

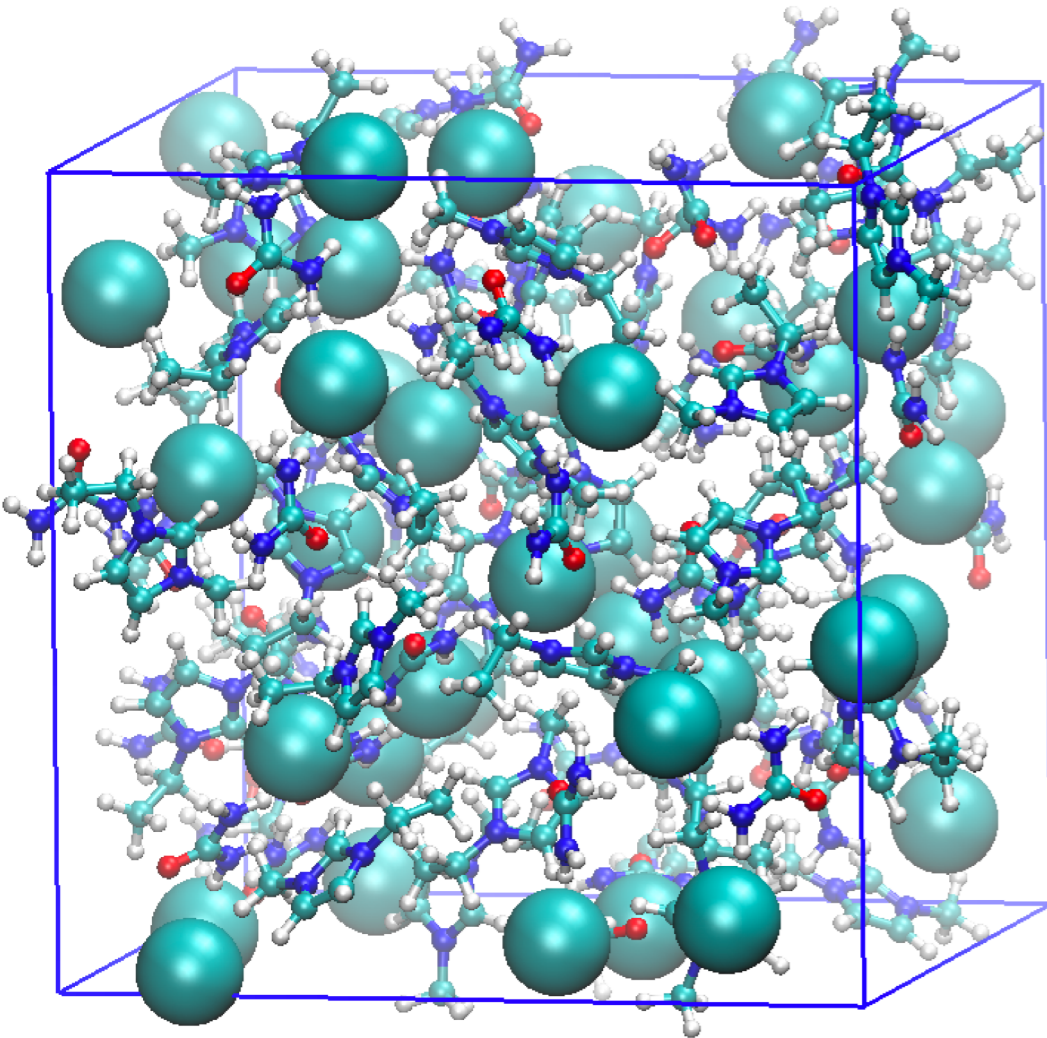
石井 良樹 (大阪大学大学院基礎工学研究科)



