

MASAMUNE-IMR

Materials science Supercomputing system for Advanced Materials simulation towards Next-generation frontiers for Materials Research

スパコンプロフェッショナル Supercomputer Professional

No. 23

令和元年 **7** 月 **4** 日 (木)
14:00~15:30

日時

金属材料研究所
2号館 1階ラウンジ

場所

※ お申込みは不要です。当日はお気軽にご参加ください。

「有機強誘電体・反強誘電体研究のための 計算科学的アプローチ」



産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナル
デザイン研究センター 上級主任研究員

石橋 章司 先生

軽量・柔軟・印刷可能・環境調和・省資源などの観点から
有望視されている有機強誘電体および反強誘電体の研究・
開発に対する計算科学的アプローチの有効例：

- ・最局在ワニエ軌道を用いた解析手法による有機強誘電体
TTF-CAの特徴的な自発分極発現機構の解明[1]、
- ・有機反強誘電体四角酸における電場印加による反強誘電
ー強誘電転移のシミュレーション[2]、
- ・水素結合型有機強誘電体の自発分極の理論計算による予測
について紹介する。

[1] K. Terakura and S. Ishibashi, Phys. Rev. B **91**, 195120 (2015).

[2] S. Ishibashi, S. Horiuchi and R. Kumai, Phys. Rev. B **97**, 184102 (2018).

■ 主催 CCMS 東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター 東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター



CCMS
東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター
Center for Computational Materials Science

■ 協賛 計算物質科学
人材育成コンソーシアム



計算物質科学
人材育成コンソーシアム



ポスト「京」萌芽的課題
「基礎科学の挑戦」

■ 「MASAMUNE-IMR」は国立大学法人東北大学の登録商標です