

4. 二次元電子格子系と不整合性

広瀬 健一

強誘電体の不整合な *microdomain* 構造を説明する理論として、従来、

1. 格子欠陥を原因とする理論

2. 誘電体表面の二次元電子格子を原因とする理論

がある。このうち、後者の二次元電子格子理論は *microdomain* の周期を定量的に説明できている。

二次元電子格子理論とは、*microdomain* を形成する自発分極を安定化する表面中和電荷が、*Madelung energy* を最小にするように規則正しい格子を組むとするものである。(Fig. 1) *Madelung energy* は、正方格子、三角格子それぞれについて、 $-3.9004 e^2/D$ 、 $-3.9206 e^2/D^*$ と計算されている。そして、表面中和電荷が *microdomain* を中和するとし、自発分極 P_s 、*microdomain* の面積 S 、素電荷量 e の間の、

$$P_s \cdot S = e$$

の関係より *microdomain* の周期が求められる。(Fig. 2)

しかし、二次元格子理論では、*microdomain* 構造の異方性を説明していない。すなわち、*Madelung energy* を最小にする電子配置を考慮するだけなら、Fig. 1 のような等方的な *domain* が形成されるはずだが、実際には Fig. 2 のような一方の軸の方向にのみ分極の変調が起きるような異方性が存在するのである。異方性が説明できないのは、従来の二次元電子格子理論では、中和電子と *background* の格子との相互作用を考慮していないためである。本研究では、中和電子と *background* の格子との相互作用を考慮することにより、*microdomain* 構造の異方性を説明する。

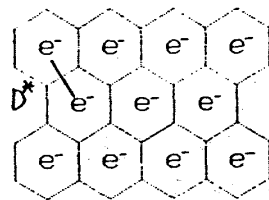
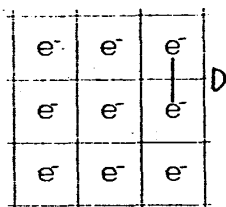


Fig. 1 二次元電子格子系

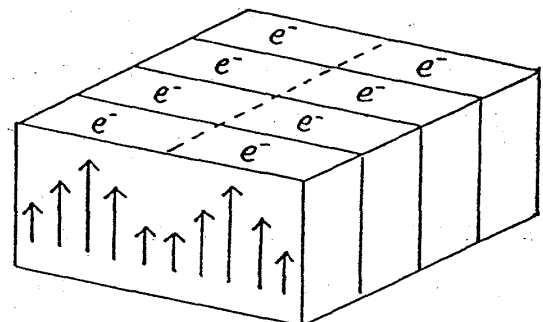


Fig. 2 *microdomain* 構造