

BaTiO₃ 極薄膜単結晶の 外部電場による強誘電性発現機構の解析

関西学院大学大学院理工学研究科
物理学専攻 寺内研究室 北川 昂人

[背景・目的]: 近年、半導体メモリの絶縁膜として強誘電体薄膜が注目されている。メモリの更なる大容量化、高速化のためには、デバイスの微細化が必要不可欠となっている。しかし強誘電体の極薄膜状態の物性は詳しく知られていない。本研究では、強誘電性の外部電場及びサイズ依存性の解析を目的として、第一原理計算である DV-X α 分子軌道法を用いて代表的な強誘電体である BaTiO₃ の電子状態を計算し、外部電場による、様々な結晶サイズの原子間の化学結合の解析を行った。

[計算モデル]: 過去の報告^{1,2)}では、電極がなく、外部電場が印加されていない状態における BaTiO₃ 極薄膜の強誘電性の変化を明らかにした。今回、図 1 に示すように、Ba₈Ti₇O₆ クラスターの周りに点電荷を配置する事で薄膜と電極をモデル化した。電極を表現した点電荷は、単位格子表面あたり 9 個配置した。そして点電荷の配置位置は、電極が酸素原子に接しているとイメージして、結晶表面から酸素の原子半径である、1.61 Å 離して配置した。以上の方法によって、強誘電体薄膜 BaTiO₃ と電極をモデル化し、結晶をモデル化した点電荷の数を変えて様々なサイズの結晶をモデル化し、また電極をモデル化した点電荷の価数を変えることで外部電場を変化させ、その変化に対する BaTiO₃ 極薄膜の強誘電性の変化を解析した。

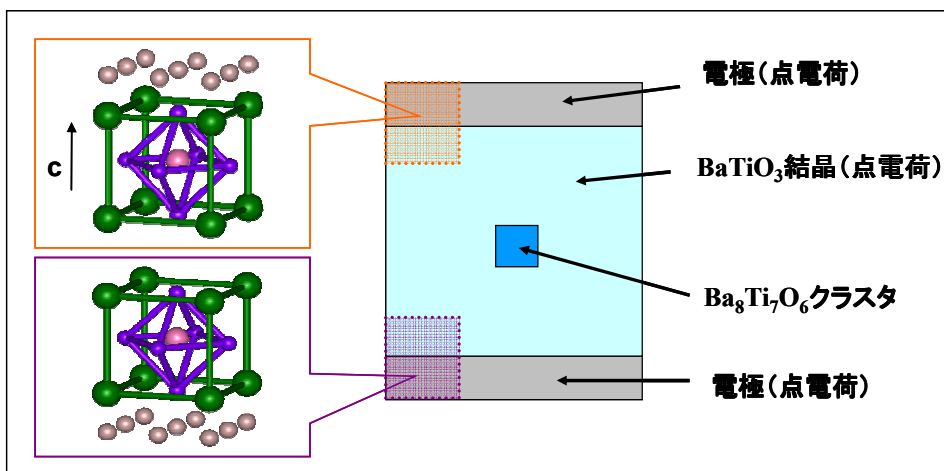


図 1. 電極で挟まれた強誘電体薄膜 BaTiO₃ の計算モデルのイメージ図.

【結論】: 図2は、電極上の面電荷密度 0.18C/m^2 (分極を促進する方向への外部電場) の外部電場を印加した場合における様々な底面積をもつ BaTiO_3 について、横軸に膜厚を底面積の平方根で割った規格化膜厚、縦軸にクラスタ中心の Ti の 3d 軌道と Ti の変位方向に位置する O の 2p 軌道との共有結合性の大きさ (overlap population) を示した結果である。図より、底面積、形状に関わらず、規格化膜厚が約 2 以下において、オーバーラップポピュレーションは外部電場の影響を強く受けていることが考えられる。これより、規格化膜厚が約 2 以下において、 BaTiO_3 結晶の強誘電性は形状に関係なく強い外部電場依存性をもつ事がわかった。

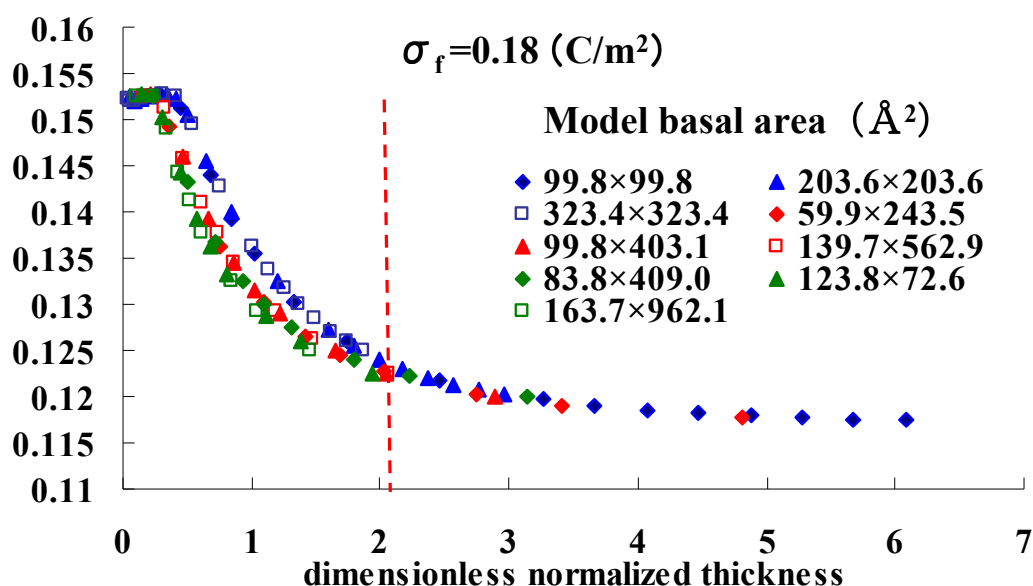


図 2. 電極の面電荷密度 0.18C/m^2 の外部電場を印加した場合における、様々な底面積をもつ BaTiO_3 についての、規格化膜厚に対する Ti3d と O2p 軌道間のオーバーラップポピュレーションの変化。

- 1) R. Nakao, K. Ishizumi, I. Takahashi, H. Terauchi, Y. Hayafuji, and K. Miura, Appl. Phys. Lett. **86** 222901 (2005).
- 2) K. Ishizumi, H. Kawanishi, R. Nakao, I. Takahashi, H. Terauchi, Y. Hayafuji, and K. Miura, Jpn. J. Appl. Phys. **45** 2656 (2006).