

第一原理計算によるイオン伝導体におけるリチウム同位体効果の解析

First-principles analysis of isotope effect in lithium ionic superconductor

*小林 恵太¹, 星野 毅¹

¹量研

第一原理計算を用い、リチウムイオン伝導体中におけるリチウム6とリチウム7の同位体効果に関する解析を行った。リチウムイオン伝導体における同位体効果に関しては①量子効果、②相関効果が大きな役割を果たすことを明らかにした。

キーワード：リチウム6濃縮、リチウム同位体分離、リチウムイオン伝導体、第一原理計算、トリチウム増殖材料

1. 緒言

核融合炉の燃料であるトリチウムはリチウム6(⁶Li)と中性子との核反応により生成されるが、天然のリチウム(Li)には約7.8%しか存在せず、核融合炉の定常運転には約90%程度に濃縮された⁶Liが必要となる。リチウムイオン伝導においては高い同位体効果が表れうることが報告されており[1]、⁶Liと⁷Liの分離に適用可能であると考えられる。今回、第一原理計算等によりリチウムイオン伝導体中における⁶Liと⁷Liの同位体効果に関する解析を行った。

2. 計算手法

Nudged Elastic Band法とフォノン計算を組み合わせ、Liイオンが単位時間あたりに安定サイトから安定サイトに飛び移る頻度（ジャンプ頻度）を第一原理計算(VASP)により導出した。更に第一原理計算により導出したジャンプ頻度を用い、キネティクスモンテカルロ法を実行することにより⁶Liと⁷Liの拡散定数比を導出した。

3. 結論

まず、Liイオンが狭い領域から広い領域を通過する構造を持つイオン伝導体の場合に、量子効果により同位体移動度の違いが大きくなることを明らかにした。また、⁶Li、⁷Li及び空孔間での相関効果により同位体拡散比が小さくなることを示した。同位体効果を最大にするにはLiイオンが狭い領域から広い領域を通過し、且つ空孔機構が弱い物質が好ましいという物質設計の指針を得た。

参考文献

[1] S.Shioya, T.Nagasaki, T.Matsui, H.Shihematsu, Solid state ionics 161 (2003) 55

*Keita Kobayashi¹, Tsuyoshi Hoshino¹

¹QST

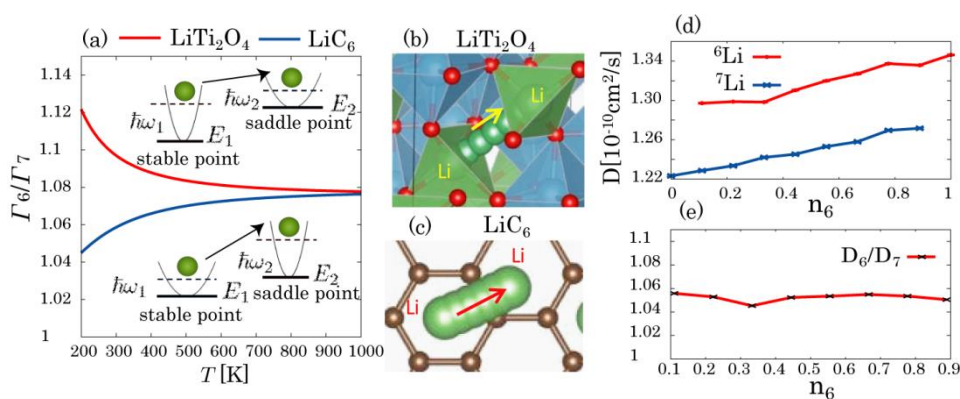


図 1 (a): LiTi₂O₄ (b), LiC₆ (c)における⁶Li、⁷Liのジャンプ頻度比 Γ_6/Γ_7 の計算結果。結晶構造により量子効果の寄与が異なる。(d)-(e): キネティクス・モンテカルロ法により計算したLiTi₂O₄における⁶Li、⁷Liの拡散定数(d), 及び拡散定数比(e)。横軸は結晶中の⁶Li濃度である。