

# 電子論計算による窒化物圧電体 Sc 添加 AlN の圧電性向上機構の解明

SATテクノロジー・ショーケース2019

## ■ はじめに

圧電体とは、機械的エネルギーと電気的エネルギーを相互変換できる材料を指し、加速度センサやジャイロセンサといった微小電気機械システム(MEMS)への応用が期待されている。その中でも、窒化物圧電体である窒化アルミニウム(AlN)は、高いQ値、良好な温度安定性から通信端末に必要不可欠である高周波フィルタに現在使用されている。しかし、東京オリンピックが開催される2020年を目途に通信システムが4Gから5Gに変わるため、AlNの圧電性向上が必要とされている。

圧電性向上の手法として、元素添加が有効である。既往研究として、AlNにスカンジウム(Sc)を添加することにより圧電性が飛躍的に向上したことが報告されている(図1)<sup>1)</sup>。しかし、なぜ圧電性が大幅に向上するのか詳細なメカニズムは解明されていない。さらに、Scはレアアースであるため高価であり、コスト削減のためScに代替できる添加元素が求められている。

本研究では、第一原理計算を用いてSc添加AlNの諸物性値を算出し、圧電性向上メカニズムの解明に取り組んだ。圧電性向上のメカニズムを解明することにより、Scに代わる添加元素の探索に貢献したいと考えている。

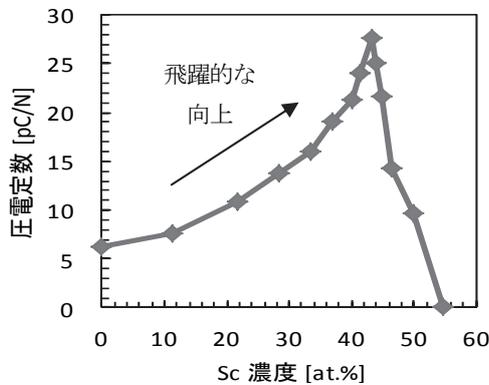


図1 Sc 添加 AlN の Sc 濃度依存性<sup>1)</sup>

## ■ 活動内容

### 1. 計算モデルの作成

結晶構造のモデル化には、理想的なランダムモデルを作成するため、SQS(Special Quasi-random Structure)法を適用した。

### 2. モデルの構造最適化

構築したモデルについて第一原理電子状態計算を用い、構造最適化計算を実行した。

計算結果のSc濃度における格子定数の変化を、報告された実験値<sup>1)</sup>と比較し、結晶モデルの妥当性を確認した。

### 3. 物性値の算出

構造最適化したモデルを用いて、物性値を算出した。

#### ●ウルツ鉱相と岩塩相の混合エンタルピー

AlNはウルツ鉱型構造、ScNは岩塩型構造であることが知られている。各Sc濃度でのウルツ鉱相と岩塩相の混合エンタルピーを比較することにより、熱力学的な相安定性を検討した。結果、Sc濃度37at.%まではウルツ鉱相が安定、37at.%以降は岩塩相が安定であった。

#### ●カチオン周りの局所構造パラメータ

図2に示すように、*c* 軸方向に沿ったカチオンと窒素(N)との結合Al-N(Sc-N)を*b*<sub>1</sub>、それ以外の結合Al-N(Sc-N)を*b*<sub>2</sub>、*b*<sub>1</sub>と*b*<sub>2</sub>の結合間の角度をβとして、カチオン周りの局所構造を調べた。また、Mulliken電荷密度により結合の電子状態を評価した。その結果、Sc濃度が50at.%よりも高濃度では窒化ホウ素類似の無極性六方晶相に相転移することが分かった。また六方晶相では、*b*<sub>1</sub>のイオン結合性が大幅に向上した。

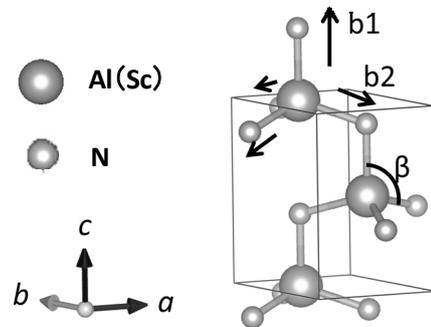


図2 カチオン周りの局所構造パラメータ *b*<sub>1</sub>、*b*<sub>2</sub>、β

## ■ 参考文献

- 1) M. Akiyam, T. Kamohara, K. Kano, Y. Takeuchi, and N. Kawahara, Adv. Mater. 21, 593 (2009)

代表発表者 江藤 和也(えとう かずや)

所属 産業技術総合研究所  
九州大学大学院

問合せ先 〒841-0052 佐賀県鳥栖市宿町 807-1  
TEL: 0942-81-4080(共同研究者 山田 浩志)  
MEIL: hiro-yamada@aist.go.jp(共同研究者 山田 浩志)

■キーワード: (1) 圧電体  
(2) 第一原理計算

■共同研究者: 山田 浩志  
(産業技術総合研究所、九州大学)  
上原 雅人  
(産業技術総合研究所、九州大学)  
平田 研二(産業技術総合研究所)