

エネルギー機能材料の電子構造と光物性

Electronic states and optical properties of the functional energy materials

京都大学 大学院エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻

量子エネルギープロセス分野 蜂谷 寛

研究成果概要

昨年度に引き続き、熔融  $\text{CsCl-AlCl}_3$  二元系に着目して第一原理分子動力学法 ADMP (Atom-centered Density Matrix Propagation) によるイオン拡散のダイナミクスを検討した。

( $8 \times \text{CsAlCl}_4$ ) を配置したユニットセルでの計算を行った。

GAUSSIAN09 を用い、汎関数 HSE06 (HSEh1PBE), 基底関数として Modified def2-SVP を用い、0.2 fs の time step での時間発展を計算し、温度設定を 700 K とした。

昨年度計算を行った、構成イオンの 1 ps 後の座標を初期座標とし、さらに 1 ps にわたるダイナミクスの計算を進めた。

FIG. 1 にイオン配置の一例を示す。

$\text{AlCl-AlCl}_3$  ( $A$ : alkaline metals) 熔融塩における、1:1 の組成付近での  $\text{Al(III)}$  イオンのとる錯体構造 (M. P. Tosi, D. L. Price, M.-L. Saboungi, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **44** 173 (1993)) において、 $A = \text{Cs}$  の場合の 1:1 組成を境とする  $\text{AlCl}_4^-$  アニオン構造のみの構造と、二つの四面体  $\text{AlCl}_4^-$  アニオン構造が頂点共有で連なった  $\text{Al}_2\text{Cl}_7^-$  構造を含む構造、両者が共存に加えて、 $\text{AlCl}_4^-$  アニオンが多数配位した形での  $\text{Cs}^+$  カチオンみられ、やや不均質な構造をとっている。 $\text{AlCl}_4^-$  アニオン中の  $\text{Al}$ ,  $\text{Cs}^+$  とともに相対的に動きは小さく、 $\text{Cl}^-$  の動きは大きいため、頻繁に  $\text{Cl}^-$  の交換が起きていることは変わらない。

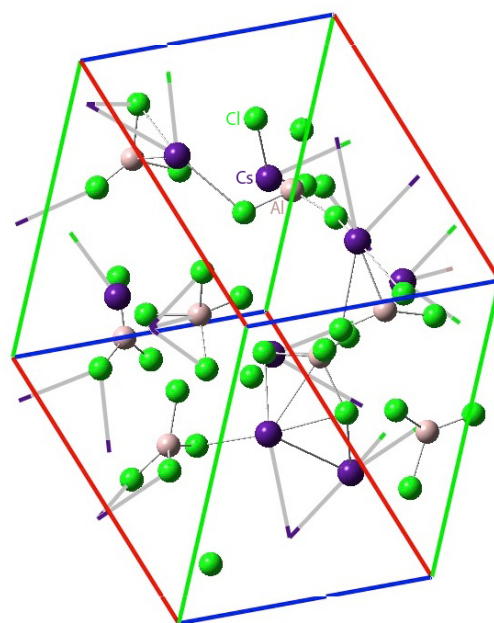


FIG. 1 Ionic configurations after 1.0 ps following another 1.0 ps of equilibration calculated with ADMP dynamics for molten  $\text{CsCl-AlCl}_3$  at 700 K

発表論文(謝辞あり、謝辞なし)

該当なし