

電子論計算を用いた MgNbAlN 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

圧電材料とは機械的エネルギーと電気的エネルギーを相互変換する材料である。圧電材料の一種である窒化アルミニウム(AIN)は通信端末用の高周波フィルタに応用されているが、通信方式が5Gに進化するにともない圧電性の向上が求められている。これまでに、AINの圧電性向上を目的に様々な単独元素添加が報告されている。その中でも、産総研の秋山らはSc添加による飛躍的な圧電性向上を確認し、AINの約5倍の値を示すことを報告した。⁽¹⁾しかし、Scがレアアースであるため、Scに代わる元素の探索が行われている。現在、AINへの複数元素添加が行われ、産総研の上原らはMg・Nb共添加により圧電性が約4倍になることを報告した。⁽²⁾AINへのSc添加に関しては多数の第一原理計算の結果が報告されており、各物性値を解析することで、圧電性向上機構の解明が進められている。一方、Mg・Nb共添加においては知見が少ない状態である。

本研究では、第一原理計算によりMg・Nb共添加における圧電性向上機構の解明を目的とし、 $Mg_xNb_yAl_{1-x-y}N$ ($x/y = 1$)の各物性値を調査した。本研究により、新圧電材料の発見、既存の圧電材料の圧電性向上が期待される。

■ 活動内容

1. 計算モデル

各物性値を算出するための計算モデルの構築方法として、添加した元素を可能な限り無秩序に配置するSQS法を適用した。ウルツ鉱型構造のAlサイトの一部をMgとNbに置換し組成比を0から100%まで変えたモデルを作成した。その際MgとNbの比は1と固定した。

2. 構造最適化

第一原理計算の構造最適化による格子定数の計算結果を図1(a)、上原らの実験結果を図1(b)に示す。Mg・Nb含有量の増加に伴い、 a 軸の増加、 c 軸の減少、 c/a の減少が確認され、実験結果と同様の傾向が得られた。また、混合エンタルピーの結果から、 c/a の急激な減少を示したMg・Nb含有量50%近傍において、最安定相がウルツ鉱型結晶構造(極性構造)からBN型結晶構造(無極性構造)に相転移することが確認された。このことから、相転移近傍においてモルフोटロピック相境界による圧電性向上が示唆された。

3. 各物性値の評価

各組成における弾性定数 C_{33} 、圧電テンソル e_{33} 、ボルン有効電荷についても評価を行い、圧電性向上機構への寄与を考察した。

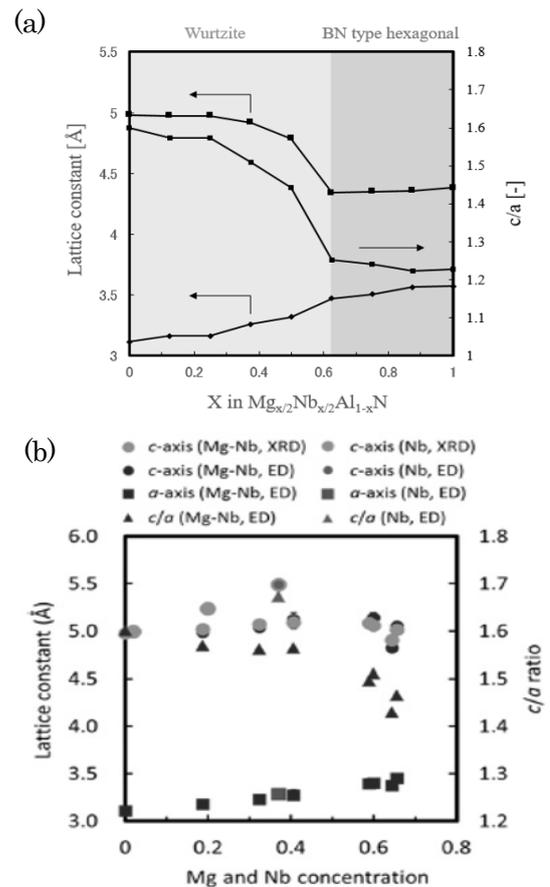


図1 各組成における $Mg_xNb_yAl_{1-x-y}N$ ($x/y = 1$)の格子定数:
(a)計算結果, (b)実験結果

■ 参考文献

- [1] M. Akiyama *et al.*, Adv. Mater. 21(2009) 593.
[2] M. Uehara *et al.*, Appl. Phys. Lett. 111(2017)

代表発表者 **森 雄登(もり ゆうと)**
所属 **産業技術総合研究所、九州大学**
問合せ先 **〒841-0052 佐賀県鳥栖市宿町 807-1**
TEL:0942-81-4080 (山田) FAX:0942-81-4018
E-mail : hiro-yamada@aist.go.jp

■キーワード: (1)圧電材料
(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)