

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 23 日現在

機関番号：53101

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2010～2013

課題番号：22540337

研究課題名(和文) 分子動力学法による固体および液体電解質中におけるイオン間相互作用とダイナミクス

研究課題名(英文) Inter ionic interaction and dynamics in liquid and solid electrolyte by molecular dynamics simulation

研究代表者

松永 茂樹 (Matsunaga, Shigeki)

長岡工業高等専門学校・その他部局等・教授

研究者番号：70321411

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000 円、(間接経費) 990,000 円

研究成果の概要(和文)：本研究においては、次世代の燃料電池等に用いられる複雑な超イオン導電体、多元系溶融塩、および電解質溶液について、理論と分子シミュレーションの両面から考察した。多元系溶融塩については主に輸送現象、光学的性質等の動的性質と構造の関係について考察し、更に第一原理計算によって電子状態も考察した。多成分を含む電解質溶液については、構造、輸送係数、光学的性質、さらに熱物性等の圧力による変化について分子動力学シミュレーションによって考察した。

研究成果の概要(英文)：In this study, the complex super ionic conductors, the multicomponent molten salts, and the multicomponent electrolyte solutions, which would be employed in the next-generation fuel cell, are discussed from both the theory and the molecular dynamics simulation. The multicomponent molten salts are mainly discussed on the relationship between the dynamic properties, the transport phenomena, the optical properties and the structure. The electronic properties are also discussed by the ab initio calculations. For the multicomponent electrolyte solutions, the pressure dependence of the structure, the transport properties, the optical properties, and the thermal properties are also discussed by the molecular dynamic simulation.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性

キーワード：分子動力学 シミュレーション 多元系溶融塩 電解質溶液 超イオン導電体 イオン伝導度 動的構造因子 電子状態

1. 研究開始当初の背景

イオンの輸送現象は物理化学的に重要な現象であるばかりでなく工業科学における応用技術においても重要である。電力貯蔵用の電池等では、イオンの移動や反応は主に融体や溶液中で行われるからである。我々はこれまで主に超イオン導電体やその融体である熔融塩の研究を行ってきた。本研究では、これまでの理論的研究、および多成分系の分子動力学法による研究の経験を踏まえて、**より複雑な新たな系の研究**を計画した。超イオン導電体では多成分系とすることで、超イオン導電相への転移温度が下がる利点があり、より実用化へ近づくと考えられるからである。

イオンの輸送現象は主に2種類のカテゴリーにおいて研究されている。1つは**熔融塩のグループ**であり、他方は水溶液を含む様々な種類の**電解質溶液のグループ**である。以下、これらの背景について概要を述べる。

(1) **熔融塩の研究**は、1960年代に学術的研究の進展が数名の研究者によってなされ、1970年代からは、熔融塩の構造と輸送現象の研究を目的とした多くの実験的研究や分子動力学シミュレーションがなされてきた。

J. P. Hansen and I. R. McDonald (1975), S. Biggin and J. E. Enderby, (1981)

これらを踏まえて、近年我々のグループは熔融塩2元系の輸送現象の研究に携わってきたが、『**等価熔融塩の部分伝導度はイオンの逆質量比に等しい**』という法則が見出され、一般化された Langevin 方程式およびシミュレーションによってこれを証明した。

T. Koishi and S. Tamaki, J. Chem. Phys., vol.121, pp.333-340 (2004)

また、超イオン導電体混合系の分子動力学シミュレーションを行い、融体では『**3種類のイオンの部分伝導度の比は、温度に拘わらず一定**』となる特筆すべき現象が見出された。

S. Matsunaga and P. A. Madden, Journal of Physics: Condensed Matter, vol.16, pp.181-194, (2004).

さらに、非等価熔融塩2元系においても同様の関係が成り立つことを示した。また第一原理計算によってイオン間の相互作用の変化による空孔形成と電子状態を考察し、光学的性質についても考察してきた。

