

平成 24 年 9 月 20 日

## スパコン活用数値計算受託プロジェクト開始趣意書

東北大学未来科学技術共同研究センター  
川添良幸

我々の、20 年以上にわたる物理・化学の基礎原理に基づく独自定式化とそれを実現するための計算機プログラム開発、及び、これら独自開発プログラムと広範な市販プログラムを活用した基礎研究から民間との共同による材料設計シミュレーション計算、解析、公表の実績を生かし、国内外民間企業の必要とする各種シミュレーション計算の受託、コンサルティング、及び社員教育を提供するプロジェクト研究を開始します。

材料設計シミュレーション計算は、その対象が幅広いだけでなく、その研究手法も単純ではなく、古典力学、電磁気学、熱統計力学、流体計算、量子計算等の統合的なものです。我々は、国内外でも珍しい、これら全てに研究実績を有する国際研究グループ（アジア計算材料学コンソーシアム仮想組織 ACCMS-V0）を保持しています。特に、最近では、物質中の電子状態を直接計算する第一原理計算が多用される様になりました。しかし、第一原理計算とは言っても実際の計算には多くのパラメーターを含むため、単なるブラックボックス的な使用法では信頼性高いシミュレーション計算結果は得られず、計算実行には多くのノウハウが必須です。さらに、企業の期待する、未だ実験的に知られていない新材料を設計した結果の有意性を確認するためには、高度で最新の物理・化学の知識が必須です。基礎研究を基盤とした我々の研究グループでは、単なるプログラム利用の数値計算とは異なる大学ならではの高いレベルの数値シミュレーション計算方法を提供出来ます。

我々独自開発プログラムには、ハンドギャップの絶対値算定法、双極子間相互作用計算によるファンデルワールス力算定、連続状態経由電子伝導計算、熱伝導計算、化学反応過程追跡等、他では実行不可能な新たな機能も付加されています。他にも、熱力学計算、モンテカルロ計算、流体計算、等の実績も数多くあります。我々の、これまでの経験を駆使して、国内外企業からのご要望に迅速、そして高信頼性を持って対応出来ます。

これまでに企業との共同研究実績を有するシミュレーション計算の対象は、  
(1) 分子エレクトロニクス用有機分子材料、(2) 希少金属削減 ITO 系材料、  
(3) 多結晶シリコン太陽電池、(4) ガン部位探索用発光ナノ粒子、(5) 磁気多値記録媒体、(6)  $\text{NO}_x$  分解用ナノ粒子触媒、(7) 非鉛圧電材料、(8) 紫外線

防止化粧品、(9) 水素貯蔵材料、等多数あり、特許化したものも 10 件あります。

本受託研究で可能な具体的なサービス内容としては、(1) 半導体のバンドギャップ、イオン化ポテンシャル、電子親和力の絶対値算定、(2) 触媒用等の半導体及び金属ナノ粒子設計、(3) 太陽電池、燃料電池等用材料設計、(4) 熱電材料設計等が挙げられます。

現在までに、国内外から各数社のご依頼をいただいておりますが、年間、10 件程の案件を受託する用意があります。具体的なシミュレーション計算内容に関しては、各企業からのご要望に個別に対応させていただきますので、是非、ご相談下さい。

**本件に関するお問い合わせ先は以下の通りです。**

住所           〒980-8979 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-4-4  
東北大学未来科学技術共同研究センター  
川添研究室

電話番号   022-795-3670

電子メール   munakata@imr.tohoku.ac.jp

受付担当者名   宗形利重子

川添研に関する情報は、以下のホームページをご覧ください。

1. ウィキペディアの川添良幸の項目は：

<http://ja.wikipedia.org/wiki/%E5%B7%9D%E6%B7%BB%E8%89%AF%E5%B9%B8>

2. 研究業績等に関する情報は：

<https://sites.google.com/site/kawazoetest/>