

III-V 族窒化物圧電薄膜への Yb 添加効果

Electromechanical properties of Yb-substituted III-V nitride alloys

早大 GCSE¹, 早大先進理工² ◦賈 軍軍¹, 岩田直也², 柳谷 隆彦²

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

◦Junjun Jia¹, Naoya Iwata, Takahiko Yanagitani²

E-mail: jia@aoni.waseda.jp

【研究背景】 現在、ウルツ鉱型結晶構造を持つ ScAlN 合金薄膜がスマートフォンの BAW フィルタなどに実用化されている。ウルツ鉱型 III-V 族窒化物薄膜を母体材料として Yb や Cr 等の異種元素を添加し、電気機械結合係数が向上する新規圧電材料の実験探索・計算予測が盛んに行われている^{1,2)}。本研究では、III-V 族窒化圧電薄膜の電気機械結合係数の実験データを踏まえて、第一原理計算による Yb の添加効果を理論的に解明し、添加元素・母体材料・電気機械結合係数との関係を明らかにすることを目的としている。

【研究手法】 Yb 元素をウルツ鉱型 III-V 族窒化物 (AlN, GaN, InN) 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 10 個以上計算し、第一原理計算で結晶構造の最適化を行い、エネルギー的に最安定な構造を決定した。その後、圧電定数および弾性定数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。YbGaN と YbAlN 薄膜はスパッタ法により作製した¹⁾。

【結果】 図 1 では Yb 濃度を変化させた YbGaN の電気機械結合係数 k_{33}^2 及び弾性定数 V_{33} の実験値と計算値を比較している。Yb 添加量 ($x=Yb/(Yb+Al)$) が 20%以下の領域では、実験値と計算値とよく一致している。 $x=33\%$ において、YbGaN の k_{33}^2 は 9.5%であり、YbAlN の k_{33}^2 の半分となり^[2]、これは添加元素 Yb と母体材料のカチオンのサイズ効果によるものである。また、YbAlN と YbGaN の構造安定性についても検討した。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, Appl. Phys. Lett., 104, 082911 (2014).

[2] J. Jia, and T. Yanagitani, Phys. Rev. Applied, 16, 044009 (2021).

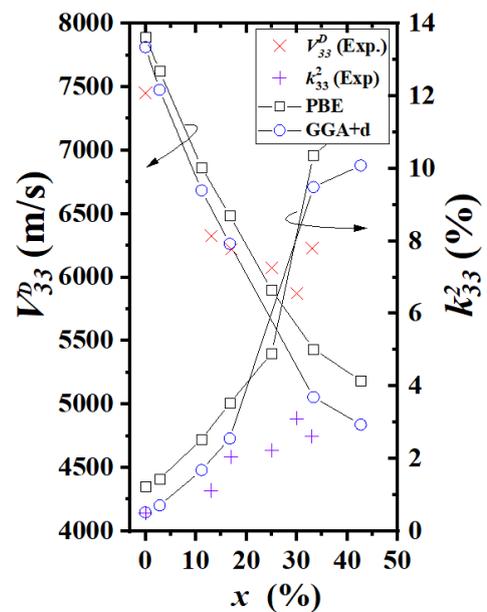


Fig. 1. Calculated V_{33} and k_{33}^2 compared with those measured ones for YbGaN films ($x=Yb/(Yb+Al)$). Two density functionals for Ga (PBE and GGA+d) were used in the first principles calculations of YbGaN.