

窒化タンタルの体積弾性率 Bulk moduli of tantalum nitrides

遊佐 齊^{1*}, 川村史朗¹, 谷口 尚¹, 亀掛川卓美²
¹物質・材料研究機構 〒305-0044 つくば市並木 1-1
²物質構造科学研究所 〒305-0801 つくば市大穂 1-1
 Hitoshi Yusa^{1,*} and Takumi Kikegawa²

¹National Institute for Materials Science, 1-1 Namiki, Tsukuba, 305-0044, Japan

²Photon Factory, 1-1 Oho, Tsukuba, 305-0801, Japan

1 はじめに

超硬物質探索において、近年、5d 窒化物に注目が集まっている。実際、理論計算や実験によって、いくつかの構造で Pt, Ir, Re 等の窒化物がダイヤモンドに匹敵する体積弾性率を有するとの報告がある[例えば 1,2]。しかしながら、難窒化性であることに加え、合成条件が過酷であるため、大量に目的相を得られないという欠点がある。一方、窒化タンタルは、一気圧安定相としての TaN-type (ϵ -TaN) が比較的容易に入手可能であることから、以前より、それを出発試料として高压合成がおこなわれてきた[3 など]。さらに、最近の計算科学の急速な普及にともない、各種窒化タンタルの体積弾性率が数多く計算されており、その値は計算手法による差が大きいものの、超硬物質として期待させる結果も多い[例えば 4]。しかしながら、体積弾性率の実測値は数少なく、知る限り ϵ -TaN[5], Ta₂N₃[6], Ta₂N[7]のみである。そこで、本研究では、NaCl-type, WC-type TaN および Ta₅N₆を高压合成し、常圧相の ϵ -TaN とともに静水圧下で体積弾性率を決定し、各結晶構造(図 1)の観点から系統的な考察をおこなったので報告する[8]。

2 実験

合成実験は、NIMS のベルト型高压装置を用いて、WC-type, NaCl-type TaN については 2.5~5.5 GPa, 2000~2400 °Cで TaN-type を出発試料に用いておこなった。Ta₅N₆は TaCl₂と Ca₃N₂の混合物を 3 GPa, 1750 °Cの条件で複分解反応により合成した。測定は KEK-PF (AR-NE1)において、DAC による高压下粉末 X線回折法 (IP 検出器)によりおこなった。圧媒体にメタノール・エタノール・水混合媒体を用い 10 GPa までの完全静水圧下で実験をおこなった。

3 結果および考察

NaCl 型の単相は低压・高温側 (2.5 GPa, 2400 °C)で合成され、それ以外では WC-type が回収された。この結果は以前の報告[3]と調和的である。SEM による粒径観察によれば、WC-type は出発試料の ϵ -TaN (1~2 μ m) と大差ないが、NaCl-type は 10 μ m 以上に成長していた。

図 2 に圧縮曲線を示す。Birch - Murnaghan の状態方程式から計算した体積弾性率(K_0)はそれぞれ、WC-type:351 GPa, NaCl-type:295 GPa, TaN-type:318 GPa, Ta₅N₆:286 GPa となり、WC 型が最も圧縮されにくく、次に TaN-type が大きな体積弾性率を持つことが明らかとなった。両者の構造に共通なのは c 軸方向にプリズム型六配位の連結構造を持つことである。線圧縮率も c 軸方向に圧縮されにくいことから、この連結構造が大きな体積弾性率を演出しているものと思われる。

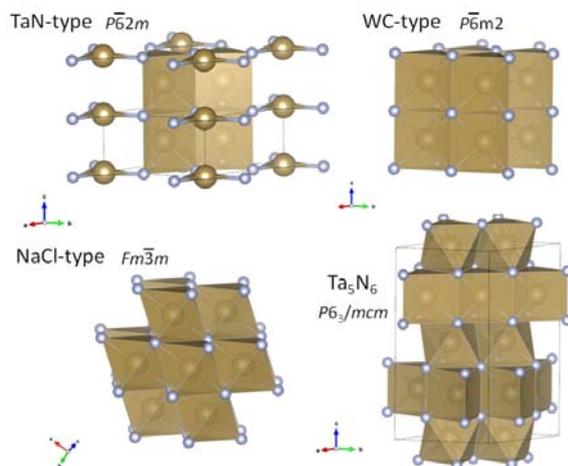


図 1 : 窒化タンタルの各結晶構造

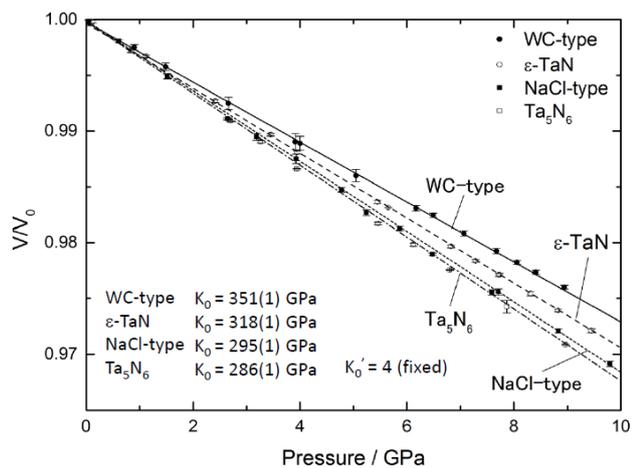


図 2 : 窒化タンタルの圧縮曲線と体積弾性率

参考文献

- [1]A. F. Yong +, Phys. Rev. Lett. 96, 155501 (2006)
- [2]A. Friedrich +, Phys. Rev. Lett. 105, 085504 (2010)
- [3]T. Mashimo +, Physica B 239, 13 (1997)
- [4]E. Zhao & Z. Wu, J.Solid State Chem. 181, 2814 (2008)
- [5]E. Soignard +, Phys. Rev. B75, 014104 (2007)
- [6]A. Zerr +, Phys. Status Solidi RRL 6, 484 (2012)
- [7]W. W. Lei +, J.Phys.:Condens.Matter 19,425233 (2007)
- [8]H. Yusa +, J. Appl. Phys. 115, 103520 (2014)

* yusa.hitoshi@nims.go.jp