

量子化学計算・第一原理計算・分子動力学計算でできること

2025年6月24日

量子化学計算・第一原理計算でできること

- 電子・スピン密度分布、各分子軌道のエネルギー・形状、HOMO-LUMOギャップ、イオン化ポテンシャル
- 結晶の状態密度、バンド構造、バンドギャップ、フェルミ面、仕事関数
- 各原子の電荷、静電ポテンシャル分布、双極子モーメント、結合軌道解析（結合次数など）
- 絶対零度における平衡構造（原子座標、格子定数、スピン構造）と
その構造における各種エネルギー（ポテンシャルエネルギー、エンタルピー、自由エネルギー）
- 結合、吸着、表面、界面、欠陥生成エネルギー、酸化還元電位、平衡電位
- 各種分光学的スペクトル（IR、ラマン、UV-Vis、発光、NMR、XANES、EELS、XPS）
- フォノン状態密度、フォノンバンド構造、比熱
- EFG、四重極結合定数、異方性パラメータ
- 化学反応における活性化エネルギー、活性化状態の構造、反応熱
- イオン・電子分極由来の誘電関数・誘電率・誘電正接、分極率、アツベ数、屈折率、反射率
- イオン伝導度、弾性率、熱伝導率、磁気応答、電気伝導率、ゼーベック係数
- 電荷・ホール移動度 など

分子動力学計算でできること

- 原子の運動性（平均二乗変位、自己拡散係数、速度分布、速度・回転・分子内ベクトル相関関数、振動スペクトル）
- 分子集合構造の平衡構造（動径分布関数、散乱関数、配位数、分子内配座、分子間配向、自由体積）
- 各種熱力学量（密度、比熱、自由エネルギー変化、蒸気圧、沸点、融点、平衡密度など）
- 蒸発熱、溶解度パラメータ、 χ パラメータ、溶媒和自由エネルギー
- 配向分極由来の誘電関数・誘電率・誘電正接、屈折率、反射率
- イオン伝導度、弾性率、ゼロずり粘度・緩和弾性率・粘弾性、熱伝導率
- 界面での局所的な構造・運動性（界面張力、吸着量、吸着エネルギー）、濡れ性
- 相転移、ガラス転移温度
- せん断、はく離、ひずみ-応力線図、熱膨張率 など