

分子動力学シミュレーションによる BaTiO₃ における ドメイン成長の欠陥依存性の解析

Analysis of Effect of Defects on Domain Growth of BaTiO₃ using Molecular Dynamics Simulation

名工大工, °都築 貴寛, 尾形 修司, 小林 亮, 浦長瀬 正幸, 下井 聖也, 辻本 早

Nagoya Inst. Tech., °Takahiro Tsuzuki, Shuji Ogata, Ryo Kobayashi, Masayuki Uranagase,

Seiya Shimoi, Saki Tsujimoto

E-mail: gottu80@gmail.com

1. Introduction

強誘電体はメモリーや圧電素子などに広く使われており、温度特性の改善や誘電率の向上など、その特性を改良する研究が盛んに行われている。しかし、いまだ特性原因に謎が多く、特にドメインと呼ばれる強誘電領域の成長とドメイン境界であるドメイン壁はまだわからないことが多く、その解明が期待されている。本研究の目的は、ドメイン成長において、まだ解明されていない欠陥の影響を解析することである。対象は古典的で有名な強誘電体材料である、BaTiO₃ を使用した。

2. Simulation Method

ポテンシャルは強誘電体に使われる、コア・シェルポテンシャルを用いた[1]。これは原子を原子核であるコアと、電子であるシェルに分け、コアとシェルをバネでつなぐことで、電子分極を再現するモデルである。対象系は 16x16x16 の BaTiO₃ を使用した。全原子数は 20480 原子である。その系から、monovacancy として Ba, Ti, O を、divacancy として第一、第二隣接の Ba-O と Ti-O のペアを取り除いた系を用意した。それぞれの系に -60MV/m から 60MV/m の電場をかけることにより、ヒステリシス曲線を求めた。

3. Results

シミュレーションによる、mono/divacancy のヒステリシス曲線の結果から、monovacancy の、反転への影響を解析できた。Divacancy の結果では、divacancy により誘起される dipole の影響により、ヒステリシス曲線の対称性が壊れていることが確認できた。電場と dipole の向きが同じ場合では、特に 1st-neighbor の Ba-O, Ti-O ペアの場合にドメインが早く反転されることがわかった。Ba-O ペアの場合の結果を、Figure 1 に示す。結果と考察の詳細は、講演で紹介する。

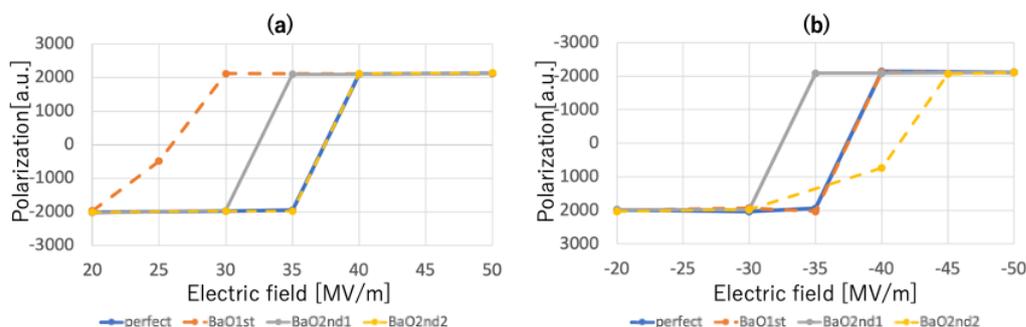


Figure 1. Result of hysteresis loop with dipole direction of Ba-O pair: (a) parallel to the electric field and (b) antiparallel to the electric field.

参考文献

[1] P.J.D. Lindan, M.J. Gillan, Phys. Condens. Matter. 5 (1993) 1019–1030.