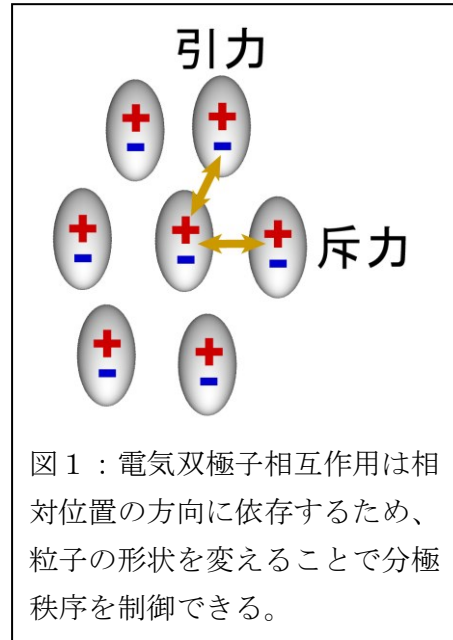


強誘電ゆらぎを經由した反強誘電相転移

(東大生研) 高江恭平、田中肇

【はじめに】

電気双極子を有する粒子反強誘電相転移を示す分子動力学モデルを提案する。このとき、粒子の形状が重要である。例として楕円体粒子を考える。図1にみられるように、双極子相互作用は粒子の相対位置に依存して符号を変えるため、楕円体のアスペクト比が1に近い(形状が球に近い)とき、各粒子間の双極子相互作用は引力が優勢であり、低温で強誘電秩序が発現する。対して、楕円体のアスペクト比が大きいとき、立体斥力のため双極子間の引力相互作用は弱められ、斥力が優勢となるため、低温で強誘電相とは異なる秩序が発現することが期待される。このように、粒子の形状を変えたとき、どのような秩序が、どのようにして生ずるかを研究する。



【結果と考察】

分子動力学のモデルとしては、文献[1,2]において提案したモデルを用いる。このモデルでは、粒子間の相互作用が粒子配向に依存しており、形状異方性を制御するパラメータを導入することで、粒子の異方性を簡単に制御できるようにしている。この粒子からなる結晶において、形状異方性を制御したとき、融点直下の高温では常誘電結晶(配向が乱れた結晶、柔粘性結晶)が生ずるが、低温においては、異方性が弱い場合は強誘電秩序が生じ、異方性が強い場合には反強誘電秩序が生ずることを見出した。特に反強誘電秩序が生ずるとき、一旦強誘電ゆらぎが強く発達し、しかる後に反強誘電状態が成長してくるといふ、2段階の成長則がみられる。このような特異な相転移は結晶構造の変化に由来する。つまり、この相転移は結晶構造の変化を伴う構造相転移であり、高温の常誘電結晶では FCC あるいは HCP 構造であるが、強誘電相では(111)面内において1方向に引き伸ばされた Rhombohedral 相になり、反強誘電相ではさらに(111)面がスライドすることで Body-Centred-Monoclinic 相へと転移する。講演では各秩序をどのように特徴づけるか、秩序化の動力学とそのときの粒子スケールでの運動、電場応答、フェリ相が発現する可能性について考察する。

【参考文献】

- [1] K. Takae and A. Onuki, Phys. Rev. E **89**, 022308 (2014).
- [2] K. Takae and A. Onuki, unpublished.