

# 材料設計支援システムのご提案

Advanced Algorithm & Systems

材料の物性を計算により求める方法は数限りなく存在します。その中から最適な手法を選択するには大変な労力を要します。

当社ではこのようなニーズにお応えするため、独自のノウハウを生かした材料設計支援システムをご提案いたします。

## [システム概要]

分子軌道計算（MO法）、分子動力学計算（MD法）、熱力学計算など、物性計算に必要な様々な手法をご用意しております。材料と知りたい物性を指定していただければ、それぞれに応じて最適な手法を選択し、計算を行います。もちろん計算精度だけでなく、時間的なパフォーマンスに対するご要望にもお応えいたします。

また、計算手法が確立されていない場合でも適切なモデリングを行い、計算を行います。

## [ワークフロー]

システムの基本的なフローは下記のようになっております。

1. 指定材料の構造最適化計算(構造予測)  
多くの物性は構造に依存します。エネルギー的な観点から、構造の予測を行います。
2. 構造安定性評価  
どんなに良い特性を得られる材料でも、使用条件下で安定に存在しなくては使い物になりません。設計した材料が安定に存在することができるのか、確認作業となります。
3. 電子状態計算  
物性は電子状態で決まると言っても過言ではありません。量子力学を応用した計算手法により、電子状態を計算します。
4. 物性計算  
材料の目的・用途に応じて様々な特性が要求されます。本システムでは電子状態から物性を計算することを主軸に据えながら、材料に要求される特性に応じて、マクロな視点からのニュートン力学を用いたアプローチも行い、煩雑な計算を簡略化して時間的なパフォーマンスを向上させます。

上記のフローそれぞれにつき、各種手法を取り揃え、材料に適した手法を選択して計算を行います。本システム利用の具体例を次にご用意いたしましたのでご覧ください。

## [その他]

本システムのご利用以外にも、当社では計算機ソフトウェアに関するコンサルティングも行っております。数あるソフトウェアの選択に迷った場合からお望みの物性計算にどのようなソフトウェアの利用が有効か、といった事柄までなんでもご相談ください。また、既存のソフトウェアにご不満がある場合、新規ソルバー開発やソルバーの改良なども承っております。

### [具体例]

リチウム電池正電極材料の物性

### [対象物質]

LiCoO<sub>2</sub>

### [評価したい物性と計算に用いる手法]

- |                  |                                   |
|------------------|-----------------------------------|
| (a) 結晶構造         | : MO 計算, MD 計算                    |
| (b) 結晶安定性        | : MO 計算による生成熱評価, Fermiology       |
| (c) 電子状態         | : MO 計算, 密度汎関数法                   |
| (d) 電子伝導度        | : MO 計算によるバンド計算, 密度汎関数法によるバンド計算   |
| (e) Li 脱離の可逆性    | : MO 計算による生成熱の評価, MD 計算による動的過程の評価 |
| (f) Li 脱離の速度     | : MD 計算, モデリングによる熱力学計算            |
| (g) Li 脱離による構造変化 | : MO 計算, MD 計算                    |

ここでは(a)~(c)がフロー1.~3.に対応し、(d)~(g)までがフロー4.に対応しています。

### [計算結果の相関]

図は計算項目の相関を表しています。矢印は計算結果を矢印の行き先に適用して計算をおこなうことを表しています。

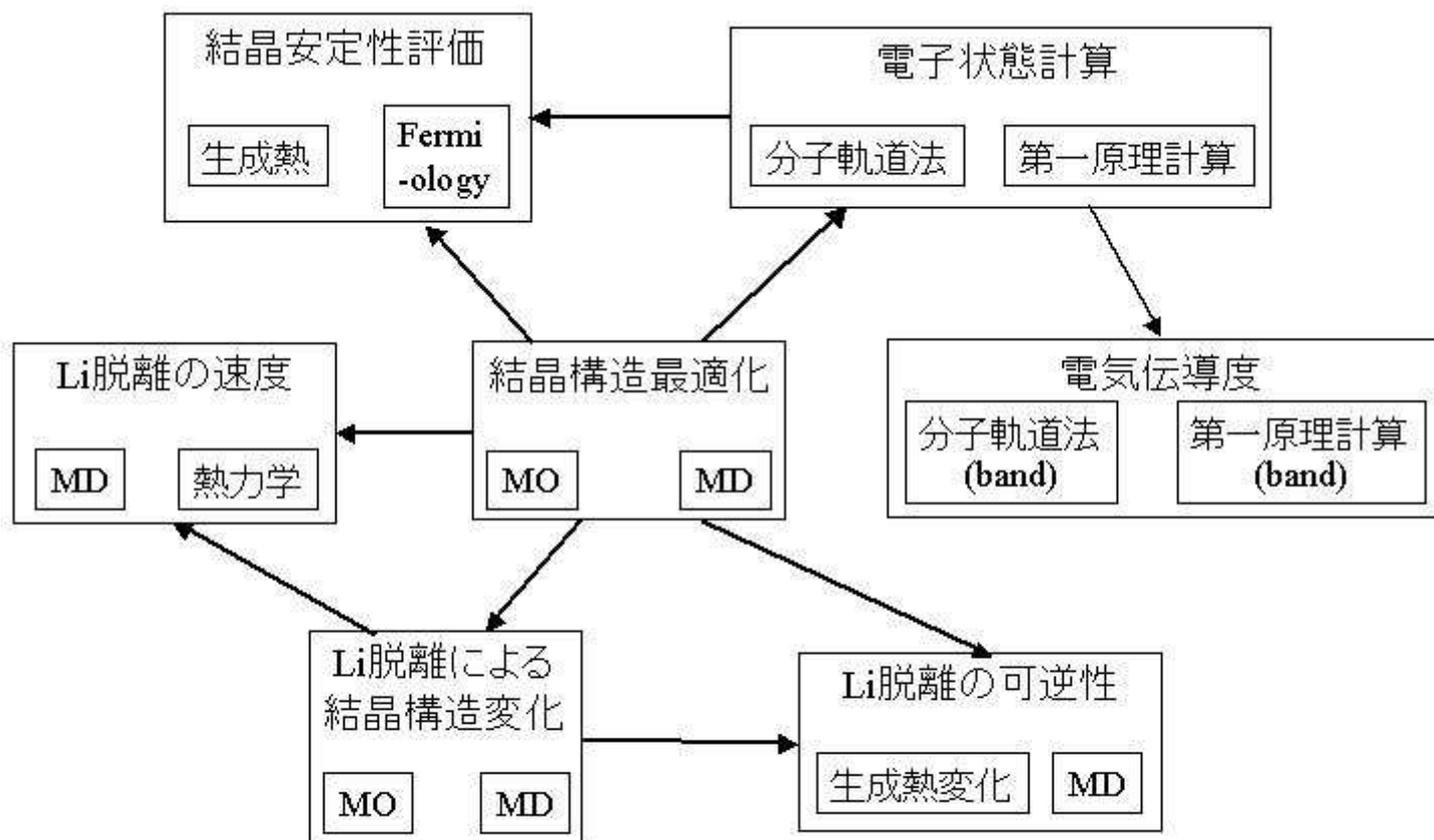


図: 計算項目の相関図