

新規誘電体材料の組成スクリーニング

パナソニックホールディングス株式会社 テクノロジー本部 横山智康

目的 高い誘電率を有する材料の創出

内容 昨年度の計算機で見出した新規結晶構造に対し、類似構造を抽出、それらの構造候補に対し元素置換を行うことで組成最適化を実施

結果 類似構造探索により 5 種類の類似構造を抽出。組成最適化の結果、特定のアニオンで高い誘電率を実現する傾向があることが網羅的な元素置換により明らかとなった。

利用した計算機

ノード時間

使用ストレージ

グループ番号

OCTOPUS

57227時間

10TB

I2102

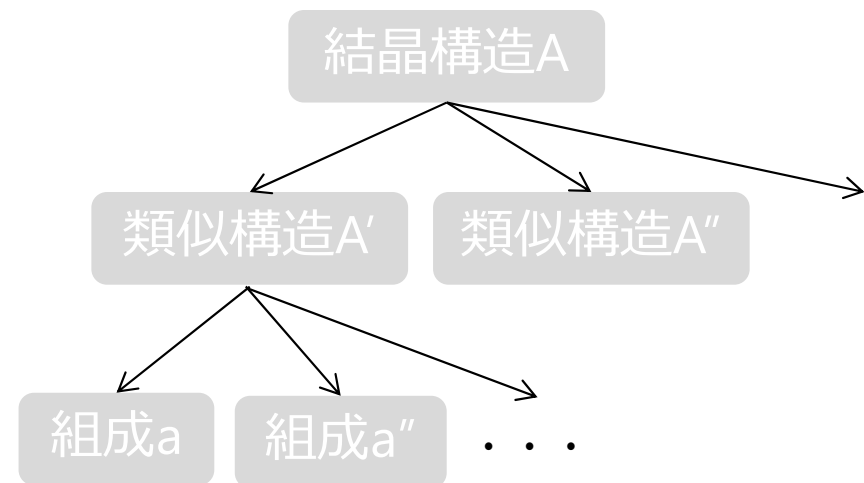


図 本取り組みの概念図