

第一原理計算から分かること

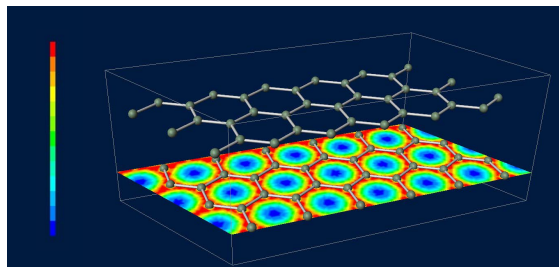
第一原理計算

概要

第一原理計算は実験から得られたパラメータを用いることなく、原子・分子レベルで材料の電子構造を調べることやXPSなどの各種分光学的スペクトルをシミュレートすることが可能です。得られた知見は新材料の設計や探索に有効なだけでなく、実験が困難な物理・化学的な現象のメカニズム解明にも繋がります。本資料では第一原理計算から分かることとして、解析対象、得られる物性情報及び解析事例を紹介します。

第一原理計算を用いた解析

- 解析対象（計算の実施にあたっては、組成・結晶構造などの情報が必要となります）
 - ・ 主な解析対象は、結晶など周期性を持つ系
 - ・ アモルファス構造や表面、界面を有する系の計算も可能
- 得られる物性情報
 - ・ 結晶構造パラメータ(格子定数、原子配置など)
 - ・ 電子構造及びスピン状態(電荷分布、バンド構造、フェルミ面、磁気モーメントなど)
 - ・ 共有結合、イオン結合などの化学結合状態
 - ・ 原子の置換、欠損など格子欠陥が存在するときの安定構造及び欠陥形成エネルギー
 - ・ 表面や界面の形成エネルギー及び原子配置
 - ・ 活性化エネルギーや中間体の構造など化学反応に関する情報
 - ・ 誘電関数、電気抵抗、ゼーベック係数など電子の応答特性
 - ・ 比熱など固体の熱力学量
 - ・ 各種分光学的スペクトル(XPS、XAFSなど)
- 第一原理計算の解析事例
 - ・ ワイドギャップ半導体(GaN、Ga₂O₃、SiCなど)中、ドーパントの存在サイト及び電子状態評価
 - ・ Si系材料における不純物の拡散経路、移動障壁の評価
 - ・ 各種基板上的ALD(Atomic Layer Deposition)成膜メカニズムの解明
 - ・ トンネル磁気抵抗効果(TMR)を示す系(Fe/MgO/Feなど)のTMR比の評価
 - ・ 熱電材料のゼーベック係数の算出



第一原理計算から得られたグラファイトの電荷分布

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！