

Pna2₁-(In_xM_{1-x})O₃ (M=Al, Ga) の弾性定数、圧電定数および自発分極の 第一原理計算

First-principles calculation of elastic and piezoelectric constants and spontaneous polarization of Pna2₁-(In_xM_{1-x})O₃ (M=Al, Ga)

関東学院大院工¹, 関東学院大理工² ○(M1)長谷川 諄¹, 島田 和宏²

Kanto Gakuin Univ., ○Jun Hasegawa, Kazuhiro Shimada

E-mail: m19j2001@kanto-gakuin.ac.jp

【はじめに】Ⅲ族酸化物である In₂O₃、Al₂O₃、Ga₂O₃ の準安定構造である空間群 Pna2₁ の斜方晶は、大きい圧電定数や自発分極を持つことが予測されており^[1-3]、高電子移動度トランジスタや圧電デバイスの材料として期待できる。実際のデバイス設計では、材料の弾性定数や圧電定数に関する知見は非常に重要である。本研究では、In₂O₃ と Al₂O₃ および Ga₂O₃ の混晶を用いたデバイス設計を想定し、第一原理計算により 2 つの混晶系の弾性定数、圧電定数、自発分極の組成依存性に関する計算を行った。

【計算方法】第一原理計算ソフト Quantum Espresso を用いて、密度汎関数理論に基づき電子状態を求めた。波動関数の切断エネルギーは 45[Ry] とし、擬ポテンシャルは PAW ポテンシャルを使用し、交換相関汎関数は Wu-Cohen 型の GGA 汎関数を用いた。2×1×1 単位胞の Al (Ga) 原子の一部を In 原子に置き換えることでモル分率を変化させ計算を行った。原子配置は準ランダム配置とした。

【計算結果】図 1 と図 2 はそれぞれ (In_xAl_{1-x})₂O₃ と (In_xGa_{1-x})₂O₃ の組成比に対する格子定数の変化である。c 軸方向のみ直線的に変化せず、組成比 x = 0.75 付近で最大となった。この格子定数にみられる組成比に対する結晶構造の非線形性の影響によって弾性定数、圧電定数、自発分極の変化も非線形となった。

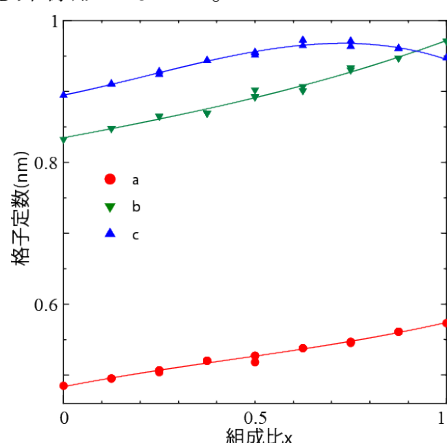


Fig. 2 lattice constants of (In_xAl_{1-x})₂O₃

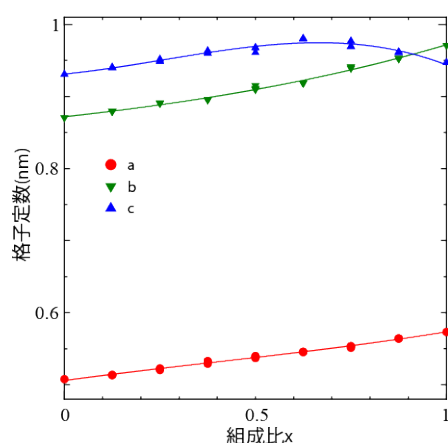


Fig. 1 lattice constants of (In_xGa_{1-x})₂O₃

【参考文献】 [1] M.Barbara and V.Fiorentini, APEX 9, 041102 (2016). [2] K. Shimada Mater. Res. Express 5 036502 (2018). [3] J. Kim, D. Tahara, Y. Miura, and B. kim, APEX 11, 061101(2018).

【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。