

# 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: ハイスループット第一原理計算(2元系合金)

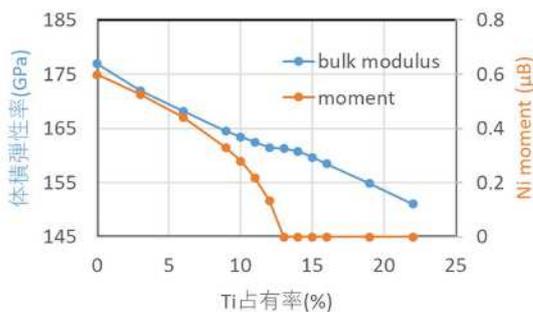
第一原理計算は、物質の性質を与える量子力学に基づくシミュレーション技術であり、原子の種類、格子定数等の原子配置情報に基づいて多くの物性を計算できます。また、実験値を用いることがないという特徴を有しております。

下の例は従来苦手としていた合金について、短時間で28種類の計算結果を集めた結果となっております。

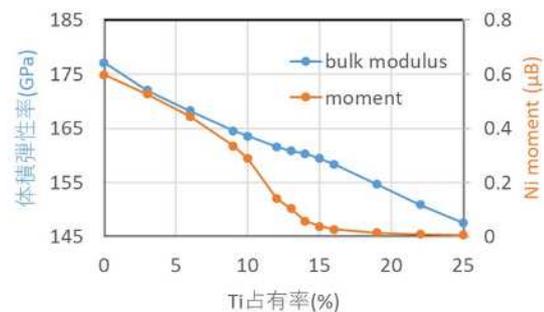
### 【アウトプット】

磁化、弾性率、起電力、相安定性、格子定数、励起スペクトル、振動モード、活性化エネルギー、拡散係数、

Ni-Ti合金の計算結果

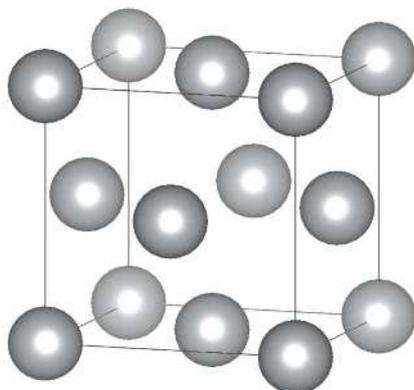


不純物含有Ni-Ti合金の計算結果

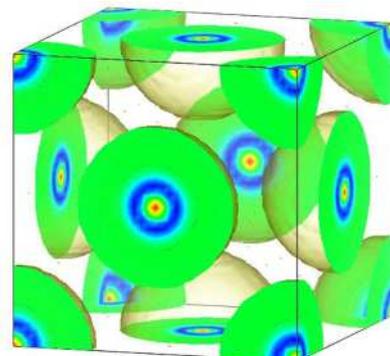


計算においては、下のように結晶構造に対して電子状態計算が行われます。結果の物性値は電子状態の結果から算出されます。Ni-Ti合金の結果は第一原理計算パッケージであるAkaiKKR[1]を使用して、CPA近似計算を行っております。CPA近似では組成の異なる合金や不純物系に対して低コストに計算が可能な手法です。

FCC-Ni結晶構造



電荷密度分布



[1] <http://kkriissp.u-tokyo.ac.jp/jp/>