

MgZnO 複合酸化物薄膜の電気機械結合特性

Electromechanical coupling properties of wurtzite MgO-ZnO films

早大 GCSE¹, 早大先進理工² ◯賈 軍軍¹, 岸 大貴², 柳谷 隆彦²

GCSE, Waseda University¹, ASE, Waseda University²

◯Junjun Jia¹, Kishi Daiki², Takahiko Yanagitani²

E-mail: jia@aoni.waseda.jp

【研究背景】 AlN 窒化物合金薄膜の電気機械結合係数は Sc 添加により飛躍的に向上するため、現在スマートフォンの BAW フィルタに実用化されている。一方で、近年発見された Sc 添加 AlN 薄膜の強誘電性は、強誘電体材料の設計方針に新たな示唆を与えている。本研究では、窒化物以外の Mg 添加 ZnO 酸化物合金材料を注目し、その電気機械結合係数 k_t^2 の増幅を実験的・理論的に検討した。さらに ScAlN と比較し、その分極反転特性の違いについて議論する。

【実験・計算手法】 Mg 添加 ZnO 酸化物薄膜はスパッタ法により作製し、電気機械結合係数の評価はネットアナライザで評価した。計算では、大きさ $3 \times 3 \times 2$ (72 atoms) のウルツ鉱型 ZnO スーパーセル中に、SQS 法 (Special Quasirandom Structure Model) を用いて、Zn サイトに Mg が置換されている。第一原理計算で結晶構造の最適化を行った後に、LDA および GGA-PBE 汎関数を用いて圧電定数および弾性率を DFPT 法でそれぞれ計算した。分極反転特性に関しては、Nudged Elastic Band (NBE) 法を用いて評価した。

【結果】 図 1 では、Mg 濃度が変化させた MgZnO の電気機械結合係数 k_t^2 と音速 V_{33}^D の実験値と理論値を比較している。実験により、Mg 添加量 ($x = \text{Mg}/(\text{Mg} + \text{Zn})$) が 35% 以下の領域では、Mg 添加量の増加に伴い、 k_t^2 と V_{33}^D が増加する傾向が確認された。この傾向は LDA や GGA-PBE 汎関数を用いて得られた計算結果と一致しているが、GGA-PBE 汎関数を用いたほうが計算値と実験値とよく一致している。音速 V_{33}^D の増加は Mg の添加により薄膜の密度が減少したためと考えられる。MgZnO と ScAlN との分極反転特性の違いに関して当日に報告する。

【参考文献】

[1] J. Jia, and T. Yanagitani, Phys. Rev. Applied 16, 044009, 2001.

[2] J. Jia, N. Iwata, M. Suzuki, and T. Yanagitani, ACS Appl. Electron. Mater. 4, 3448, 2022.

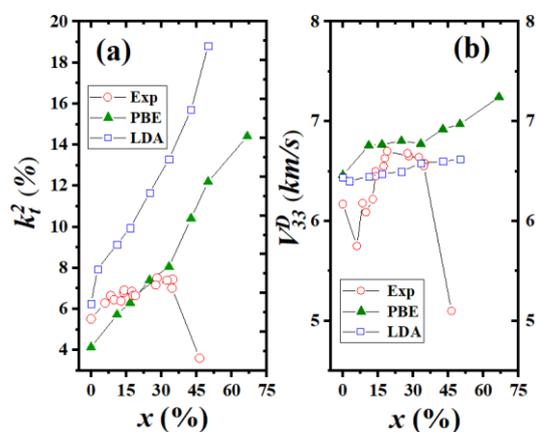


Fig. 1. The measured k_t^2 and acoustic velocity V_{33}^D for MgZnO compound films are compared with those calculation values from first principles calculations with different potential functionals (LDA and GGA-PBE).