

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

熔融 CsCl-AlCl₃ 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。

昨年度に引き続き(8×CsAlCl₄)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。

本年度は、構成イオンの座標の計算を 1 ps にいたるまで行った。

AlCl-AlCl₃ (A: alkaline metals) 熔融塩において、1:1 の組成付近での Al(III)イオンのとる錯体構造は長らく議論の的となっている(M. P. Tosi, D. L. Price, M.-L. Saboungi, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **44** 173 (1993)), A = Cs の場合に、かねてから主張されている 1:1 組成を境に、AlCl₄⁻ アニオン構造のみの構造から、四面体 AlCl₄⁻ アニオン構造面帳点共有で連なった Al₂Cl₇⁻ 構造を含む構造へと急激に変化し、当該組成では両者が存在しうる。

FIG. 1 にイオン配置の一例を示す。

AlCl₄⁻ アニオンの連なる間に Cs⁺ カチオンが挟まれている。AlCl₄⁻ アニオン中の Al, Cs⁺とも相対的に動きは小さく、Cl⁻の動きは大きいため、頻繁に Cl⁻の交換が起こっている。

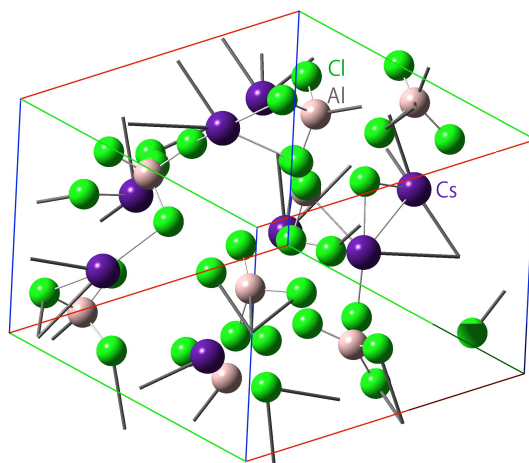


FIG. 1 Ionic configurations after 0.98 ps calculated with ADMP dynamics for molten CsCl-AlCl₃ at 700 K

発表論文(謝辞あり、謝辞なし)

該当なし