

【研究シーズテーマ】

# 第一原理分子動力学シミュレーションによる 物性予測(不純物添加・元素置換)

 工学部 環境土木工学科 准教授 **大村 訓史**

**Keyword**
**電子状態計算／分子動力学法／物質科学・材料科学／不純物添加／  
元素置換**


## 【研究シーズの概要】

第一原理分子動力学法は、物質を構成する原子1つ1つの時間発展と、それにもなう電子状態を追跡するシミュレーション手法です。この手法を用いることで、実験条件を自由に設定することができ、現実には存在しない仮想的な物質を自由につくることが出来ます。とくに第一原理分子動力学法は経験的なパラメータを用いないため、得られたシミュレーション結果の定量的な評価が可能です。我々はこの手法を用いることで、元素置換、不純物添加によって物質の性質がどのように変化するか、また物質に欲しい機能を持たせるには、どのような元素を添加・置換すればいいのかを理論的に予測することが出来ます。

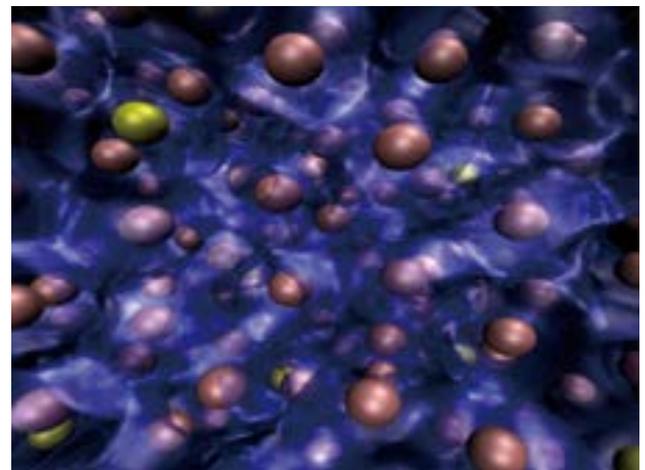


図:液体鉄にシリコンを添加した場合の原子配置(茶色:鉄原子、黄色:シリコン原子)と電子の空間分布。シリコンが添加されることで、電気伝導率などの性質が大きく変化する。

## 【新規性・独自性・従来研究(技術)と比べての優位性】

- 現実には存在しない物質の作成が可能。またその物性を高精度で予測できる。
- 外部条件(温度・圧力)を自由に調整できる。
- 実験では得られない情報を得ることができる。

## 【産業界での展開・用途】

- 新規物質設計
- 既存の物質・材料をさらに高性能化するための予測

連絡・問合せ先

 広島工業大学 研究支援機構 〒731-5193 広島市佐伯区三宅2-1-1  
 (事務窓口: 研究・地域連携支援部) TEL:082-921-4222 FAX:082-921-8963  
 URL <https://www.it-hiroshima.ac.jp/for-research/office/> E-mail [kyo-kiko@it-hiroshima.ac.jp](mailto:kyo-kiko@it-hiroshima.ac.jp)