

第一原理計算を活用したデータ駆動型強誘電体・誘電体材料研究

Data driven ferroelectric materials study using first-principles calculations

JFCC ナノ構造研究所¹, 東工大元素戦略 MDX 研究センター² °森分 博紀^{1, 2}

JFCC¹, Tokyo Institute Technology², °Hiroki Moriwake^{1,2}

E-mail: moriwake@jfcc.or.jp

近年、マテリアルズインフォマティクスが注目され、多くの研究機関でマテリアルズインフォマティクスを活用した材料研究、材料開発が行われており、最近ではマテリアルズデジタルトランスフォーメーションの大きな潮流となっている。本講演では、講演者らによる、マテリアルズインフォマティクス、その基幹をささえる第一原理計算を活用した材料研究の例を紹介する。ここでは一例として、第一原理計算をベースとするマテリアルズインフォマティクスにより、実用的な抗電界を有するウルツ鉱型結晶構造を有する強誘電体材料を探索した結果を示す。著者らは従来のペロブスカイト型結晶構造に代表されるような八面体構造以外での強誘電体実現の可能性を検討してきた。その中で四面体構造からなるウルツ鉱型結晶構造に着目し、2014年にはウルツ鉱型 ZnO ペロブスカイト強誘電体並みの分極反転障壁を実現できることを報告し、2019年にウルツ鉱型結晶構造を有する強誘電体材料がドイツのグループにより合成されるに至った。著者らは引き続き図1に示すようにマテリアルズインフォマティクスを活用した抗電界の低い材料探索を行い候補材料を導出し報告している。

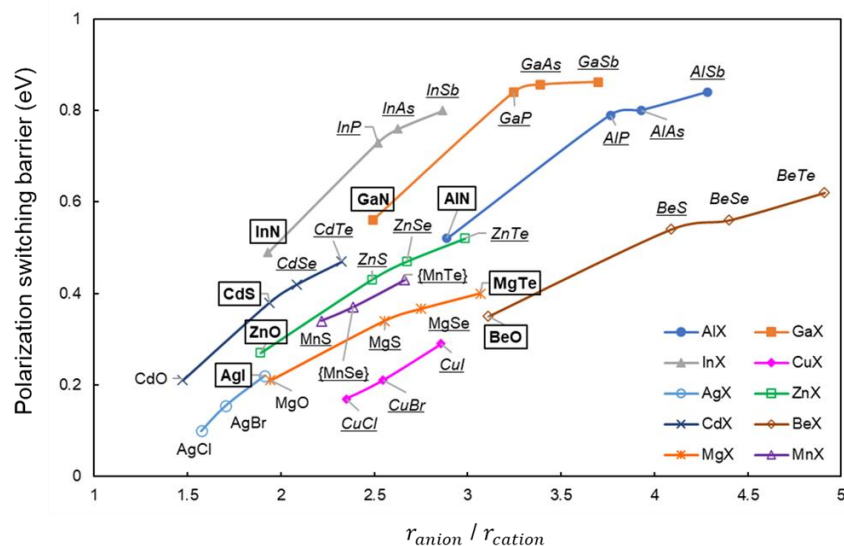


Fig.1 Relationship between polarization switching barrier and ionic radius ratio, $r_{\text{anion}}/r_{\text{cation}}$. Compounds with the wurtzite structure under standard conditions are labeled in bold within boxes, those with the zinc blende structure in italics, those with the nickeline structure in curly brackets, and those with the rock-salt structure in normal font. Compounds known to be synthesizable in the wurtzite structure under non-equilibrium or non-standard conditions are underlined.