

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2017

講演概要集

~~~~~

講演者：世木隆（コベルコ科研）

講演題目：リチウムイオン二次電池における劣化解析への応用

講演概要：

リチウムイオン二次電池はモバイル装置や電気自動車におけるエネルギーストレージデバイスとして日常的に用いられている。弊社では試作・分析・試験・コンピュータシミュレーションを用いた劣化機構の調査サービスを行っている。

今日、分析分野では放射光を用いた X 線吸収分光法や透過型電子顕微鏡を用いた物理分析が用いられているが、この現象を劣化機構と紐付けて理解する為には、密度汎関数理論に基づいた原子・分子レベルのシミュレーション技術が有効である。今回、PHASE/O が有するイオン伝導性や微細構造の計算機能を応用した適用事例について主に紹介する。

~~~~~

講演者：今任嘉幸（海洋研究開発機構）

講演題目：地球シミュレータでの PHASE/O の性能評価と産業利用への展開

講演概要：

海洋研究開発機構が運用する現在 3 世代目の地球シミュレータでは、地球科学分野だけでなく、他分野でも多くの成果が得られています。他分野の例として、第一原理電子状態計算プログラムである PHASE/O も動作実績があります。

今回、地球シミュレータを使用し、PHASE/O の性能評価を実施した結果をご紹介します。地球シミュレータシステムの利用についてのご相談については [es\\_apply@jamstec.go.jp](mailto:es_apply@jamstec.go.jp) までご連絡ください。

~~~~~

~~~~~

講演者：宇佐見護（株式会社アスミス）、澤田健、岩本敏志（日邦プレシジョン株式会社）  
講演題目：分子性結晶のテラヘルツ振動モード同定と AlN の圧電定数 -ボルン有効電荷を利用した解析-

講演概要：

PHASE/0 にはベリ一位相分極理論に基づくボルン有効電荷計算機能が備わっています。本発表ではこの機能を利用した解析事例を二件ご紹介します。

赤外分光は材料を解析するツールとして広く利用されています。本発表では特に、波長が長い「テラヘルツ(THz)」分光による分子性結晶の解析に注目します。このエネルギー域の赤外分光は分子全体の振動を捉えるので、結晶構造まで含めて分子を識別できます。アミノ酸やビタミン C のテラヘルツ吸光度測定と PHASE/0 の計算結果を比較して、スペクトルの帰属を明らかにしたことを報告します。

また、AlN に Nb と Mg を添加すると圧電定数が 4 倍以上に増大する現象に興味を持ち、PHASE/0 を用いて解析しました。ランダムに元素置換された材料を少ない計算量で取り扱うために、仮想結晶近似を使用しました。計算結果は実験結果を定量的に再現し、圧電定数増大機構の理解に役立ちました。

~~~~~

講演者：肥田聡太（鳥取大学）、木下健太郎（東京理科大学）

講演題目：抵抗変化メモリ(ReRAM)の動作機構に関する 実験および理論的検討

講演概要：

ReRAM の実用化に向けて、金属酸化物薄膜中における抵抗変化機構の検討が実験理論の両観点から行われている。我々はこれまでの研究から多結晶 NiO 薄膜の粒界が様々な伝導性を持つ微小表面の組み合わせによって構成されており、粒界原子の僅かな移動による局所的な伝導性の変化により抵抗変化が生じる Grain surface tiling model を新たに提案した。今回は NiO に溶媒を供給した実験および理論計算を行うことで、提案モデルの検討を行った。

~~~~~

~~~~~  
講演者：斎藤峯雄（金沢大学）

講演題目：ZnO 中 Zn 原子空孔の第一原理計算

講演概要：

これまで、PHASE/O に対し、バンド構造を群論に基づいて解析する機能を付加し、また、陽電子消滅解析機能を付加した。

ZnO の Zn 空孔は強磁性を引き起こすことで注目されており、今回、上記の機能を用いて、この系の研究を行った。Zn 空孔に近接する 4 個の酸素原子は空孔から遠ざかる様に移動するため、この系の Jahn-Teller 効果が極めて小さくなることが分かった。この結果、この系は Jahn-Teller 歪みをとまわずに高い対称性(C3v) を保ったまま、スピン分極することが示された。また、近年、スピンを検出するスピン偏極陽電子消滅の実験が注目されており、Zn 空孔に捕獲された陽電子の寿命を計算した。

~~~~~  
講演者：金子智昭（東北大学）

講演題目：2 層グラフェンの金属インターカレーション

講演概要：

近年、数層のグラフェンに Li や Ca などの金属原子をインターカレーションした系が作成されている。特に、Ca では超伝導が観測されるなど、興味深い物性が調べられている。

本研究では、2 層グラフェンにアルカリ金属とアルカリ土類金属のインターカレーションした系について、系統的な第一原理計算を行いその電子状態などについて調べた。

~~~~~

~~~~~  
講演者：奈良純（物材機構）

講演題目：SiC 表面上のグラフェンと水素分子の相互作用に関する研究

講演概要：

近年注目されている材料であるグラフェンの作成法として SiC 上のグラフェン成長がある。しかし、SiC 表面のすぐ上に出来る C 原子層は表面と強く結合していてグラフェンの特徴的な性質を失っている（この層をバッファレイヤーと呼ぶ）。これを水素雰囲気下でアニールすると SiC 基板と C 原子層の間に水素が入りこみ結合が切り離されてグラフェン固有の性質を回復するが、水素が入り込むメカニズムはよくわかっていない。本講演では、水素分子の解離吸着過程、水素拡散過程の重要な過程について NEB 手法を用いて解析した結果について報告する。

~~~~~  
講演者：濱田智之（物材機構）

講演題目：自己無同着ハイブリッド密度汎関数法の PHASE への実装と固体バンドギャップの高精度計算

講演概要：

Kohn-Sham (KS)DFT 法は、物質の電子状態及び物性計算で極めて成功した方法であるが、KS 電子の自己相互作用のためバンドギャップが過小評価される問題があり、この問題はギャップが狭い半導体の計算で特に深刻である。

我々は、今回、ハイブリッド DFT 法において、HF 交換相互作用の寄与パラメータ  $\alpha$  を自己無撞着的に計算する、自己無撞着ハイブリッド密度汎関数法を PHASE に実装した。この方法は、GW 法同様、スクリーニングされた交換相互作用を自己無撞着的に計算する。本方法を実装した PHASE により、各種の半導体のバンドギャップ計算を行ったところ、GW 法と同程度の精度でギャップを計算できることがわかった。本方法を実装した PHASE は、バンドギャップの高精度計算が可能であり、光学材料やギャップが狭いトポロジカル絶縁体等の計算に有効と期待できる。

~~~~~