

# ナフイオン中の輸送係数の計算

産業技術総合研究所無機機能材料研究部門 清原健司

目的 ナフイオン中の水および電解質イオンの輸送係数を求める。

内容 水溶液電解質を含むナフイオンを、圧力場下および電場下に置いた場合の、水分子および電解質イオンの輸送係数を、速度相関関数から線形応答理論を用いることによって求める。

結果 数種類の水溶液電解質を含むナフイオンについて、Darcy係数および電導係数を求めた。イオン種および含水率によるこれらの係数の変化を得ることができた。

利用した計算機

ノード時間

並列化

VCC

11400時間

20並列

