

ウルツ鉱構造物質の圧電性と構造パラメータの相関関係

Correlations between Piezoelectricity and Structure Parameters in Wurtzite Materials

阪大産研¹ ○ 梶田 浩義¹, 小口 多美夫¹

Osaka Univ.¹, °Hiroyoshi Momida¹, Tamio Oguchi¹

E-mail: momida@sanken.osaka-u.ac.jp

【背景・目的】 AlN や ZnO に代表されるウルツ鉱型構造の圧電材料は、電子デバイスやピエゾトロンクス素子として広く応用利用されている。ウルツ系材料の圧電定数は比較的に小さく、元素置換等によって圧電性を高める研究が活発に行われている。特に、 $\text{Sc}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ の圧電定数は AlN の約 5 倍もの増大を示すことが報告され大きな注目を集めている[1]。第一原理計算によって、AlN 中 Sc の圧電性増大効果の理解が示されてきたが[2]、一般的に適用可能なウルツ系圧電材料の高機能化設計指針は明らかではない。本研究では、ウルツ鉱構造型材料の圧電定数を支配するパラメータを第一原理計算と統計解析手法を用いて抽出することを目的とする。

【計算方法】 ICSD 結晶構造データベースに掲載されているウルツ鉱構造を有する物質群に対して、第一原理計算を実行し、圧電 e 定数 (e_{33}) を計算する。第一原理計算はコード “HiLAPW” を使用する。ウルツ鉱構造の格子定数 (a , c) と原子座標 (u) は計算で最適化した値を用いる。統計解析はパッケージ “R” を使用し、計算した e_{33} データに対して一般化線形モデル解析を行い、 e_{33} と強く相関関係を持つパラメータを特定する。

【結果・議論】 計算したウルツ構造物質群の圧電 e 定数 (e_{33}) は、格子定数比 c/a と最も強い相関関係を持つ結果が得られ (図 1)、近似的に “ $e_{33} \propto c/a$ ” と表すことができる。興味深いことに、過去に計算された三元系の $\text{Sc}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{N}$ モデルの e_{33} 値[2]もこの関係の延長線上にあることが分かった。統計解析の結果は、より良い相関関係として、構成元素のイオン価数 Z を用いた “ $e_{33} \propto Z(c/a)$ ” の関係が得られた。圧電定数の定義式から、第一原理解析結果を併用してこの近似式が導かれることが示される。この結果は、「 c/a がより小さい物質は、より高い e_{33} を持つ」ことを示している。この関係に基づいて、 c/a 値を変化させた歪み AlN や仮想ウルツ物質 LiX ($X = \text{H}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) に対して e_{33} が実際に c/a と強い相関関係があることを実証する。また、ZnO の圧電定数に対する Ca 置換効果を計算し、Ca 置換によって c/a が減少し、 e_{33} が顕著に増大することを示す。

【参考文献】 [1] M. Akiyama *et al.*, Adv. Mater. **21**, 593 (2009). [2] F. Tasnádi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **104**, 137601 (2010); H. Momida *et al.*, AIP Adv. **6**, 065006 (2016).

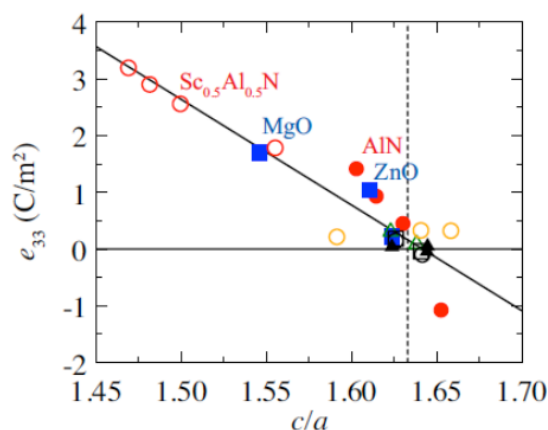


図 1 : 圧電 e 定数(e_{33})と格子定数比 c/a の計算値.