

## ベリー位相を用いた電気伝導率の計算

産業技術総合研究所 土田 英二

燃料電池やリチウム電池の電解質は通常エネルギーギャップを持ち、電子伝導性はない。従って荷電したイオンが電気伝導を担うことになるが、このような系において電気伝導率を第一原理分子動力学シミュレーションから計算する方法は未だ確立されていない。これは古典分子動力学法とは異なり、イオンの電荷が一定では無いこと、周期系に電場を加える方法が自明では無いこと、及び統計精度が厳しいという事情による。本講演ではベリー位相を用いて電気伝導率を効率良く計算する複数の方法 [1] について比較・検討する。

具体例として、小規模な熔融塩（144 原子系）について 2 ナノ秒（ $10^6$  ステップ）程度の第一原理 MD を行い、統計精度や実験値との比較について議論する。

文献

[1] 非平衡 MD の例として、Y-K. Choe, E. Tsuchida, and T. Ikeshoji, "First-principles molecular dynamics study on aqueous sulfuric acid solutions", J. Chem. Phys. 126, 154510 (2007).