

中間レポート

名 前：	椎葉 寛将
所 属：	名古屋工業大学大学院 工学研究科 未来材料創成工学専攻 2年
派 遣 先：	インペリアル・カレッジ・ロンドン
研究テーマ：	分子動力学法を用いたペロブスカイト型 $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ (BSCF)の酸素拡散機構の解明
派遣期間：	2010年 8月 ~ 2011年 6月
本学側指導教員：	中山 将伸
派遣先側指導教員：	Robin W Grimes
具体的な研究内容： <目的：実用的意義、問題点を含めて> ペロブスカイト型 $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ (BSCF)に関連した材料は、中温域の固体酸化物型燃料電池の電極材料として注目を集めている。それゆえ、様々な組成において研究が行われている。BSCFは、Ba及びSrがAサイト、Co及びFeがBサイトを占有するペロブスカイト型 ABO_3 に関連した結晶構造を持つ。しかし、カチオンの配列の影響はよくわかっていない。酸素拡散メカニズムを理解するため、酸素拡散における不規則なカチオン配列の影響を調べることにした。本研究では、簡略化のためBSCFに関連した $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_{2.5}$ を用いた。 <実験経過報告：簡単に> 1800 K以下において、Ba/Srが規則的に配列した材料よりも不規則的に配列した材料の方が遥かに高い酸素イオン拡散能を示した。更に、不規則的な配列の材料の拡散係数は、報告されている実験値とほぼ一致する値を示した。これは、BaとSrはランダムに配列していることが好ましいことを示す。Ba/Srのランダム配列の比率が10%以下において、この比率が増加するにつれて活性化エネルギーは急激に減少することがわかった。更に、この比率が10%以下において、1750 K以上で急激な格子定数の増加が観察された。 <今後の予定> BSCFに関連した他の組成についても同様に研究を行っていく。Ba/Sr配列が規則的な場合と不規則的な場合における酸素拡散の軌道の違いについても研究を行っていく。	

派遣先研究室に関して（担当教授・構成人数・研究活動スタイル）：

Robin W Grimes 教授

ポスドク：4人

博士課程学生：8人

計算機シミュレーション

参加した又は参加予定のワークショップ・セミナー等について：

E-MRS Spring Meeting

派遣期間後半に向けての抱負：

英語力の向上に努めるとともに、より流暢に話せるよう、積極的に研究室メンバーとディスカッションを行っていく。

