

19. $\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ の逐次相転移の理論

西 俣 辰 男

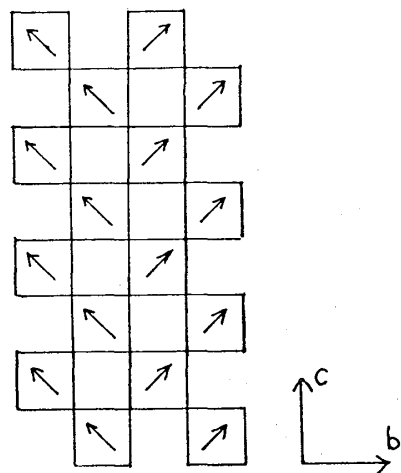
$\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ の単結晶は層状構造をなし、1層に4つの酸素八面体が重なるペロブスカイト系酸化物で逐次相転移をすることが知られている。まず1615 Kという高温にTcがあり、それ以下ではC軸方向に自発分極が発現する。488 Kには整合-不整合相転移があり、60 K以下まで不整合相が存在することが確認されている。117 K以下では、c軸だけでなくさらにb軸方向にも弱い自発分極が現れる。このような変化にとんだ相転移機構の解明は重要と思われる。そこで従来の研究では $\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ の逐次相転移を双極子相互作用のみで説明しようと試みたが、本研究ではさらに表面2D電子論を導入して3つの相転移を統一的に説明することを目的とする。

まず表面2D電子論であるが、これは強誘電体物質の表面(c-domain)に中和電子が下記の中和条件にしたがって2次元格子を作り、その格子長によって長周期不整合性を決定するとするものである。

$$D_a \times D_b \times P_s = e$$

ただし D_a 、 D_b は電子格子の格子長、 e は電気素量
 $\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ の場合は上式より $D_a/2 = 8.55 \sim 6.65$ [Å]と、実験値8.03 [Å]によく一致する値を得る。またこれは NaNbO_3 や K_2SeO_4 においてもよい結果を得ている。

さて、下図のb-c面の模式図において、1層内だけの双極子相互作用によるNbとOの局所場を計算するとNbの分極が実際の自発分極の方向と逆の方向を向く結果となり非常に不安定である。しかし $\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ は酸素が余分につくことによって層状構造をなしていると考えられるので、その酸素の影響により層の中心から左右方向にBias Fieldがはたらくと考えると安定する。



以上を前提として $\text{Sr}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ の逐次相転移を定性的に考えると、まず1615 KのTcではエネルギーの増加により表面電子格子の局在が破れ散逸することによってFerroが失われる。488 Kにおいては電子格子のb軸方向の制約が破れ、a軸方向の整合が観測できなくなると考える。117 K以下では電子格子もしくはBias Fieldの影響により一つの層の隣接二層の分極の不均一が生じ、結果としてb軸方向に弱い自発分極が発生すると考えられる。