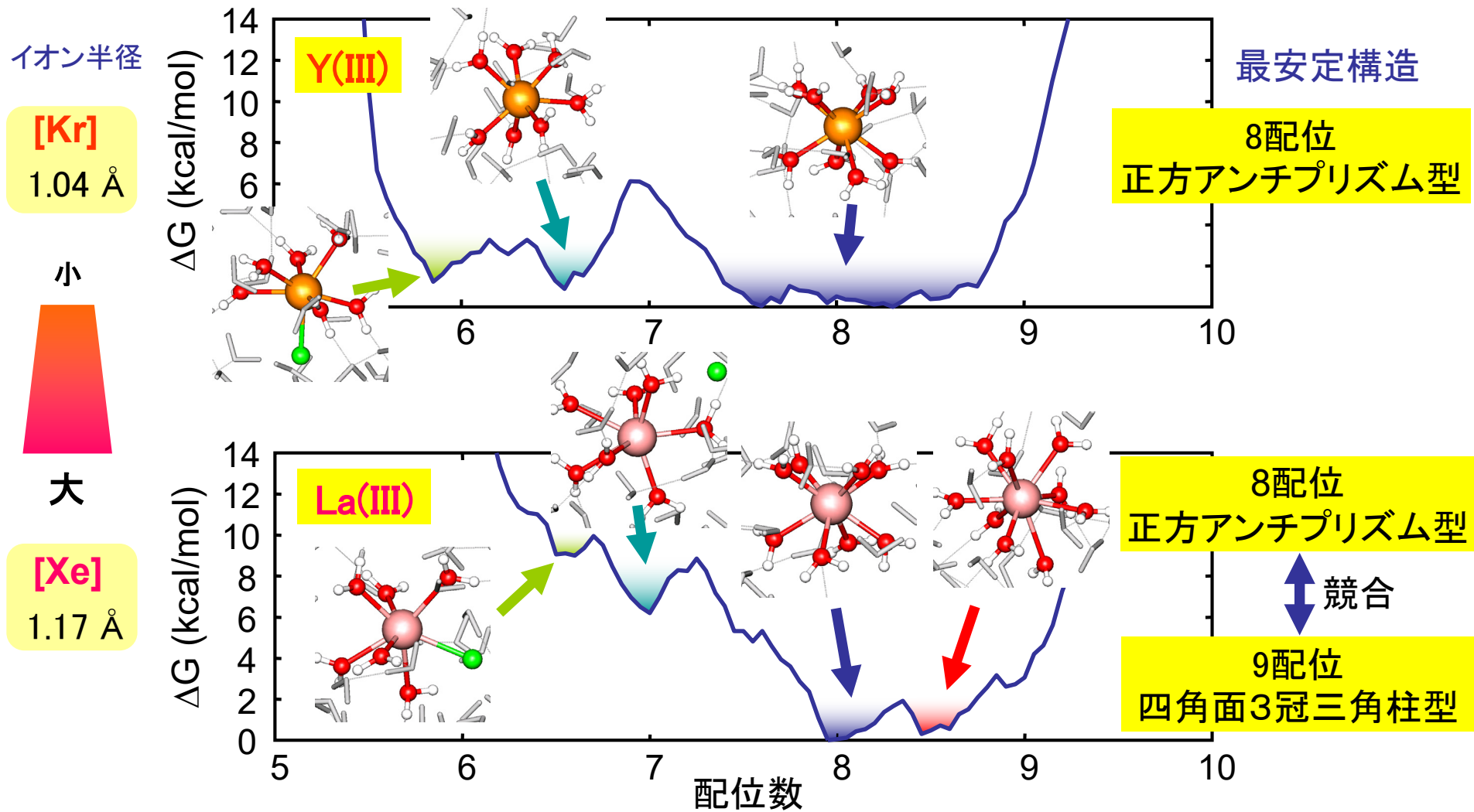


# 3価希土類イオンの水和構造

【目的】3価希土類イオンの最安定水和構造と、異なる配位数間での自由エネルギー差を第一原理分子動力学に基づいたシミュレーションから求めることにより、当該イオンの水和挙動に関する詳細な情報を得る。



【成果】自由エネルギー差からイオンの水和に関する詳細な情報を得ることに初めて成功した。