

強誘電体の反電場に用いる誘電率の値と隠れた機構：第一原理計算

Permittivity for Depolarization Field of Ferroelectric and Hidden Mechanisms: *Ab initio* Calculations

九大理 〇渡部 行男

Kyushu Univ. 〇Yukio Watanabe

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

一般に自発分極 P_S から反電場が、求められ、例えば Metha の式がよく使われる。このような解析 (Kittel の平行分域モデル等は例外) では、測定中の試料や GL 方程式中の P_S を用いているが、その試料で測定される P_S は反電場下の P_S であり、反電場無しの P_S より小さい(図 1)^[1]。

この時、Metha の式を含め、反電場を求めるのに使う誘電率 ϵ_d は、常識として、強誘電体の誘電率である(典型的には 100 前後)。これは、反電場下の誘電率測定=外場に対する分極の変化から誘電率($\gg 1$)を求めているので、尤もらしい。しかし、外場に対する誘電率と、反電場と P_S の関係式中の誘電率 ϵ_d は違うという主張もある^[2]。この明瞭な解明のため、第一原理計算を用いた^[1]。

その結果、Metha の式表面や対抗分域の反電場と P_S の一般的な関係式中の誘電率 ϵ_d は、double counting で、 $\epsilon_d=1$ とすべきだった(図 2)。すると、多くの報告で、 $\epsilon_d \gg 1$ 即ち、強い誘電遮蔽を用いて、つじつまが合っているのは、隠れた機構~隠れた遮蔽等があるためと思われる。即ち、従来、 $\epsilon_d \gg 1$ により、巨大な反電場の効果が見過ごされているが、本来は、反電場による様々な重要な新規現象の可能性を示唆する。

例えば、 $\epsilon_d=1$ では、単一分域の電極無しや対抗分域では、ほぼ全ての強誘電体が、常誘電体になるか、部分的に金属的になるしかないとと言える(図 3)。これは、個別的理論^[3]や近年の結果の一般的証明である(電極無しの強誘電体と対抗分域は静電的に同じ^[1])。しかし、最近の単立で 1 層まで強誘電体が存在するという報告^[4]に矛盾するように見える。検討すると、この存在^[4]の真の機構は吸着物であること示唆される^[1]。このように、正しい ϵ_d を用いれば、隠れた機構が分かる。

[1] Watanabe, Examination of permittivity for depolarization field of ferroelectric by *ab initio* calculation, suggesting hidden mechanisms, *Scientific Reports* (in press, 2021), [2] Watanabe, *Jpn. J. Phys. Soc.* 79, 034713 (2010), [3] Watanabe ら, *PRL* 86, 332 (2001); Watanabe, *Phys. Rev.* B57, 789 (1998). [4] Ji ら, *Nature* 570, 87 (2019).

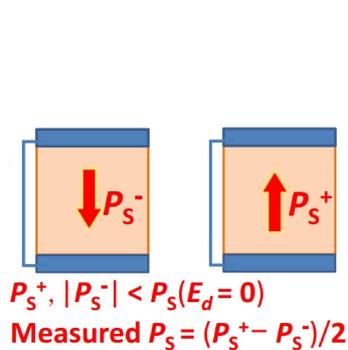


図 1 自発分極の典型的測定

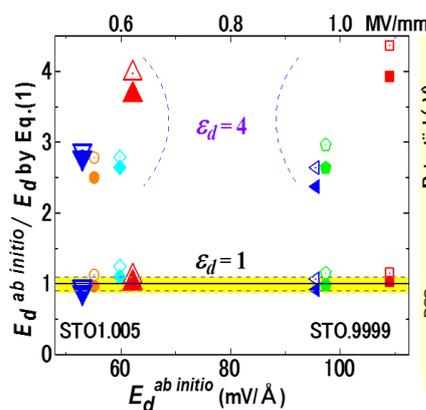


図 2 単立強誘電体の ϵ_d の検討

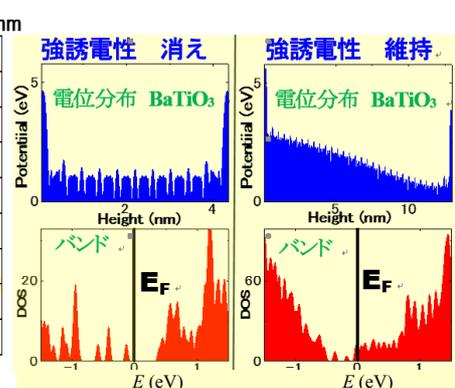


図 3 単立強誘電と絶縁の二律背反