# $SrTiO_3$-$BaTiO_3$系の自発分極を格子パラメーターから精密に求める半経験的代数式

## Accurate semi-empirical analytical formulas for spontaneous polarization by crystallographic parameters of $BaTiO_3$- $SrTiO_3$ system

九大理　○渡部　行男

Kyushu Univ.　°Yukio Watanabe

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

強誘電体の自発分極の第一原理計算は、交換相関関数や応力により様々な値を与える。しかし、同じ格子定数で、様々な交換相関関数で $BaTiO_3$ の自発分極 $P_S$ を計算すると、±2%で一致する[1]。さらに、303K の格子定数の実験値[2]を使えば、交換相関関数によらず 4%~8%の精度で 298K の実験 $P_S$ 値[3]と一致する[1]。このことは、Born 有効電荷法のような考えで、格子定数から $P_S$ が高精度に求まることを示唆する。ここで、交換相関関数により、物質の一部の現象がより強くまたはより弱く表れた状態の格子が得られると考え、実験でも一部の現象がより強くまたはより弱く表れた格子が局所的または揺らぎとして存在すると仮定する[1]。すると、これらの状態の $P_S$ も実験に対応し、前述のよう $P_S$ は格子だけで高精度に決まることから、高精度と考えらる。即ち、様々な交換相関関数で計算した $P_S$ は、疑似的実験値と考えられる。歪下の計算を加えれば、格子定数による $P_S$ の高精度の表現が得られる[1,4]。規格化した Ti-$O_2$ 間隔 $\Delta_{TiO2}$ (または Ti-$O_1$): $P_S$ ($\mu C/cm^2$) = $977\Delta_{TiO2} + 0.04$(BTO), = $926\Delta_{TiO2} - 0.05$(STO), = $959\Delta_{TiO2} - 0.02$(STO-BTO) [4] (図 1)。これは、$BaTiO_3$-$SrTiO_3$ の Born 有効電荷が一定で $BaTiO_3SrTiO_3$ で共通あり、Sr, Ba が単なる檻として機能していることを示唆する。応用として、平行分域(180°分域)と対抗分域(head-on)の 1 格子毎の分極に適用すると、第一原理計算と非常によく一致した(図 2)。

[1] Y. Watanabe, *J. Chem. Phys.*148, 194702 (2018). [2] Nakatani et al., Acta Cryst. 72, 151(2016). [3] W. Merz, Phys. Rev. 91, 513 (1953). [4] Y. Watanabe, *Comput. Mater. Sci.* 158, 315 (2019).

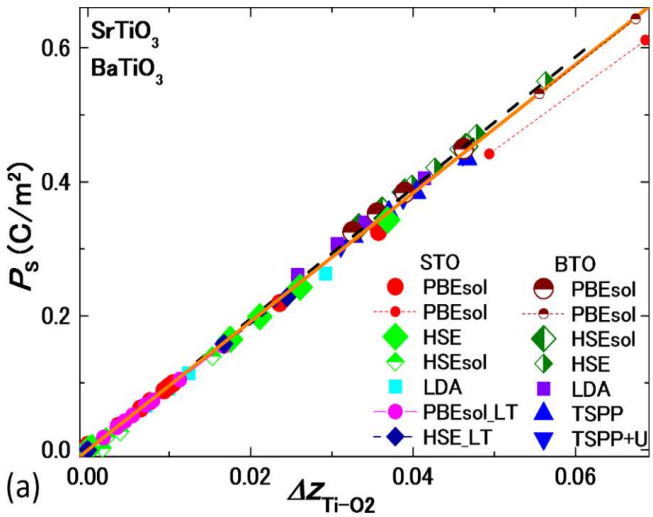


図 1 種々交換相関関数と歪下の変位と $P_S$ の相関[4]

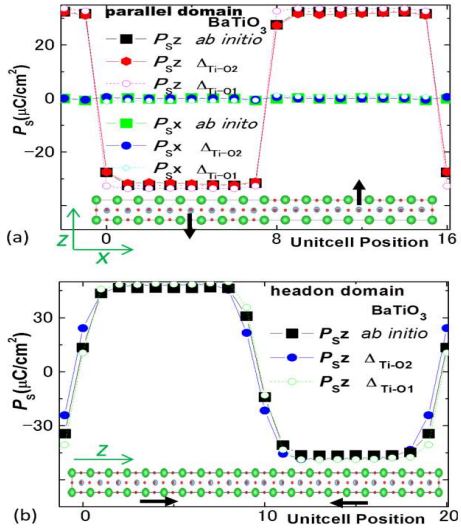


図 2 本経験式と第一原理計算の比較[4]