

所属・資格 物理学科・教授

申請者氏名 橋本 拓也

研究課題		遷移金属酸化物機能性材料の各種スペクトロスコーピーによる解析
報告の概要	研究目的 および 研究概要	<p>酸素イオンと電子・ホールが同時に伝導する混合電気伝導体は燃料電池のカソード、ガスセンサーの材料として注目されている。これらの機能性発現機構の解明および新材料の探索には、X線回折、メスbauer分光、電子回折測定など各種スペクトロスコーピーを総合的に用いて、結晶構造や電子構造を正確に解析し、機能性と結びつけることが必要不可欠である。</p> <p>これまでに申請者は具体的な材料として <math>\text{SrFeO}_{3-\delta}</math> をベースとした酸化物が高機能性を持つことを明らかにしてきた。本研究ではこれらの機能性発現機構を明らかにすべく、本材料系の結晶構造・電子構造・構成成分の化学状態を上記の各種スペクトロスコーピーを用いて明らかにすることを目的とする。また機構解明の結果から新たな材料の探索・開発指針を明らかにし、さらに優れた機能を持つ材料の探索も試行する。</p>
	研究の結果	<p>均一な酸素欠損量を持つ <math>\text{SrFeO}_{3-\delta}</math> を空気中での熱処理、引き続いて液体窒素を用いた急冷によって合成することに成功した。X線回折・電子回折およびメスbauer分光測定の結果、室温では <math>\text{SrFeO}_{2.875}</math> の正方晶および <math>\text{SrFeO}_{2.75}</math> の直方晶が安定で単相として得られるが、その間の酸素量では両者の混相となっていることを明らかにした。両者の電気伝導特性を測定したところ、正方晶は直方晶よりも高い電気伝導率を示した。これはメスbauer分光スペクトルでは正方晶ではホールの非局在化を示す <math>\text{Fe}^{3.5+}</math> のシグナルが強いが、直方晶では <math>\text{Fe}</math> が <math>3+</math> と <math>4+</math> に不均化、ホールが局在していることに対応している。また両者とも <math>300^\circ\text{C}</math> あるいは <math>420^\circ\text{C}</math> で立方晶への相転移に伴う電気伝導率の増大が観測された。</p>
	研究の考察・反省	<p><math>\text{SrFeO}_{3-\delta}</math> の酸素量制御方法の開発および各種スペクトロスコーピーによって、本物質にはミシビリティギャップによる混相領域があることを確定できた。また正方晶の方が高い電気伝導特性を示す理由について、メスbauer分光測定から明らかにすることができた。今後は <math>\text{SrFeO}_{3-\delta}</math> に <math>3+</math> イオンを部分置換した立方晶試料について、導電率測定と合わせて X線回折・電子回折・メスbauer分光を実施し、高い電気伝導率の起源を探索する予定である。</p>
研究発表 学会名 発表テーマ 年月日/場所	<p>※この欄は、本報告書提出時点で判明している事項についてご記入ください。</p> <p>研究発表</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid State Science (PRiME2024) “Elucidation of Structural Phase Diagram of <math>\text{SrFeO}_{3-\delta}</math> -Evidence of Miscibility Gap and Effect of Structural Phase Transition on Electrical Conduction Behavior” 2024年10月8日/Hawaii, USA</li> <li>・ 日本セラミックス協会第37回シンポジウム「酸素量を制御した <math>\text{SrFeO}_{3-\delta}</math> の電気伝導特性—構造相転移の影響」2024年9月10日/名古屋大学</li> <li>・ 第23回メスbauer分光研究会シンポジウム「メスbauer分光・X線回折・熱分析による <math>\text{SrFeO}_{3-\delta}</math> の酸素量によるミシビリティギャップの解明」2024年4月26日/姫路じばさんびる</li> </ul>	
研究成果物 テーマ 誌名 巻・号 発行年月日 発行所・者	<p>研究成果物</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ “Miscibility gap by oxygen content in <math>\text{SrFeO}_{3-\delta}</math> : examination using X-ray diffraction and Mössbauer spectroscopy” <i>Interactions</i>, vol. 245 (2024) p. 299, Springer Nature.</li> </ul>	