また、固体から融体へ転移する直前の温度において液体様クラスターが形成される前駆現象について、多相の揺らぎに基づく理論と分子動力学シミュレーションによる研究を行った。

S. Matsunaga, T. Koishi, S. Tamaki, Molecular Simulation, vol.33, pp.613-621 (2007),

S. Matsunaga, Molecular Simulation, vol.33, pp.1129-1133, (2007)

S. Matsunaga, Progress of Theoretical Physics Supplement, vol.178, pp.113-119, (2009)

S. Matsunaga and S. Tamaki, Journal of

Physics: Condensed Matter, vol.20, pp.114116 (9pp), (2008)

S. Matsunaga and S. Tamaki, The European Physical Journal B, vol.63, pp.417-424, (2008)

我々はこれらの研究の手法を、更に複雑なイオン結晶や融体の擬二元系、さらに二種類の陽イオン Ag^+ , Cu^+ を含む超イオン導電体混合系の研究にも適用しようと計画した。混合系とすることで超イオン導電相への転移温度が下がり、より実用に近づくと考えられるからである。また、異種の陽イオン Ag と Rb を含む超イオン導電体 $RbAg_4I_5$ は室温で超イオン導電体になることが知られているが、その融体における研究は実験も含めて多くはなく、分子動力学法による研究はこれまで行われていない。我々は、こもような異種の陽イオンを含む系についても分子動力学シミュレーションによる研究を系統的に行うことを計画した。

(2) 一方、**電解質溶液**の研究に関しては、Faraday の発見以来数多くの研究が行われており、Kohlrausch は電解質の希薄水溶液に関する基本的な法則を確立した。しかし、粒子間の相互作用の厳密な表現は未だに導出されていない。また、多成分を含む電解質溶液の基礎的研究も十分ではない。

近年、溶液中のイオンに対しても、分子動力学シミュレーションの手法が、静的及び動的性質を微視的観点から研究するために用いられてきた。理論面でも溶媒中のイオンの挙動を説明する様々な試みがなされてきているが、これらは分子動力学シミュレーションによって得られる結果と比較検討することが可能である。

一方、大気中への二酸化炭素やメタンなどのいわゆる温室効果ガスの増加が地球環境に与える影響が注目されている。大気中に温室効果ガスが増加した場合の影響についてはこれまで多くの研究がなされてきた。これらの気体は、気温の上昇の影響によって今後一層海水に溶解し、様々な物性の変化を引き起こすと考えられる。しかし、海水に溶解した場合の種々の物性の変化や、巨視的な環境への影響については、特に分子動力学シミュレーションを用いた研究は十分になされていない。

2. 研究の目的

前述のように、我々のこれまでの熔融塩2元系及び擬2元系の研究結果を踏まえて、さらに熔融塩擬2元系の発展的研究を行い、さらに新たな展開として電解質水溶液の研究を計画した。

(1) 研究の第一の目的は、理論及び分子動力学シミュレーションによって、擬2元系イオン結晶の融解直前の構造や輸送現象の変化、すなわち融解前駆現象を考察することであ

る。この研究によって、固相から超イオン導電相への転移に関する示唆が得られるものと期待される。さらにフォノンの伝播などのダイナミクスや、光学的性質について考察する。

(2) 研究の第二の目的は、多成分を含む電解質水溶液の構造や輸送現象の研究を行うことである。特に稀薄塩化ナトリウム水溶液を海水のモデルとしてとらえ、そこに二酸化炭素やメタン等が溶解した場合の物性変化について、構造、輸送係数、分子振動、さらに熱物性の変化を、様々な水深に相当する圧力を加えながら分子動力学シミュレーションを用いて考察する研究を計画した。これらは海洋の気象などを考察する際の基礎データとなるものと期待される。

