

# 分子動力学法による2種類の陽イオンを含む超イオン導電体及び熔融塩混合系の動的性質と電子状態

長岡工業高等専門学校 松永茂樹

(目的) 超イオン導電体(SIC)は可動イオンの電導度が液体と同程度の物質である。2種類の陽イオンを含む超イオン導電体及びその融体について、分子動力学シミュレーション(MD)と電子状態の研究を継続して行っている。

(方法) 分極の効果及び他の粒子による遮蔽効果を考慮した新たな2体ポテンシャルモデル(SP-IPM)を用いて分子動力学シミュレーションを行い、動的構造因子等を求め、さらにイオンの電子状態について考察した。

(結果) 添加した陽イオンが融体の構造や phonon 等の動的性質等に与える影響、および電子状態の変化について考察した。

利用した計算機	PCクラスタ
CPU時間	約50時間
並列化	4並列

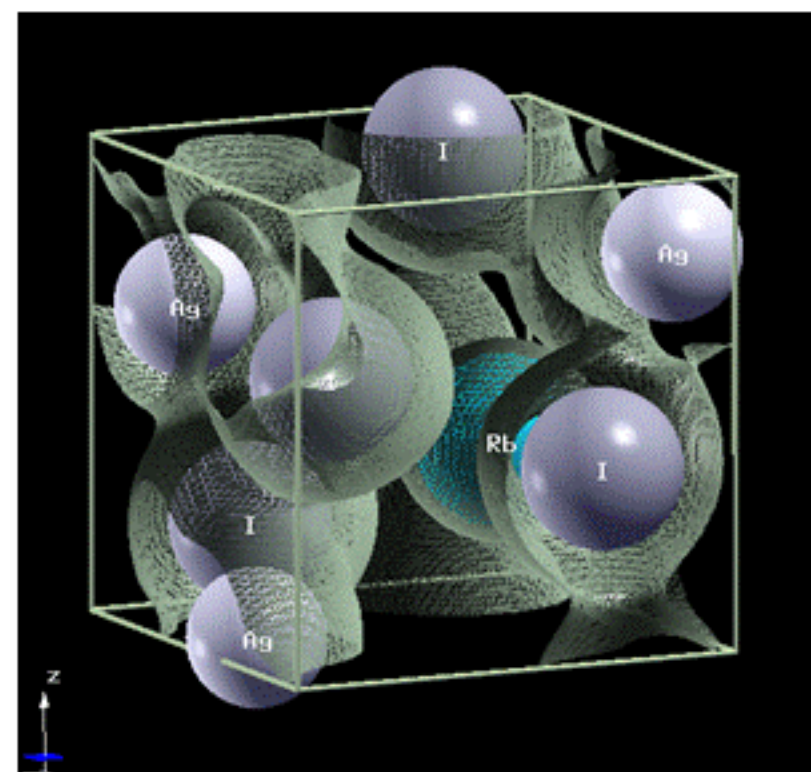


図: 融体 RbI-AgI の電子密度分布