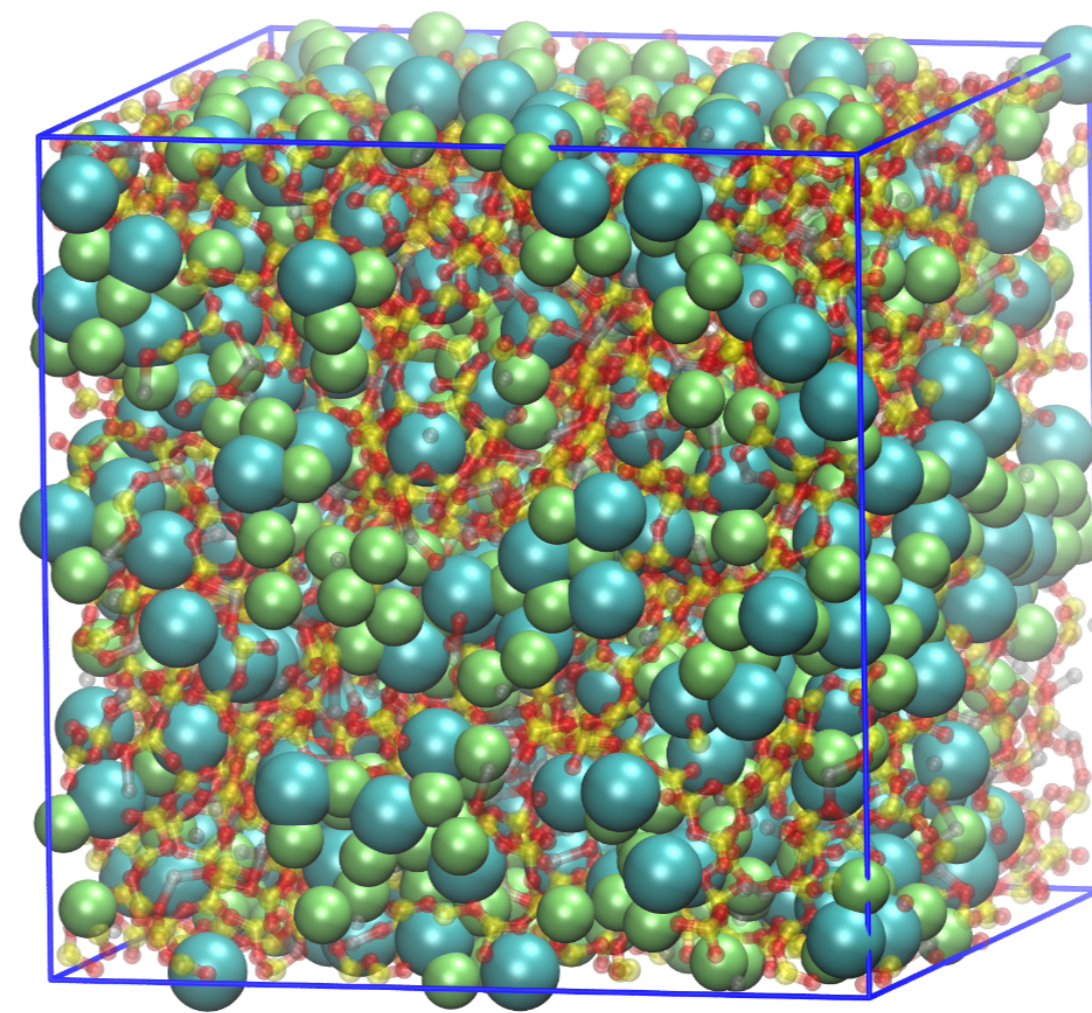
# 高イオン伝導性を示すイオン性融体の材料探索と物性予測

## 1. イントロダクション：分子動力学 (MD) シミュレーションを用いた輸送物性解析

溶融塩やイオン液体などの無機材料系は、優れたイオン伝導特性から電解質としての用途が広く提案され、実用化はガラスや結晶による固体電解質にまで及ぶ。現在これらの材料設計の指針を得るために、輸送物性の指標化が進められており、近年ではマテリアル・インフォマティクスの進展も相まって、基礎科学的なデータの拡充が要請されている。



