

テーマ

# 電子論に基づく物性予測

適用分野

化学（材料,電気化学,表面・界面）物理（金属,半導体）



研究名称

電子論に基づくバルク、界面現象、化学反応の物性予測

氏名所属

山本雅博 教授  
理工学部 機能分子化学科

内容

## ●特徴

経験的なパラメータのない第一原理計算（量子力学）から化学・材料の物性・特性を予測する。固体・固体表面・固液界面・電極表面・分子・イオン系の計算が可能である。近年ではvan der Waals力も計算が可能になってきたため、分子間の相互作用を正確に見積ることが可能になってきた。

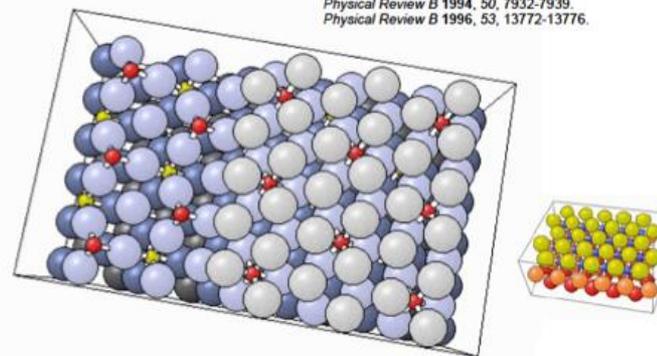
## ●研究内容

我々は1990年代からこの種の計算を行ってきており、図に示すようにZr(0001)面上の酸素の解離吸着サイトは、表面上ではなく表面下のしかも第2層と第3層の八面体サイトに入ることを、第一原理計算で示した。当時は米国で最高性能をもつCray-YMP計算機でも何日もかかるものであった。現在スマートフォンの計算能力はこのCray-YMPに相当する。従って、一般のPCやノートPCでかなりの計算ができる現状にある。ソフトの方も理論家でなくても容易に計算できる商用コードが多くなり、計算入力のGUIも進歩したので、理論家でなくても計算が可能になった。

しかし、理論の内容を知らずに計算を行って、間違った結果を与えることも散見される。計算の理論の説明と入力に対するコメントをシーズとして提供できれば幸いである。

Our previous F.P. calculations: Surfaces  
Zr(0001)+(2x2)-O (fcc, interstitial)

Yamamoto, M.; Chan, C. T.; Ho, K. M. et al.  
*Physical Review B* 1996, 54, 14111-14120.  
*Physical Review B* 1994, 50, 7932-7939.  
*Physical Review B* 1996, 53, 13772-13776.



<http://www.chem.konan-u.ac.jp/PCSI/>

キーワード

第一原理計算, 物性予測, 表面・界面, 電極表面

連携方法

■ 講演   □ 研修   ■ 研究相談   □ 学術調査   □ コメント   ■ 共同研究