

ScAlN 混晶の分極反転における Sc 組成および格子拘束の影響に関する理論検討 Effects of Sc composition and lattice constraint on polarization switching of ScAlN alloys

三重大院工, ○秋山亨, 宮本拓翔, 河村貴宏

Mie Univ., ○Toru Akiyama, Takuto Miyamoto, Takahiro Kawamura

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】ScAlN は新たな強誘電体材料として注目を集めている。Sc_{0.43}Al_{0.57}N において高い圧電係数が報告され[1]、強誘電性を示すことも示されている[2]。一方、密度汎関数 (DFT) 計算では、Sc_xAl_{1-x}NにおけるSc組成 $x=0.67$ で分極ウルツ鉱 (WZ) 構造から層状構造への変化が起こり、自発分極が非線形に減少することが報告されている[3]。分極スイッチングについては、Krishnamoorthy らがドメインを起因とする極性反転障壁よりも一様な極性反転による障壁が大幅に大きくなることを提案している[4]。しかしながら、ScAlNの強誘電性におよぼすSc組成および基板の格子拘束の影響に関しては不明な点が多い。これまでに我々は、格子拘束がWZ 構造の安定化に寄与することを明らかにした[5-6]。本研究では、DFT 計算にもとづいてSc 組成と格子拘束が分極反転におよぼす影響を評価する。

Al(Sc)極性からN極性への反転経路およびエネルギー障壁をNudged Elastic Band (NEB) 法を用いて計算する。

【結果および考察】Fig. 1は格子拘束のない場合でのSc_xAl_{1-x}N混晶における分極反転する際のエネルギー変化および構造変化の様子を示したものであり、Fig. 1(a)における両端がそれぞれAl(Sc)極性およびN極性でのエネルギーを示している。Fig. 1(a)から分極反転のエネルギー障壁はSc組成とともに減少し、 $x=0.42$ の場合は0.027 eV/atomと小さくなることがわかる。しかしながら、 $x=0.5$ ではWZ構造は準安定構造としても出現せず、無極性の層状構造が安定となる。一方、AlN および GaN の基板拘束を考慮すると、エネルギー障壁 (約0.33 eV/atom) は増大するものの、 $x=0.5$ においてもWZ 構造が安定構造となる。AlNおよびGaNの面内格子定数はScAlNの格子定数より小さいため、エネルギー障壁の増大は圧縮歪みに起因することが解る。従って、分極反転ひいては強誘電性に対する格子拘束の影響は大きく、引張歪みによりエネルギー障壁を低減させることも期待できる。

【参考文献】[1] M. Akiyama *et al.*, Adv. Mater. **21**, 593 (2009). [2] S. Fischer *et al.*, J. Appl. Phys. **125**, 114103 (2019). [3] K. Furuta *et al.*, J. Appl. Phys. **130**, 024104 (2021). [4] A. Krishnamoorthy *et al.*, Nanotechnology **32**, 49LT02 (2021). [5]宮本他, 第71回応用物理学会春季学術講演会, 25a-P03-11 (2024). [6] T. Miyamoto *et al.*, Extended Abstract of the 2023 International Conference on Solid State Devices and Materials, Himeji, 2024.

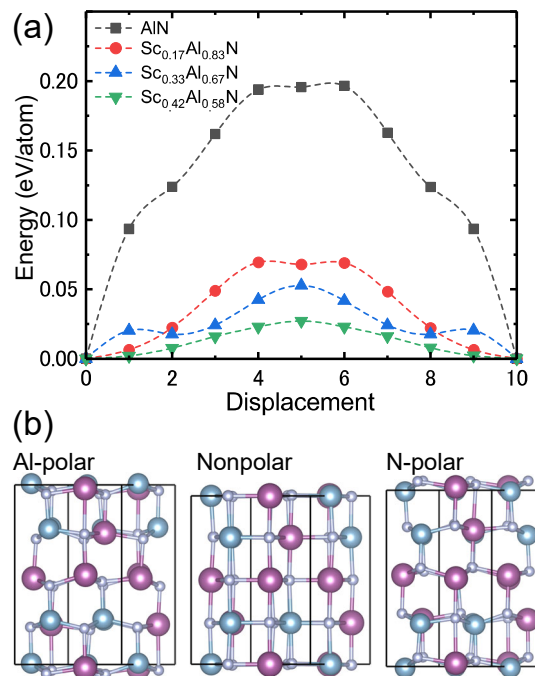


Fig. 1 (a) Energy variations of as a function of displacement of atoms from positive (metal polar) to negative (N polar) polarity in strain-free ScAlN alloys, and (b) side views of structural change for Sc_{0.42}Al_{0.58}N obtained by the NEB calculations. Blue, purple, and gray circles in side views denote Al, Sc, and N atoms, respectively.