

第一原理計算による MgX 共添加 AlN(X=V, Nb, Ta)の圧電特性評価

Evaluation of Piezoelectricity in MgX Codoped AlN (X=V, Nb, Ta)

by First-principles Calculation

九大総理工¹, 産総研² ^{○(M2)}森 雄登¹, 平田 研二², Anggraini Sri Ayu², 秋山 守人²,

上原 雅人^{1,2}, 山田 浩志^{1,2}

Kyushu Univ.¹, AIST², ^{○(M2)}Yuto Mori¹, Kenji Hirata², Sri Ayu Anggraini², Morito Akiyama²,

Masato Uehara^{1,2}, Hiroshi Yamada^{1,2}

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

【緒言】AlNは圧電材料の一種であり、通信端末用のFBAR型BAWフィルタ等に使用されている。通信方式が 5Gへ進化するに伴いフィルタの広帯域低損失化が求められており、デバイスの仕様を満足させるためにはAlNの圧電性向上が要求されている。産総研の秋山らは、AlNにScを添加することにより飛躍的に圧電性が向上することを報告し^[1]、Sc添加AlNの高周波フィルタへの利用が進められている。しかしScは希少金属で高価なことから代替元素の探索が広く行われている。産総研の上原らは、AlNへのMgとNbの共添加による飛躍的な圧電性向上を報告した^[2]。このようにSc添加AlNに代わる材料として二元素共添加AlNが注目されており、Nbと同族のVやTaを用いたMg+V, Mg+Ta共添加AlNについても圧電性向上が報告されている^[3,4]。二元素共添加AlNにおける圧電性向上機構を明らかにすることは材料設計の指針を得るために重要である。Mg+Nb共添加AlNの圧電性については、ウルツ鉱構造から六方晶BN型構造への構造変化が関係しているという報告^[5]はあるが、Mg+V共添加AlNやMg+Ta共添加AlNについては詳細な報告はない。本研究では、第一原理計算を用いてMg+X共添加AlN (X=V, Nb, Ta) の圧電特性を評価し、Mgと共添加する元素 (V, Nb, Ta) の違いによる圧電特性への影響を調査した。

【計算方法】Mg+X 共添加 AlN 固溶体(0<Mg+X<100) 結晶構造(X=V, Nb, Ta)のモデル作成には Special quasi-random structure (SQS)法を適用した。その際、添加元素の比率は Mg 元素を二価、X 元素を五価と仮定して Mg/X =2 (X=V, Nb, Ta)とした。第一原理計算ソフト Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP)を用いて各モデルの構造最適化計算を行った後、弾性定数 C_{33} と圧電応力定数 e_{33} 、比誘電率 ϵ_{r33} の計算を行い、圧電歪み定数 d_{33} と圧電出力定数 g_{33} 、電気機械結合係数 k_{33}^2 を算出した。

【結果および考察】格子定数比(c/a)の変化から Mg+X 共添加 AlN (X=V, Nb, Ta)では、Mg+X 濃度が 56~76at.%でウルツ鉱構造から六方晶 BN 型構造への構造変化が生じることが確認された。Fig.1 に示すように、Mg+X 共添加 AlN(X=V, Nb, Ta)の d_{33} は構造変化が生じた組成域内で最大値をとる傾向にあった。この結果から、Mg+V, Mg+Ta 共添加 AlN についても Mg+Nb 共添加 AlN と同様、圧電性と構造変化に関係性があることが示唆された。また構造変化が生じた組成域内では、Mg+V 共添加よりも Mg+Nb、Mg+Ta 共添加の方が d_{33} が大きい傾向にあり、V と比べ Nb や Ta の方が圧電性向上に効果的だと考えられる。発表では他の圧電性能指標として g_{33} および k_{33}^2 の計算結果についても報告する。

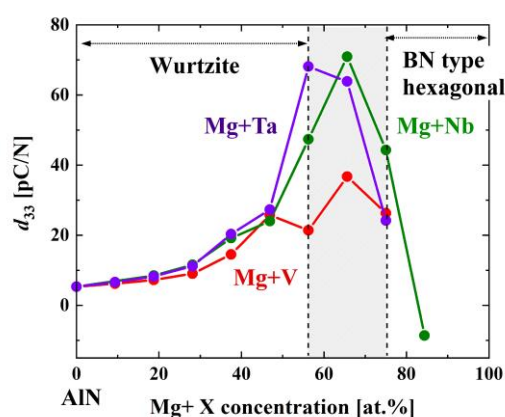


Fig.1. Piezoelectric strain constants d_{33} in MgX co-doped AlN (X=V, Nb, Ta).

【参考文献】

- [1] M. Akiyama *et al.*, Adv. Mater. 21(2009) 593.
- [2] M. Uehara *et al.*, Appl. Phys. Lett. 111(2017) 1129.
- [3] 太陽誘電株式会社、公開特許 JP 2013-219743 A (2013)
- [4] Anggraini ら、第 80 回応用物理学会秋季学術講演会講演予稿集 19a-PB1-4(2019)
- [5] 森ら、第 66 回応用物理学会春季学術講演会講演予稿集 10a-PA4-6(2019)