

Mg+Me(Me=Cr,Mo,W)添加 AlN における圧電定数の第一原理計算

First-principles calculation of piezoelectric constant in

Mg+Me (Me=Cr, Mo, W) doped AlN

産総研¹, °平田 研二¹, 山田 浩志¹, Anggraini Sri Ayu¹, 上原 雅人¹, 秋山 守人¹

AIST¹, °Kenji Hirata¹, Hiroshi Yamada¹, Sri Ayu Anggraini¹, Masato Uehara¹, Morito Akiyama¹

E-mail: kenji.hirata@aist.go.jp

【緒言】窒化アルミニウム(AlN)圧電体はセンサーや周波数フィルターとして応用されている。今後の IoT 社会の実現を見据え、センサーとしての高性能化や通信方式の高周波化のために、さらなる圧電特性の向上が望まれている。その手段の一つとして不純物元素を AlN に添加する方法が挙げられる。これまでに Mg+Ti や Mg+Nb 添加 AlN など、Mg と第 4、5 族の遷移金属を組み合わせることで添加することにより圧電特性の向上が得られている^[1-3]。Mg+Nb 添加 AlN においては、遷移金属の Nb が複数の価数となり、特徴的な電荷の変動が報告されている。そこで本研究では、複数の価数を取り得る第 6 族元素に着目し、Mg+Me (Me=Cr, Mo, W)添加 AlN において圧電定数を第一原理計算により調査した。

【計算方法】ウルツ鉱相（固溶体）における原子配置を SQS 法により決定した。スーパーセルの大きさは $4 \times 4 \times 2$ (128 atoms) とし、第一原理計算で結晶構造を最適化した。圧電応力テンソルおよび弾性テンソルの計算にはそれぞれ、DFPT 法および Frozen Phonon 法を利用した。

【計算結果】Fig. 1 は Mg+Me (Me=Cr, Mo, W)添加 AlN と Sc 添加 AlN^[4]における圧電定数 d_{33} の計算結果を示している。Mg+Cr 添加では d_{33} はほとんど向上しなかったが、Mg+Mo および Mg+W 添加では、添加量の増加に伴い顕著な圧電定数の向上が確認された。特に Mg+Mo 添加 AlN では高濃度の組成域において、Sc 添加 AlN と同程度の d_{33} が得られた。ウルツ鉱型結晶構造において d_{33} は圧電応力定数 e_{33} と弾性定数 C_{33} より $d_{33}=e_{33}/C_{33}$ と近似される。これまでの Sc 添加 AlN における先行研究では、 e_{33} の上昇と C_{33} の低下により d_{33} が高くなると理解されてきた^[4]。本研究により見出された

Mg+Mo および Mg+W 添加 AlN においても、 e_{33} の上昇と C_{33} の低下により d_{33} が高くなっており、Sc 添加 AlN と同様の機構で圧電定数が向上するものと考えられる。

【参考文献】 [1] M. Akiyama et al., Adv. Mater. 21(2009) 593. [2] M. Uehara et al., Appl. Phys. Lett. 111, 112901 (2017). [3] Y. Iwazaki et al., Appl. Phys. Express, 8(2015), 061501. [4] K.R. Talley et al., Phys. Rev. Materials. 2, 063802 (2018).

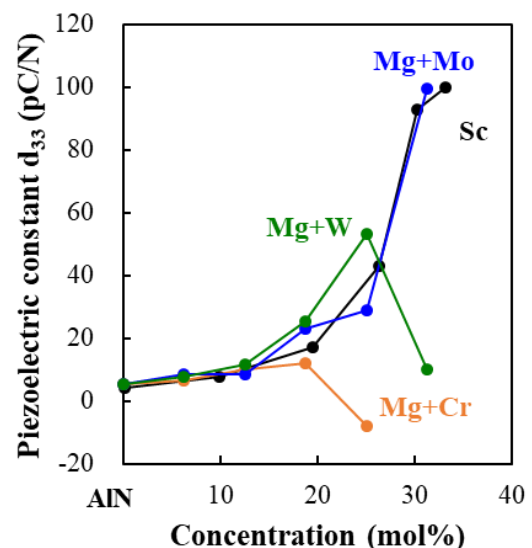


Fig. 1 The calculated piezoelectric constants d_{33} of several AlN-based compounds.