

平成 21 年 6 月 16 日現在

研究種目：基盤研究 (C)  
 研究期間：2005 年 ~ 2008 年  
 課題番号：17540304  
 研究課題名 (和文) 分子動力学法による貴金属ハライドにおける輸送現象とポテンシャルの決定 —超イオン導電体およびイオン性液体の研究—  
 研究課題名 (英文) Transport phenomena and potential determination in noble metal halide by molecular dynamics simulation —Study on superionic conductor and ionic liquids—  
 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

研究成果の概要：イオン結晶、熔融塩、および超イオン導電体の 2 元系および 3 元系において、理論および分子動力学シミュレーションによって、主に構造の変化およびイオン伝導度を含む輸送現象に関する研究を行った。イオンが受ける二体ポテンシャルの他のイオンからの遮蔽効果の影響を考慮し、遮蔽されたポテンシャルを求め、イオン伝導度、融点近傍の融解前駆現象、さらに光学的性質等について考察した。

交付額

(金額単位：円)

|         | 直接経費      | 間接経費    | 合計        |
|---------|-----------|---------|-----------|
| 2005 年度 | 900,000   | 0       | 900,000   |
| 2006 年度 | 1,000,000 | 0       | 1,000,000 |
| 2007 年度 | 900,000   | 270,000 | 1,170,000 |
| 2008 年度 | 600,000   | 180,000 | 780,000   |
| 年度      |           |         |           |
| 総計      | 3,400,000 | 450,000 | 3,850,000 |

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性 I

キーワード：分子動力学, シミュレーション, イオン結晶 3 元系, イオン伝導度, 熔融塩 3 元系, 二体ポテンシャル, 速度相関関数, 誘電遮蔽

## 1. 研究開始当初の背景

超イオン導電体の計算機実験は、Rahman(1976)が  $\text{CaF}_2$  について行ったものに始まる。次いで Vashishta と Rahman が、 $\alpha$ -AgI における分子動力学シミュレーションによって陰イオンの部分格子は安定であるが可動 Ag イオンは拡散に寄与する状態を実現して以来、多数の 2 元系超イオン導電体のシミュレーションが行われてきた。一方、超イオン導電体 3 元系のシミュレーションはこれまで稀であった。実験的には  $\alpha$ -AgI のような超イオン導電体に同族イオンの不純物

を固溶させ、そのときの効果について考察する研究は数多くおこなわれており、その際のイオン伝導度の変化は同族イオンのサイズや電子構造に起因すると考えられている。超イオン導電体 3 元系をシミュレーションで考察することは、イオン伝導の発現機構の解明にも非常に重要である。

一方熔融塩に関しては、『2 元系熔融塩中のイオンの部分電気伝導度の比は、イオンの逆質量比に等しい』という関係が、我々のグループによってシミュレーションで見出されていた。(T. Koishi et al. J. Phys. Soc. Jpn

66 (1997) 3188, S. Matsunaga J. Phys. Soc. Jpn. 70 (2001) 3591) 他方、熔融塩 3 元系のイオン伝導度については組成依存性が存在することが Chemra 効果として知られているが、組成一定の条件での温度依存性については明確な関係はこれまで知られていなかった。我々は、『熔融塩 3 元系の部分イオン伝導度の比は温度にかかわらず一定』となる関係をシミュレーションで見出した。(S. Matsunaga and P. A. Madden, J. Phys.: Condens. Matter, 16 (2004) 181) イオン性液体 3 元系におけるこの現象は、これまで知られていないものである。これらを踏まえて、熔融塩 3 元系の理論およびシミュレーションによる研究を行い、2 元系熔融塩中の場合と比較して検討しようとする研究を計画した。

## 2. 研究の目的

前述のように、我々はこれまで、分子動力学シミュレーションによって、銀ハライド超イオン導電体混合系  $\text{Ag}_x\text{SI}$  系の熔融相において、3 種類のイオンの部分伝導度の比に関する関係を見出した。

