

MOPAC による $\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_y$ 派生相の水分子侵入シミュレーション

Simulation of water molecule intercalation in $\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_y$ by MOPAC

○河合健勝¹, 末松久幸¹, 藤本晶², 中山忠親¹, 新原皓一¹

1. 長岡技術科学大学 極限エネルギー密度工学研究センター、2. 沼津工業高等専門学校

○K. Kawai¹, H. Suematsu¹, A. Fujimoto², T. Nakayama¹ and K. Niihara¹

(1. Extreme Energy-Density Research Institute, Nagaoka University of Technology,

2. National Institute of Technology, Numazu College)

E-mail: k_kawai@stn.nagaokaut.ac.jp

緒言 銅酸化物超伝導体の一つである $\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_6(0^{\text{Sr}}212)$ 相は SrO 層間に水がインターカレートすることで派生相を形成し¹⁾、臨界電流密度(J_c)特性、不可逆磁場(H_{irr})特性が向上することが報告されている。しかし、派生相の形成メカニズムは未だに解明されていない部分が多く、水分子吸着位置の決定は派生相の形成メカニズムや構造を解明する上で重要である。そこで、半経験的分子軌道法のプログラムパッケージである MOPAC を用い、シミュレーション解析を行うことで分子吸着領域の決定を行った。

方法 $\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_6$ 結晶構造としては化学量論組成で、Sr-O 面間隔 2.46 Å、 CuO_2 -Ca 面間隔 1.64 Å を仮定し、c 軸方向に SrO-SrO- CuO_2 -Ca- CuO_2 -SrO-SrO の順で積層させた。このセルを a,b 軸方向に 1x1 から 2x2 個使用した。侵入させる分子・基は H_2O 、 OH^- 、 H^+ の 3 種類とした。侵入方向は[100]方向と[110]方向とした。

結果と考察 Fig. 1 にシミュレーションに用いた $\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_6$ の積層の模式図と、2x2 セルを示す。Fig. 2 にシミュレーションによって得られた吸着熱と H_2O 侵入時の模式図を示す。SrO-SrO 面間で、中心から 1.5 Å の位置に生成熱の極小値があり、ここに H_2O が存在出来ることが分かった。Table 1 にシミュレーション結果をまとめた。 H_2O 、 OH^- はいずれの方向からも、 H^+ は[110]方向から侵入可能性が示唆された。

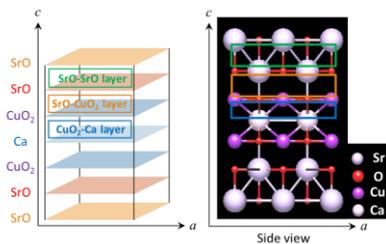


Fig. 1 Schematic diagram of $\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_y$

Table 1 Simulation result of unit cell (2x2)

SrO - SrO layer	H_2O	OH^-	H^+
[110] direction	Intercalate	Intercalate	Intercalate
[100] direction	Intercalate	Intercalate	Optimized outside the cell

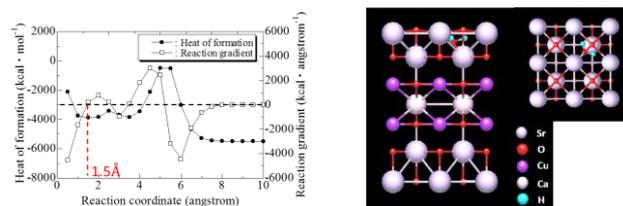


Fig. 2 Simulation result of (2x2), H_2O , [110], SrO-SrO layer

参考文献 1)T. Aoba, et al., Mater. Chem. Phys. 177, (2016) 67-72