

Al-Sc-N 3 元系計算状態図と 歪みを導入したウルツ鉱相における Sc の固溶挙動

The calculated Al-Sc-N ternary phase diagram
and the solubility of Sc in strained wurtzite phase

産総研¹, 計算熱力学研究所² ○平田 研二¹, 菖蒲 一久², 山田 浩志¹, 上原 雅人¹,

Anggraini Sri Ayu¹, 秋山 守人¹

AIST¹, RICT², °Kenji Hirata¹, Kazuhisa Shobu², Hiroshi Yamada¹, Masato Uehara¹,

Sri Ayu Anggraini¹, Morito Akiyama¹

E-mail: kenji.hirata@aist.go.jp

Sc 添加 AlN の薄膜は AlN と比較して飛躍的に圧電特性が向上するため、次世代通信規格の周波数フィルタやセンサーとしての応用が期待されている^[1]。圧電効果はウルツ鉱相において発現するが、Sc 固溶量の増加に伴い圧電定数が向上する。ゆえに、ウルツ鉱相における Sc の固溶挙動は圧電特性を制御する上で重要である。しかし、Al-Sc-N 3 元系の相平衡は実験報告が少なく不明な点が多い。CALPHAD(CALculation of PHase Diagrams)法は限られた実験値から求めた熱力学関数を利用し、状態図を計算・推定することが可能である。本研究では第一原理計算と CALPHAD 法を組合わせて Al-Sc-N 3 元系の相平衡を計算し実験報告と比較した。また実用材料は薄膜で作製され、バルクとは異なる相平衡を示すと考えられる。そこで基板と薄膜の間に生じる歪エネルギーを考慮し、ウルツ鉱相における Sc の固溶挙動もあわせて評価した。

ウルツ鉱(WZ)相や岩塩(RS)相、3 元化合物相の生成エンタルピーを第一原理計算で求めた。WZ 相と RS 相の非化学量論組成における生成エンタルピーは Special Quasirandom Structure model により作成した結晶構造を利用した。また、Debye-Grüneisen model を利用して有限温度における、化学量論化合物の自由エネルギーを計算し CALPHAD 法に援用した。

Fig.1 は本研究で求めた熱力学関数により計算した 1273K の Al-Sc-N 3 元系状態図である。この計算状態図は Schuster らにより報告された実験状態図^[2]とよく整合していた。一方で、50mol%N において WZ 相は 2 相分離を示しており、薄膜で(Al,Sc)N の固溶体を得られている従来の報告^[1]とは矛盾する。そこで、AlN の基板上に(Al,Sc)N の薄膜が形成した状態を仮定して、基板と薄膜の間の歪エネルギーを算出し WZ 相の熱力学関数に反映させた。その結果、薄膜の膜厚が薄くなるほど 2 相分離が抑制されることが確認された。よって、薄膜の実用材料で WZ 相に Sc が多く固溶する要因の一つに薄膜と基板の間の歪エネルギーが影響していると考えられる。

【参考文献】 [1] M. Akiyama et al., Adv. Mater. 21(2009) 593. [2] J.C. Schuster and J. Bauer, J. Less-Common Metals 109 (1985) 345.

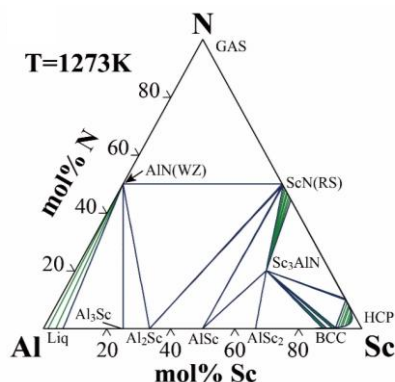


Fig. 1 Calculated isothermal section of Al-Sc-N ternary system.