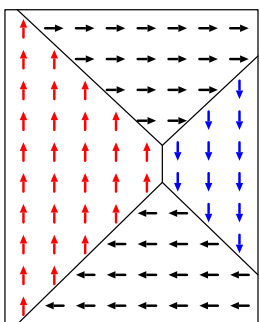


feram コードによる強誘電体薄膜キャパシタのヒステリシス・ループの超高速分子動力学シミュレーション

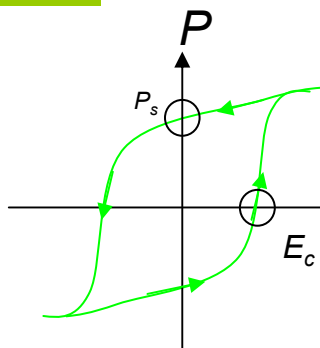
東北大学 金属材料研究所 計算材料学研究部門

岩本昌也, 西松毅, 川添良幸

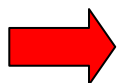
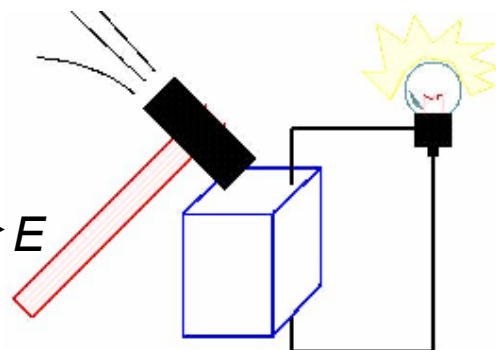
強誘電体の特徴



自発分極, ドメイン構造



圧電効果

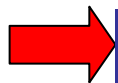


不揮発性メモリ (FeRAM) 等に応用されている。

目的: 強誘電体キャパシタのヒステリシス・ループ, 分極反転, ドメイン壁の動力学的研究.

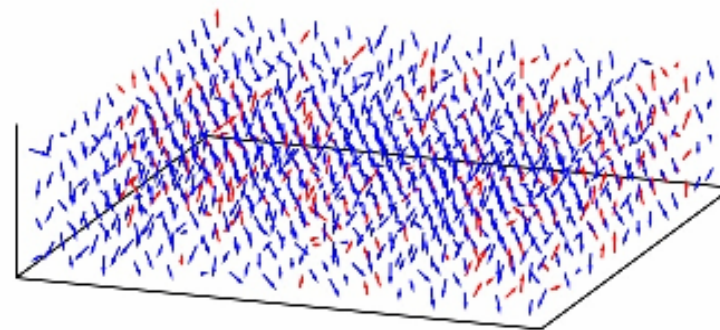
問題点: 長距離の双極子-双極子相互作用が大規模・長時間の分子動力学シミュレーションを困難にしていた.

解決策: (1) 巧妙な周期境界条件 (2) FFTと逆空間での力の計算 (3) 最先端の分子動力学法 (4) 並列化



高速化: 大規模 (>100nm), 長時間 (>1ns)

シミュレーション中の双極子の様子



計算されたヒステリシスループ

