

Mg 単原子層が金属とセラミックスの接合を強くする！

—原子分解能分析電子顕微鏡で初めて見えてきた異材接合の原子メカニズム—

1. 発表者：

幾原雄一（東京大学大学院工学系研究科附属総合研究機構 教授）
柴田直哉（東京大学大学院工学系研究科附属総合研究機構 准教授）
熊本明仁（東京大学大学院工学系研究科附属総合研究機構 特任研究員）
藤平哲也（東京大学大学院工学系研究科附属総合研究機構 助教）
名雪桂一郎（日本電子株式会社）
黒光祥郎（三菱マテリアル株式会社中央研究所 所長）
秋山和裕（三菱マテリアル株式会社中央研究所）
寺崎伸幸（三菱マテリアル株式会社中央研究所）
長友義幸（三菱マテリアル株式会社中央研究所）
長瀬敏之（三菱マテリアル株式会社中央研究所）

2. 発表のポイント：

- ◆原子分解能走査型透過電子顕微鏡法(STEM、注1)と超高感度 X 線組成分析手法(注2)を融合することにより、アルミ (Al) 合金と窒化アルミ (AlN) 基板の界面を原子レベルで直接観察することに成功した。
- ◆ 第一原理計算 (注3) により、単原子層で偏析 (注4) した Mg が隣接する酸素原子と強固に結合することで異材接合界面を安定化し、強固な接合を実現していることを見出した。
- ◆ Al 合金と AlN 基板の界面は、ハイブリッド自動車などのパワーモジュール用絶縁回路基板 (注5) に用いられており、今後のパワーモジュール用絶縁回路基板開発やその性能向上に大きく貢献することが期待される。

3. 発表概要：

東京大学 大学院工学系研究科 附属総合研究機構の幾原雄一教授、柴田直哉准教授、熊本明仁特任研究員、藤平哲也助教らの研究グループは、三菱マテリアル株式会社、日本電子株式会社と共同で、原子分解能走査型透過電子顕微鏡法(STEM)により、Al 合金と AlN 基板の界面に単原子層の Mg が偏析し、界面接合を強化することを世界で初めて明らかにしました。Al と AlN 等の金属とセラミックスの接合界面はハイブリッド自動車や電気自動車等に搭載されるパワーモジュール用絶縁回路基板の重要部位であり、本結果はより高性能且つ高信頼性絶縁回路基板を開発するための原子レベルの設計指針を与える重要な成果です。

金属とセラミックスの異種材料接合部材は、さまざまな構造部材、電子デバイス部品などに用いられています。中でも、ハイブリッド自動車などのパワーモジュール用絶縁回路基板には、Al と AlN 基板等の金属とセラミック基板の接合体が利用されており、その強度、信頼性、耐久性などがハイブリッド自動車や電気自動車等の安定な駆動制御において極めて重要です。例えば金属として Al、またセラミックス基板として AlN 基板を用いた界面接合では、少量の添加元素が引き起こす Al の融点降下を利用した界面接合が行われており、実用上は Al 合金と AlN 基板の界面構造の安定性が重要であると考えられます。そこで、不純物あるいは添加元素の効果を加味した更なる強固な界面の開発が必須の技術課題となりますが、今まで Al 合金と AlN 基板という異なる材料が原子レベルでどのように接合するのかに関しては未解明な点が多く残されていました。

そこで本研究チームは、1Å(オングストローム、 10^{-10} m)以下の分解能を有する STEM 法(図1)と超高感度な X 線分析手法を高度に融合することにより、Al 合金/AlN 基板界面における原子レベルの組成分布解析を行いました。その結果、Al 合金と AlN 基板の界面には、不純物である Mg 原子が単原子層構造を形成していることを世界で初めて明らかにしました(図2)。また、この周囲には酸素(O)原子も層状構造を形成しており、数原子層レベルで複雑な界面層状構造が自己組織的に形成されることがわかりました(図3)。つまり、Al 合金と AlN 基板の界面は金属とセラミックスの単純な接合ではなく、本来は不純物である Mg や O 原子が界面遷移構造を形成し、強固な接合を実現していることが明らかとなりました。本成果は金属とセラミックスを強固に接合するための原子レベルの指針を与えるものであり、今後のパワーモジュール用絶縁回路基板開発やその性能向上に大きく貢献することが期待されます。

本研究成果は、本成果は、英国の Nature Publishing Group (NPG) が発行する学術雑誌「Scientific Reports」に日本時間 3 月 10 日午後 7 時付けで掲載されます。

