



グローバル COE 物質科学イノベーション講演会

演題：欠陥蛍石型酸化物 $M_{1-y}Ln_yO_{2-y/2}$ ($M^{4+}=\text{Hf, Zr, Ce, Th, U}$; $\text{Ln}^{3+}=\text{希土類}$):

非ヴェガード性と欠陥構造への一つの欠陥結晶化学的アプローチ

講師：中村 彰夫 (日本原子力研究開発機構)

日時：2012年3月15日(木) 13:00~15:00

場所：理学部6号館1-03号室

共催：日本化学会北海道支部

要旨：蛍石型二酸化物 MO_2 -希土類三二酸化物 $\text{LnO}_{1.5}$ 系のいわゆる酸素空孔型欠陥蛍石酸化物固溶体は、固体酸化物燃料電池、核燃料、放射性廃棄物固化体、触媒、人工歯材、熱バリア材、人造宝石等の幾多の実用性を持つ先進セラミックス材料である。そのマクロな相平衡挙動や結晶構造とミクロな局所欠陥構造との間の関係は、これらの応用に関わる各種の基礎物性(酸素イオン伝導性、熱物性(熱伝導+熱膨張)、耐照射損傷性など)との関連で過去精力的に研究されてきた。しかしその理解は遅々として進まず、高濃度欠陥系の複雑さと手強さを際立たせてきた。本講演では、この状態を打破すべく演者が最近提案し(精緻化+拡張を進めている)一つの新しい欠陥結晶化学モデルについて概説する。本モデルは、これらの系の示す格子定数の顕著な非ヴェガード性(ヴェガード則からの顕著なずれ)が、その非ランダムな微視的欠陥構造のマクロな表象であることを初めて明らかにし、両者を統一的に説明する一般化されたヴェガード則を提案する。これにより、これらの系の示す低酸素空孔濃度領域での酸素伝導度の極大にも一つの明確な説明を与えることができる。

参考文献：1) A. Nakamura et al, Pure and Appl. Chem. **79** (2007) 1691-1729.

2) A. Nakamura, Solid State Ionics, **181** (2010) 1543-1564, ibid, **181** (2010) 1631-1653..

3) A. Nakamura et al, Hyperfine Interactions, published online, Oct. 28, 2011.

4) A. Nakamura et al, Chap.5, in 'Mossbauer Spectroscopy: Applications in Chemistry, Biology, Nanotechnology, Industry, and Environment', V. K. Sharma et al eds, John-Wiley & Sons, 2012, in press,

連絡先：理学研究院化学部門 日夏幸雄 (内線：2702)