

# 第一原理計算によるウルツァイト型結晶構造 単純カルコゲナイドの強誘電性

(ファインセラミックスセンター) ○小西綾子・森分博紀・小川貴史・藤村幸司・

Craig A. J. Fisher・桑原彰秀、

(東京工業大学) 清水荘雄・安井伸太郎・伊藤満

強誘電体は自発分極を有しており、かつ外部電場によってその分極が反転可能な物質である。チタン酸バリウムなど強誘電体の多くは酸素八面体中における陽イオンのずれによって分極反転が起こっている。誘電体ファミリーに新しい物質群を加えることは基礎科学ばかりでなく応用の観点からも極めて重要な意味がある。ウルツァイト型結晶は共有結合性の強い結合により四面体配位となっている物質群であり、極性結晶ではあるが外部電場による分極反転はおこらないと考えられていた。しかしながら、ウルツァイト型構造  $\text{BeO}$  において強誘電性のヒステリシスループが観測されたという研究結果が報告されている<sup>[1]</sup>。ところが、このメカニズムはいまだ十分に解明されていない。そこで今回、ウルツァイト構造カルコゲナイドが分極反転可能な物質群であるかどうかを確かめるため、 $\text{MX}$  ( $\text{M}=\text{Zn}, \text{Be}, \text{X}=\text{O}, \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) のウルツァイト構造の単純カルコゲナイドの第一原理計算を試みた。ウルツァイト構造カルコゲナイドでは、 $c$  軸に沿って陽イオンを相対的に変位させることにより、Fig.1 のように中心対称性の常誘電構造を見ることができる。このポテンシャル障壁が十分に小さい場合、ウルツァイト構造カルコゲナイドの自発分極は二つの極性構造の間で反転し得る。本稿における計算手法には密度汎関数理論に基づく擬ポテンシャル法、又は Projector-Augmented Wave (PAW) 法を用い、交換相関ポテンシャルには一般化勾配近似 (GGA) を用いた。また、分極計算には Berry 位相法を用いている。本研究により、これらの物質群が非分極 ( $P6_3/mmc$ ) を中心として二つの分極構造 ( $P6_3mc$ ) をダブルミニマムとしたダブルミニマムポテンシャルを有していることが分かった。また、その分極反転障壁が  $\text{PbTiO}_3$  に匹敵する低さの (Fig.2)、これらの強誘電性が実験的に確認できる可能性を示唆するものである。

## 【参考文献】

[1] S. Sawada et al., J. Phys. Soc. Jpn., 1973, 35 946.

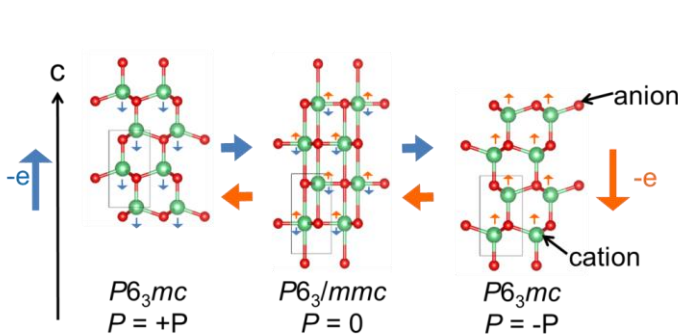


Fig.1. Crystal structure of the Wurtzite structure polar state ( $P6_3mc$ ) and non-polar state ( $P6_3/mmc$ ).

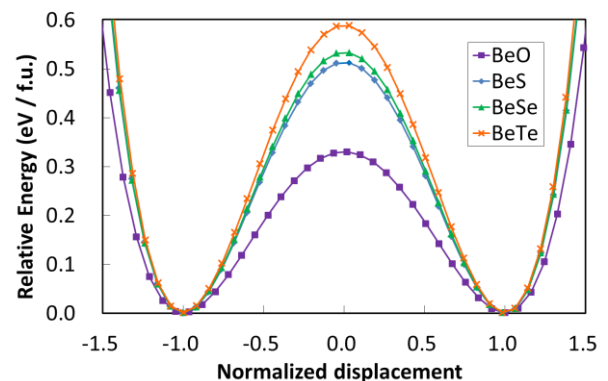


Fig. 2. Calculated potential surface of the ferroelectric relative cation displacement in Be chalcogenide compound.