

第一原理電子状態計算による Zr 添加 AlN の圧電性向上のメカニズム解明

Clarification of the Piezoelectric Enhancement Mechanism in Zr-AlN by First-Principle Calculation



九大総理工¹ 産総研² ○(M1) 古田 紘雅¹, 江藤 和也¹, Anggraini Sri Ayu², 秋山 守人²

上原 雅人^{1,2}, 山田 浩志^{1,2}

Kyushu Univ.¹, AIST², ○(M1) Koga Furuta¹, Kazuya Eto¹, Sri Ayu Anggraini², Morito Akiyama²

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で極性を持つことからその c 軸配向膜は圧電体となる。現在、AlN 配向膜は通信端末用高周波フィルタ FBAR などの MEMS デバイスに使用されているが、デバイスの性能向上のためには AlN の圧電性能は不足しておりさらなる性能向上が必要とされている。

秋山らは、Sc を AlN に添加することで AlN の圧電歪み定数 d_{33} が飛躍的に向上することを報告した^[1]。しかし、Sc 金属元素は高価であることから代替元素が求められている。これまでに単独元素添加や二元素添加による圧電性向上が報告されているが、Sc 添加 AlN の d_{33} を超える報告はない。本研究グループでは、第一原理電子状態計算を用いて Zr の単独元素添加により低濃度領域において Sc 添加 AlN よりも高い圧電性を示し、 d_{33} の向上に圧電応力定数 e_{33} の増大が寄与することを報告した^[2]。しかし、Zr 添加 AlN に関し詳細な圧電性向上機構や d_{33} 以外の圧電性能に関する知見は明らかになっていない。本研究では第一原理電子状態計算を用いて Zr 添加 AlN の圧電向上機構の解明と圧電出力定数 g_{33} 、電気機械結合係数 k^2 の評価を行った。

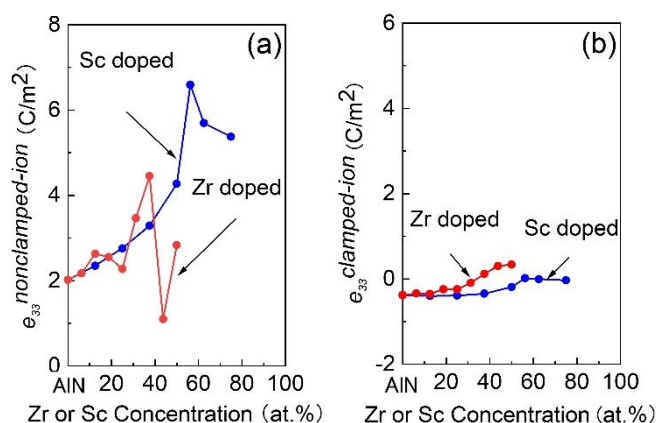
【計算方法】

Zr 及び Sc 添加 AlN のモデルを SQS(special quasi-random structure) 法を用いて作成した。その際にスーパーセルのサイズは $4 \times 4 \times 2$ (128 atoms) とした。各モデルにおける元素添加量は 0~100 at.% 範囲で Zr 添加は 6.25% 間隔、Sc 添加は 12.5% 間隔とした。構築した各モデルについて第一原理電子状態計算法を用いて構造最適化を行った。構造最適化後の構造を用いて混合エンタルピー ΔH_{mix} を求めた。次に、

圧電応力テンソル e_{ij} と比誘電率テンソル ϵ_{ij} を DFPT (Density Functional Perturbation Theory) 法で求め、弾性テンソル C_{ij} を FP (Frozen Phonon) 法で求めた。これらの計算結果を用いて、圧電出力定数 g_{33} ($g_{33}=e_{33}/\epsilon \cdot C_{33}$)、電気機械結合係数 k^2 ($k^2=e_{33}^2/\epsilon \cdot C_{33}$) を計算した。

【結果及び考察】

圧電応力定数 e_{33} は $e_{33}^{nonclamp}$ と e_{33}^{clamp} の二項の和で表される。Zr 及び Sc 添加 AlN における $e_{33}^{nonclamp}$ 、 e_{33}^{clamp} の添加元素による濃度依存性の結果を Figs.1 に示す。両添加元素の濃度依存性を比較すると、Zr 添加 AlN では $e_{33}^{nonclamp}$ 、 e_{33}^{clamp} 両項の増加が e_{33} 増大に寄与しているのに対し、Sc 添加 AlN では e_{33} 増大に $e_{33}^{nonclamp}$ のみが寄与していることが確認された。当日の発表では圧電出力定数 g_{33} 及び電気機械結合係数 k^2 についても報告を行う。



Figs.1 The Zr (Sc) concentration dependences on piezoelectric strain constant (a) nonclamped-ion term (b) clamped-ion term.

【参考文献】

- [1] M. Akiyama *et al.*, Adv. Mater., 21, 593-596 (2009).
- [2] 江藤ら、第 66 回応用物理学会春季学術講演会公演予稿集 10a-PA4-6(2019).