

Pna2₁-M₂O₃ (M=Al, Ga, In, Sc, Y) 単結晶および混晶の弾性定数、圧電定数、自発分極の第一原理計算

First-principles calculation of elastic and piezoelectric constants and spontaneous polarization of Pna2₁-M₂O₃ (M=Al, Ga, In, Sc, Y) single crystals and alloys

関東学院理工 °島田 和宏、長谷川諄、二階堂大地、佐藤拓海、松島寛幸

Kanto Gakuin Univ., °Kazuhiro Shimada, Jun Hasegawa, Daichi Nikaido, Takumi Sato and, Hiroyuki Matsushima

E-mail: shimada@kanto-gakuin.ac.jp

【はじめに】 Al₂O₃、Ga₂O₃、In₂O₃ はそれぞれ異なる対称性の結晶構造が安定構造であり、その他に取り得る構造も反転対称性を持った構造が多いが、Pna2₁ の対称性を持ったκ-Ga₂O₃ は、反転対称の無い構造であり、圧電特性を持つ。κ-Ga₂O₃ の自発分極[1,2]と圧電定数[1]の報告は少なく、Ga₂O₃ 以外のセスキ酸化物を含め、その圧電特性の詳細は明らかになっていない。本研究では、5つのⅢ族セスキ酸化物について[3]、また、一部混晶系についても、その自発分極とともに圧電特性について第一原理計算を行ったので報告する。

【計算方法】 密度汎関数理論に基づいた第一原理計算を第一原理計算ソフト Quantum ESPRESSO を用いて行った。交換エネルギー汎関数は Wu-Cohen 型の GGA 汎関数を用いた。弾性定数および圧電定数は、原子に加わる力および応力がそれぞれ 10⁻⁵Ry/Bohr および 0.01GPa 以下に最適化された構造に微小歪みを加えることで算出した。自発分極は、反転対称のある自発分極の無い Pnma の対称性を持った構造の分極との差から算出した。混晶の計算では、原子数 80 個の 2×1×1 単位胞を用い、単位胞内の原子配置については準ランダム配置 [3]とした。

【計算結果】 Table 1 は、Pna2₁ の対称性を持った5つのⅢ族セスキ酸化物単結晶の自発分極と圧電定数の計算結果である。この結果から、Al₂O₃ と Ga₂O₃ はウルツ鉱 GaN と同程度かそれ以上の大きな自発分極および圧電定数を持ち、In₂O₃、Sc₂O₃ および Y₂O₃ はさらに桁の違う強い圧電特性を持つことが予測された。混晶系の計算結果については当日報告する。

【参考文献】 [1] M. B. Maccioni and V. Fiorentini, APEX 9, 041102(2016). [2] J. Kim *et al.*, APEX 11, 061101(2018). [3] K. Shimada, Mater. Res. Express 5, 036502 (2018). [4] A. van de Walle *et al.*, CALPHAD 42, 13(2013).

【謝辞】 本研究で行われた計算は、東京大学情報基盤センターのスーパーコンピューティングシステムを利用して行った。

Table 1. Spontaneous polarization P_{sp} and piezoelectric stress constants e_{ij} of Pna2₁-M₂O₃ in units of C/m².

	P_{sp}	e_{31}	e_{32}	e_{33}	e_{15}	e_{24}
Al ₂ O ₃	-0.275	0.250	-0.131	0.993	0.008	0.263
Ga ₂ O ₃	-0.242	0.429	-0.198	0.844	0.196	0.712
In ₂ O ₃	-0.525	1.824	1.610	3.282	0.099	0.253
Sc ₂ O ₃	-0.685	2.339	1.678	3.274	0.162	0.264
Y ₂ O ₃	-0.774	2.395	0.798	3.206	-0.069	0.337