

# 分子シミュレーション技術

梶崎晋也\*  
信時英治\*\*  
熊田輝彦\*\*\*

Molecular Simulation Technology

Shinya Tokizaki, Hideharu Nobutoki, Teruhiko Kumada

## 要 旨

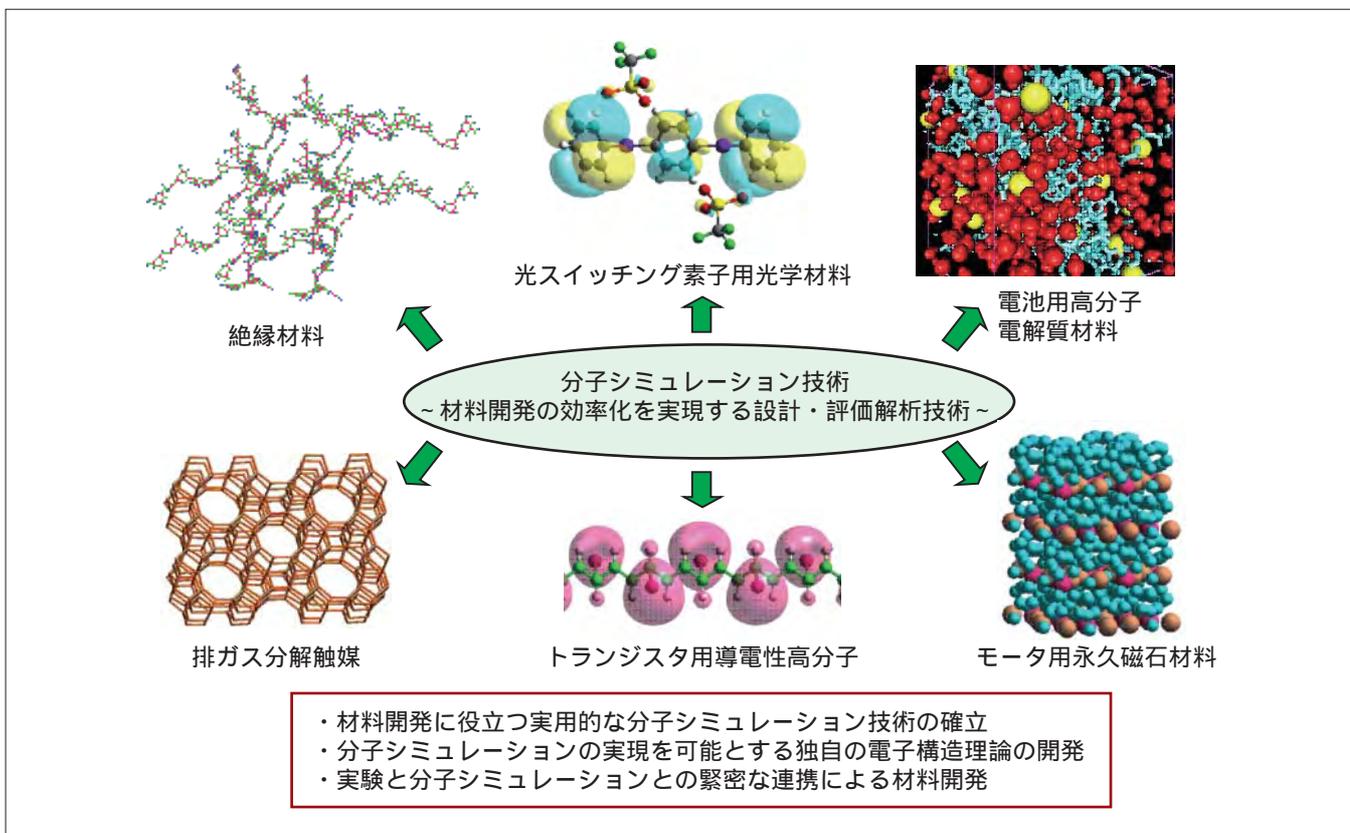
高度情報化社会が必要とする、高機能で環境に優しい新材料の開発が求められており、我々は従来の勘と経験による材料開発から、理論に基づいた計算機実験による材料開発へのパラダイムシフトを目指している。さらに、企業の材料開発に役立つ実用的な分子シミュレーション手法の確立、及びナノテクノロジーを先導できる大規模な分子シミュレーション手法の確立を目的に、分子シミュレーションの技術開発を行っている。

分子シミュレーション技術は、材料の構造、電気、光学、磁気、熱的性質などの巨視的の性質を微視的(分子レベル)

で解明、理解、設計するための計算機実験であり、実際に実験を行うことなく材料物性が予測できる。このため、分子シミュレーション技術は、材料開発の効率化を可能とする基盤技術である。

本稿では、分子シミュレーション技術の開発例として、磁性材料の磁気特性の予測技術と高分子電解質材料のプロトン伝導性<sup>(注1)</sup>の予測技術について述べる。開発した分子シミュレーション技術は、高精度・短計算時間で材料物性を予測可能であり、分子シミュレーション技術が材料開発に有効であることが実証できた。

(注1) 電解質材料を伝導するプロトン(水素イオン)の度合い



## 分子シミュレーション技術の機能性材料への適用例

分子シミュレーション技術は、材料物性を微視的(分子レベル)で解明、理解、設計するための計算機実験である。分子シミュレーション技術を駆使することによって、材料開発期間の大幅な削減、材料やデバイス作製基本プロセスの最適化、従来にない全く斬新(ざんしん)な高機能性材料や新概念の創出などが期待できる。