

分子動力学法を用いた NiO 中のイオン挙動の解析

○ 内海 男斗¹、澤口 直哉²、佐々木 眞²
¹室工大院、²室工大

【目的】 NiO/YSZ (Y₂O₃-ZrO₂) の酸化還元反応を応用したディーゼル車の排気ガス中のNO_x浄化デバイスに関する研究が進められている。その性能を律する要因を理解するために、分子動力学法を用いたNiO-YSZ粒界におけるイオンの挙動解析が有用である。本研究ではその前段階としてNiOの単結晶モデルと粒界モデルについてイオンの拡散挙動を解析した。

【実験方法】 分子動力学シミュレーションはプログラムMXDORTO¹⁾ を用いて解析を行った。原子間相互作用には次式の二体間ポテンシャル関数を用いた。

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

過去にNiOの粒界モデルにおいてエネルギー的に最も安定と報告のあった、(111)対称傾角粒界のモデルを作成し、1500 Kの温度で、全粒子数 3072 に対し 0 ~ 5 at % の欠陥を導入してイオンの拡散挙動を解析した。また、各層における欠陥の分布変化を調べた。アンサンブルをNPT、圧力を 0.1 MPa、刻み時間を 2 fsとし、3次元周期境界条件を適用した。

【結果と考察】 (111)対称傾角粒界モデルでは、欠陥率 5 at %においてサイト間のイオンの移動頻度がそれぞれ最も高くなった。このときのNi, Oそれぞれのイオンの軌跡の例をFig. 1に示す。3本の縦線は(111)対称傾角粒界の位置を示す。粒界近傍でイオンがサイト間を移動している様子が顕著である。特にNiに関しては粒界に沿う方向の移動が確認できる。また、このときの各層における欠陥の分布変化を調べたところ、ランダムに配置した欠陥が粒界近傍へと移動するという結果が得られた。このことから粒界近傍ではバルク部分に比べイオンが拡散しやすいことが示唆される。しかし、欠陥率 0 at % の場合はイオンのサイト間の移動が確認されなかった。このことより、(111)対称傾角粒界はイオンの拡散経路にはなり得るが、イオン拡散を誘発してはいないと考えられる。

【参考文献】

- 1) K. Kawamura, MXDORTO, *Japan Chemistry Program Exchange*, #29.
- 2)伊藤 優、室蘭工業大学 学士論文 (2006)
- 3) D. M. Duffy and P. M. Tasker, *Philosophical Magazine A* (1983), vol. 48, (6), 817 - 825.

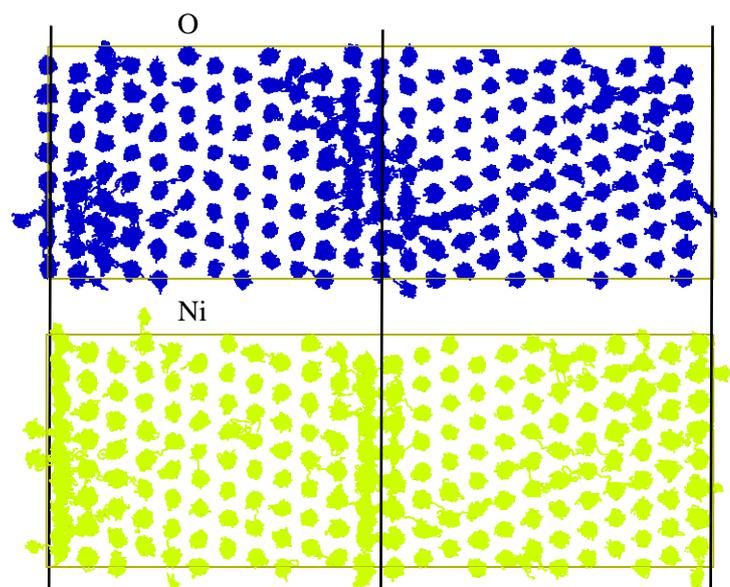


Fig. 1. Trajectory of Ni ions and O ions in NiO.
 (Symmetrical tilt boundary model,
 T = 1500 K, 1 ~ 10000 steps)