

第 32 回 GRL 浜松セミナー ～若手研究者のための光・電子・情報科学に関する情報交換～

11月22 日(木)10:30～11:30
浜松キャンパス 総合研究棟 10 階 R1005 室

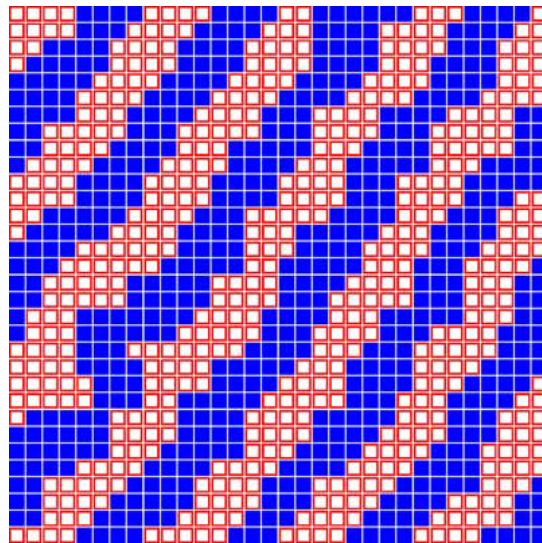
第一原理計算と分子動力学計算による強誘電体の研究

講師： 西松毅

東北大学金属材料研究所 助教

近年、環境保護や安全衛生管理の観点から、物性実験が高コストになりつつあります。一方、コンピューターの高速化と高容量化はめざましいものがあります。このような環境下、応用上必要とされる特性をもったデバイスや物理的に興味深い現象が期待される物質を物性理論に基づいてコンピューターにより設計 (Material Design) できるようにすることの重要性が増大してきています。この Material Design を究極の目標として、様々な物性シミュレーションの手法が開発されつつあります。今回はその一例として第一原理計算と分子動力学計算による「強誘電体」の研究を紹介します。

「強誘電体」とは BaTiO_3 や PbTiO_3 に代表される電気的な自発分極を持つ物質で私たちの生活のまわりで様々な応用され利用されています。第一原理計算では強誘電体中の電子の波動関数を正確に決定して、その「静的」な物性を予測することが出来ます。他方、われわれが開発している分子動力学計算法[1,2]では強誘電体中の双極子-双極子相互作用を高速に計算して、大規模な強誘電体の有限温度の「動的」な性質を予測することが出来ます。今後もこの2つは強誘電体の研究において強力な道具となることが期待されています。



分子動力学計算プログラム feram により計算された強誘電体薄膜キャパシタのストライプ状の 180° ドメイン構造。

[1] Takeshi Nishimatsu et al.: Phys. Rev. B 78, 104104 (2008).

[2] feram: fast MD simulator for bulk and thin-film ferroelectrics
<http://loto.sourceforge.net/feram/>

問合せ先： 若手グローバル研究リーダー育成拠点 符徳勝、内線：1374, E-mail: ddsfu@ipc.shizuoka.ac.jp