

課題名 (タイトル) :

第一原理計算を利用した X 線光電子分光および X 線吸収分光法の理論スペクトルの算出

利用者氏名 : ○中尾 愛子、小和田 善之\*

所属 : 前田バイオ工学研究室、\*兵庫教育大学

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

現在普及している Li イオン 2 次電池よりも、さらに高性能な次世代蓄電池として期待されている全固体 2 次電池の材料開発において、電極活物質や固体電解質などの充放電に伴う構造変化や界面における化学反応を把握することは、材料特性の改善および新規材料の探索に必要不可欠な重要な課題である。特に、X 線光電子分光法や X 線吸収分光法は、局所的な構造変化を検討し、また特定の元素についての状態分析を行うことができることから、電極活物質や固体電解質の状態変化を調べる上で、極めて有効な手法である。通常、これらの分光法においては、対象となるサンプルのスペクトルを、リファレンスとなる物質のスペクトルと比較することで解析を行う方法が一般的である。しかしながら、全固体 2 次電池に用いる材料については、その反応や構造変化が非常に複雑で有り、必ずしも一般的に入手可能な安定な物質をリファレンスとするだけでは解析することが困難である。そこで、全固体電池への応用が期待される電極材料、固体電解質などの XPS や XANES などの電子遷移スペクトルを理論的な手法を用いて解析することを目的としている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

電池材料について、様々なモデル構造を構築し、その理論スペクトルを算出することで、全固体電池材料のスペクトルを理論的に解析するため、スペクトルの算出には、我々が開発しているスピン-軌道相互作用などフルポテンシャルの相対論を考慮した相対論 DV-X  $\alpha$  法を用いる。本年度は、これらのプログラムの、HOKUSAI システムへの移植を行った。

3. 結果

本年度は、HOKUSAI システム上へ、DV-X  $\alpha$  分子軌道法計算プログラムのうち、非相対論版計

算プログラム **scat** およびエネルギー計算プログラム(TESDA および **Coulomb**)について移植作業を行った。プログラムの若干の修正を行い、アプリケーション演算サーバ上で動作する環境を構築した。

4. まとめ

本年度は HOKUSAI システム上で、DV-X  $\alpha$  法の計算を行うための準備として、主要なプログラムである、非相対論版 **scat** の移植を行い、正常に動作する環境を構築した。実際に試験的な計算を行ったところ、計算速度は期待していたとおり十分であり、今後の電池材料のスペクトル解析への応用が期待できる。

5. 今後の計画・展望

アプリケーションサーバ上において、当初計画にある全固体電池に利用される電極材料、固体電解質およびそれらの表面に施されるコーティングなどの XPS や XANES の理論解析を進める。また、相対論を考慮した CI 計算が可能となる相対論 DVME 法のプログラムの移植を行う。さらに、複雑な系への適用をめざし、これらプログラムの超並列演算システムでの計算環境構築を進める。