第一原理電子状態計算による $Mg_{2x}Nb_xAl_{1-3x}N$ の圧電定数解析

First-principles analysis of piezoelectric constants of $Mg_{2x}Nb_xAl_{1-3x}N$

アスムス [1]　○宇佐見 護 [1]，甲賀 淳一朗 [1]，田上 勝規 [1]，野原 善郎 [1]

ASMS Co., Ltd. [1], ○Mamoru Usami[1], Junichiro Koga[1], Katsunori Tagami[1], Yoshiro Nohara[1]

E-mail: usami@asms.co.jp

【諸言】

昨年、窒化アルミニウムに Nb と Mg を添加することにより、圧電定数が 4 倍以上に増大することが報告された[1]。この現象を電子状態計算の立場から解明することに成功したので報告する。

【計算手法】

第一原理バンド計算ソフトウェア PHASE/0 を用いて[2]、平面波基底を採用した密度汎関数法に基づく擬ポテンシャル電子状態計算を行った。電子状態から圧電定数を求める手順はベリー位相分極理論に基づき確立されているので[3]、同手法に則って計算した。

原則として、擬ポテンシャル法の計算では原子配置を具体的に与えなければならない。元素がランダムに配置している場合には、複数の原子配置を考慮して、それらの平均的な描像を抽出することが望ましいが、計算量が多くなる問題がある。そこで本研究では、Mg と Al が周期表で隣り合う元素であることに着目して仮想結晶近似[4]を適用し、Mg と Al の配置を平均（均一）化した。そして、原子配置を添加濃度につき一つに限定することにより、計算負荷を軽減した。例として、$Mg_{0.375}Nb_{0.1875}Al_{0.4375}N$ の原子配置を Fig. 1 に示す。絶縁性を保つために、Nb 一つにつき、Mg 二つを Al と置換した。緑球が Mg と Al の中間の性質を持つ「原子」である。

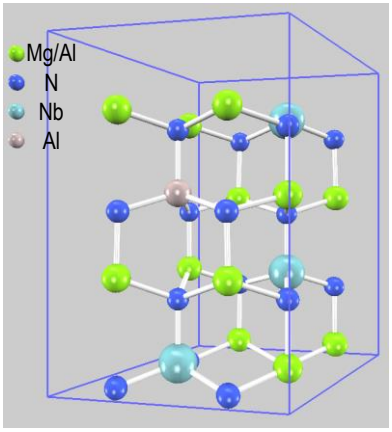


Fig. 1 Crystal structure of $Mg_{0.375}Nb_{0.1875}Al_{0.4375}N$.

【結果】

圧電定数 d_{33} の Mg+Nb 置換量依存性を Table I に示す。Mg ならびに Nb を添加することによる圧電定数の増大を、定量的に再現することに成功した。格子定数の置換量依存性についても実験とよく合う結果を得ており、弾性定数の計算結果と併せて、講演で報告する。

Table I　Calculated piezoelectric constants of $Mg_{2x}Nb_xAl_{1-3x}N$.

Total amount of substitution ($3x$)	Piezoelectric Constants d_{33} (pC/N)
0.0	4.9
0.375	10.5
0.563	19.9

【参考文献】

[1] 上原、重本、長瀬、曾田、梅田、秋山、第 63 回応用物理春季学術講演会講演予稿集 19p-P9-2 (2016).
[2] T. Yamamoto, T. Uda, T. Yamasaki, and T. Ohno., Phys. Lett. A **373**, 3989 (2009).
[3] D. Vanderbilt, J. Phys. Chem. Solids **61**, 147 (2000).
[4] L. Boeri, J. Kortus, and O. K. Andersen, Phys. Rev. Lett. **93**, 237002 (2004); K. W. Lee and W. E. Pickett, Phys. Rev. Lett. **93**, 237003 (2004); Y. Ma, J. S. Tse, T. Cui, D. D. Klug, L. Zhang. Y. Xie, Y. Niu, and G. Zou, Phys. Rev. B **72**, 014306 (2005).

© 2017年 応用物理学会