

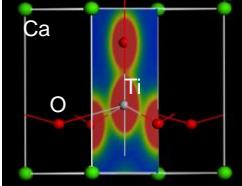
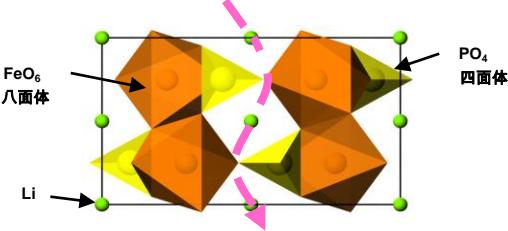
# 高精度な量子化学計算により材料特性の理論的解明や新たな材料設計に貢献

## 第一原理計算による材料設計技術

技術分野分類 4304：数理物理・物性基礎

技術キーワード K：計算物理学

産業分類 E-21：窯業・土石製品製造業、E-28：電子部品・デバイス・電子回路製造業

内 容	概要	第一原理計算とは実験結果を用いず、量子力学の原理のみによる理論計算手法で、近年、その動向が注目されている。これを材料設計に応用することにより、機能発現機構を原子、電子レベルで理解でき、新材料開発や材料特性向上に大きく貢献できる。
	従来技術・競合技術との比較(優位性)	計算負荷の高い大規模な第一原理計算を高速クラスター計算機の並列計算により高速かつ高効率に実行（約5兆回／秒の演算可能）することにより、高精度な量子化学計算が可能となる。強誘電体へ相転位することによる電子密度の異方性（図-1）、Li電池／正極中のLi拡散経路（図-2）等が解析できる。
	本技術の有用性	電子顕微鏡観察等から得られる実験結果との対照を通じて、実験からは知ることのできない原子・電子レベルでの詳細な物性解析や新規材料の特性予測などに貢献できる。
関連情報 (図・表・写真等)		 <span>図-1 強誘電相CaTiO<sub>3</sub>の電子密度</span>  <span>図-2 LiFePO<sub>4</sub>におけるLi拡散経路</span>
適用可能製品		誘電体、磁性体、Liイオン電池、熱電材料、触媒材料及び半導体等の原子・電子構造と物性が計算でき、経験則によらない最適材料設計が可能となる。
技術シーズ保有者	氏名 所属・役職	森分 博紀 (財) ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所 主任研究員
技術シーズ照会先	窓口 TEL/FAX e-mail	(財) ファインセラミックスセンター 研究企画部 052-871-3500 / 052-871-3599 techsup@jfcc.or.jp

## ■知的財産

## ■試作品状況

無

提示可

提供可

作成日 2012年1月10日