研究の第一の目的は、この関係を Langevin 方程式に基づいて理論的に説明することである。研究の最初の段階として、イオンの価数と組成の比が 1:1 ではない 2 元系  $\text{CaCl}_2$  系についてシミュレーションおよび理論研究を行う。次の段階として 熔融  $\text{Ag}(\text{Br}_x\text{I}_{1-x})$  系、 $(\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x})\text{Br}$  系等においてシミュレーションと理論的研究を行い、実験値との比較検討を行うことである。

研究の第二の目的は、熔融塩や超イオン導電体中のポテンシャルと種々の物性との関連を検討することである。熔融塩や超イオン導電体中のイオンが受けるポテンシャルは周囲の他のイオンから遮蔽され、最初の二体ポテンシャルから変化したものになっているはずである。このような効果が貴金属ハライドやその混合系の物性にどのような影響を与えるか、アルカリハライド系と比較しつつ、理論による検討及び分子動力学計算を同時に行う研究を計画した。

## 3. 研究の方法

### (1) イオン性液体の伝導度に関する理論及びシミュレーションによる研究

これまで我々のグループはイオン性液体のイオン伝導度の理論的研究およびシミュレーションによる研究を行い、特にイオン伝導度に関する関係を見出した。我々はこれらの成果の発展を微視的な分子論理論で展開することを計画した。非等価熔融塩 2 元系および 3 元系について、線形応答理論に基づく部分伝導度の理論について考察する。Langevin 方程式から出発し、速度相関関数とイオンの有効質量の関係を統計力学に基づいて考察

する。最終的に部分伝導度の一般的な関係を導く研究を計画した。

### (2) 熔融塩や超イオン導電体中のポテンシャルと種々の物性との関連に関する研究

熔融塩や超イオン導電体中のイオンが受けるポテンシャルは、周囲の他のイオンから遮蔽されていると考えられる。しかし、誘電遮蔽に関するこれまで知られている Hansen and McDonald による理論では、ある波数  $q$  の領域で負の誘電関数が現れ物理的に不自然である。誘電遮蔽に関する理論を再検討し、さらにこのような遮蔽効果が熔融塩やその混合系の物性にどのような影響を与えるか検討しようとする計画した。また、構造や輸送現象、及び融点近傍の相転移について理論、分子動力学及び第一原理計算を含めた研究を計画した。

## 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。通し番号は論文の番号に対応している。

(1) 銀ハライド混合系の固相、超イオン導電相、熔融相における分子動力学シミュレーションを行い、それぞれの系におけるイオンの軌跡、構造、速度相関関数、振動数に依存する拡散係数、 $D_i(\omega)$  を得た。 $D_i(\omega)$  は、赤外領域、特に物質に対する大きな透過力など特異な物質との相互作用で知られる THz 領域に大きなピークが見られた。この THz 領域のピークは特に  $\text{AgI}$  に  $\text{AgBr}$  を微量に加えた場合、及び  $\text{AgCl}$  に  $\text{AgI}$  を微量に加えた場合の微量陰イオンの振動に関して顕著であった。これは、陰イオンの周囲の陽イオンによる遮蔽効果によってイオン間の有効ポテンシャルが変化し、cage 効果によってイオンの振動が狭い空間で起こったためと考えられる。この結果は、貴金属ハライド混合系を用いた THz デバイスの可能性を示唆し、今後の新たな実験的研究の方向を示すものと考えられる。

(2) 2 種類の可動陽イオン  $\text{Ag}^+$  及び  $\text{Cu}^+$  が存在する系である  $(\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x})\text{Br}$  の超イオン導電相において分子動力学シミュレーションを行った。これまでの貴金属ハライドの研究は主に 2 元系、あるいは 1 種類の陽イオンと 2 種類の陰イオンを含む混合系に対して行われてきた。これらの系の超イオン導電相では、陽イオンは主に四面体 12(d) 位置に滞在すると考えられてきた。しかし  $(\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x})\text{Br}$  のように 2 種類の可動陽イオンを含む系の超イオン導電相では  $\text{Ag}^+$  と  $\text{Cu}^+$  は同じように分布するのだろうか、という疑問に対して、我々の知る限り  $\text{Ag}^+$  と  $\text{Cu}^+$  の分布の違いについて明確に論じた研究はこれまで見られない。本研究では、 $(\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x})\text{Br}$  系の超イオン導電相に

