

強誘電体の電気熱量効果の分子動力学計算

東北大金研¹、アイオワ州立大学² 西松毅¹、Scott P. Beckman²、Jordan A. Barr²

近年の気相成長技術の発達により、均質で膜中の欠陥の少ない強誘電体薄膜が作られるようになりつつある。欠陥の少ない薄膜には今までは不可能であった強い電場をかけることができ、そのON/OFFにより大きな電気熱量効果 (electrocaloric effect) が期待できる。固体冷却装置などへの応用が期待されている。

さきごろ、われわれは、われわれが開発を続けている強誘電体に特化した分子動力学計算プログラム **feram** (<http://loto.sourceforge.net/feram/>) により BaTiO₃ の電場下の分子動力学計算を行い、電気熱量効果を見積った[1]。そこでは、しかしながら、熱力学的な関係式を使って dP_e/dT から間接的に電気熱量効果 ΔT を見積っていたため、 dP_e/dT が発散する、外部電場 E_z が小さな場合にはその見積りに困難があった。

今回、有限の外部電場 E_z 下でカノニカル・アンサンブル計算を行い、その後 $E_z=0$ としてマイクロ・カノニカル・アンサンブル計算を行うことにより直接的に分子動力学計算により電気熱量効果 ΔT を見積ることができた[2]。ただし、分子動力学計算で用いている粗視化 (coarse graining) により系の比熱が過小評価され、その結果 ΔT が過大評価されるので、粗視化の度合いに応じた補正が必要である。図の計算結果より比較的弱い外部電場 E_z でも相転移温度 T_c 付近で大きな ΔT が得られるが、 T_c 以上のある程度の温度範囲で大きな ΔT を得るためにはより強い E_z が必要なることがわかる。

参考文献

[1] S. P. Beckman, L. F. Wan, Jordan A. Barr and Takeshi Nishimatsu: Materials Letters **89**, 254 (2012).

[2] Takeshi Nishimatsu, Jordan A. Barr and S. P. Beckman: J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 114605 (2013).

図: 分子動力学計算によりえられた BaTiO₃ の電気熱量効果 ΔT .

