

第一原理計算を用いた材料設計

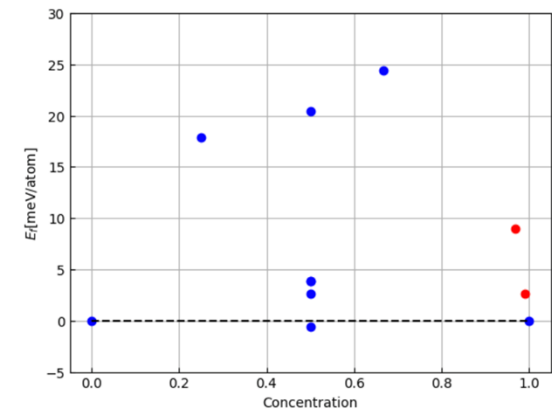
長岡技術科学大学産学融合トップランナー養成センター 氏名 山下 智樹

目的 $\text{Li}_x\text{Ca}_{1-x}\text{Cl}_{2-x}$ の安定構造探索

内容 固体電解質材料の候補として, $\text{Li}_x\text{Ca}_{1-x}\text{Cl}_{2-x}$ の安定構造を CrySPYを用いた結晶構造探索シミュレーションを行うことで探索した.

結果 いくつかの組成で結晶構造探索シミュレーションを実施し, LiCaCl_3 の組成において形成エネルギーが負になる構造を発見した

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	561 時間
並列化	1ノード 並列



$\text{Li}_x\text{Ca}_{1-x}\text{Cl}_{2-x}$ の形成エネルギー