

有効遮蔽媒質法の拡張

Extensions of the effective screening medium method

大谷 実¹、Nicephore Bonnet^{1,2}、杉野 修²

Minoru Otani¹, Nicephore Bonnet^{1,2}, Osamu Sugino²

産業技術総合研究所、東京大学物性研究所

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), 1-1-1 Umezono,
Tsukuba, 305-8568, Japan,
The University of Tokyo, The Institute for Solid State Physics, 5-1-5 Kashiwanoha, Kashiwa,
277-8581, Japan

有効遮蔽媒質 (ESM) 法は固体表面や固液界面に電圧を印可することができる方法である。これまでに電圧を印可した固液界面における電気化学反応のシミュレーションに成功するなどの成果を上げているが、いくつかの改善の余地があることが知られている。現在のESM法ではESMと電子状態計算で扱う領域の間に真空領域が必要であり、この真空領域にも電圧が印可されてしまい、真に系に印可された電圧の見積もりを難しくしている。また、電気化学系の記述のためにはポテンシャル一定の方法が必要であるが、現在の分子動力学の運用では系の電子数を一定にした計算を行っており、この点にも改善の余地がある。講演ではこれらの問題点に関する処方箋について議論する。