

層状アンチモン化合物の構造シミュレーション

Structure simulation of layered antimonides

京都大学 工学研究科 物質エネルギー化学専攻 陰山研究室 新井 一功

研究成果概要

これまで当研究室にて、 Zr_2CuSb_3 型構造を有する新規層状アンチモン化合物2種の合成に成功した。これらの化合物の構造解析を行うと、既報の物質を含む4種の化合物のうち、1種のみ金属とアンチモンが秩序配列した構造を有しており、その他は無秩序に配列していることが判明した。しかし、この秩序・無秩序の違いの原因がわからず、また無秩序構造を実験的に精密に決定することは困難である。そこで、各化合物の秩序モデルと無秩序モデルをそれぞれ組み立て、第一原理計算から相の安定性や結合状態について議論することを目的に、スーパーコンピュータを利用した。

4種の化合物の秩序・無秩序モデルの得られた全電子エネルギーを比較すると、すべての化合物において秩序・無秩序モデル間での顕著なエネルギー差は確認されなかった。また、構造緩和後の結晶構造も大きな差はなく、第一原理計算から秩序・無秩序相の安定性の議論をすることは不可能であった。

今後はすでに合成に成功している他の新規層状アンチモン化合物に関して第一原理計算を行い、磁気モーメントや電気伝導性、バンド構造を計算する。得られた計算結果から物性予測や実験データとの比較を行い、機能性新物質の創製を目指す。

発表論文(謝辞あり)

該当なし

発表論文(謝辞なし)

該当なし