において分子動力学シミュレーションを行い、それぞれのイオンの分布について検討した。我々の知る限り、超イオン導伝相における  $\text{Ag}^+$  と  $\text{Cu}^+$  の分布の相違に関しては、本研究が最初の報告である。

(3) 統計力学に基づく融解前の多相の揺らぎの理論を  $\text{KCl}$  及び  $\text{AgCl}$  結晶に対して適応し、結晶中に形成される液滴様クラスターのサイズを見積もった。また、伝導度から液体様クラスターのサイズを見積もる理論を検討し、2 種類の方程式を得た。これらの方程式と伝導度の実験データからも液体様クラスターのサイズを見積もった。一方、大規模な分子動力学計算を行い、Lindemann instability condition からやはり融解直前の液体様クラスターのサイズを見積もった。理論と分子動力学の結果には良い一致が見られた。また融解直前の液体様クラスターとそれ以外の部分の構造を、特に配位数の観点から融体及び固体の構造と比較検討した。 $\text{KCl}$  と  $\text{AgCl}$  の液体様クラスターには明確な相違が見られた。

(4) 融解直前に現れる比熱の直線性からの大きなずれなどの特異な現象を、結晶中に Frenkel 欠陥が多数できて液体様クラスターが形成されると仮定して、統計力学に基づく融解前の多相の揺らぎの理論を考察した。この理論を  $\text{NaCl}$  及び  $\text{AgBr}$  結晶に対して適応し、結晶中に形成される液滴様クラスターのサイズを見積もった。一方、大規模な分子動力学計算を行い、Lindemann instability condition からやはり融解直前の液体様クラスターのサイズを見積もった。理論と分子動力学の結果には良い一致が見られた。また融解直前の液体様クラスターとそれ以外の部分の構造を、融体及び固体の構造と比較検討した。液体様クラスターの構造は融体と異なる固体の特徴を残している。また  $\text{NaCl}$  と  $\text{AgBr}$  では液体様クラスターの出来方に相違が見られる。本研究が、我々の知る限り、分子動力学を用いた融解直前のイオン結晶中の液体様クラスター形成に関する最初の報告である。

(5) 融体中のイオンの周囲の異種イオンの影響でイオンに実際に影響を及ぼす二体ポテンシャルは遮蔽されたものになる。このときの遮蔽の効果を表す誘電関数と中性子散乱実験から得られる構造を関係づける理論を考察した。誘電遮蔽に関するこれまで知られている Hansen and McDonald による理論では、ある波数  $q$  の領域で負の誘電関数が現れ物理的に不自然である。イオン結晶の融体について我々が新たに導いた誘電関数  $\epsilon(q)$  の定義は、誘電関数の逆数を電荷-電荷構造因

子  $S_{zz}(q)$  を用いて定義するものであるが、これは Hansen and McDonald による式とは異なり全ての  $q$  の値に対して正となり、物理的に妥当である。 $\text{AgBr}$  及び  $\text{CuBr}$  に対して中性子実験から得られた構造を用いて、誘電関数および遮蔽された二体ポテンシャルを得た。さらに、effective mean force の理論を用いて二体分布関数を求め、分子動力学及び実験から得られる二体分布関数と比較した。さらにイオン伝導度に関する Nernst-Einstein の理論からのずれ  $\Delta$  を理論及び分子動力学から見積り、実験値と比較したが、これらは良い一致を示した。

(6) 本研究は融体中の部分イオン伝導度の研究を 3 元系へ拡張しようとする試みである。理論的考察によって、一般化された Langevin 方程式を用いて各イオンの部分電気伝導度が電流相関関数を用いて表された。さらに、相関関数のアンサンブル平均をとることによって、3 元系の伝導度テンソル及び部分伝導度について、2 元系の伝導度とイオン質量の関係式の 3 元系への拡張に相当する関係式が導かれた。さらに  $\text{NaCl-KCl}$  混合系について二体ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションを行い速度相関関数を求め、理論的に導かれた関係式が数値的に成り立つことを確かめた。

