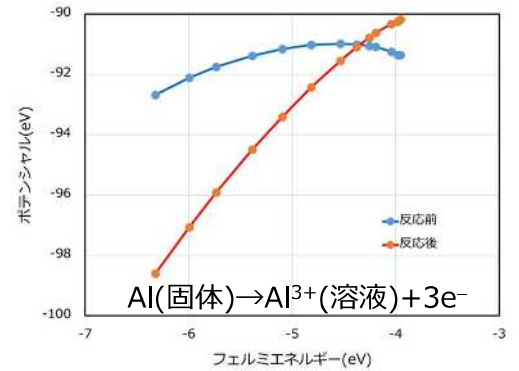
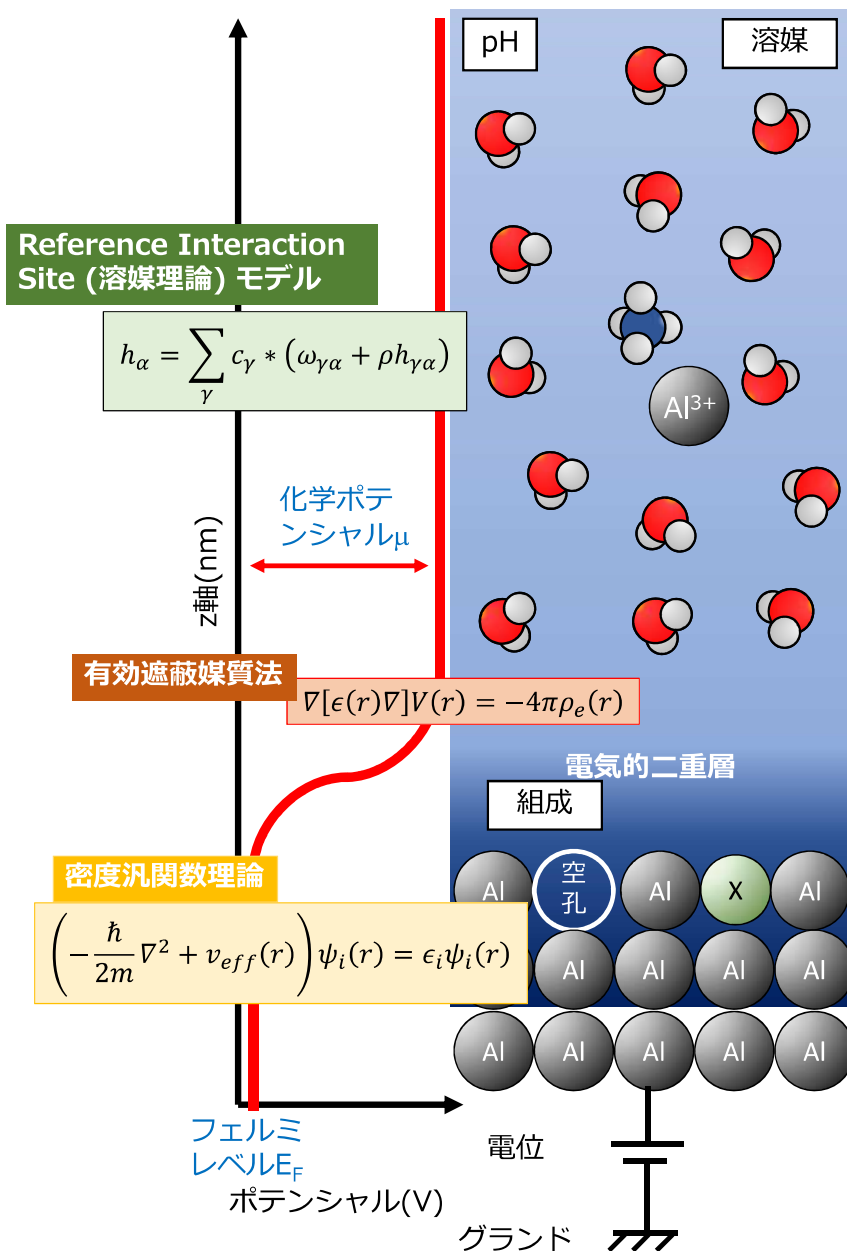


量子シミュレーションデータベース販売／構築支援サービス

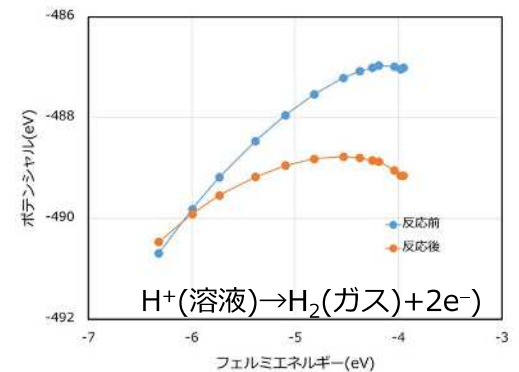
量子シミュレーション技術はナノオーダー領域を対象にした量子力学に基づくシミュレーション技術です。これらを用いる事で触媒活性やリチウムイオン二次電池等の物性が見積もる事が出来ます。ここでは、ハイスループット計算を用いて物性値を算出するサービスについてご紹介いたします。

事例: 大型計算機の活用

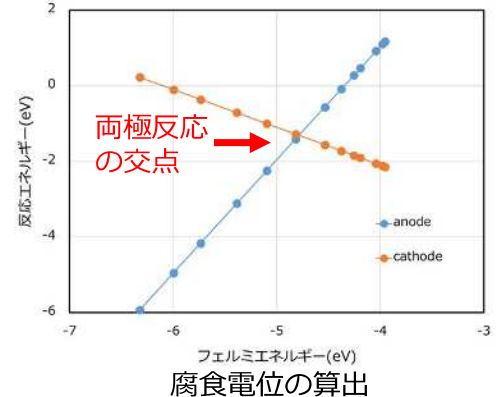
当社は腐食データベース構築を目的としたスーパーコンピュータ富岳の産業利用課題に取り組んでおります[1-2]。これらの取り組みより蓄積された知見を用い、ハイパフォーマンスコンピューティングインフラを駆使し、お客様が必要な計算データをご用意いたします。



アノード反応の計算



カソード反応の計算



腐食電位の算出

[1] ‘ Study on the free corrosion potential at an interface between an Al electrode and an acidic aqueous NaCl solution through density functional theory combined with the reference interaction site model ’, K. Kano *et al.*, *Electrochimica Acta*, **377**,138121(2021).

[2] 令和3年度A期富岳産業利用課題

課題番号hp210058：電気化学界面シミュレーションによる構造材料の腐食特性データベース構築