

強誘電体 BaTiO₃における 90° ドメイン壁の自由エネルギー計算

Calculation of the free energy of the 90° domain wall in ferroelectric BaTiO₃

名工大工¹, °吾妻 真光¹, 尾形 修司¹, 小林 亮¹, 浦長瀬 正幸¹,

都築 貴寛¹, 下井 聖也¹, 出口 元貴¹,

Frank Wendler², Dilshod Durdiev²

Nagoya Inst. Tech.¹, FAU Erlangen-Nürnberg²

E-mail: h.azuma.651@stn.nitech.ac.jp

Introduction

強誘電体は不揮発性メモリや圧電素子をはじめとして広く応用されている重要な材料である。BaTiO₃は、有害な鉛を含まない利点やドーピングによる誘電特性の向上によって近年注目され、その特性の研究が多く行われている。特に、自発分極の向きが揃っているドメインの界面はドメイン壁 (DW) と呼ばれ、分極疲労の要因などとして材料の性能に大きく影響する。正方晶相の BaTiO₃ では 180° DW と 90° DW の 2 つが存在し、自由エネルギーはこれらの DW の有限温度での存在度に直結する。本研究で我々は、分子動力学法を用いて BaTiO₃ の 90° DW の自由エネルギー計算を初めて行った。

Methods

誘電体をよく表現する Core-Shell 原子間ポテンシャルを用い、有限温度 (300K) における BaTiO₃ 結晶に対してシミュレーションを行なった。周期境界条件下で、任意のドメイン幅の 90° DW を配置できるシステムを用意した。DW が存在しない状態を始状態、ドメイン幅が十分大きい状態を終状態として、ドメイン幅の異なる多数の中間状態での応力を計算し、系になされた総仕事量として自由エネルギー差を計算した。このとき、終状態で十分なドメイン幅を確保できるように、システムは 1 辺 80 nm の大規模系を用いた。また、各状態のドメイン構造は、目的のドメイン構造となるように外部電場を印加した後、ゼロ電場下で緩和することで得た。

Results

DW 間距離が 10 nm 以下の構造は不安定であったものの、Fig.1 のように、ドメイン幅の異なる各中間状態で、90° DW の構造が安定して保たれた。得られた 90° DW の自由エネルギーは、先行研究において 0 K で計算されたエネルギーより一桁程度小さかった。講演では、自由エネルギー計算値のシステムサイズ依存性や、180° DW との比較についても報告する。

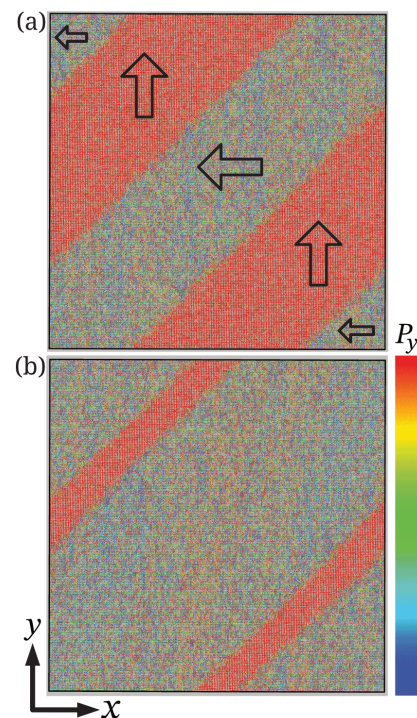


Fig. 1: Dipoles for systems with domain fraction of (a) 0.5 and (b) 0.1.