

2種類の陽イオンを含む超イオン導電体及び熔融塩 混合系の構造と動的性質のシミュレーション

長岡工業高等専門学校 松永茂樹

(目的) 超イオン導電体は個体でありながらイオン電導度が液体と同程度の物質である。我々は2種類の可動陽イオンを含む超イオン導電体及びその融体のイオン分布、輸送係数及び動的性質を理論とシミュレーションの両面で継続的に研究している。

(方法) 二体ポテンシャルを用いて分子動力学シミュレーションを行い、イオン分布、二体分布関数、輸送係数、相関関数、構造因子等の計算をおこなってきた。

(結果) 2種類の可動陽イオンは超イオン導電相および融体中で異なる配置を占め、構造、輸送係数、振動数分布等の動的性質も異なるという結果が得られた。また、成分イオンの直流電気伝導度を求めるために、新しい再帰的方法を提案し、分子動力学シミュレーションから得られる結果を用いて考察した。さらに、分極の効果を含むが他の粒子による遮蔽効果を考慮し分極モデルによって生ずる発散を回避する新たな2体ポテンシャルを提案し、シミュレーションの結果を用いて考察した。

利用した計算機	PCクラスター
CPU時間	約40時間
並列化	4並列