(7)  $\text{AgBr}$  の結晶は融点直前の温度で急激な体積膨張が起きることが実験的に知られており、結晶格子中に Frenkel 欠陥ができるためと考えられている。本研究では、融解前の温度において NTV アンサンブルによる第一原理計算を行い、 $\text{AgBr}$  結晶中に格子欠陥がある場合と無い場合についての系の体積とエネルギーの関係性を求め、系の体積の温度変化から結晶中に格子欠陥ができる割合を得た。一方、統計力学の理論に基づく考察から、格子欠陥形成のエネルギーと系の体積の温度変化の関係式を求めた。実験から得られた格子欠陥形成のエネルギーを用いて、系の体積の温度変化を求めたが、この結果は第一原理計算の結果と良く一致した。また、第一原理計算から、結晶中の電子密度分布を求めたが、これは実験から得られている結果と良く位置した。

(8) 非等価溶融塩のイオン伝導度に関する理論が線形応答理論に基づいて考察された。これは、これまで我々のグループが考察してきた等価溶融塩の理論の拡張である。本研究ではより一般的な粒子数の表示を用いた。速度相関関数は二体ポテンシャルと二体分布関数によって表された。また、イオンの運動を一般化された Langevin 方程式で表現し、イオンの運動に伴う effective friction

constant に関する関係式を見出した。これらの理論的考察から、イオンの伝導度の間の『イオン伝導度の比がイオンの電荷の絶対値の比とイオン質量の逆比の積に等しい』という関係が得られた。これは等価熔融塩の場合の「逆質量比」の関係の拡張となっている。熔融  $\text{CaCl}_2$  及び  $\text{AlF}_3$  に対して理論に基づく数値計算を行ったが、これは分子動力学シミュレーションの結果、及び実験結果と良く一致した。

(9) 我々はこれまで熔融塩中のイオン伝導度と Langevin 方程式に基づく理論によって考察してきた。本研究ではこれまでに展開してきた理論構成を偽二元系  $(\text{AgI})_{1-c}(\text{AgBr})_c$  に適用して考察した。Langevin 方程式及び相関関数を用いて、 $(\text{AgI})_{1-c}(\text{AgBr})_c$  系の  $c$  が 0.5 の場合について検討し、イオンの部分伝導度テンソルが二元系の場合の拡張に相当するイオン質量との関係式を満たすことが示された。同時に行った分子動力学から求めた相関関数の結果から、理論的に求めたイオンの伝導度テンソルの関係式が数値的に成り立つことが示された。

(10) 熔融偽二元系  $(\text{AgI})_{1-c}(\text{AgBr})_c$  における誘電遮蔽の効果、熔融塩中の誘電遮蔽の理論的考察によって考察した。得られた誘電関数の逆数は陽イオン - 陰イオン間のポテンシャルの引力部分に掛けられ、遮蔽されたイオン間ポテンシャルが得られた。中性子散乱実験から得られた構造因子を用いて誘電関数及び遮蔽されたポテンシャルが得られた。遮蔽されたポテンシャルは potential of mean force によって考察され、2 体分布関数と関係づけられた。その概形は、同時に行った分子動力学から得られた 2 体分布関数と良く一致した。

(11)  $\text{AgI-AgBr}$  系の構造の性質を調べるために超イオン導電相及び熔融相において分子動力学シミュレーションを行った。シミュレーションには Parrinello, Rahman, Vashishta type のポテンシャルを用いた。得られた 2 体分布関数は中性子散乱実験のデータを良く再現した。これら 2 つの相の輸送係数も平衡及び非平衡分子動力学を用いて計算された。 $\text{Ag}$  イオンの分布の組成依存が輸送係数の組成依存と consistent に説明された。熔融相においては、組成一定の条件での部分電気伝導度の比が異なる温度でも一定となる結果が得られた。

