

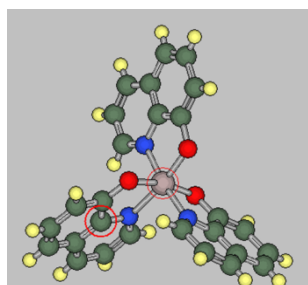
# 材料物性のシミュレーションによる材料設計・特性解析

量子力学に基づいた材料特性のシミュレーション  
(分子から連続体まで)



実験の効率化  
材料特性の原因解析  
分析結果の解析をサポート

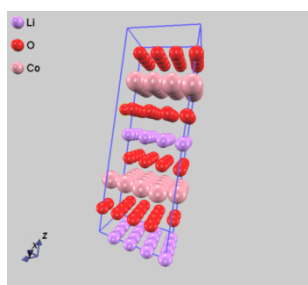
## 第一原理に基づく分子軌道計算



[Al(C<sub>9</sub>H<sub>6</sub>NO)]

- ◆ Gaussian を用いた第一原理に基づく分子軌道計算
- ◆ 分子やクラスターの電子状態に基づく材料設計
- ◆ 分子レベルの反応性、反応機構の予測
- ◆ IR、Raman等のシミュレーションにより解析をサポート

## 第一原理に基づくバンド計算



LiCoO<sub>2</sub>

- ◆ Advance/Phaseを用いた第一原理に基づくバンド計算
- ◆ 連続体の電子構造に基づく分子設計
- ◆ 酸化物や金属の反応性予測
- ◆ 電極材の平衡電位等を予測

## 応用分野

- ◆ 電子構造に基づく分子設計
- ◆ 既存材料の材料特性の原因解析
- ◆ 安定性予測
- ◆ 反応性予測