

ダブル超イオン相中の第二可動粒子の拡散機構

大阪大学 工学研究科 村山 大輔

目的

高温高圧環境で、水素及び酸素、炭素、窒素からなる物質は2種類の元素が他の元素が作る副格子中を拡散できるダブル超イオン相を形成することがシミュレーションにより予測されている。本研究は、そのようなダブル超イオン相中を拡散する第二可動粒子の拡散機構を明らかにする。

内容

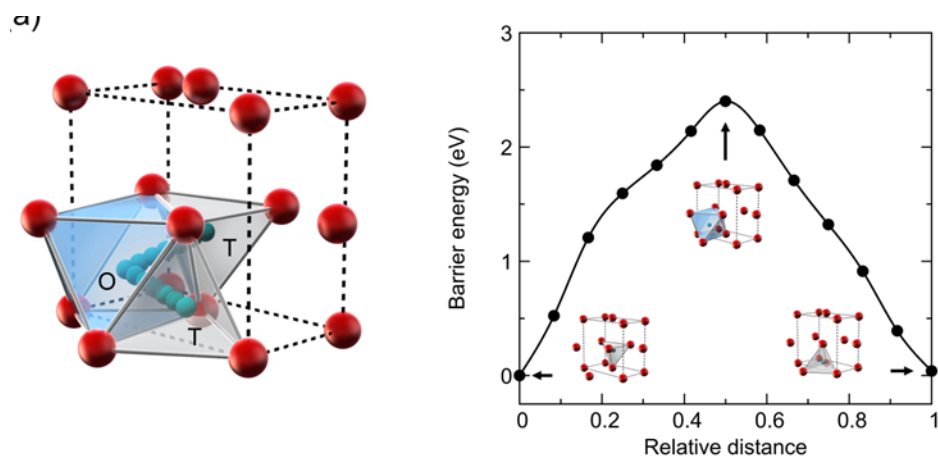
第一原理分子動力学シミュレーション及びNEB(Nudged Elastic Band)法を用いて拡散パスに沿ったエネルギープロファイルを計算した。

結果

第二可動粒子は最密構造をとる副格子の4面体サイトを施入することが判明した（図参照）。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間	8,000 NH
使用メモリ	500 GB
並列化	64-304 並列



図（シミュレーション結果）