

テーマ

# 電子論に基づく界面物性予測

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

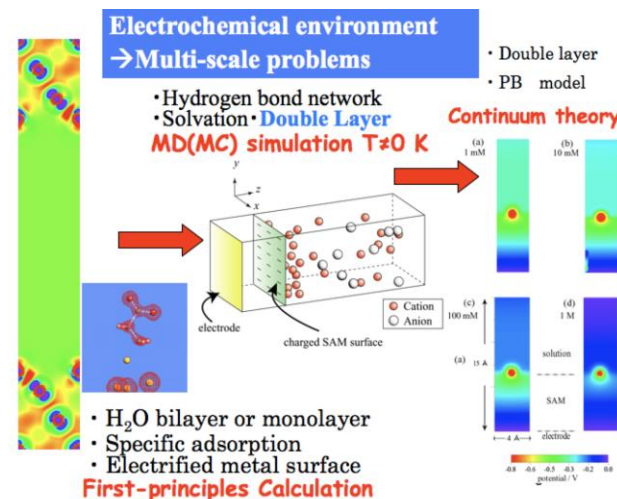
経験的なパラメータのない第一原理計算（量子力学）から化学・材料の物性・特性を予測する。固体・固体表面・固液界面・電極表面・分子・イオン系の計算が可能である。近年ではvan der Waals力も計算が可能になってきたため，分子間の相互作用を正確に見積ることが可能になってきた。

## ●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，固体，表面の物性を説明してきた。一方で，化学の分野では量子化学計算により化学物質の性質，反応を解析することがなされ，今では実験結果を量子力学レベルから説明することが求められている。

特に最近では，電気化学関係のデバイス（リチウムイオン電池，全固体電池，スーパーキャパシター）等の界面現象の解明が電気化学デバイスのパフォーマンスを向上させるために必要不可欠である。電気化学現象は，電子，原子，分子レベルの量子力学で解くレベルから，多くの分子集団の分子シミュレーションレベル，連続体として近似するマ

クロレベルがあり，それぞれのレベルでの理論を接続して使用する必要がある。今ではAI等を用いてその接続を行っている。ただし，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。



<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   □ コメントート   ■ 共同研究