(12) 熔融塩における誘電遮蔽の理論を用いて、誘電関数を求め、遮蔽された有効ポテンシャルの関数形が得られた。分子動力学シミュレーションによって得られた、熔融  $\text{NaCl}$  における  $S_{zz}(q)$  と  $1/\epsilon(q)$  を用いて全遮蔽ポテンシャルが得られた。これは、potential of mean force と一致している。同様の計算を熔融  $\text{RbBr}$  に対して  $S_{zz}(q)$  の測定値を用いて行い、良好な結果を得た。これらの結果から、熔融塩中で得られた potential of mean force は、イオン伝導度における Nernst - Einstein の関係からのずれの計算に用いることができると考えられる。

ユレーションによって得られた、熔融  $\text{NaCl}$  における  $S_{zz}(q)$  と  $1/\epsilon(q)$  を用いて全遮蔽ポテンシャルが得られた。これは、potential of mean force と一致している。同様の計算を熔融  $\text{RbBr}$  に対して  $S_{zz}(q)$  の測定値を用いて行い、良好な結果を得た。これらの結果から、熔融塩中で得られた potential of mean force は、イオン伝導度における Nernst - Einstein の関係からのずれの計算に用いることができると考えられる。

(13) これまで、我々は等価熔融塩の伝導度について検討してきたが、本研究は理論面の非等価熔融塩への拡張である。イオン伝導度は速度相関関数および二体ポテンシャルであらわされ、また Langevin 方程式を用いてイオン伝導度の比  $\sigma^+/\sigma^-$  が  $|z^+|m^-/|z^-|m^+$  に等しいことが示された。これは、等価熔融塩の場合の逆質量比の関係の比等価熔融塩への拡張となっている。熔融  $\text{CaCl}_2$  および  $\text{AlF}_3$  についての理論の計算結果と分子動力学シミュレーションの良好一致を得た。

(14) 超イオン導電相および熔融相において  $\text{AgI}$  に  $\text{AgBr}$  を固溶した効果が、分子動力学シミュレーションによって検討された。相図上の対応する組成と温度で超イオン導電相が再現された。熔融相における分子動力学シミュレーションから得られた二体分布関数は中性子散乱実験から得られた結果を再現した。超イオン導電相及び熔融相における部分二体分布関数は、 $\text{I}$  イオン及び  $\text{Br}$  イオンの周りのイオン分布の特徴が異なっていることを示している。 $\text{AgBr}$  を  $\text{AgI}$  に固溶し格子点の  $\text{Br}$  濃度が増えるに従って、結晶格子の  $(1, 0, 0)$  面上の  $\text{Ag}$  イオンの分布の変化が起こる。これらの相の輸送係数も分子動力学法によって得られた。部分伝導度は実験値とよく一致しており、また組成一定における部分伝導度の比は温度に関わらず一定となる現象が認められた。

## 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 14 件)

(1) S.Matsunaga, "Structure and Atomic Dynamics of Silver Halide Mixtures", Progress of Theoretical Physics Supplement, 査読有, vol.178, pp.113-119, 2009

(2) S.Matsunaga: "Structural features of superionic phase in  $\text{AgBr-CuBr}$  system by molecular dynamics simulation", Journal

of Physics: Conference Series, 査読有, vol.144, pp.012011(6pp), 2009

(3) **S.Matsunaga** and S.Tamaki, "Hetero-phase Fluctuations in the Pre-melting Region in Ionic Crystals", The European Physical Journal B, 査読有, vol.63, pp.417-424, 2008

(4) **S.Matsunaga** and S.Tamaki, "Premelting phenomena in ionic crystals", Journal of Physics: Condensed Matter, 査読有, vol.20, pp.114116(9pp), 2008

(5) **S.Matsunaga**, M.Saito, T.Koishi and S.Tamaki, "Dielectric screening properties in molten noble-metal halides", Journal of Alloys and Compounds, vol.452, 査読有, pp.182-187, 2008

(6) **S.Matsunaga**, T.Koishi, S.Tamaki, "A Theory of Electrical Conductivity of Pseudo-Binary Equivalent Molten Salt", American Institute of Physics Conference Proceedings, vol.982, 査読有, pp.399-402, 2008

(7) **S.Matsunaga**, "Anomalous pre-melting volume expansion in AgBr - ab initio approach", Molecular Simulation, 査読有, vol.33, pp.1129-1133, 2007

