Mg と遷移金属を同時添加した AlN における圧電特性の調査

Systematic investigation on piezoelectric property of Mg and transitional element simultaneously added into AlN

産総研 [1]，　○平田 研二 [1]，　山田 浩志 [1]，上原 雅人 [1]，Anggraini Sri Ayu[1]，秋山 守人 [1]，

AIST [1], ○Kenji Hirata[1], Hiroshi Yamada[1], Masato Uehara[1], Sri Ayu Anggraini[1], Morito Akiyama[1]

E-mail: kenji.hirata@aist.go.jp

【緒言】

窒化アルミニウム(AlN)に異種元素を添加した固溶体薄膜では圧電特性が向上するため、センサや高周波フィルタなどへの応用が盛んに進められている。なかでも、高周波フィルタとして実用化された Sc 添加 AlN(ScAlN)がその代表例として挙げられる。一方、希少元素の使用低減や、より高い圧電特性を得るために、複数の異種元素を同時添加した AlN 薄膜の作製も検討されている。これまでに、Mg と 4 族や 5 族遷移金属を同時添加した AlN 薄膜で顕著な圧電特性の向上が報告され、注目を集めている[2,3]。しかし、Mg と他の遷移金属を添加した際の圧電特性は調査事例が少なく不明な点が多い。したがって AlN への添加元素の指針として、Mg と遷移金属(X)の組合せが圧電特性に与える影響を明らかにすることは重要といえる。本研究では、Mg と X を同時添加した AlN(MgXAlN)を対象に、第一原理計算により系統的に圧電特性を評価した。

【計算方法】

ウルツ鉱型結晶構造のスーパーセルの大きさを 2×2×2 (32 原子)とし、$MgXAl_{14}N_{16}$ (金属サイト：Mg+X=12.5 mol%)の結晶構造モデルを作成した。第一原理計算により結晶構造の最適化を行い、DFPT 法で圧電応力テンソル、Frozen Phonon 法で弾性テンソルを計算した。

【計算結果】

図 1 は MgXAlN において、圧電応力定数 e_{33} や弾性定数 C_{33}、圧電定数 d_{33} を計算した結果である。ほとんどの Mg と X の組合せで、AlN に比べて e_{33} が増大、C_{33} は低下した。d_{33} は全ての MgXAlN で AlN よりも高くなり、これまでに高い圧電特性が報告されている ScAlN と同等以上の添加元素の組合せも見出された。d_{33} は(1)式のように近似され、e_{33} の増大と C_{33} の低下は d_{33} を増大させる。

$$d_{33} \fallingdotseq e_{33}/C_{33} \quad (1)$$

先行研究の理論計算では、格子軟化によって C_{33} が低下するだけでなく e_{33} も増大させることが指摘されている[4]。したがって、MgXAlN においても同様の機構で圧電特性が向上していると考えられる。さらに、X が第 5 および第 6 周期遷移金属の場合、原子番号の増加に伴い系統的に e_{33} や C_{33} が変化し、d_{33} も同様の傾向を示した。ゆえに、X の価電子数が圧電特性に影響を与えていることが示唆された。一方、X が第 4 周期遷移金属の場合では、圧電特性に関する各物性値は原子番号に対して系統的に変化せず、価電子数との関係は確認されなかった。

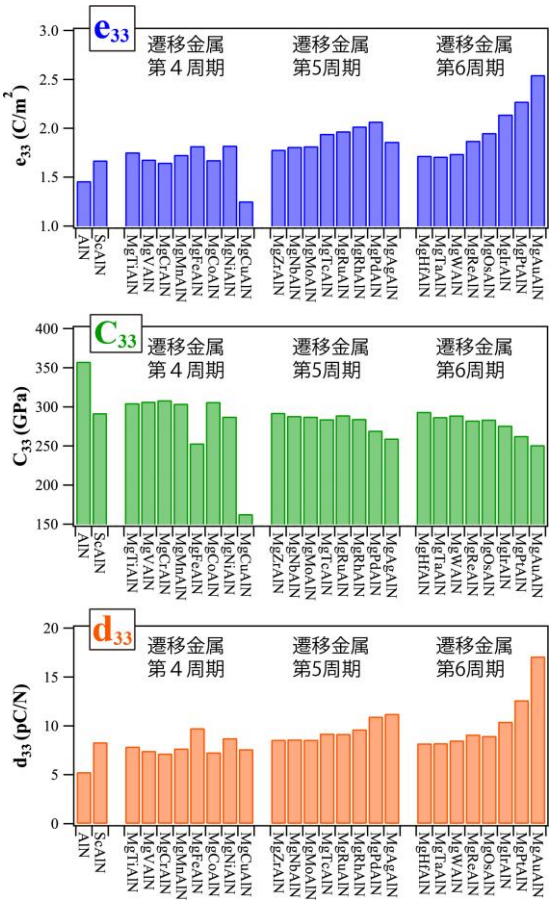

図 1 MgXAlN (X:遷移金属)の圧電特性

【参考文献】

[1] M. Akiyama et al., Adv. Mater. 21(2009) 593. [2] Y. Iwazaki et al., Appl. Phys. Express, 8 (6) (2015) [3] M. Uehara et al., Appl. Phys. Lett., 111 (11) (2017) [4] F. Tasnádi et al., Phys. Rev. Lett. 104 (2010)