

4d,5d 遷移金属窒化物の結晶構造-体積弾性率相関 Crystal structure – bulk modulus relationship in 4d and 5d transition metal nitrides

遊佐 齊^{1,*}¹物質・材料研究機構, 〒305-0044 つくば市並木 1-1Hitoshi YUSA^{1,*}¹National Institute for Materials Science, 1-1 Namiki, Tsukuba, 305-0044, Japan

1 はじめに

我が国の主要産業における軽量構造材の開発とその需要増加は、被削材の多様化をもたらしており、その精密機械加工の要請から、切削工具等にさらなる技術革新が求められている。そうした背景の中、硬質物質として cBN やダイヤモンドに匹敵する、4d,5d 遷移金属窒化物が近年相次いで報告され、注目を集めている。そこで、様々な 4d,5d 窒化物に対して、結晶構造と硬質物性を代表する体積弾性率の相関を抽出すべく、高圧下 X 線その場観察による研究をおこなっている。今回新しく測定した窒化物の結果と、今までの測定データ、ならびに文献報告値を総括して報告する。

2 実験

今までに測定してきた系は、Re-N, Ta-N, W-N 系[1-3]であるが、それらに加え、今回あらたに、Nb-N, Mo-N 等の体積弾性率測定をおこなった。測定は、高圧 X 線角度分散法によりおこない KEK-PF (AR-NE1) 等に於いて、対称型ダイヤモンドアンビルセル (DAC) を用いておこなった。粉末化した Mo₂N および NbN に金粉末を分散させたものをレニウムガスケット中に詰めて、10GPa までの完全静水圧下 (アルコール混合媒体) でデータ収集した。回折パターンはイメージングプレートで検出し、IPAnalyzer により一次元化した回折プロファイルを得た。

3 結果と考察

Birch - Murnaghan の状態方程式から計算した体積弾性率は、欠陥 NaCl 型構造も持つ Mo₂N については 299(1) GPa と文献値[4]の 301(7) GPa とほぼ一致をみた。しかしながら、cBN に匹敵するとされた NbN[5] (報告値 348 GPa) は今回の測定の結果 297(1) GPa にとどまることが明らかになった (Fig.1)。また、同様に非常に高い体積弾性率が報告されていた[6]WC 型 WN や立方晶 W₃N₄ もともに 15%程度低い値となることも確認され[3]、文献値の今までの報告値に対する信頼度が少なからず低下することとなった。

現在までに蓄積した結晶構造と体積弾性率相関を俯瞰すると、構造にプリズム型六配位の連結を有するものに高い体積弾性率を示すものが多いことが理解できる (Fig. 2)。

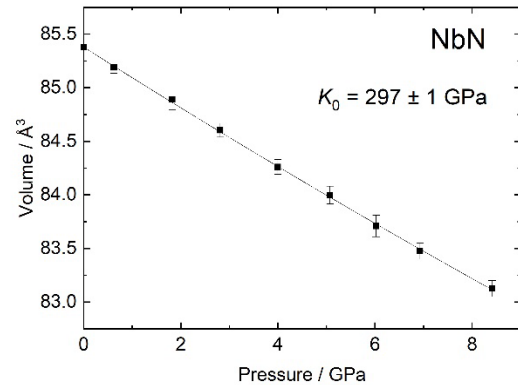


Fig. 1: P-V data of compression experiments of NbN.

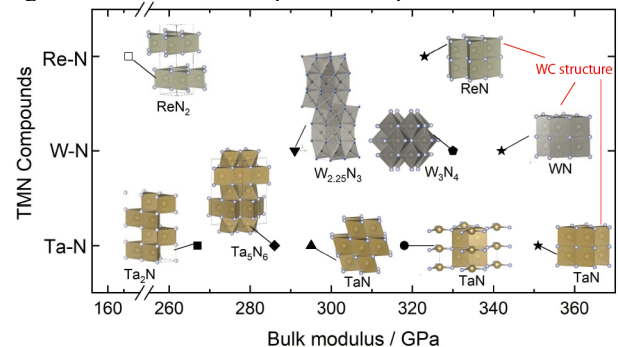


Fig.2 Crystal structure - bulk modulus relationship in 4d and 5d TMN.

・謝辞

本研究は、科研費 (19H05790, 19H02005) の支援のもとおこなわれました。また、本研究の一部は、SPring-8 においておこなわれました。この場をお借りしてお礼申し上げます。

参考文献

- [1]F. Kawamura, H. Yusa, T. Taniguchi, APL 100, 251910 (2012)
- [2]H. Yusa et al., JAP 115, 103520 (2014)
- [3]F. Kawamura, H. Yusa, T. Taniguchi, JACERS 101, 949 (2018)
- [4]E. Soignard et al., PRB 68, 132101 (2003)
- [5]X. J. Chen et al., PNAS 102, 3198 (2005)
- [6]S. Wang, CM, 2112, 3023 (2012)

* yusa.hitoshi@nims.go.jp