第一原理計算による窒化物圧電体 Mg,Nb 共添加 AlN の物性評価

Physical Properties Evaluation of Piezoelectric Nitride Mg,Nb Codoped AlN by First-principles Calculation

九大総理工 [1]，産総研 [2] ○(M1C)森 雄登 [1]，平田 研二 [2]，Anggraini Sri Ayu[2]，秋山 守人 [2]，上原 雅人 [1,2]，山田 浩志 [1,2]

Kyushu Univ. [1], AIST [2], ○(M1)Yuto Mori[1], Kenji Hirata[2] , Sri Ayu Anggraini[2], Morito Akiyama[2], Masato Uehara[1,2], Hiroshi Yamada[1,2]

E-mail: hiro-yamada@aist.go.jp

【緒言】

AlNはウルツ鉱型結晶構造をとる圧電体として知られており、高いQ値、良好な温度安定性から通信端末用のFBAR型BAWフィルタに使用されている。通信方式が5Gに進化するに伴い、広帯域低損失フィルタが求められ、AlNの更なる圧電性向上が要求されている。これまでに、AlNの圧電性向上を目的に様々な単独元素添加が報告されている。その中でも、産総研の秋山らはSc添加による飛躍的な圧電性向上を報告した。[(1)]しかし、Scがレアアースであるため、代替元素の探索が行われている。現在、AlNへの複数元素添加が行われ、産総研の上原らはMg+Nb共添加による圧電性向上を報告した。[(2)]Sc添加に関しては多数の第一原理計算の結果が報告されており、ウルツ鉱結晶構造相とBN型結晶構造相の相転移に伴う弾性定数C_{33}の減少が圧電性向上に起因していると考えられている。[(3)]一方、Mg+Nb共添加においては知見が少なく、どのような物性が圧電性向上に寄与しているのか詳細は不明である。本研究では、Mg+Nb共添加AlNにおける圧電性向上機構を明らかにすることを目的とし、第一原理計算を用いて$Mg_xNb_yAl_{1-x-y}N$ (x/y = 1)におけるウルツ鉱結晶構造の構造変化と各物性値を調査した。

【計算方法】

Mg+Nb共添加AlN固溶体結晶構造のモデル作成にはSQS(Special quasi-random structure)法を適用し、MgとNbの比は1と固定した。Mg+Nb含有量を0から100 at.%まで変えたSQSモデルを作成し、第一原理計算により各モデルの構造最適化計算を行った。さらに、弾性定数、圧電テンソルの計算を行った。

【結果および考察】

第一原理計算による構造最適化の結果から、ウルツ鉱型結晶構造において Mg+Nb 添加量の増加に伴い、a 軸の増加、c 軸の減少、c/a の減少が確認され、上原らの実験結果と同様の傾向が得られた。また、c/a の急激な減少を示した Mg+Nb 添加量 60 at.%近傍では、Sc 添加と同様にウルツ鉱型結晶構造(極性構造)から BN 型結晶構造(無極性構造)に相転移することが示唆された。Mg+Nb 添加量に対する弾性定数 C_{33}、圧電テンソル e_{33} を Fig. 1(a)、圧電定数 d_{33} を Fig. 1(b)に示す。Mg+Nb 添加量の増加に伴い弾性定数 C_{33} は減少し、Mg+Nb 添加量 50 at.%で最小となった。圧電テンソル e_{33} は弾性定数 C_{33} と対照的な挙動を示し、圧電定数 d_{33} は Mg+Nb 添加量 50 at.％で最大となった。これらの結果より、Mg+Nb 共添加 AlN においても Sc 添加の場合と同様に、ウルツ鉱結晶構造相と BN 型結晶構造相の相転移に伴う弾性定数 C_{33} の減少が圧電性向上に起因していることが示唆された。

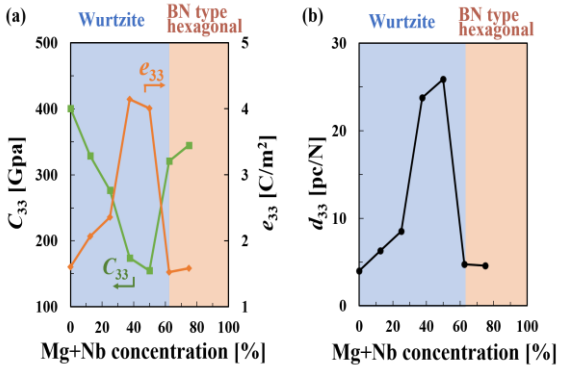


Fig. 1. (a) Elastic constants C_{33} and piezoelectric tensor e_{33} (b) piezoelectric coefficients d_{33} of $Mg_xNb_yAl_{1-x-y}N$ (x/y = 1) as a function of Mg+Nb concentration.

【参考文献】

[1] M. Akiyama *et al.*, Adv. Mater. 21(2009) 593.
[2] M. Uehara *et al.*, Appl. Phys. Lett. 111(2017)
[3] K. R. Talley *et al.*, phys. Rev. Mater. 2, 063802(2018)

© 2019年 応用物理学会