

分子動力学法によるCa₂Fe₂O₅の酸化物イオン伝導性の検討○川井 トオル¹、澤口 直哉²、佐々木 眞²¹室工大院、²室工大

【緒言】

ブラウンミラライト型構造のBa₂In₂O₅が酸化物イオン伝導性を示すことから、結晶構造が同じCa₂Fe₂O₅も酸化物イオン伝導性を有することが予想されている。しかし、この物質の酸化物イオン伝導を詳細に調べた研究は少ない。そこで本研究では分子動力学(MD)シミュレーションを用いナノスケールにおけるイオンの挙動を検討した。

【手法】

イオン間相互作用には式(1)の2体間ポテンシャル関数を用い、式中の z 、 a 、 b 、 c をパラメータとした。Ca₂Fe₂O₅のMDシミュレーションに必要なCa、Fe、OのポテンシャルパラメータをMDシミュレーションにより決定した。そのパラメータを用いて完全結晶、酸化物イオン欠損、酸化物イオン挿入の各モデルについてそれぞれMDシミュレーションを行った。粒子数約1800、温度800～1800 KのMDシミュレーションで得られた結果から酸化物イオンの軌跡や自己拡散係数を調べた。ソフトウェアはMXDORTO¹⁾を用いた。

$$U_{ij}(r_{ij}) = \frac{z_i z_j e^2}{r_{ij}} + f_0(b_i + b_j) \exp\left(\frac{a_i + a_j - r_{ij}}{b_i + b_j}\right) - \frac{c_i c_j}{r_{ij}^6} \quad (1)$$

【結果と考察】

ポテンシャルパラメータを変化させながらMDシミュレーションを行い、パラメータの最適化を行った。その結果、格子定数をすべての軸について実測値²⁾を±1.5%以内で再現するパラメータが得られた。

MDシミュレーションによる酸化物イオンの軌跡を描画し、結晶中における酸化物イオンの挙動を調べた。完全結晶モデルにおいてはFeO₄四面体層(Tet.)中の酸化物イオンには熱振動のみがみられ、酸化物イオンの隣接サイト間の移動は確認されなかった。一方、イオン欠損モデルにおいてはFeO₆八面体層(Oct.)中の酸化物イオンが隣接サイトへ移動することが確認された(Fig. 1)。また、イオン挿入モデルにおいては、四面体層中の酸化物イオンのサイト間移動と、酸化物イオンの四面体層-八面体層間の移動が確認された。

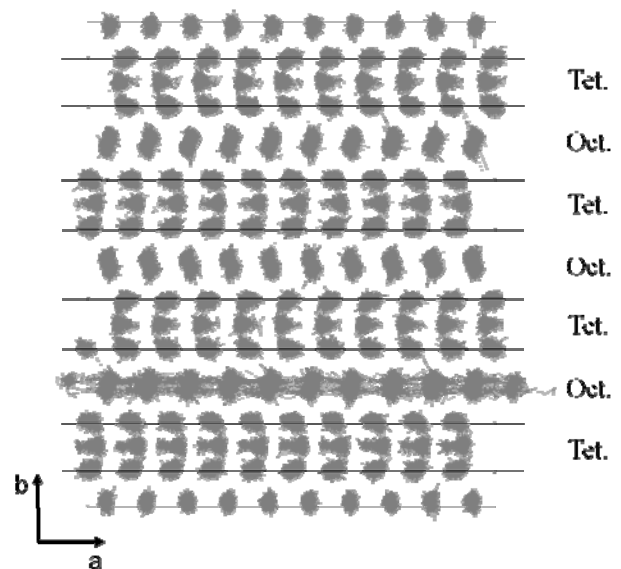


Fig. 1. Oxide ion trajectory in defect model at 1600 K for 20 ps.

【参考文献】

- 1) K. Kawamura, MXDORTO, Japan Chemistry Program Exchange, #29.
- 2) P. Berastegui, S. -G. Ericsson, S. Hull, *Mater. Res. Bull.*, **34**, No. 2, 1999, 303-314.