

Pna2₁-(Sc_xM_{1-x})O₃ (M=Al, Ga) の格子定数、弾性定数および圧電定数の第一原理計算

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

関東学院大院工¹, 関東学院大理工² ○(M2) 北原 智輝¹, 島田 和宏²

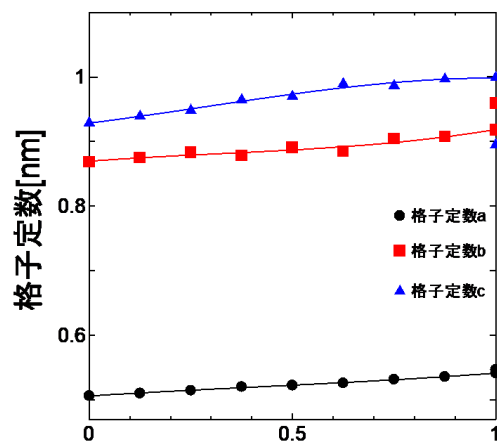
Kanto Gakuin Univ., °Tomoki Kitahara, Kazuhiro Shimada

E-mail: m20J2001@kanto-gakuin.ac.jp

【はじめに】近年、III族窒化物や炭化ケイ素よりも優れた半導体特性を持った酸化ガリウム(Ga₂O₃)が注目されている。Ga₂O₃ はパワーデバイスや深紫外 LED など様々な用途が考えられる材料である。空間群 Pna2₁ の対称性を持つ直方晶系 Sc₂O₃ は、Al₂O₃ や Ga₂O₃ よりも強い圧電性を持つことが予測されており^[1-3]、これらの材料の混晶で圧電性を調節することが可能であると考えられている。本研究では、Sc₂O₃ 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と圧電定数の組成依存性に関する計算を行った。

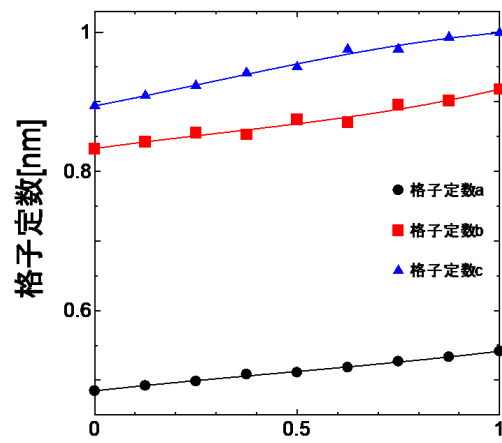
【計算方法】第一原理計算ソフト Quantum Espresso を用いて、密度汎関数理論に基づき電子状態を求めた。波動関数の切断エネルギーは 45[Ry] とし、擬ポテンシャルは PAW ポテンシャルを使用し、交換相関汎関数は Wu-Cohen 型の GGA 汎関数を用いた。2×1×1 単位胞の Al(Ga) 原子の一部を Sc 原子に置き換えることでモル分率を変化させ計算を行った。原子配置は準ランダム配置とした。

【計算結果】図 1 と図 2 はそれぞれ (Sc_xGa_{1-x})₂O₃ および (Sc_xAl_{1-x})₂O₃ の組成比に対する格子定数の変化である。格子定数と各組成比の関係はおおよそベガード則に従う結果となった。また、(Sc_xGa_{1-x})₂O₃ および (Sc_xAl_{1-x})₂O₃ の組成比と弾性定数および圧電定数の関係はベガード則に従わない結果となった。



Scの組成比 x

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



Alの組成比x

Fig. 2 lattice constants of (Sc_xAl_{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 et al., 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。