

CHO 3元系の超イオン相中の第一原理分子動力学シミュレーション

大阪大学 工学研究科 村山 大輔

目的

水素、酸素、炭素は、太陽系の存在量に基づく、天王星や海王星のような氷惑星の主要成分であり、C-H-O三元混合物を形成している。惑星内部では、これらの物質は1000K、100GPaを超える極端な温度・圧力条件にさらされる。ここでは、第一原理分子動力学シミュレーションを用いて、惑星内部環境の水素、炭素、酸素が完全に混合した場合の相挙動の候補を明らかにする。

内容

第一原理分子動力学法を用いて、原子の平均二乗変位から相の振る舞いを明らかにした

結果

酸素の副格子中を水素と炭素が同時に拡散する超イオン相が現れた。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	12,000 時間
使用メモリ	100 GB
並列化	4ノード 並列

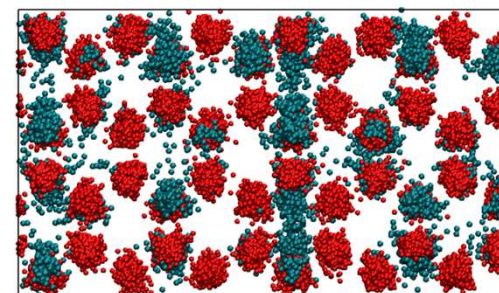


図 (シミュレーション結果)