3. 研究の方法

(1) 様々な擬二元系イオン結晶について、固相からイオン伝導を有する超イオン導電相への転移に関する知見を得るために、融解前駆現象に関する研究を行う。理論的に予想される液体様クラスターのサイズを、分子動力学シミュレーションを用いて得られる結果と比較する。更に、固体から液体へ転移する直前の領域におけるイオンの動的性質についても考察する。

(2) また、2種類の可動陽イオン Ag^+ と Cu^+ を含む超イオン導電体 $(Ag_xCu_{1-x})Br$ に関して、分子動力学法によって輸送係数、動的構造因子、密度の揺らぎの相関関数等を求める。さらに第一原理計算等を行って電子状態についても考察する。

(3) 溶融塩のイオン間ポテンシャルについて、分極モデルの発散の原因について考察する。発散を避けるために、分極の効果を考慮した新たな遮蔽されたポテンシャルを提案し、いくつかの系に適用する。特に異種の2種類の陽イオン Rb^+ と Ag^+ を含む溶融 $RbAg_4I_5$ 系にこのポテンシャルを適用して分子動力学シミュレーションを行う。さらに第一原理計算によって電子状態についても考察する。

(4) 溶融塩の電導度の研究については、短時間領域における Langevin 方程式の記憶関数と直流電導度を説明するために、結合された速度相関関数を解く新しい再帰的方法を提案する。この方法を溶融塩化ナトリウムに適用し、分子動力学法の結果を用いて考察する。

(5) 電解質溶液の研究に関しては、稀薄電解質溶液のイオン電導度について考察する。また、二酸化炭素およびメタンが、海水のモデルとしての稀薄塩化ナトリウム水溶液に溶解した系において分子動力学シミュレーションを行い、構造、速度相関関数、振動数分

布、さらに熱伝導度などの物性について、圧力による変化について考察する。気体分子は剛体モデルとして扱うが、内部自由度を考慮した場合についても考察する。

4. 研究成果

本研究において得られた主な結果は以下の通りである。関連する論文の番号を記載している。

イオン結晶、超イオン導電体、溶融塩の研究については、擬二元系、特に2種類の陽イオンを含む混合系に注目して分子動力学シミュレーションによる研究を行った。混合系とすることで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ある。

(1) 本研究では、まず $KCl-NaCl$, $AgBr-AgCl$ 及び $AgBr-CuBr$ の擬二元系の融解前駆現象を、「多相の揺らぎ」の概念に基づく理論を用いて考察した。融点近傍の融解前駆領域において分子動力学シミュレーションを行い、Lindemann の不安定性条件を用いて液体様のクラスターが形成されることが認められた。分子動力学シミュレーションで得られたクラスターのサイズは、Gibbs-Helmholtz 方程式と有効媒質近似を用いて理論的に推定されたものと良く一致した。さらに融解前駆領域のイオンの動的な振る舞いを平均二乗変位および速度相関関数を用いて考察した。¹³

(2) また、2種類の可動陽イオン Ag^+ と Cu^+ を含む $(Ag_xCu_{1-x})Br$ ($x < 0.5$) の超イオン導電相と溶融相に対して分子動力学シミュレーションによる研究を行った。特に超イオン導電相ではこれまで Ag^+ と Cu^+ の分布や輸送係数はほぼ等しいと考えられていたが、実際には Ag^+ と Cu^+ の輸送係数や振動数分布等の動的な振る舞いは異なるという結果を得た。また、Bhatia 及び Ratti による多成分に対する密度の揺らぎの相関関数 $S_{C_i C_j}(q)$ を求めた。¹⁰

次に、 $(Ag_xCu_{1-x})Br$ ($x=0.1$) の超イオン導電相において部分動的構造因子 $S_{\xi_1}(k, \omega)$ を求めた。2種類の可動陽イオン Ag^+ と Cu^+ は赤外領域において異なる振動数分布を示した。これは、 Ag^+ と Cu^+ が格子点で振動する Br^- と異なる相互作用をすることを示している。また、得られた $S_{\xi_1}(k, \omega)$ からフォノンの縦音響モード、縦光学モード、更に横音響モードが認められた。これらのモードはすべて Br^- イオンが担っている。また、イオン間の相互作用をプラズマ振動に基づくモデルによって議論した。^{4, 8}

