

Title	Analysis of Polarization Reversal Mechanisms in Ferroelectrics within the framework of a Lattice Model based on the Landau theory
Author(s)	Richinschi, Dan
Citation	大阪大学, 2001, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/42448
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	リチンスキ、 Richinschi, Dan
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第 16302 号
学位授与年月日	平成13年3月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 基礎工学研究科物理系専攻
学位論文名	Analysis of Polarization Reversal Mechanisms in Ferroelectrics within the framework of a Lattice Model based on the Landau theory (ランダウ理論に基づいた格子モデルによる強誘電体の分極反転機構の解析)
論文審査委員	(主査) 教授 奥山 雅則 (副査) 教授 蒲生 健次 教授 石橋 善弘 (愛知淑徳大学) 教授 岡本 博明 助教授 野田 実

論文内容の要旨

強誘電体の分極反転および関連現象を、相転移の理論解析に有効なランダウ理論に基づいた格子モデルを用いて研究した。本研究の目的は、強誘電体における分極反転特性とその劣化についての基礎物理の理解を進めることである。

強誘電体の分極反転現象を電場誘起の相転移と位置づけ、ランダウ-ハラツニコフ方程式を数値的に解いて単体のランダウ双極子の反転過程を詳細に論じた。同方程式の解の中で分極反転電流密度についての2つの項を改良することにより実験値と計算結果がさらに一致することが分かった。また、より一般化された場合として非一様な分極反転をランダウ理論に基づく格子モデルを用いて調べた。分極反転特性の電場振幅依存性と温度依存性とを評価し、それらがBaTiO₃とPb(Zr, Ti)O₃を用いた実験結果と一致することが分かった。不完全な分極反転の場合についても計算し、不揮発性メモリセルと適応型メモリへ強誘電体を応用するための有用な手掛かりを与えた。

次に、強誘電体の分極反転特性のグレインサイズ依存性を解析するために格子モデルを構築し、分極状態の時間経過を様々な格子サイズについて計算した。系を単純化し、実験データとの比較を行うため、モデルの多体系と等価のランダウ係数を新たに定義した。このランダウ係数の格子サイズ依存性についての計算結果がBaTiO₃の実験結果と一致することを見出し、本手法がグレインサイズ効果解明に非常に有効であることを示した。

さらに、分極反転と有限サイズの効果に関するこれらの研究成果を、分極疲労現象の原因の詳細な理論的究明に適用した。強誘電特性の劣化機構を誘起する様々な仮説を格子モデルに取り入れ、分極履歴曲線のパラメータを解析することにより、Pb(Zr, Ti)O₃薄膜の分極疲労機構を明らかにした。実験結果を最も良く再現する分極疲労機構は、内部電界によって分極反転を制限されながらサンプル面内方向に次第に広がる疲労領域が形成されることであった。このモデルは、内部電界の大きさと疲労領域発生の時間依存性について有用な情報を与えた。

論文審査の結果の要旨

今日の高度情報化を支える技術の中で、高速・大容量のメモリ素子はその基幹部分をなす重要な電子機器である。特に、強誘電体メモリは高速書き込み・読み出し、低消費電力、超高集積化可能な次世代不揮発性メモリとして期待されている。しかし、100nm程度の厚さとμm程度の平面の強誘電体薄膜のミクロな物性、メモリ動作時の分極反

転による強誘電性の劣化（疲労やインプリントなど）が問題となっており、これを理解するための解析やその解決方法が切望されている。

そこで、強誘電体の分極反転および関連する物性を、現象論であるランダウ理論に基づいて格子モデルを構築して理論解析した。種々の状態を仮定した格子モデルについてランダウ-ハラツニコフ方程式を数値的に解いて、ランダウ双極子の反転過程を詳細に論じた。解析の結果明らかにした主な項目を以下に示す。

- 1) 分極履歴特性を解析した後、分極の時間的変化（電流応答）を印加電界をパラメータとして数値的に計算し、これが BaTiO_3 と $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$ における実験結果と一致することを示した。また、パルス電界の断続的印加による分極の変化を解析し、適応学習機能ニューロ素子の原理的問題点を明らかにした。
- 2) ランダウ理論に基づいた分極の格子モデルを構築し、分極の時間変化を様々な格子サイズについてもとめた。ランダウ係数の格子サイズ依存性の計算結果が、 BaTiO_3 のグレインサイズ依存性の実験結果と一致することを見出し、分極履歴特性のグレインサイズ依存性の機構を明らかにすることができた。
- 3) 分極反転による強誘電特性の劣化（疲労）した分極履歴曲線を、様々な仮説を取り入れた格子モデルにおいて分極履歴曲線をパラメータ解析した。その結果、ゾル・ゲル法により作製された $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$ 薄膜の分極疲労は、内部電界のために抗電界がシフトした不活性領域（疲労領域）が部分的に発生し、これが周りの強誘電性領域の分極と相互作用することによって生じることを示した。

以上の研究成果は、強誘電体中の分極の挙動について新しい理論的解析を行い、実験結果の基本的要因を明らかにしており、強誘電体物性の進歩に先駆的な貢献をしたものであり、博士（理学）の学位論文として価値あるものと認める。