

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 12049 号
------	---------------

氏 名 今泉 孝太

論文題目

Theoretical Study of Oxygen Ion Conduction Mechanisms in
Apatite-type Oxide
(理論解析を用いたアパタイト型酸化物における酸素イオン伝導機
構の解明)

論文審査担当者

主査	名古屋大学	教授	松永 克志
委員	名古屋大学	教授	山本 剛久
委員	名古屋大学	教授	入山 恭寿
委員	京都大学	准教授	豊浦 和明
委員	ファインセラミックスセンター	主任研究員	桑原 彰秀

論文審査の結果の要旨

今泉孝太君提出の論文「Theoretical Study of Oxygen Ion Conduction Mechanisms in Apatite-type Oxide (理論解析を用いたアパタイト型酸化物における酸素イオン伝導機構の解明)」は、地球環境に優しいエネルギー発電システムとして知られる固体酸化物型燃料電池 (SOFC) の新しい固体電解質として期待されるアパタイト型酸化物結晶について、第一原理計算を中心的手段とした計算科学により、その優れた酸素イオン伝導性の発現機構を明らかにしている。各章の概要は以下の通りである。

第1章では、希土類イオンを含むアパタイト型酸化物 $\text{La}_{10}(\text{GeO}_4)_6\text{O}_3$ (LGO)および $\text{La}_{10}(\text{SiO}_4)_6\text{O}_3$ (LSO)について、結晶構造の特徴および従来研究で報告されている酸素イオン伝導度、酸素イオン伝導機構をまとめ、本研究で解決すべき課題を述べている。

第2章では、本研究の酸素イオン伝導解析に用いた計算手法を述べている。

第3章では、LGO、LSOにおけるイオン伝導キャリアである格子間酸素イオンの安定サイトの解析結果を明らかにし、従来報告の実験結果を合理的に説明する重要な知見を得ている。

第4章では、LGOの酸素イオン伝導機構の解析結果を示している。格子間酸素イオンが隣接する格子サイト上の酸素イオンと連携しながら伝導する準格子間機構により、LGOの高速なイオン伝導性が発現することを見出している。また、LSOもLGOと同じく準格子間機構が支配的な伝導機構であるが、結晶構造中のイオン伝導経路は異なることを明らかにしている。準格子間機構による同酸化物のイオン伝導発現は、従来研究に無い新しい知見である。

第5章では、LGOおよびLSOにおけるLa組成の影響を検討しており、La欠損により酸素イオン伝導のポテンシャル障壁が上昇する結果を得ている。これは、La欠損量に比例して酸素イオン伝導度が低下するという実験結果を合理的に説明する重要な結果である。

第6章では、本研究の結論を与えている。

以上のように本論文では、SOFCの新しい固体電解質として期待されているアパタイト型酸化物の酸素イオン伝導機構を電子・原子レベルから明らかにしている。これらの解析方法並びに得られた結果は、SOFCの高性能化を実現するために重要であり、工学の発展に寄与するところが大きいと判断できる。よって、本論文の提出者である今泉孝太君は博士(工学)の学位を受けるに十分な資格があると判断した。