

強誘電体のドメイン構造の分子動力学シミュレーション ～ドメインエンジニアリングとその場観察に向けて～

東北大金研¹, 名工大², CROSS³, 原子力機構⁴
西松毅¹, 岩田真², 松浦直人³, 大和田謙二⁴

近年の計算機の高速化と物性理論の発展により、電気双極子の集まりである強誘電体のドメイン構造の分子動力学シミュレーションがバルクと薄膜キャパシタとについて可能になりつつある[1,2,3]. 西松は強誘電体のための高速分子動力学計算コードferamを開発し

<http://loto.sourceforge.net/feram/> でフリーソフトウェアとして公開している. 例えば, 図1はferamによるシミュレーションで得られたPbTiO₃の90°ドメイン構造である[2].

来年度より大型単結晶成長, SPring-8のコヒーレントX線を利用したその場観察, J-PARCでの高分解能中性子非弾性散乱実験などによって強誘電体のドメインエンジニアリングの共同研究を計画している(図2).

文献

[1] Takeshi Nishimatsu, Umesh V. Waghmare, Yoshiyuki Kawazoe and David Vanderbilt: Phys. Rev. B **78**, 104104 (2008).

[2] Takeshi Nishimatsu, Kenta Aoyagi, Takanori Kiguchi, Toyohiko J. Konno, Yoshiyuki Kawazoe, Hiroshi Funakubo, Anil Kumar and Umesh V. Waghmare: J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 124702 (2012).

[3] Summayya Kouser, Takeshi Nishimatsu and Umesh V. Waghmare: Phys. Rev. B **88**, 064102 (2013).