(8) **S.Matsunaga**, T.Koishi, S.Tamaki, "A theory of electrical conductivity of non-equivalent molten salts", Molecular Simulation, 査読有, vol.33, pp.613-621, 2007

(9) **S.Matsunaga**, T.Koishi and S.Tamaki, "Velocity correlation functions and partial conductivities of molten AgI-AgBr by molecular dynamics simulation", Materials Science and Engineering A, 査読有, vol.449-451, pp.693-698, 2007

(10) **S.Matsunaga**, M.Saito, T.Koishi and S.Tamaki, "Dielectric screening effects in molten AgI-AgBr system", Molecular Simulation, 査読有, vol.33, pp.153-158, 2007

(11) **S.Matsunaga**, "Structural and transport properties of the AgI-AgBr system in its superionic and molten phases by computer simulation", Journal of Non-Crystalline Solids, 査読有, vol.353, pp.3459-3462, 2007

(12) T. Koishi, M.Saito, **S.Matsunaga**, S.Tamaki, "Dielectric screening properties

in molten salts", Physics and Chemistry of Liquids, 査読有, vol.45, pp.181-196, 2007

(13) **S.Matsunaga**, T.Koishi, S.Tamaki, "Ionic conductivities of non-equivalent molten salts by molecular dynamics simulations", Bussei Kenkyu, 査読有, vol.87, pp.70-71, 2006

(14) **S.Matsunaga**, "Structural and transport influence of dissolving AgBr into AgI in super ionic and molten phases by molecular dynamics simulations", Solid State Ionics, 査読有, vol.176, pp.1929-1940, 2005

[学会発表] (計 24 件)

(1) **松永茂樹**, 古石貴裕, 田巻 繁: "熔融における融解前駆現象IV", 日本物理学会第64回年次大会, 2009年3月30日, 立教大学

(2) **松永茂樹**, 田巻 繁, "イオン結晶混合系における融解前の異相間の揺らぎII", 日本物理学会新潟支部第37回例会, 2008年12月21日, 新潟大学

(3) **松永茂樹**, 古石貴裕, 田巻 繁, "熔融における融解前駆現象III", 日本物理学会 2008年秋季大会, 2008年9月22日, 岩手大学

(4) **S.Matsunaga**, "Structural Properties of Noble Metal Halide Pseudo Binary System by Molecular Dynamics Simulation", The 13<sup>th</sup> International Conference on Rapidly Quenched & Metastable Materials, 2008年8月24日, Dresden University of Technology, Germany

(5) **S. Matsunaga**, P.S. Salmon, and S. Tamaki, "PREMELTING PHENOMENA IN TERNARY MIXED IONIC CRYSTALS", 7<sup>th</sup> Liquid Matter Conference, 2008年6月27日, Lund University, Sweden

(6) **松永茂樹**, 古石貴裕, 田巻繁, "イオン結晶における融解前の異相間の揺らぎ", 平成19年度日本物理学会新潟支部 第36回例会, 2007年12月8日, 新潟大学

(7) **S. Matsunaga**, T. Koishi and S. Tamaki, "A Theory of Electrical Conductivity of Pseudo-Binary Equivalent Molten Salt", 5<sup>th</sup> International Workshop on Complex Systems, 2007年9月27日, 東北大学

(8) **松永茂樹**, 古石貴裕, 田巻繁, "イオン結晶における融解前駆現象 II", 日本物理学会第62回年次大会, 2007年9月22日, 北海道大学

(9) 田巻繁, 竹野茂治, 日下部征信, 古石貴裕, **松永茂樹**, "熔融塩におけるランジュバン方程式と電気伝導度の理論", 日本物理学会第62回年次大会, 2007年9月22日, 北海道大学

