

## BaTiO<sub>3</sub> の order-disorder モードのイオン分極への寄与 Contribution of order-disorder mode to ionic polarization in BaTiO<sub>3</sub>

東工大院理工 〇金原 一樹, 保科 拓也, 武田 博明, 鶴見 敬章

Tokyo Tech., 〇Kazuki Kanehara, Takuya Hoshina, Hiroaki Takeda, Takaaki Tsurumi

E-mail: thoshina@ceram.titech.ac.jp

BaTiO<sub>3</sub> は現在最も用いられている強誘電体材料であるが、大きなイオン分極が発現する機構など未だに不明な点が多い。特に BaTiO<sub>3</sub> において Ti イオンが <111> 方向に変位し、ホッピングする order-disorder モードは、既往の研究によってその存在は明らかになっているが、THz 領域における複素誘電率への寄与は明らかになっていなかった。そこで本研究では、まず THz 領域の複素誘電率を唯一直接測定できる遠赤外分光エリプソメータ[1]によって、BaTiO<sub>3</sub> 単結晶の複素誘電率を測定した。次に第一原理計算によって得た Ti イオンの静的ポテンシャルをもとに、分子動力学法によって order-disorder モードが与える THz 領域の誘電分散の形を算出した。最終的に、両者の形を比較することで order-disorder モードが THz 領域の複素誘電率に与える影響を検討した。また比較のため SrTiO<sub>3</sub> に対しても同様の実験を行った。

まず Fig. 1 に SrTiO<sub>3</sub> の Slater モードによる誘電率の挙動を示す。なお分子動力学法によるシミュレーションでは 2 次関数のポテンシャルカーブを用いた。エリプソメータによる測定値、分子動力学法によるシミュレーション結果がほぼ一致しており、シミュレーションが妥当であることが分かる。また Fig. 2 は BaTiO<sub>3</sub> 単結晶の 176°C での複素誘電率である。100 cm<sup>-1</sup> 以下の周波数領域で誘電率の実部、虚部共に急激な立ち上がりが見られた。これは従来の解析モデルである調和振動子モデルでは表すことができない非線形な挙動である。この非線形な誘電率の傾向は、BaTiO<sub>3</sub> の Double-well ポテンシャルに基づいて行った分子動力学法による誘電率シミュレーションによって再現された。このことは BaTiO<sub>3</sub> の誘電率が、従来モデルでは考慮されていない order-disorder モードと深くかかわっていることを示唆する。

[1] K. Kanehara *et.al*, *Appl. Phys. Lett.*, **104** (2014) 042901.

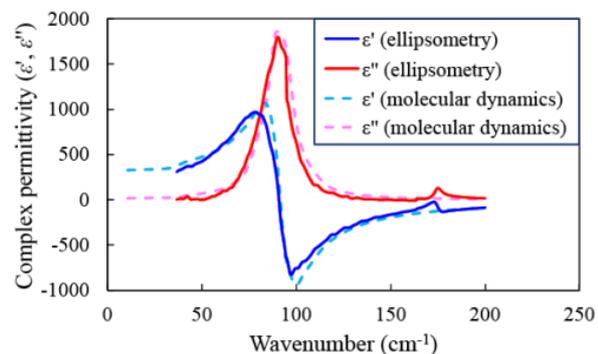


Fig. 1 SrTiO<sub>3</sub> のエリプソメトリーと分子動力学法によるシミュレーションで得た複素誘電率

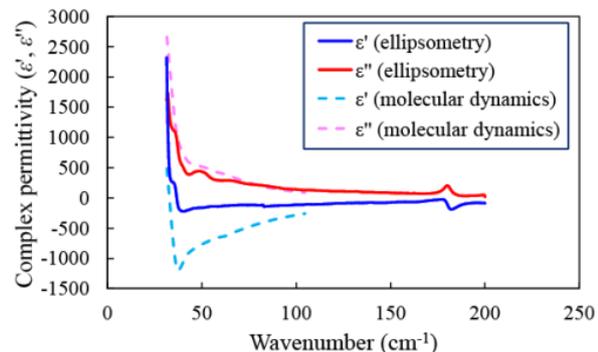


Fig. 2 BaTiO<sub>3</sub> の 176°C におけるエリプソメトリーと分子動力学法によるシミュレーションで得た複素誘電率