①複合イオン液体  
中性分子の存在によって低融点でも優れたイオン伝導特性を示す  
⇒ 中性分子の役割は？  
構造ゆらぎを形成する？



②機能性ガラス  
ハロゲン化物イオンが局所的に結晶化して高いイオン伝導性を示し、組成によっては超イオン伝導ガラスを形成する  
⇒ 構造ゆらぎの役割は？  
結晶の構造スケールは制御可能？

## 2. 本研究の目的：イオン伝導特性の分子論と物性予測への応用

高イオン伝導性を示す無機材料系に焦点を当て、担体イオンの伝導特性と拡散経路を調べる。特に、イオン液体や酸化物ガラスのエネルギーや輸送物性を空間分割して考察し、輸送現象を局所的な構造や濃度・密度ゆらぎに対する依存性として明らかにする。これによって、様々な材料群の輸送物性を、温度・圧力応答の組成依存性として指標化するだけでなく、Stokes-Einsteinの関係やWalden則などの経験則を基にした分子論の解明を目指す。

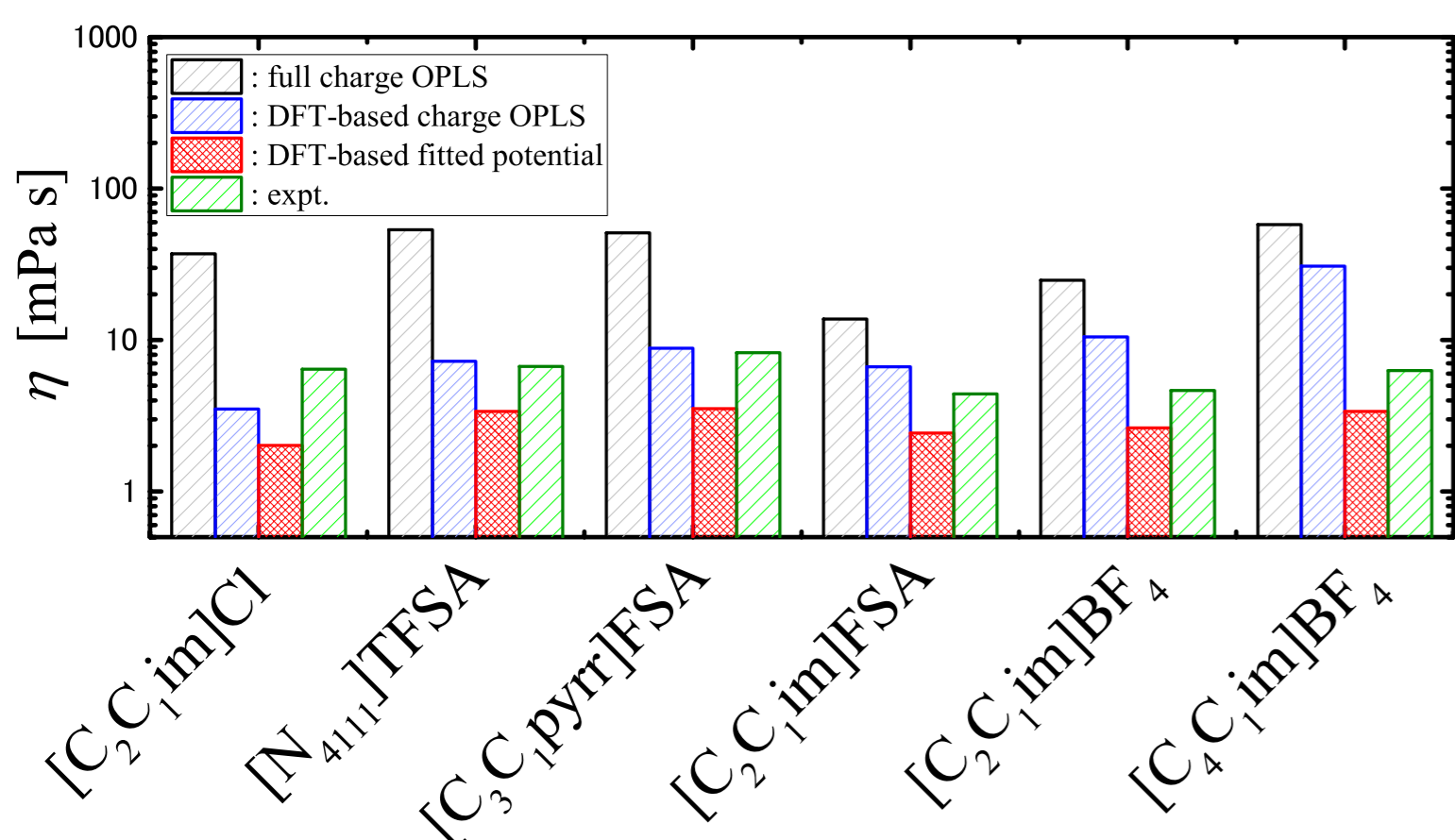
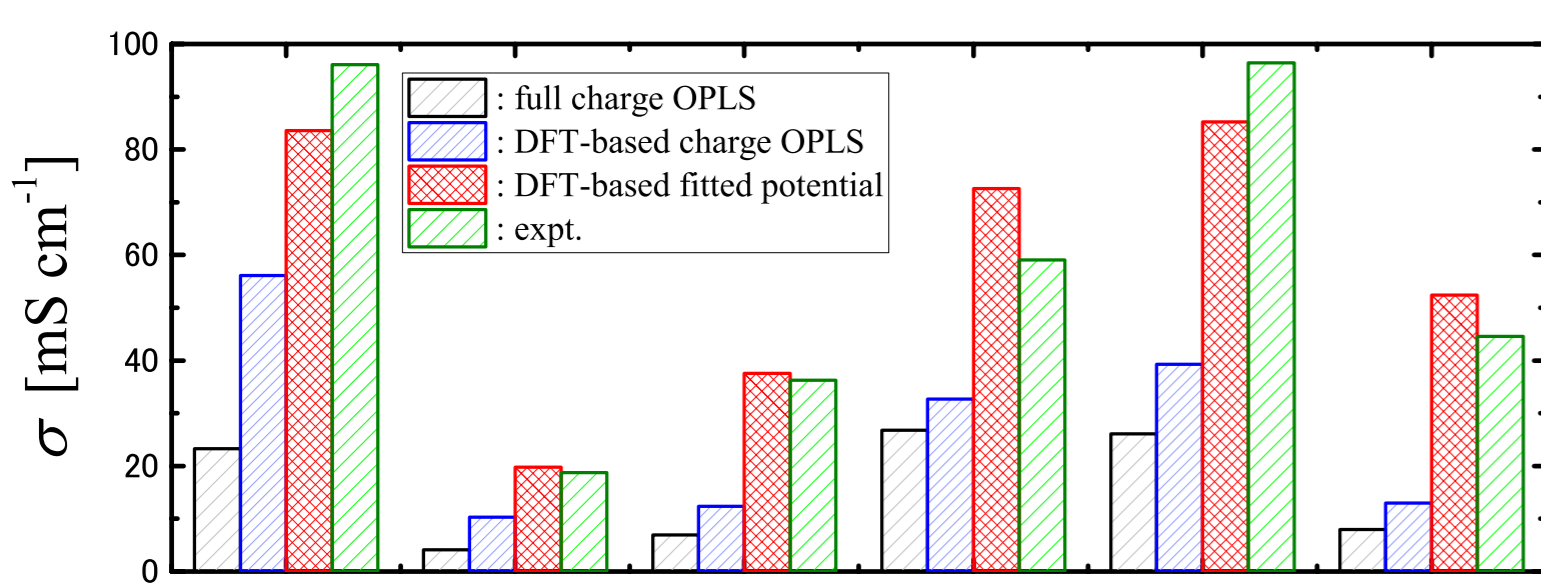
## 3. 研究内容の紹介：MD計算で得られるイオン伝導率は実在系をどのくらい再現する？