さらに、 $(Ag_xCu_{1-x})Br$ ($x=0.5$) の超イオン導電相と、閃亜鉛鉱構造 $CuBr$ において第一原理計算を行い、バンド構造及び電子状態密度を求め、結果を比較した。また、イオン間の

電荷移動を計算し、 $(\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x})\text{Br}$ ($x=0.5$) の超イオン導電相における Cu イオンの滞在確率との関係において議論した。 ¹

(3) 熔融塩のイオン間ポテンシャルとしてよく用いられる分極モデルには、イオン間の距離によってポテンシャルの値が発散するという欠陥 “polarization catastrophe” が知られていたが、分極の効果を含むイオン間の相互作用についてこれまでの研究の歴史を概観し、ポテンシャルが発散の原因について考察を加えた。このような発散を避けるために、分極の効果を検討した新たな遮蔽されたイオン間ポテンシャルを提案し、熔融 CuI 系に適用した。 ¹²

熔融 RbAg_4I_5 に対して、イオンの分極を考慮した Born-Maier 型のポテンシャルを用いて分子動力学シミュレーションを行った。我々の知る限り、本研究が熔融 RbAg_4I_5 の分子動力学法による最初の報告である。分子動力学シミュレーションの結果から、部分 2 体分布関数及び部分構造因子、更に Bhatia 及び Ratti による多成分に対する密度の揺らぎの相関関数 $S_{c_i c_j}(q)$ を求めた。これらの結果は 2 種類の陽イオン Rb^+ と Ag^+ に対して大きく異なっており、陽イオン間の強い相互作用を示唆している。更に速度相関関数からイオンの動的性質やイオン電導度についても考察した。 ^{7, 9}

また、分子動力学シミュレーションによって部分動的構造因子 $S_{\xi_1}(k, \omega)$ を求めフォノンの伝播について考察した。特筆すべき事項として、縦音響モードは I イオン、横音響モードは Ag イオンと、それぞれ異なるイオンによって伝播されるという結果が得られた。横音響モードは陽イオン間の相互作用によって引き起こされるものと考えられる。さらに、第一原理計算によって、状態密度、バンド構造などの電子状態を考察した。イオン間の混成電子状態は Rb イオンの存在によって強められていることが認められた。 ^{5, 6}

(4) 熔融塩の電導度の研究については、成分イオンのランジュバン方程式に基づく部分直流イオン電導度の微視的表現について、我々のこれまでの研究を概観し、さらに記憶関数を Fourier-Laplace 変換の長波長極限を用いて表した。短時間領域における Langevin 方程式の記憶関数と直流電導度を説明するために、結合された速度相関関数を解く新しい再帰的方法を提案した。この方法を熔融塩化ナトリウムに適用し、分子動力学法による計算から得られた伝導度を用いて記憶関数を求めた。得られた短時間領域における記憶関数は 3 種類のガウス関数で近似され、これらの物理的解釈について議論した。 ¹¹

