

第一原理計算を用いた強誘電体材料の物性予測

【背景】材料開発

従来

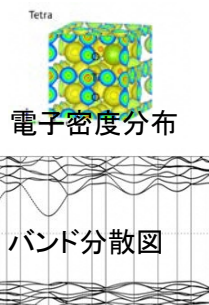


近年



トライアル&エラー

計算科学の活用



＜科学計算について＞

第一原理計算*(DFT)や分子動力学**(MD)を用いて、材料の合成可能性や物性値を算出材料開発に役立てる。

「計算による予測を基にした実験」、
「実験結果の計算による説明」など

(*) 第一原理計算: 原子の配列のみから物性を予測

(**) 分子動力学: 原子、分子の相互作用から動きを予測

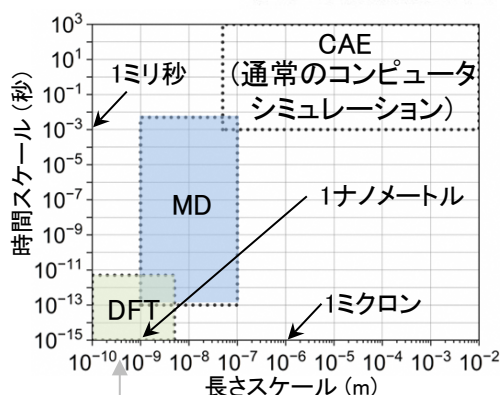


図1 時間、長さのスケールイメージ

【目的】

コンデンサ等の電子部品に利用されるチタン酸バリウム(BaTiO_3)について、温度による構造の変化を計算で予測する。

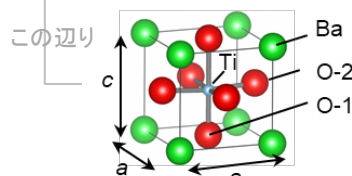


図2 BaTiO_3 の原子配列

＜計算方法＞

コアシェルモデル*** (図3)を用いたポテンシャル使用
12×12×12のスーパーセル(8640原子)で計算(図4)

(***) コアシェルモデル:
イオン性の1原子をばねでつながれた
コアとシェルの2粒子と仮定、相互作用を表現

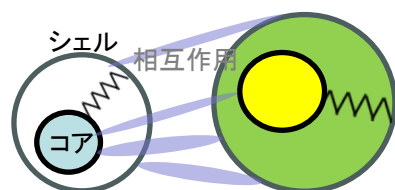


図3 コアシェルモデル

【計算結果】

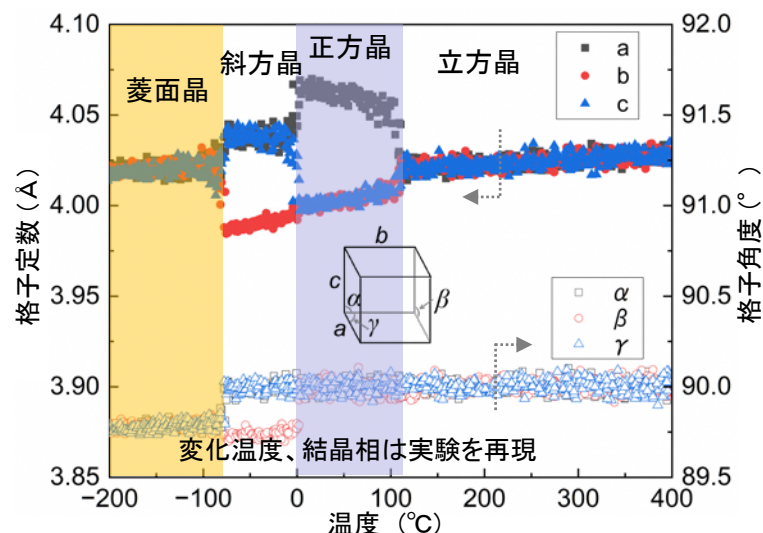


図4 格子定数と角度の温度変化

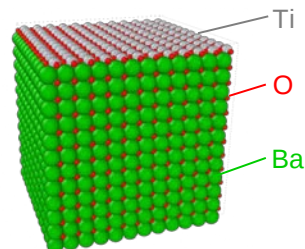


図4 12×12×12スーパーセル

チタン酸バリウムの
温度変化に伴う構造変化
を計算で予測することに成功
今後、他の材料系での
評価へと広げる。