

チタン酸バリウム関連材料の物性計算

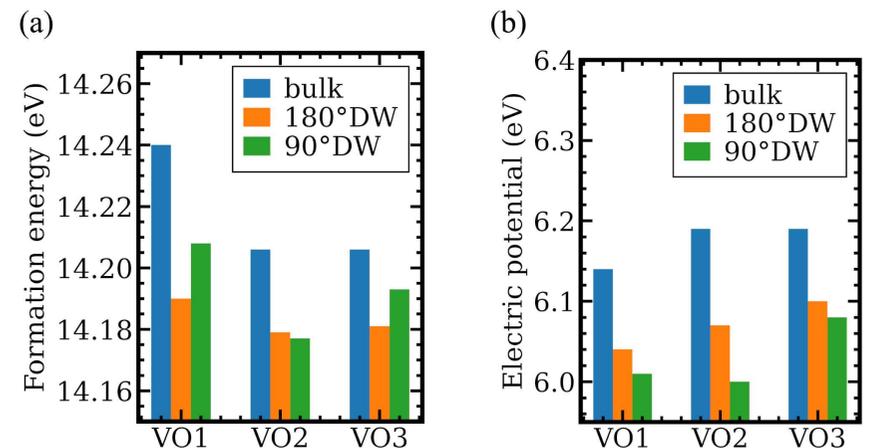
名古屋工業大学 工学部 氏名 吾妻 真光

目的 チタン酸バリウムにおける強誘電体ドメイン壁および酸素空孔の形成自由エネルギーの計算, および関連材料の強誘電体特性の解析.

内容 MPI+OpenMPでハイブリッド並列化されたオリジナルプログラムを用いて, 分子動力学シミュレーションを行った.

結果 チタン酸バリウムにおいて, 強誘電体ドメイン壁近傍で酸素空孔の形成エネルギーが低下することを明らかにした.

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間 3892.70 時間
並列化 MPI+OpenMP



各酸素空孔 (VO1-3) の形成エネルギー