

研究タイトル:

# 計算機シミュレーションによる物性評価

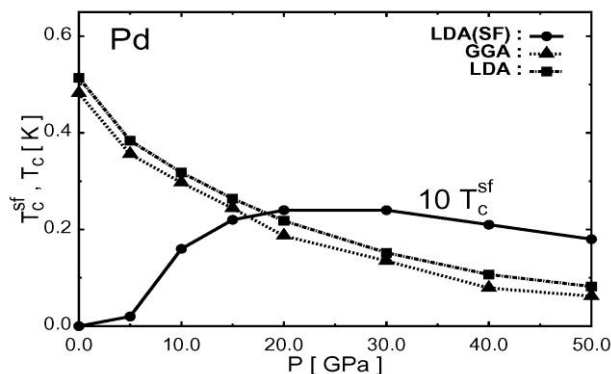
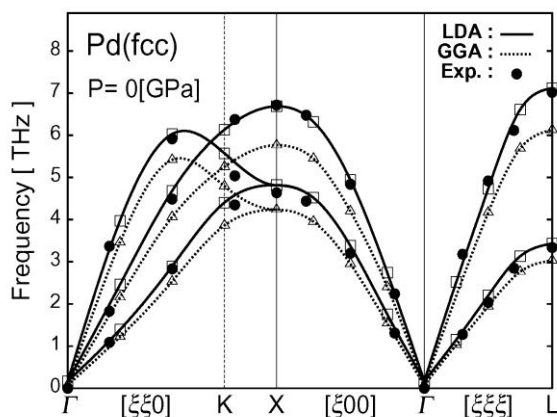


氏名:	竹澤 智樹 TAKEZAWA Tomoki	E-mail:	takezawa@maizuru-ct.ac.jp
職名:	教授	学位:	博士(工学)
所属学会・協会:	日本物理学会		
キーワード:	第一原理電子状態計算、分子動力学、物質設計		
技術相談 提供可能技術:	・計算機シミュレーションによる、 原子や分子といったミクロな視点に立った材料の開発や特性評価		

## 研究内容:

原子や分子といったミクロな視点から物質の性質を予測することができる。すなわち量子力学に基づいて、物質を構成する粒子、おもに電子の運動を計算することにより、物質の構造(結晶構造、表面構造、分子構造)、導電性、磁性、誘電性などの物性を明らかにできる。

基礎科学的な応用が中心であるが、磁性半導体、強誘電体、水素貯蔵合金、水素生成のための触媒など、幅広く物質設計(材料開発)の手法として工学的な応用も進んでいる。最近では、計算機の高性能化と低価格化、計算技術の向上と計算結果の蓄積、優れたソフトウェアの無料配布により、安価に、しかも迅速に幅広い対象物質の物性評価が可能となっている。



物質の格子振動(左図)の計算を行い、これから超伝導転移温度(右図)を予測した研究例

[ Physical Review B, Vol.71, 012515(2005) の研究より ]

## 提供可能な設備・機器:

### 名称・型番(メーカー)

名称・型番(メーカー)