

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(1)、小和田善之(1)

理研における所属研究室名: (1)前田バイオ工学研究室

<p>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</p> <p>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、XPS や XANES 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。しかし、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あり、安定な物質をリファレンスとするだけではスペクトルを解析することが困難である。そこで本研究では、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ことを目的とする。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>本年度は、HOKUSAI システム上に移植を行った第一原理計算法のひとつである DV-X α 分子軌道計算プログラムを用いて、電極材料および固体電解質の表面などのモデル構築を行った。また、その構造最適化を行うための全エネルギーをエネルギー計算プログラムである TESDA および coulomb2 について、大規模な計算に適用できるように改良を行った。</p> <p>3. 結果</p> <p>電極材料および固体電解質の表面モデルを、結晶構造を元に構築しその電子状態の計算を行った。その結果、表面と固体内部における結合状態に大きな違いが生じることがわかった。また、クラスターサイズの増加した際の、エネルギー計算について、プログラムのデバッグを行ったが、大きなモデルにおいては計算時間が長くなってしまったため、いくつかのモデルについて全エネルギーを求めるに留まった。</p> <p>4. まとめ</p> <p>HOKUSAI システム上において、相対論版お</p>	<p>よびエネルギー計算プログラムを含めて DV-X α 法が正常に動作することが確認できた。また、DV-X α 法が固体電解質や電極材料の表面についての XPS や XANES の理論解析に有効であることも確認できた。</p> <p>5. 今後の計画・展望</p> <p>本研究は、今年度で終了予定であるが、今後も全固体電池用材料の電子状態計算に適用できる機会があれば、システムを利用したいと考えている。</p>
--	---