

## 国内ラボ留学 報告書

九州大学 多田研究室

博士研究員 高松晃彦

期間：2025 年 12 月 23 日～26 日

受入者：大阪大学 川崎猛史准教授

当研究室で研究している、フッ化物系の超イオン伝導体におけるイオン伝導現象について、分子動力学法を用いて固体中でどのようにイオン伝導現象が起きているのかを詳細に調査いたしました。これまでも、巨視的な物理量であるイオン伝導度や拡散係数について、実験値と、分子動力学法によるその計算値の間で定量的な一致が得られていました。しかし、高いイオン伝導特性がなぜ発現するのかを説明するためには、微視的な観点から拡散イオンの動的挙動を追跡し、その振る舞いを原子レベルで理解する必要があります。近年、超イオン伝導体では、複数のイオンが協調的に運動する可能性が議論されていますが、そのような運動を捉えるための解析手法はまだ発展途上です。そこで、過冷却液体やガラスなどの材料研究において蓄積されてきた協調的な運動の解析手法を応用し、拡散機構の詳細な解明に繋げることを目指しました。

今回のラボ留学では、過冷却液体やガラスなどの理論研究を専門とされる川崎猛史先生にご協力頂きました。大阪大学に4日間滞在し、当研究室で研究対象としているフッ化物イオン伝導材料に対して、過冷却液体やガラスなどの材料系において標準的に用いられているダイナミクスの解析方法を適用しました。具体的には、平均的な拡散像では見えにくい原子運動の緩和過程を様々な距離・時間スケールの観点から評価しました。結果として、事前には想定していなかったものの、運動が空間的・時間的に一様ではない可能性が示唆されました。これにより、局所的にイオンの動きやすさが偏る特徴的な運動パターンの存在に着目すべきという次段階の評価指針が得られました。

最後になりましたが、ご多忙の中、今回実施した解析方法の実装方針や条件設定、結果の検証などについて丁寧にご助言くださった川崎猛史先生および研究室の皆様へ、心より感謝申し上げます。

