

揺らぎの無い場合の基底状態としての SrTiO₃ の強誘電性 Ferroelectricity as Ground State of Pure SrTiO₃ the Absence of Fluctuation

九大理 〇渡部 行男

Kyushu Univ. 〇Yukio Watanabe

E-mail: watanabe@phys.kyushu-u.ac.jp

SrTiO₃ は、量子力学的零点振動の揺らぎがなければ、極低温で強誘電体になる量子常誘電体と考えられている。低温と室温では、酸素の回転による対称性低下(AFD)の有無の違いがあり、夫々 AFD-STO, STO と呼ぶ。しかし、基底状態の解明が不十分なため、AFD-STO の量子常誘電性の機構は未解明である。本発表では、AFD-STO の圧力誘起強誘電性[1]の再現性を基に STO AFD-STO の第一原理計算を検討する。この精度は格子定数の再現性で決まるので[2]、実験[3]を高精度に再現するのは PBEsol と HSE と結論した(図 1)[4]。AFD 角実験値は HSE でのみ再現できた。STO は、揺らぎ無し応力無しで常誘電体と報告されているが[5]、圧力誘起強誘電性[1]と矛盾し、AFD による強誘電性抑制を考えると矛盾が広がる(図 2)。

PBEsol HSE では強誘電体であり[4]、強誘電体/絶縁体の界面の 2 次元電子層の最初の理論・実験[6]の機構を支持する最近の STO/LaAlO₃ 実験を説明する[7]。精密比較が可能な AFD-STO は、常誘電体(PBEsol)と強誘電体(HSE)に分かれるが(図 3)、幾つかの理由で、正しい AFD 角を示す HSE の示す強誘電性が適切と考えられる[5]。これは、AFD-STO の量子常誘電性が、強誘電性領域の無秩序化による可能性を考慮する必要性を示唆し、極性ナノ領域 PNR[8]と整合する。

[1] H. Uwe & T. Sakudo, *Phys. Rev. B* 13, 271 (1976). [2] Y. Watanabe, *J. Chem. Phys.* 148, 194702 (2018). [3] 例えば A. Okazaki & M. Kawaminami, *Mat. Res. Bull.* 8, 545 (1973). [4] Y. Watanabe, *Phys. Rev. B* 99, 064107 (2019). [5] 例えば T. Hashimoto ら, *Jpn. J. Appl. Phys.* 44, 7134 (2005). [6] Y. Watanabe ら, *Phys. Rev. Lett.* 86, 332 (2001). [7] Y. Z. Chen et al., *Nat. Commun.* 4, 1371(2013). [8] H. Uwe ら, *Phys. Rev. B* 33, 6436 (1986).

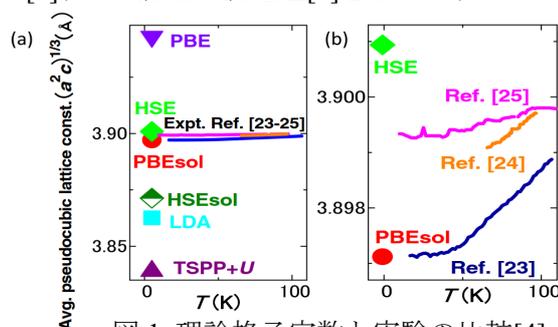


図 1 理論格子定数と実験の比較[4]

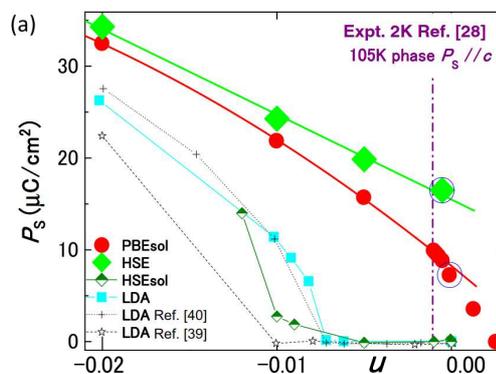


図 2 STO の自発分極と応力実験比較[4]

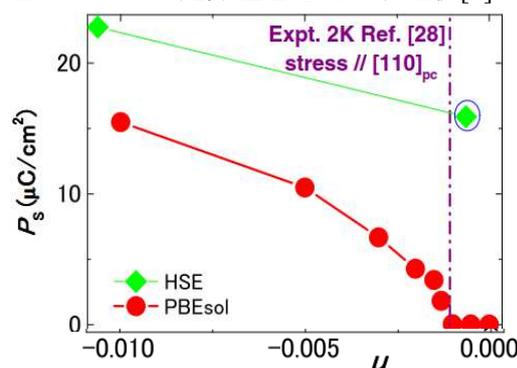


図 3 AFD-STO の自発分極と応力実験比較[4]