

2P16

ペロブスカイト型酸化物の強誘電性に関する計算化学的検討

○篠田克己¹、磯田直征¹、遠藤 明¹、久保百司¹、小西義則²、大沢通夫²、
米澤喜幸²、脇坂寿幸³、知京豊裕^{3,4}、鯉沼秀臣^{3,4}、宮本 明^{1,5}

¹ 東北大学大学院工学研究科材料化学専攻(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07)

² 富士電機総合研究所(〒240-0194 横須賀市長坂 2-2-1)

³ 東京工業大学応用セラミックス研究所(〒226-8503 横浜市緑区長津田町 4259)

⁴ 物質・材料研究機構(〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1)

⁵ 東北大学未来科学技術共同研究センター(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 04)

【緒言】ペロブスカイト化合物の多様な物性の中で特に強誘電性に関しては研究の歴史も長く、現在実用化されているペロブスカイト化合物の多くはその強誘電性を利用している。特に PbTiO_3 に代表される Pb 系の材料が最も広く利用されているが、Pb が人体に有害であることから、非 Pb 系の強誘電体の探索が行われている。本研究では新たな強誘電体材料の候補として SnTiO_3 を設計し、その物性を密度汎関数法により評価した。

【方法】周期的密度汎関数計算には、ケンブリッジ大学で開発された擬ポテンシャルを有するコード CASTEP を採用した Accelrys 社製の構造解析ソフト Material Studio を用いた。各原子ポテンシャルはウルトラソフト擬ポテンシャルにより記述し、平面波のカットオフエネルギーは 400 eV とした。局所密度近似(LDA)を用いて構造最適化を行った後、PW91 型の一般化勾配近似(GGA)を用いて電子状態計算を行った。

【結果】最適化後の構造を図 1 に示す。 SnTiO_3 は正方晶のペロブスカイト構造をとり、各原子が c 軸方向に大きく変位している。この変位と各原子の形式電荷から自発分極量を算出したところ、分極量は $84 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ となり、同様の方法で計算した PbTiO_3 の自発分極量 $66 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ (実験値 $75 \mu\text{C}/\text{cm}^2$) と比べても大きい値が得られた。また、状態密度(DOS)分布(図 2)からこの自発分極量の大きさについて考察すると、 SnTiO_3 の DOS は PbTiO_3 の DOS と良く似ており、 $\text{Sn } 5s$ 、 $5p$ 準位と $\text{O } 2p$ 準位が混成している。この混成が間接的に共有結合性を高め、近接交換反発を緩和することにより強誘電性が発現するものと考えられる。

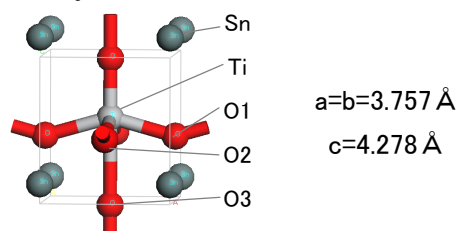


図 1 SnTiO_3 の構造

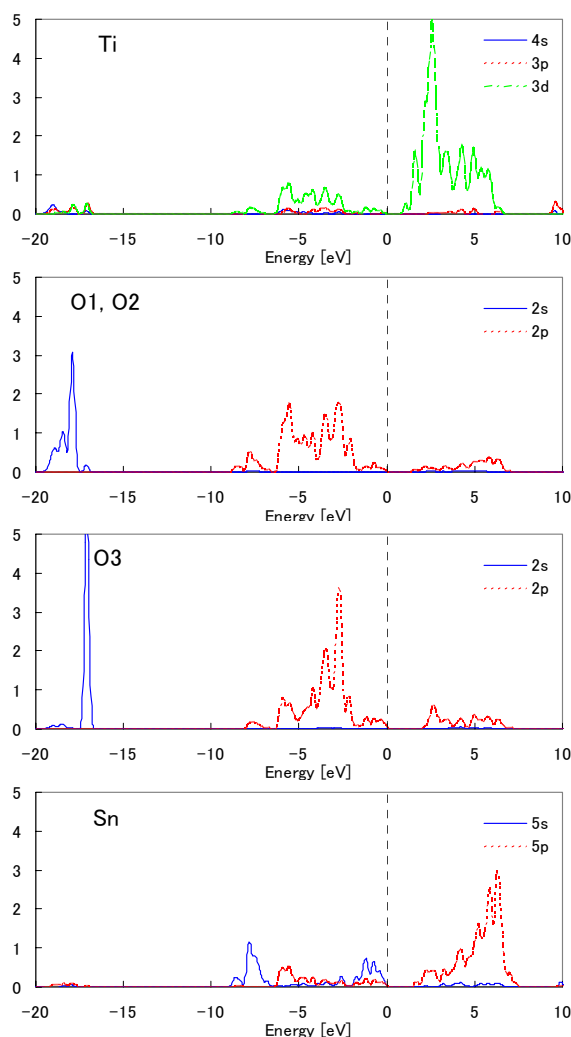


図 2 SnTiO_3 の状態密度分布