第一原理計算による Zr 添加 AlN の圧電性に関する研究

Study on Piezoelectricity of Zr-Doped AlN by First-Principles Calculation

九大総理工 [1]，産総研 [2]　○(M2) 江藤 和也 [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]　°Kazuya Eto[1], Kenji Hirata[2], Sri Ayu Anggraini[2], Morito Akiyama[2],
Masato Uehara[1, 2], Hiroshi Yamada[1, 2]

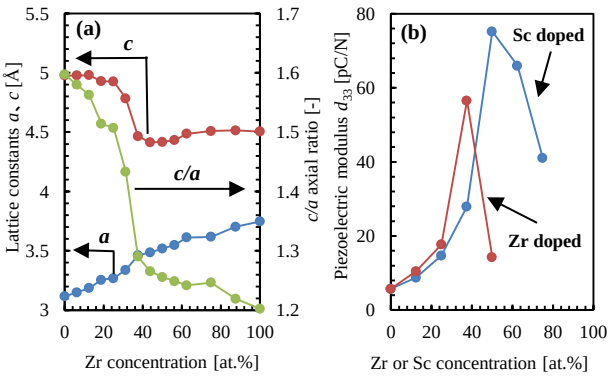
E-mail: hiro-yamada@aist.go.jp

【緒言】ウルツ鉱型結晶構造を有する AlN は、高い Q 値と良好な温度安定性を持つ圧電体として知られており、通信端末用の FBAR 型 BAW フィルタに使用されている。第 5 世代(5G)通信規格では、フィルタ性能のさらなる広帯域低損失化が要求されており、圧電性向上が課題である。これまでに様々な添加物による圧電性向上が報告されており、最も注目されているのが産総研の秋山らによって開発された Sc 添加 AlN である。[1] Sc 添加による圧電性の飛躍的な向上が実現されたが、Sc 金属は高価であり産出国も限られていることから、代替元素が求められている。本研究では、ScN と同じ岩塩型結晶構造で格子定数が最も近い ZrN に着目し、代替元素としての Zr 添加の可能性を計算機シミュレーションにより調査した。

【計算方法】Zr 添加 AlN および Sc 添加 AlN の固溶体結晶構造モデルの作成には SQS（Special quasi-random structure）法を適用し、Zr（Sc）添加量 0 at.%～100 at.%で作成した。スーパーセルのサイズは、4×4×2 とした。各 SQS モデルについて第一原理電子状態計算ソフト CASTEP および VASP を用い、構造最適化、弾性テンソル、圧電テンソルの計算を行った。

【結果および考察】Zr 添加 AlN の格子定数の Zr 添加量依存性を Figs.1(a)に示す。格子定数比 *c/a* は Zr 添加量の増加と伴に指数関数的に急激な減少を示し、38 at.%以上においてほぼ一定となった。これは Sc 添加 AlN でも観察されている。*c/a* はウルツ鉱結晶型構造（*c/a* ≅ 1.6）を評価する際の指標となり、*c/a* ≅ 1.2 は窒化ホウ素類似六方晶構造（h-BN）であることを示す。*c/a* = 1.24～1.29 であることから、Zr 添加量が 38 at.%以上で h-BN 類似構造への相転移が示唆された。

次に、Zr 添加 AlN と Sc 添加 AlN の圧電歪み係数 d_{33} の計算結果の比較を Figs.1(b)に示す。Zr 添加 AlN の d_{33} は、Sc 添加 AlN と比較して、Zr 添加量 38 at.%まで高い値を示した。特に 38 at.%において飛躍的な向上を示した後、急激に減少した。Zr 添加量 38 at.%は h-BN 類似構造への相転移が示唆された添加量であり、この準安定相への相転移が d_{33} の飛躍的な向上に寄与したと考えられる。発表では、計算した各濃度におけるその他物性についても報告する。Sc 添加 AlN の傾向と比較し、それぞれの物性が圧電性に与える影響を報告する。



Figs.1 (a) Calculated lattice constants of Zr doped AlN,
(b) piezoelectric constants d_{33} of Sc, Zr doped AlN .

【参考文献】
1) M. Akiyama et al., Adv. Mater., 21, 593-596 (2009).