



機能性セラミックス材料研究における第一原理計算と マテリアルズ・インフォマティクス

森分 博紀 主席研究員

ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所
計算材料グループ グループ長

- 日 時 : 平成29年6月12日 (月)
13:30~14:30
- 場 所 : 集会室 2

近年, 第一原理計算の進歩は目覚ましく, 材料特性の高精度な計算・予測が可能になっている. 講演者らのグループではこの第一原理計算と原子分解能構造解析などの高精度実験と連携することにより, 機能発現機構の原子レベルでの解明を目指して, 種々の機能性セラミックス材料研究を行っている.
本講演では, Liイオン電池材料, 強誘電体材料など講演者らの最近の研究成果を紹介する.