

# 接着面解析 計算量1—100

## 東大 金属など、原子レベルで

東京大学の溝口照康准教授らは金属やセラミックスなどの接着面の構造を、原子レベルで高速で解析できる計算手法を開発した。計算量が従来の100分の1以下で済む。高性能の電池や触媒の開発効率化などに役立つと期待している。

電池や触媒は、電極と電解質の境界面や異なる材料の接着面にある原子の並び方が性能を大きく左右する。境界面の原子構造を調べるには、数万个の候補の中から最も安定した原子構造を見つけた計算が必要という。

新手法は、接する2つの物質の種類を入力すると境界面の原子構造をすばやく解析する。候補の中から100個程度を調べるだけで、最も安定した構造を見つけ出せる。石炭や石油などの資源開発で、少ない探掘データから最も資源がたくさんある地点を推測する計算手法を応用した。従来の手法では、候補となる構造を1個ずつ計算していたため、計算に1カ月程度かかることもあった。新手法では、同じ計算が5時間程度で済む。

実験では銅板が接する境界面について、69個の計算だけで解析できることを確かめた。従来は1万7000個の候補を計

算する必要があった。研究チームは今後、企業や研究機関など向けに、電池や触媒などの開発に役立つソフトウェアの公開も検討している。