(5) 一方、電解質溶液の研究に関しては、稀薄電解質溶液のイオン電導度に関する新た

な関係式について研究発表を行った。また、二酸化炭素およびメタンが海水のモデルとしての塩化ナトリウム水溶液に溶解した場合の物性変化について考察した。今回の研究では、海水に二酸化炭素及びメタンが飽和するまで溶解させ、海面直下から深海 10000m に至る圧力をかけた場合の構造、配位数、干渉関数、速度相関関数、振動数分布、さらに熱伝導度などの圧力変化を調べた。メタンが溶解した場合においては圧力による変化は特にメタンの THz 領域における振動数分布において顕著である。これらの特徴ある振動数の分布は、今後の深海における THz 波を用いたメタンの探査の可能性を示唆するものと考えられる。さらに、メタンの内部自由度を考慮することによって、高振動数側にラマン散乱の実験結果に対応する特徴的なピークが現れた。また、二酸化炭素を海水に溶解させた場合にも、水圧による構造の変化が認められた。特筆すべき現象として、二酸化炭素が飽和した海水は、深海 8000m 以上の圧力で顕著な熱伝導度の低下が認められた。これは、『二酸化炭素の溶解によって海水が熱を伝えにくくなる』ことを示唆しており、今後さらに研究を継続して行う予定である。 ^{2, 3}

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 13 件)

S.Matsunaga, “Anomalous Electrical Properties in Superionic $(\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x})\text{Br}$ ($x=0.5$): ab initio Study”, *Ionic*, 査読有, pp.1-6, 2014, Online First, DOI: 10.1007/s11581-014-1144-x

S.Matsunaga, “Effect of dissolution of methane in aqueous NaCl solution: A molecular dynamics study”, *JPS Conference Proceedings*, 査読有, vol.14, pp.012061-1-012061-4, 2014, DOI: 10.7566/JPSCP.1.012061

S.Matsunaga, “A molecular dynamics study of structure and thermal properties of carbon dioxide in sodium chloride aqueous solution”, *Journal of Physics: Conference Series*, 査読有, vol.490, pp.012158-1-012158-4, 2014, DOI: 10.1088/1742-6596/490/1/012158

S.Matsunaga, “Dynamical Behavior and Phonon Propagation in Superionic AgBr-CuBr System”, *Transactions of Materials Research Society of Japan*, 査読有, vol.38[2], pp.177-181, 2013, DOI: 10.14723/tmrj.38.177

S.Matsunaga, “Inter-cation interaction in partial dynamic structure factors $S_{\xi_1}(k, \omega)$ and electrical properties of molten AgI-RbI system”, *Physics and Chemistry of Liquids*, 査読有, vol.51(3), pp.414-428,

2013, DOI: 10.1080/00319104.2013.777959

S.Matsunaga, "Partial Dynamic Structure Factors $S_{\xi_1}(k, \omega)$ and Phonon Propagation in Molten RbAg_4I_5 : Molecular Simulation Study", Transactions of Materials Research Society of Japan, 査読有, vol.38(1), pp.113-117, 2013, DOI: 10.14723/tmrsj.38.113

S.Matsunaga, "Structural features in molten RbAg_4I_5 by molecular dynamics simulation", Molecular Simulation, 査読有, vol.39(2), pp.119-122, 2013, DOI: 10.1080/08927022.2012.706711

S.Matsunaga, "Dynamical Behavior Difference between Cu^+ and Ag^+ in Superionic AgBr-CuBr ", Lecture Notes in Information Technology, 査読有, vol.20, pp.309-313, 2012

S.Matsunaga, "Structure and Atomic Dynamics in Molten RbAg_4I_5 by Molecular Dynamics Simulation", Proceedings of 13th Asian Conference of Solid State Ionics, 査読有, pp.730-737, 2012, DOI: 10.1142/9789814415040_0086

S.Matsunaga, "Dynamical and Thermodynamic Properties of Ag^+ and Cu^+ Halide Mixtures" Molecular Simulation, 査読有, vol.38, pp.384-388, 2012, DOI: 10.1080/08927022.2010.544305

M.Kusakabe, **S.Takeno**, **T.Koishi**, **S.Matsunaga** and **S.Tamaki**, "A theoretical extension for the electrical conductivity of molten salts", Molecular Simulation, 査読有, vol.38, pp.45-56, 2012, DOI: 10.1080/08927022.2011.601308

S.Matsunaga and **S.Tamaki**, "On the inter ionic potentials of molten salts", EPJ Web of Conferences, 査読有, vol.15, pp.02010-1-02010-6, 2011, DOI: 10.1051/epjconf/20111502010