- (10) **S.Matsunaga**, T.Koishi and S.Tamaki, "Premelting Phenomena in ionic crystals", 13<sup>th</sup> International Conference on Liquid and Amorphous Metals, 2007年7月12日, Ekaterinburg, Russia
- (11) **松永茂樹**, 古石貴裕, **新井好司**, 田巻繁, "イオン結晶における融解前駆現象", 日本物理学会 2007年春季大会, 2007年3月18日, 鹿児島大学
- (12) **S.Matsunaga**, "Anomalous Pre-Melting Behavior in AgBr", Second International Symposium on Nanometer-Scale Quantum Physics: nano PHYS'07, 2007年1月24日, 東京工業大学
- (13) **松永茂樹**, 斉藤正敏, 古石貴裕, **新井好司**, 田巻 繁, "溶融 AgBr, CuBr における誘電遮蔽の効果", 日本物理学会新潟支部第 35 回例会, 2006 年 12 月 2 日, 長岡技術科学大学
- (14) **松永茂樹**, 斉藤正敏, 古石貴裕, **新井好司**, 田巻 繁, "溶融貴金属ハライドにおける誘電遮蔽", 日本物理学会 2006 年秋季大会, 2006 年 9 月 24 日, 千葉大学
- (15) **S. Matsunaga**, M. Saito, T. Koishi and S. Tamaki, "Dielectric Screening Properties in Molten Noble-Metal Halides by Molecular Dynamics Simulations". The 12<sup>th</sup> International IUPAC-Conference on High Temperature Materials Chemistry, 2006 年 9 月 18 日, Univ. Wien, Austria
- (16) **S.Matsunaga**, T.Koishi and S. Tamaki, "Ionic conductivities of non-equivalent molten salts by molecular dynamics simulations", Structures and Dynamics in Soft Matter -Beyond Self-Organization and Hierarchical Structures, 2006 年 7 月 14 日, 京都大学
- (17) **S. Matsunaga**, M. Saito, T. Koishi and S. Tamaki, "Dielectric Screening Effects in Molten AgI-AgBr System", Symposium on Progress and Future Prospects in Molecular Dynamics Simulation, Keio Univ., Yokohama, 2006 年 6 月 6 日, 慶応大学
- (18) 斉藤正敏, 古石貴裕, **松永茂樹**(発表者), **新井好司**, 田巻 繁, "溶融塩における誘電遮蔽", 日本物理学会 第 61 回年次大会, 2006 年 3 月 30 日, 愛媛大学
- (19) **松永茂樹**, 古石貴裕, **新井好司**, 田巻繁, "非等価溶融塩における輸送現象と動的性質 - 分子動力学法による研究 -", 日本物理学会新潟支部第 34 回例会, 上越教育大学, 2005 年 12 月 3 日
- (20) **松永茂樹**, 古石貴裕, **新井好司**, 田巻繁, "分子動力学法による非等価溶融塩の速度相関関数と部分電気伝導度 II", 日本物理学会 2005 年秋季大会, 同志社大学, 2005 年 9

月 22 日

- (21) **S.Matsunaga**, "Velocity correlation functions and frequency dependent diffusion coefficients of AgI-AgBr system in its superionic and molten phases", International Anniversary Symposium on Molecular Dynamics Simulations, 大阪大学中之島センター, 2005 年 8 月 29 日
- (22) **S.Matsunaga**, T.Koishi and S.Tamaki, "Velocity correlation functions and partial conductivities of molten AgI-AgBr by molecular dynamics simulation", The 12<sup>th</sup> International Conference on Rapidly Quenched & Metastable Materials, Jeju, Korea, 2005 年 8 月 21 日
- (23) **S.Matsunaga**, T.Koishi and S.Tamaki, "A theory of partial conductivity and velocity correlation function of non-equicharged molten salt", 6<sup>th</sup> Liquid Matter Conference of the European Physical Society, Utrecht Univ. the Netherlands, 2005 年 7 月 2 日
- (24) **松永茂樹**, 古石貴裕, 田巻 繁, "分子動力学法による非等価溶融塩の速度相関関数と部分電気伝導度", 日本物理学会 第 60 回年次大会, 東京理科大学, 2005 年 3 月 25 日

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

研究開発支援総合ディレクトリ(ReaD)に研究業績リスト掲載。

## 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

下條 冬樹 (SHIMOJYO FUYUKI)

熊本大学・理学部・准教授

研究者番号: 60253027

新井 好司 (ARAI KOHJI)

長岡工業高等専門学校・一般教育科・准教授

研究者番号: 20374738