

Yb 添加による AlN と GaN 薄膜の圧電特性向上の理論解明

Understanding the improvement of piezoelectric properties for YbN-added AlN and GaN films

早大 GCSE¹, 早大先進理工² °賈 軍軍¹、柳谷 隆彦²

GCSE, Waseda University¹, School of Advanced Science and Engineering, Waseda University²

°Junjun Jia¹, Takahiko Yanagitani²

E-mail: jia@aoni.waseda.jp

【研究背景】ウルツ鉱型結晶構造を持つ AlN に Sc 添加により、圧電特性が飛躍的に向上することで、最近ではスマートフォンに搭載されている BAW フィルタとして実用化され始めている。しかし、Sc 金属は高価であることから、新規 AlN や GaN 系圧電薄膜材料の実験・計算探索が盛んに行われている。柳谷グループから Yb 添加により AlN と GaN 薄膜の電気機械結合係数 k_t^2 の増幅が報告された。本研究では、第一原理計算を用いて、Yb 添加 AlN と GaN の圧電特性を計算し、その電気機械結合係数の増幅を理論的に解明することを目的としている。

【計算手法】対象となる物質は YbAlN と YbGaN である。Yb はウルツ鉱型 AlN または GaN 格子中のカチオンを置換し、SQS 法 (Special Quasirandom Structure Model) により Yb 原子の空間配置を決定した。スーパーセルの大きさは $3 \times 3 \times 2$ (72 atoms) とし、第一原理計算で結晶構造の最適化を行った。その後、圧電係数および弾性率の計算にはそれぞれ、DFPT 法および Frozen Phonon 法を用いて計算した。

【結果】図 1、Yb 濃度が変化させた YbAlN の電気機械結合係数 k_{33}^2 の実験値と理論値を比較している。Yb 添加量 ($x = \text{Yb}/(\text{Yb} + \text{Al})$) が 30% 以下の領域では、実験値と計算値とよく一致している。理論計算により、Yb 添加量の増加に伴い、 k_{33}^2 を顕著に増加することが確認された。 $x = 33\%$ において、 k_{33}^2 の最大増幅が 18% になり、ScAlN と同程度の値になり、有望な新規圧電薄膜材料と考えられる。詳細なメカニズムは当日に報告する。

【参考文献】

- [1] T. Yanagitani and M. Suzuki, APL, 104, 082911 (2014), and US Patent Application 20190089325.
- [2] J. Jia, and T. Yanagitani, arXiv:2102.01581.

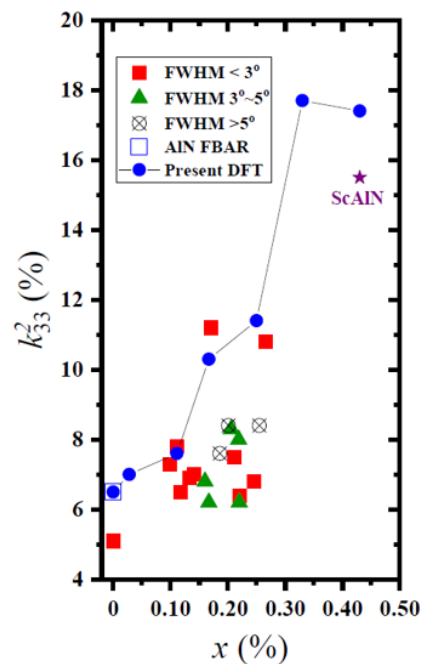


Fig. 1. Calculated k_{33}^2 vs measured k_{33}^2 for YbAlN films. The smaller is the rocking curve FWHM, the stronger is the c-axis orientation. ($x = \text{Yb}/(\text{Yb} + \text{Al})$)