S.Matsunaga, "Premelting phenomena in pseudo-binary ionic crystals", Journal of Physics: Condensed Matter, 査読有, vol.22, pp.155104-1-155104-11, 2010, DOI:10.1088/0953-8984/22/15/155104

[学会発表](計 30 件)

S.Matsunaga, "Influence of HCO_3^- ion on Structure and Transport Properties of Seawater", The 15th IUMRS International Conference in Asia (IUMRS-ICA 2014), 2014年8月24日~30日, 福岡大学

S.Matsunaga, "Dynamical Ionic Behavior in Dilute Aqueous Electrolyte Solution", the 9th Liquid Matter Conference (Liquids2014), 2014年7月21日~25日, the University of Lisbon, Portugal

松永茂樹, **田巻繁**, "電解質水溶液の構造と輸送現象", 日本物理学会第69回年次大

会, 2014年3月28日, 東海大学

松永茂樹, **田巻繁**, "希薄電解質水溶液におけるイオン電導度", 日本物理学会新潟支部第42回例会, 2013年12月14日, 新潟大学

S.Matsunaga, "Molecular Simulation Study of Structure and Dynamical Properties of Nitrate Anion in Sodium Chloride Aqueous Solution", 3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2013), 2013年11月18日, 神戸国際会議場

松永茂樹, **田巻繁**, "電解質水溶液の構造と輸送現象", 日本物理学会2013年秋季大会, 2013年9月27日, 徳島大学

S.Matsunaga, "Thermal conductivity of methane and sodium chloride aqueous solution", International Soft Matter Conference 2013 (ISMC2013), 2013年9月18日, Sapienza Univ. of Rome, Italy

S.Matsunaga, "A molecular dynamics study of structure and thermal properties of CO_2 in NaCl aqueous solution", 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (IC-MSQUARE2013), 2013年9月1日, Prague, Czech Republic

S.Matsunaga, "Effect of dissolution of methane in aqueous NaCl solution: A molecular dynamics study", The 12th Asia Pacific Physical Conference (APPC12), 2013年7月16日, 幕張メッセ国際会議場

S.Matsunaga and **S.Tamaki**, "Ionic Conduction in Electrolyte Solution", 33rd International Conference on Solution Chemistry (33ICSC), 2013年7月9日, 京都テルサ

S.Matsunaga, "Anomalous Cation Behavior in Superionic $(\text{Ag}_x\text{Cu}_{x-1})\text{Br}$ ", The 19th International Conference on Solid State Ionics (SSI-19), 2013年6月6日, 国立京都国際会館

松永茂樹, "溶融 AgI-RbI 系における動的構造と電子状態", 日本物理学会新潟支部第41回例会, 2012年12月8日, 日本歯科大学

S.Matsunaga, "Dynamical Behavior of Ag^+ and Cu^+ in Super Ionic AgBr-CuBr ", IUMRS International Conference on Electronic Materials 2012, 2012年9月25日, パシフィコ横浜

S.Matsunaga, "Molecular Dynamics Simulation in Molten RbAg_4I_5 ", IUMRS International Conference on Electronic Materials 2012, 2012年9月25日, パシフィコ横浜

松永茂樹, **日下部征信**, **古石貴裕**, **田巻繁**, "溶融塩混合系における陽イオン間の相互作用", 日本物理学会2012年秋季大会, 2012年9月19日, 横浜国立大学

S.Matsunaga, "Dynamical Behavior Difference between Cu^+ and Ag^+ in

Superionic AgBr-CuBr”, 2012 2nd International Conference on Smart Materials and Nanotechnology in Engineering (SMNE 2012), 2012年7月21日, Dubai, United Arab Emirates

