

第一原理計算による圧電材料特性評価

Estimation of piezoelectric material properties by first-principles calculation

住友金属鉱山 中岡 宏徳

Sumitomo Metal Mining, Hironori Nakaoka

E-mail: hironori.nakaoka.e7@smm-g.com

スマートフォンをはじめとする通信機器では、表面弾性波(SAW: Surface Acoustic Wave) フィルタが利用されている。SAW フィルタの基板には LiNbO_3 (LN)、 LiTaO_3 (LT) (Fig.1(a)) などの圧電材料が使用されているが、今後はさらなる高周波帯での利用や周波数帯の異なる複数の SAW フィルタをデバイスに搭載した多バンド利用などが想定されるため、既存材料の特性改善や新規の圧電材料が求められている。

SAW フィルタ特性を表す重要な指標は表面弾性波速度と電気機械結合係数である。前者はフィルタとして動作する周波数帯に関係し、後者は電気エネルギーと音響エネルギー変換効率に関係するが、ともに結晶材料のカット面、カット角に依存するため特性の良いカットが利用される。

LN では Y 軸に垂直な結晶面(Y-cut 面)を X 軸回りに回転させた回転 Y-cut(RY) (Fig.1(b)) が利用されている。

表面弾性波速度と電気機械結合係数は結晶材料の弾性定数や圧電応力定数、誘電率、密度により決まっているため、第一原理計算によりこれらを算出することで元素ドープした LN の特性を予測する取り組み[1]が行われているが、SAW フィルタとしての特性を予測するには、カット面とカット角を考慮した解析が必要である。

そこで本研究では、第一原理計算により弾性定数や圧電応力定数、誘電率、密度を算出し、カット面とカット角を考慮して文献[2]の手法で LN の表面弾性波速度と電気機械結合係数を求めた。Fig.2 は第一原理計算と実験値[3]を用いて算出した LN の表面弾性波速度(Fig.2 (a))と電気機械結合係数(Fig.2(b))の比較結果である。横軸は回転 Y-cut の角度である。第一原理計算と実験値から得られる計算結果には若干のずれが見られるものの、角度依存性を含めよく一致している。本手法を用いることで SAW フィルタの特性が予測可能となり、第一原理計算による新規圧電材料探索も可能となる。

[1] 中村 馨, 樋口 貞雄, 緒方 隆志 電力中央研究所報告 Q10013 (2011).

[2] IEEE TRANSACTIONS ON SONICS AND ULTRASONICS,
VOL. SU-15, NO. 4, OCTOBER 1968 J.J Campbell and W.R. Jones

[3] IEEE Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control 46(5), 1315-1323, 1999 J. Kushibiki et al.

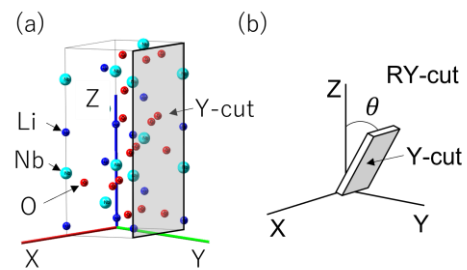


Fig.1 (a) crystal structure of LiNbO_3 . (b)

rotated Y-cut.

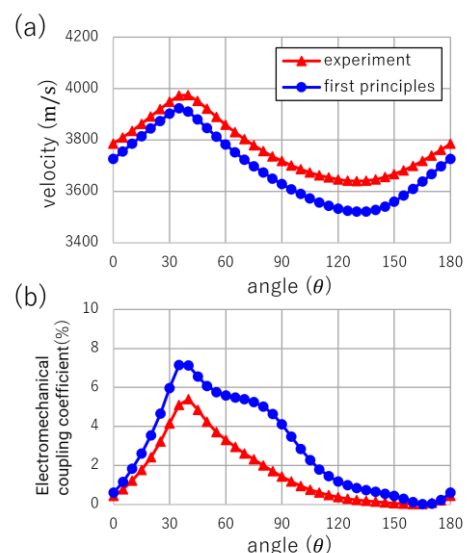


Fig.2 piezoelectric material properties of

LiNbO_3 . (a) SAW velocity and

(b) electromechanical coupling coefficient.