

令和 6 年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

ミスト化学気相成長法の反応機構解析

Analysis of the reaction mechanism in mist chemical deposition

京都大学工学研究科材料化学専攻応用固体化学研究室 若松 岳

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、**Gaussian** や **NWchem** 等の量子化学計算ソフトを用いてミスト化学気相成長法の反応機構解析の解析を行うための初期検討を行った。まず、酸化ガリウムのミスト化学気相成長法を対象とし、予想される反応物や中間体、生成物について構造最適化および振動計算を行い、自由エネルギーや赤外スペクトル、ラマンスペクトルの計算を行った。以上の結果から熱力学的に安定な化学種に関する知見を得た。今後、他の材料系を含めた遷移状態の探索や振動計算を行い反応過程の計算を行う予定である。