

## 研究タイトル： 分子動力学法による超イオン導電体，熔融塩， 電解質溶液等の研究



氏名：	松永茂樹 / MATSUNAGA Shigeki	E-mail：	matsu@nagaoka-ct.ac.jp
職名：	教授	学位：	博士(学術)
所属学会・協会：	日本物理学会，分子シミュレーション学会，日本中性子科学会、溶液化学研究会，日本物理教育学会		
キーワード：	計算物理，分子動力学シミュレーション，電子状態，超イオン導電体，熔融塩，溶液，構造，輸送現象		
技術相談	<ul style="list-style-type: none"> <li>・融体，電解質溶液等の分子動力学シミュレーションについて</li> <li>・融体，電解質溶液等の構造、輸送係数、電子状態等の各種物性の数値計算について</li> </ul>		

### 研究内容： 分子動力学法を用いた電解質中の輸送係数等の各種物性の再現、及び予測

近年環境問題やエネルギー問題に対する関心が高まり、多成分からなる熔融塩、固体電解質（超イオン導電体）や、種々のイオンや気体が溶解した溶液など、燃料電池等に応用される複雑な凝縮系の中の微細な構造や輸送現象等の基礎的研究がますます重要になっています。私の研究室ではこれらの物性を、特にイオンの挙動に着目して、熱力学、統計力学や電磁気学、量子力学等に基づく理論と、他大学の super computer を使用した分子動力学シミュレーションによる研究を行っています。これまでの主な研究の幾つかを以下に紹介します。

超イオン導電体(固体電解質)は、固体でありながらイオン電導度が液体と同程度となる物質の総称ですが、我々はこれまで、固体電解質の混合系に着目して研究を行ってきました。混合系とすることで、系がイオンの伝導度が高い超イオン導電相へ転移する温度が下がり、より実用に近づくと考えられるからです。これまでの研究で、熔融塩3元系中のイオンの伝導度に関する新たな知見も得られ、我々の報告が英国物理学会誌に掲載されました。また、イオン結晶の融解前駆現象を研究した我々の論文の図が英国物理学会誌の表紙を飾りました。

S.Matsunaga and P.A.Madden, *J.Phys.:Condens .Matter* 16(2004)181.  
 S.Matsunaga and S.Tamaki, *J. Phys.: Condens. Matter*, 20(2008) 114116.

工場の排気ガス等に含まれる二酸化炭素を吸収する安全な溶液として用いられるカリウムグリシン水溶液の構造や輸送現象を分子動力学シミュレーションで考察し、吸着の様子も第一原理計算で再現しました。

S. Matsunaga, *Journal of Solution Chemistry*, 46 (2017) 2268.  
 海水に温室効果ガスが溶解した場合の影響を研究し、深海が熱を蓄えやすくなるという結果を得ました。  
 S.Matsunaga, *Int. J. Mol. Sci.* 17 (2016) 45(18pp).

熔融塩中のイオンの構造や輸送係数はイオン間の相互作用によって決まりますが、多体系中のイオン間相互作用は誘電遮蔽の効果によって2体間の相互作用とは異なるものと考えられます。我々はこれまで用いられてきたものとは異なる新たな誘電関数の関係式を提案し、分子動力学シミュレーションの結果を用いて種々の熔融塩中の遮蔽されたイオン間ポテンシャルを求めました。また、これらの結果を著書にまとめました。

S. Matsunaga et al., *Noble Metals*, Dr. Yen-Hsun Su (Ed), pp.3-32, InTech, 2012.

最近では、バイオ電池に用いられる生体に関係した有機物の水溶液の研究にも取り組んでいます。第一原理計算と分子動力学シミュレーションを組みあわせ、誘電率等で新たな知見も得られてきています。

S.Matsunaga, *Polymer Engineering & Science* 59(12) (2019) 2474-2478.

### 提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	
数値計算用のサーバーを何台か所有しています。	