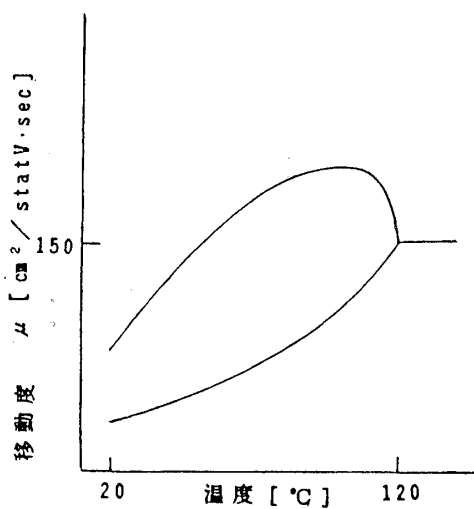


18. BaTiO₃ の Tetragonal 相における電気伝導

桑田 精一

BaTiO₃ に不純物をドーピングすることによって、この物質を半導体化することができる。こうしてできたペロブスカイト型強誘電体半導体は特異な電気伝導を示すことがわかっている。その中で電子移動度について図1のような実験報告がなされている。それによれば、BaTiO₃ の cubic 相において電子移動度は温度に対してほとんど一定であるのに対し、Tetragonal 相では強誘電軸 (c-軸) に平行及び垂直方向共に特異な温度依存性を示している。一般に電子移動度は高温になるにつれて減少する傾向があるが、今の場合は全く逆の傾向を示しているからである。この実験に対して種々の理論的説明が試みられてきたわけであるが、理論の柱として一応二つのモデルがあると考えられる。この物質を純半導体に見なし、電子の局在によるホッピングモデルと、誘電体の性質を強く反映した光学的フォノン散乱機構がそれである。

本論文では、後者のモデルを採用する。これは後で述べる様な理由により格子振動による電子散乱の定式化が容易であるからである。しかし、たとえば Frölich が唱えたハミルトニアンをそのまま用いると電子移動度は、温度に対して指数関数的に減少することがわかっている。これは実験事実と矛盾する。そこで流れ移動度 $= e\tau / m^*$ (e: 電子の電荷, τ : 緩和時間, m^* : 有効質量) において、緩和時間は通常の Frölich 型の温度依存性を示すとして、 m^* が 2 つの方向に対し異方性を示しているとした。C-軸方向とそれと垂直方向における最大の違いは、C-軸方向には自発分極が存在することである。さらに格子変形の様子が 2 つの方向では全く逆の方向を示している。(C-軸方向は温度と共に縮み、a-軸方向は温度と共に伸びる) この様な実験事実を

図1; BaTiO₃ の移動度

考慮してハミルトニアンを修正することは不可能ではないが非常に複雑なものになることが予想される。そういった複雑さを避けるために有効質量の補正はポーラロンによるそれだけに限定した。(実際格子変形による有効質量の補正はほとんど無視することができる) こうしてできた最終的な電子移動度は光学型フォノン振動数と温度のみに依存することがわかった。一方光学型フォノンのスペクトルは温度と共に微妙に変わるので、軸異方性も実驗的に確かめられているのでこれらのデータを解析して図1に示されるような電子移動度を得られるかどうか調べてみた。