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{O}_{0.45}\text{F}_2$  におけるイオン伝導機構を明らかにしている。第4節ではこれらを総括し、結論を述べている。

## 第5章「結言」

第4章までを総括し、本研究の位置付け及び将来展望について述べている。