

## 第一原理計算による $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の圧電特性評価

### First-principles calculation of piezoelectric properties of $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$

産業技術総合研究所<sup>1</sup>, 九州大学<sup>2</sup> ◯(M1)川名惣一郎<sup>2</sup>, 平田研二<sup>1</sup>, 徐超男<sup>1,2</sup>

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology<sup>1</sup>, Kyushu University<sup>2</sup>,

◯Soichiro KAWANA<sup>1,2</sup>, Kenji HIRATA<sup>1</sup>, Chao-Nan XU<sup>1,2</sup>

E-mail: [cn-xu@aist.go.jp](mailto:cn-xu@aist.go.jp)

【緒言】 応力発光体は機械刺激のエネルギーに 관련된 発光を示す機能性材料である。その中で近赤外領域の発光を示す応力発光体は、明環境下や生体組織内の利用に優れており、盛んに研究されている<sup>[1]</sup>。本研究グループでは、Li と Nd を添加した  $\text{ZnO}(\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}:\text{Nd}^{3+})$  が近赤外応力発光機能を発現することを見出している。圧電性を有する本材料は Multi-piezo 材料の一種であり、圧電特性と応力発光特性には相関性があることが報告されている<sup>[2]</sup>。したがって応力発光特性の観点から、 $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}:\text{Nd}^{3+}$  の圧電特性は重要な性能指標と考えられる。しかし、Nd が添加されていない  $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  では圧電特性の系統的な調査が少なく不明な点が多い。近年、材料科学分野では電子論計算に基づいた性能評価が盛んであり、圧電特性の詳細な調査に有効な手法であると考えられる。そこで本研究では、 $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  の圧電特性を第一原理計算で調査した。

【計算方法】 第一原理計算において用いた  $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  固溶体の結晶構造モデルは Special Quasi-random Structure 法を用いて作成した。この際、スーパーセルの原子数は 72 個とした。そして、第一原理計算ソフト Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP) を用いて結晶構造の最適化を行った後、弾性テンソル  $C_{ij}$  と圧電テンソル  $e_{ij}$  をそれぞれ Density Functional Perturbation Theory 法と Frozenphonon 法により求めた。また、Li-O, Zn-O の結合性を Crystal Orbital Hamiltonian Populations(COHP)により評価した。

【結果および考察】 図 1 は  $0 \leq x \leq 0.333$  における  $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  の弾性定数  $C_{33}$  の計算結果を示している。ZnO については実験結果と整合しており、計算結果の信頼性が高いと考えられる。 $C_{33}$  は Li 添加量に対して、低下することが確認された。一方、 $e_{33}$  は  $x=0.16$  まで大きく変化せず、0.2 以降で高くなった。 $C_{ij}$  と  $e_{ij}$  の計算結果を用いて  $d_{33}$  を計算したところ、Li 添加濃度に対して大きな変化はなかった。 $C_{33}$  が軟化した原因としては、結合特性の変化が重要な要因と考えられる。そこで、 $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$

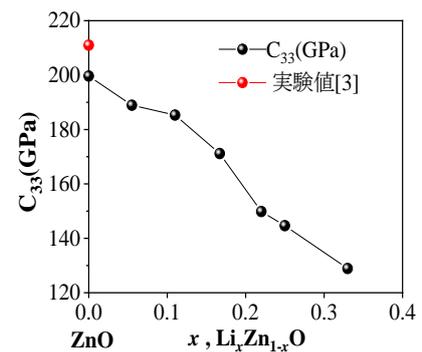


図 1  $\text{Li}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  の弾性定数  $C_{33}$  の計算結果

の結合性を COHP 解析で調査した。発表当日では、解析結果と計算結果から  $C_{33}$  の低下を考察し、原子間における結合性の観点から圧電特性向上について議論する予定である。

【参考文献】 [1] D. Tu *et al.*, *Adv. Mater.*, 32, 1908083 (2020). [2] H. Hara *et al.*, *J. Ceram. Soc.*, 128, 518 (2020). [3] D.F. Nelson, editor, *Piezoelectric Pyroelectric, Related Constants*. (Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 1993).