

第一原理バンド計算による

強誘電性高分子ポリフッ化ビニリデン I 型結晶の構造と電子状態

○伊藤 哲¹、遠藤一央²、古川猛夫¹、矢島博文¹¹ 東京理科大学大学院 総合化学研究科 (〒162-8601 東京都新宿区神楽坂 1-3)² 東京理科大学 界面科学研究センター

【緒言】

ポリフッ化ビニリデン(PVDF)のI型結晶(延伸分極膜)は秩序-無秩序型の高分子強誘電体として知られている[1-4]。強誘電体の本質は自発分極の存在、および電界による分極反転にある。ここで、自発分極量は古典的には体積あたりの永久双極子モーメントとして定義される。 $(P_s = \mu / V, \mu = \sum q \cdot r)$ [5]

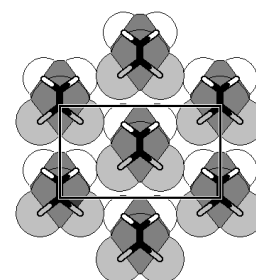


Fig. 1 Structure of PVDF Crystalline Form I.

そこで我々は PVDF の自発分極(P_s)を *ab-initio* 計算により求めるべく原子の位置(\mathbf{R})、格子定数(a, b, c , および体積 V)を綿密に求め、そして電荷(q)についての知見を深めるべく $E-k$ 分散構造を探求した。

【方法】

我々は、Crystal 06 [6] を用いて 3 次元の Born von Kármán の境界条件(あるいは周期境界条件 PBC)の下、第一原理バンド計算を行い PVDF I 型結晶(Orthorhombic $Cm2m$)の格子定数、および平衡の原子配置を各種手法(RHF 法、DFT、および hybrid DFT / 各種基底系)で求めた。

【結果】

Hybrid DFT (PBE0/mod. cc-pVTZ) により、XRD による実験結果とつじつまの合った格子定数、原子配置を得た[4]。化学結合パラメータの詳細および $E-k$ 分散を含む電子構造についての議論を行う。

参考文献

- [1] T. Furukawa, *Phase Transitions*, **18**, 143 (1989).
- [2] H. Kawai, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **8**, 975 (1969).
- [3] T. Furukawa, M. Date, and E. Fukada, *J. Appl. Phys.*, **51**, 1135 (1980).
- [4] 伊藤 哲、遠藤一央、古川猛夫、矢島博文、『高分子論文集』(to be published).
- [5] R. Resta, *J. Phys.: Condens. Matter*, **12**, R107 (2000) および関連論文.
- [6] Theoretical Chemistry Group of the University of Torino: CRYSTAL06, (<http://www.crystal.unito.it/>, Italy, 2007).