

反強誘電相転移の双極子モデルとその電気力学応答

Antiferroelectric phase transition and electromechanical responses in dipolar crystals

東大生研 ○高江 恭平, 田中 肇

Institute of Industrial Science, Univ. Tokyo, °Kyohei Takae, Hajime Tanaka

E-mail: takae@iis.u-tokyo.ac.jp

強誘電性と反強誘電性はペロフスカイト型酸化物、分子性結晶のほか、高分子・液晶などのソフトマター系においても幅広く観測される性質であり、蓄電・圧電・熱電材料の設計という実用上の重要性のみならず、そもそも強誘電性と反強誘電性はどのような物理メカニズムにより発現するのかという、基礎物理の問題としても重要である。両者の相転移は通常、温度・圧力（あるいは応力）制御のほか原子（あるいは分子における一部位）を置換することで実現されるが、強誘電および反強誘電秩序の発現、および電場や応力に対する応答性がどのように決定されるのか、単純な物理原理を描き出すことはできていないのが現状であった。エナジーストレージという観点から考えれば、強誘電体はマクロな分極を持ち、反強誘電体はマクロな分極が消失した状態であるため、両者の制御が容易になれば、蓄電材料としての可能性が大きく拓けるものと期待される。

そこで我々は、強誘電ー反強誘電相転移を示す単純な双極子モデルを提案し、相転移および応答を制御する原理の解明を試みた[1]。出発点として、電気双極子を持つ球状の分子が結晶を組んでいるとする。このとき、よく知られているように、双極子ー双極子相互作用は双極子間の相対位置、すなわち結晶構造の影響を強く受ける。そのため、双極子を有する分子の形状を変えていき、分子間の立体的な相互作用を調節することで、実効的に双極子相互作用の強さを制御できるはずである。このアイデアをもとに分子形状を制御可能なモデルを構築し、数値シミュレーションを行うことで、分極秩序の相転移が、結晶構造の変化を伴って起こることを示した。さらに、この相転移における結晶構造の差異に起因して、電気的秩序が変化する際、大きな変形や熱の発生/吸収が起こるという交差応答が生ずることを見出した。その結果、電場をかけることで大きな変形や温度変化を誘起し、逆に応力や温度変化により分極秩序の相転移をひきおこすことに成功した。このモデルでは双極子ー双極子相互作用と立体斥力という、磁気双極子にも共通なきわめて普遍的な相互作用のみを利用している。現実の誘電体および磁性体においては、双極子として分極を扱うことは必ずしも適切ではないが、有効的に双極子を定義可能であり、双極子相互作用が支配的であると見なせるような系ならば、同様の物理メカニズムにより相転移および交差応答を制御することが可能であると期待される。

参考文献

[1] K. Takae and H. Tanaka, Proc. Natl. Acad. Sci. **115**, 9917 (2018).