

分類	ナノシミュレーション
キーワード	第一原理計算、圧電応答
開発者	山本武範、宇田 毅、大野隆久
作成年月	2007年6月
コード名	UVSOR:PIEZO
使用言語	Fortran90

◇第一原理法に基づく誘電応答解析プログラム UVSOR：圧電応答の解析

UVSOR (Universal Virtual Spectroscope for Optoelectronics Research) は、電子及び光デバイス用材料の誘電応答を第一原理擬ポテンシャル法に基づき原子レベルで計算するプログラムです。UVSOR の拡張機能として、圧電応答の解析機能を追加しました。圧力を加えて物質を歪ませることにより電圧が生じることを圧電応答といいます。また、その逆現象のことを逆圧電応答といいます。大きな圧電応答を示す物質は圧電材料とよばれ、われわれに身近な機器に用いられています。携帯機器の動力をになう超音波モータや、時計や、コンピュータなどに用いられる水晶発信器、インクジェットプリンターのヘッドなどがその例です。機械要素部品をシリコン基板上に集積させたデバイス (MEMS) の駆動装置にも用いられています。

UVSOR の圧電応答の解析機能を使い、大きな圧電応答を示す材料を探索することにより、次世代デバイスの開発を支援することが期待できます。

◇プログラムの概要

圧電定数は内部ひずみに依存しない部分 (イオン固定項) と内部ひずみに起因する部分 (内部ひずみ項) とに分けて計算します。イオン固定項は内部座標を固定して結晶を歪ませることにより得られる分極から求めます。その分極は結晶の電子状態のベリー位相から計算します。内部ひずみ項の計算には、格子系の誘電応答の解析の際に用いるボルン有効電荷と格子振動モードに加えて、ひずみ-力結合定数が必要となります。ひずみ-力結合定数とは、内部座標を固定して結晶を歪ませたときに、原子に作用する力とひずみとの線形関係の係数です。大雑把に言い表すと、内部ひずみ項はボルン有効電荷とひずみ-力結合定数の積を振動数で割ることにより得られます。

◇プログラムの特徴

- (1) 入力ファイルを PHASE と共用している。このため、対象とする物質の解析を容易に行うことができる。
- (2) 電子系と格子系の誘電応答の解析の後に、続けて圧電応答の解析ができる。
- (3) ノルム保存型及びウルトラソフト型擬ポテンシャルを用いることができる。

◇計算例

UVSOR の圧電応答解析機能を用いて、ニオブ酸リチウム (LiNbO_3) 結晶とタンタル酸リチウム (LiTaO_3) 結晶の圧電定数の計算結果を紹介する。

両結晶ともキュリー温度以上では空間群が $R\bar{3}c$ の常誘電体であり、圧電応答を示さない。キュリー温度以下になるとリチウム原子とニオブ (タンタル) 原子が c 軸に沿って変位し、強誘電体となる。

強誘電相の空間群は $R3c$ であり、圧電定数 e_{ij} の独立成分は e_{22} 、 e_{31} 、 e_{33} 、 e_{15} である。計算結果をイオン固定項と内部歪み項に分けて表 1 に示す。二項の合計値は実験値と一致している。注目すべきはニオブ酸リチウムとタンタル酸リチウムの e_{31} 成分の符号が異なることであるが、それは内部歪み項の符号の違いによるものであることが本計算により明らかとなった。

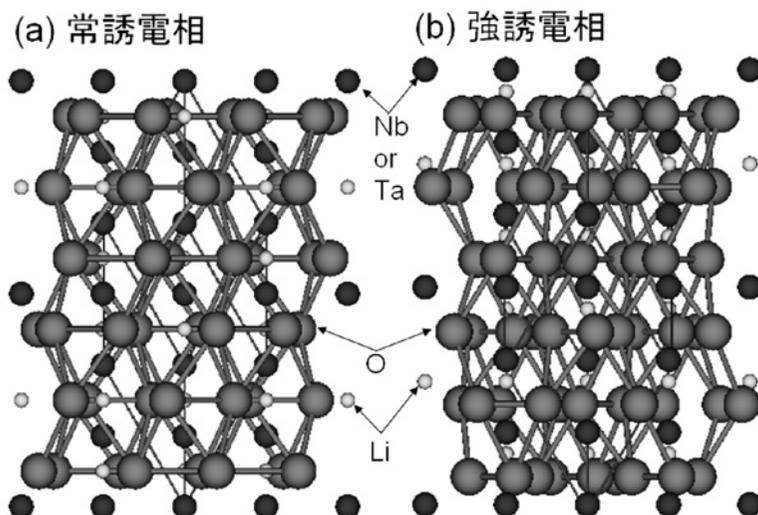


図 1 LiNbO_3 (LiTaO_3) の(a)常誘電相と(b)強誘電相の構造

表 1 ニオブ酸リチウムとタンタル酸リチウムの圧電定数 (C/m^2)

Material		Clamped-ion	Internal-strain	Total	Exp.
LiNbO_3	e_{22}	-0.18	2.65	2.46	2.37-2.5
	e_{31}	-0.25	0.27	0.02	0.2-0.35
	e_{33}	0.67	0.84	1.51	1.3-1.80
LiTaO_3	e_{22}	-0.12	1.74	1.62	1.67
	e_{31}	-0.20	-0.19	-0.38	-0.38
	e_{33}	0.45	0.85	1.30	1.09