イオン伝導率  $\sigma$  の評価方法：

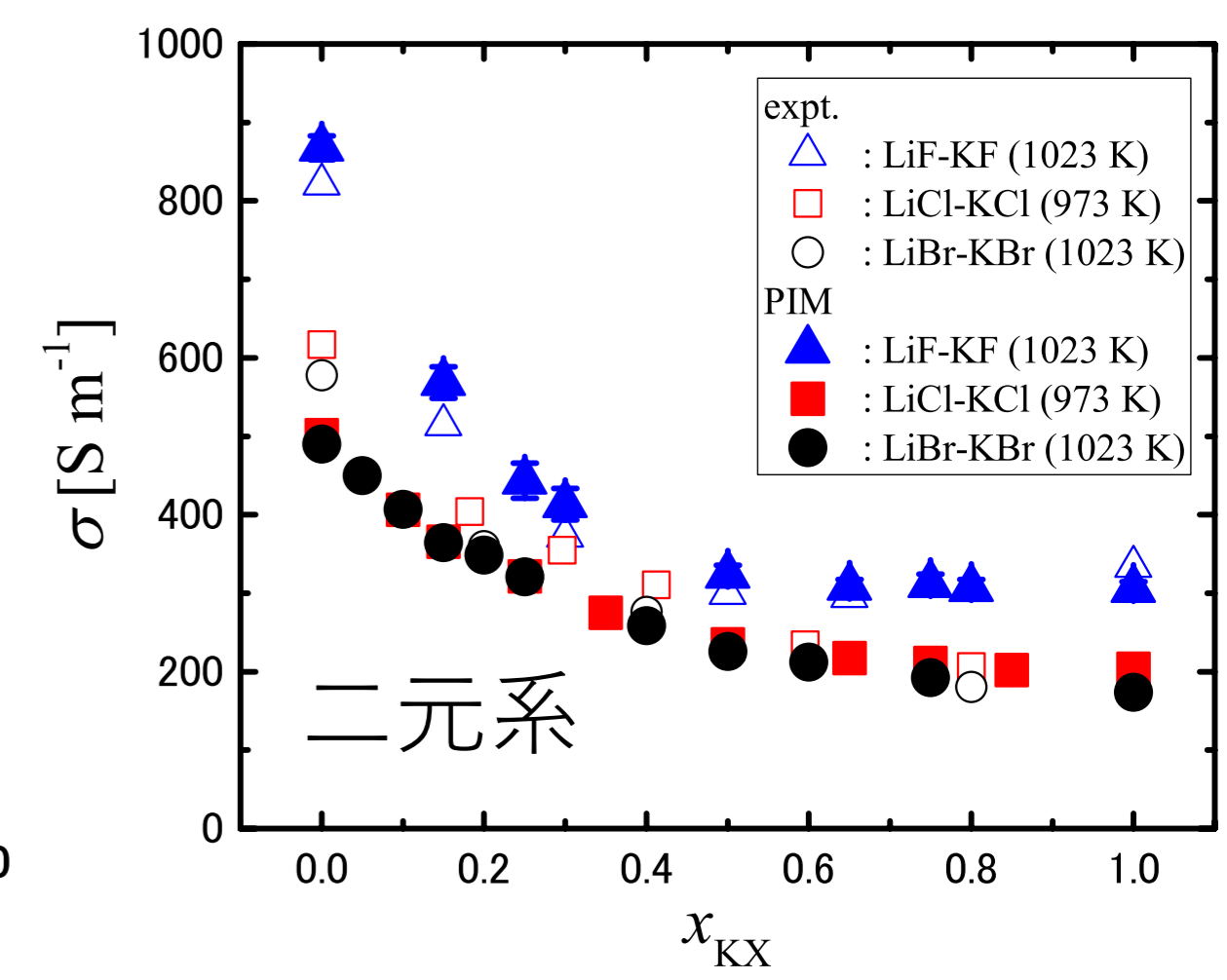
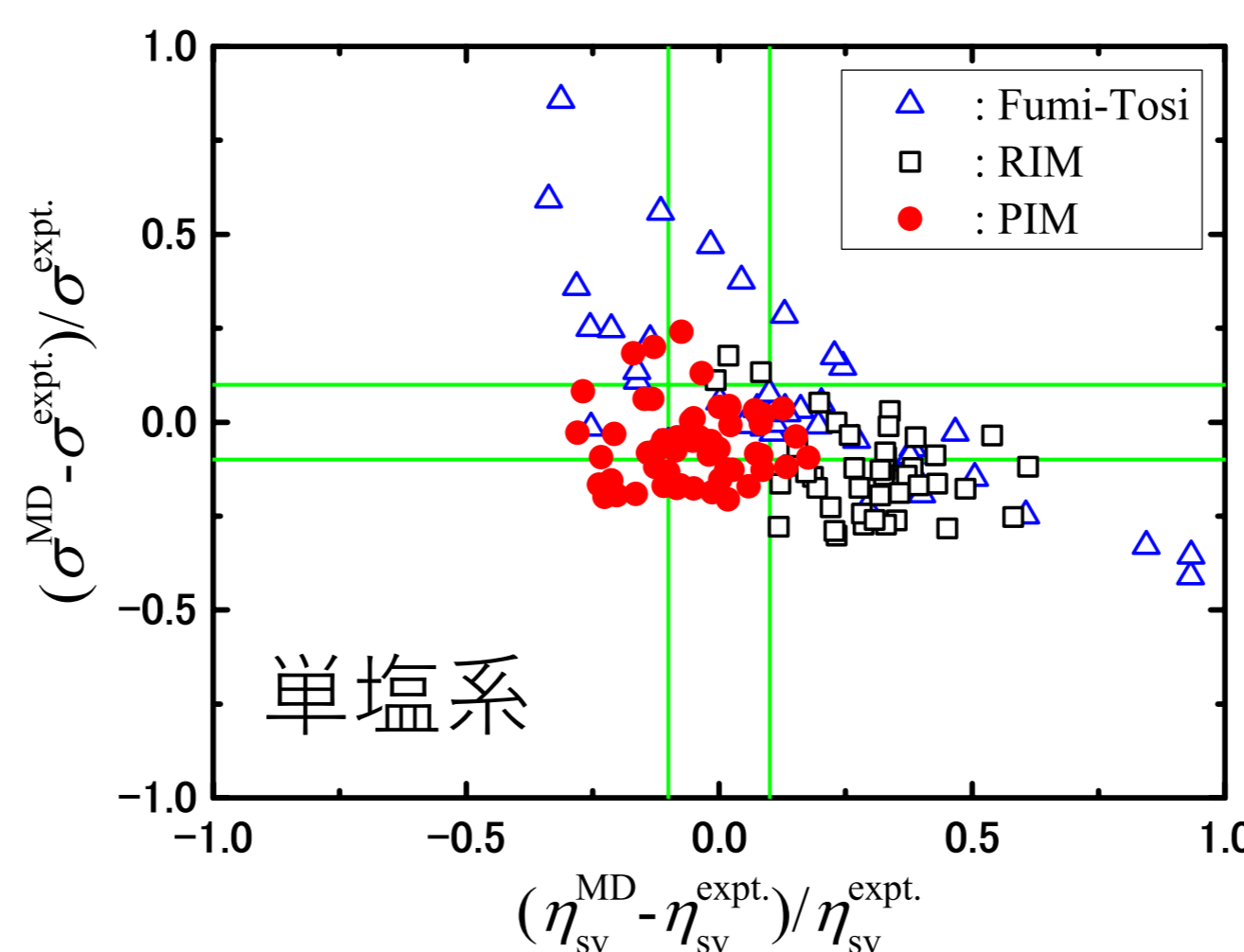
電荷  $q_i$  を持つ原子の軌跡の時間発展から算出

$$\sigma = \frac{e^2}{k_B V T} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6t} \left\langle \left| \sum_{\text{species}} \sum_i q_i \{ \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0) \} \right|^2 \right\rangle$$

### イオン液体系：



### 溶融塩系: アルカリハロゲン化物と混合塩



### 酸化物系: ケイ酸塩とアルミノケイ酸塩