S.Matsunaga, “Structure and Atomic Dynamics in Molten RbAg₄I₅ by Molecular Dynamics Simulation”, The 13th Asian Conference on Solid State Ionics (ACSSI-2012), 2012年7月18日, 東北大学

松永茂樹, **日下部征信**, **古石貴裕**, **田巻繁**, “熔融塩混合系における陽イオン間の相互作用”, 日本物理学会第67回年次大会, 2012年3月25日, 関西学院大学

松永茂樹, **日下部征信**, **田巻繁**, “熔融塩混合系における cation-cation 相互作用と動的性質”, 日本物理学会新潟支部第40回例会, 2011年12月10日, 新潟大学

松永茂樹, “2種類の陽イオンを含む熔融塩混合系の構造と動的性質”, 第25回分子シミュレーション討論会, 2011年12月5日, 東京工業大学

松永茂樹, **日下部征信**, **古石貴裕**, **田巻繁**, “熔融塩混合系における陽イオン間の相互作用”, 日本物理学会, 2011年秋季大会, 2011年9月24日, 富山大学

S.Matsunaga, “Inter-cation correlation in molten and superionic (Ag_xCu_{1-x})Br”, 8th Liquid Matter Conference, 2011年9月6日, Univ. Wien, Austria

松永茂樹, **日下部征信**, **古石貴裕**, **田巻繁**, “熔融塩混合系における陽イオン間の相互作用”, 日本物理学会第66回年次大会, 2011年3月26日, 新潟大学

松永茂樹, **日下部征信**, **田巻繁**, “貴金属ハライド混合系における cation-cation 相互作用”, 平成22年度日本物理学会新潟支部第39回例会, 2010年12月4日, 長岡技術科学大学

松永茂樹, **田巻繁**, 貴金属ハライド混合系の構造と熱力学的性質, 第33回溶液化学シンポジウム, 2010年11月16日, 京都大学

松永茂樹, **田巻繁**, 熔融 CsAu 系における誘電遮蔽, 日本コンピュータ化学会 2010 秋季年会, 2010年10月22日, 長岡技術科学大学

松永茂樹, **田巻繁**, “熔融塩におけるイオン間ポテンシャルについて”, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010年9月25日, 大阪府立大学

日下部征信, **古石貴裕**, **松永茂樹**, **田巻繁**, “熔融炭酸塩における凝固点降下 II”, 日本物理学会, 2010 年秋季大会, 2010年9月25日, 大阪府立大学

S.Matsunaga, “Dynamical and Thermodynamic Properties of Superionic Phase in Ag⁺ and Cu⁺ Halide Mixtures”, 21st IUPAC International Conference on Chemical Thermodynamic, 2010年8月5日, つくば国際会議場

S.Matsunaga and S.Tamaki, “On The Interionic Potentials of Molten Salts”, XIV liquid and Amorphous Metals Conference, 2010年7月12日, Sapienza University of Rome, Italy

〔図書〕(計 1件)

S.Matsunaga, T.Koishi, M.Saito and S. Tamaki, InTech, “Dielectric Screening Properties and Many Body Effects in Molten Salts”, Noble Metals, Dr. Yen-Hsun Su (Ed), 2012, pp3-32, ISBN: 978 -953-307 -898-4

〔産業財産権〕
出願状況(計 0件)

取得状況(計 0件)

〔その他〕

Researchmap に研究内容及び発表論文を記載
URL <http://researchmap.jp/read0060953>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

松永茂樹 (MATSUNAGA SHIGEKI)
長岡工業高等専門学校・一般教育科・教授
研究者番号: 70321411

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

丸山健二 (MARUYAMA KENJI)
新潟大学・自然科学系・准教授
研究者番号: 40240767

日下部征信 (KUSAKABE MASANOBU)
新潟工科大学・工学部・環境科学科・教授
研究者番号: 60278075

連携研究者 **荒木秀明** (ARAKI HIDEAKI)
長岡工業高等専門学校・物質工学科・准教授
研究者番号: 40342480