

Minimal model of antiferroelectric phase transition

東京大学生産技術研究所

高江恭平, 田中肇

電気双極子をもつ粒子を密に詰めて結晶を作ること考える。双極子—双極子相互作用は、古典電磁気学を思い出せば、

$$U_{ij} = \frac{1}{r_{ij}^3} \boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{\mu}_j - \frac{3}{r_{ij}^5} (\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\boldsymbol{\mu}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})$$

で与えられる。注目すべきは、この相互作用は相対位置と電気双極子の向きに応じて符号を変える点である。たとえば図1に示すように、すべての双極子が同じ向きを向いた結晶を組む時、この相は強誘電相である。しかし図からわかるように、粒子間の双極子相互作用は引力であったり斥力であったりするという、フラストレーションを含む系となっている。そこで、粒子間の短距離相互作用を制御し、引力と斥力のバランスを変えることにより、強誘電相が不安定化し、異なる分極秩序を持つ相が生じることが期待される。そのような条件下で分子動力学シミュレーションを行ったところ、反強誘電相が実現されることが明らかになった。つまり、立体斥力と双極子相互作用のフラストレーションを利用することで、反強誘電相転移を示す単純な分子モデルを発見することができた。得られた相図を図2に示す。本講演ではこの結果と、関連する話題として電気力学応答、電気熱量効果、フェリ誘電性の発見を含めて議論する。

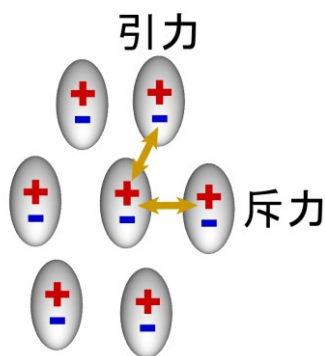


図1：電気双極子相互作用は相対位置の方向に依存するため、粒子の形状を変えることで分極秩序を制御できる。

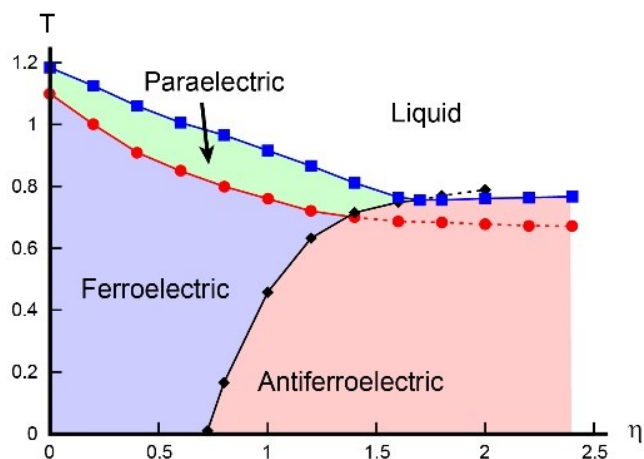


図2：シミュレーションで得られた相図。横軸 η は粒子の異方性の強さを表し、 $\eta=0$ は球形に相当する。 η が大きくなると反強誘電相が安定化される。