4. 発表内容：

<研究の背景と経緯>

近年、ハイブリッド車などの駆動制御用インバータなどに用いられる絶縁回路基板には、金属とセラミックスの異種材料接合部材が用いられています。この接合界面は、通常高温で金属を溶融し、セラミックスと接合させることで形成されます。これまでの研究開発により、Al と AlN 基板との接合部材を用いることで、高性能な絶縁回路基板を作製できることが明らかとなっていました。しかし、更なる機械特性、熱特性、信頼性の向上のためには、Al/AlN 接合界面の更なる安定化、高性能化が不可欠であり、そのためには金属とセラミックスの接合を原子レベルで理解し、制御する必要があると考えられてきました。

<研究の内容>

今回、本研究グループは、原子分解能 STEM 法を用いて Al 合金と AlN 基板の界面を原子レベルで直接観察することに成功しました。更に、超高感度な X 線分析装置を原子分解能 STEM に組み合わせることで、界面数原子層の組成分析を行いました。その結果、Al 合金と AlN 基板の界面には、不純物の Mg 原子が単原子層構造を形成していることを世界で初めて明らかにしました。また、この周囲には酸素原子も層状構造を形成しており、複雑な界面層状構造が自己組織的に形成されることが明らかとなりました。つまり、Al 合金と AlN 基板の界面は単純に Al 合金と AlN 基板が接合しているのではなく、不純物である Mg や O 原子が界面近傍に濃化することで原子レベルの界面遷移構造を形成し、強固な接合を実現していることがわかりました。また、第一原理計算を用いた理論解析により、このような構造は単純な Al 合金と AlN 基板の接合よりも界面を安定化できることもわかりました。つまり、本研究により金属とセラミックスを強固に接合するためには、不純物元素の的確な選択・制御が極めて有効であることが明らかとなりました。この知見は、安定な金属/セラミックス界面を形成するための原子レベルからの設計指針を与えるものであり、今後のパワーモジュール用絶縁回路基板開発やその性能向上に大きく貢献することが期待されます。

<社会的意義・今後の予定>

高出力の駆動制御用インバータをはじめとしたパワーモジュールは、ハイブリッド自動車、電気自動車、さらには鉄道などの分野において極めて重要です。今後、更なる性能・信頼性向上のためには、その土台となる絶縁回路基板の高性能化が必須です。今回、絶縁回路基板の主要構造である金属/セラミックス界面の原子レベルからの形成メカニズムが明らかとなったことにより、より高性能な絶縁回路基板開発に拍車がかかることが期待されます。また、ほんの微量な不純物元素が異材接合に大きな影響を及ぼすという新知見は、学術的・工学的にも極めて重要であると考えられます。更に、本研究で用いた究極的な組成分析技術は、物質科学や材料工学などのさまざまな分野において極めて有力な解析技術になることが期待されます。

5. 発表雑誌：

雑誌名：英国科学誌「Scientific Reports」(2016年3月10日)

論文タイトル：“Atomic structures of a liquid phase bonded metal/nitride heterointerface”

(液相接合による金属/窒化物界面の原子構造)

著者： Akihito Kumamoto, Naoya Shibata, Kei-ichiro Nayuki, Tetsuya Tohei, Nobuyuki Terasaki, Yoshiyuki Nagatomo, Toshiyuki Nagase, Kazuhiro Akiyama, Yoshirou Kuromitsu & Yuichi Ikuhara

DOI: 10.1038/srep22936

アブストラクト URL: <http://www.nature.com/articles/srep22936>

6. 注意事項:

日本時間 3 月 10 日 (木) 午後 7 時 (イギリス時間: 3 月 10 日 (木) 午前 10 時) 以前の公表は禁じられています。

7. 問い合わせ先:

<研究に関すること>

東京大学 大学院工学系研究科 附属総合研究機構

教授 幾原 雄一 (イクハラ ユウイチ)

〒113-8656 東京都文京区弥生 2-1-16

東京大学 大学院工学系研究科 附属総合研究機構

准教授 柴田 直哉 (シバタ ナオヤ)

〒113-8656 東京都文京区弥生 2-1-16

<報道担当>

東京大学 大学院工学系研究科 広報室

〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1

8. 用語解説:

注 1: 原子分解能走査型透過電子顕微鏡 (STEM): 細く収束させた電子線を試料上で走査し、試料により透過散乱された電子線の強度で、試料中の構造を直接観察する装置。現在、電子線を 1\AA (オングストローム) 以下にまで絞り込むことができるため、原子の直接観察も可能である。

注 2: X 線組成分析手法: 電子線が試料に入射すると、試料中に存在する元素の種類に応じて異なるエネルギーの特性 X 線が発生する。この特性 X 線のエネルギーを分析することにより、電子線が当たっている領域に存在する元素の種類、量を分析する手法。エネルギー分散型 X 線分光法 (EDS) とも呼ばれる。近年、原子分解能 STEM と組み合わせることで、原子レベルの組成分析が可能になっている。

注 3: 第一原理計算

量子力学の基本原則に則って電子の量子状態から原子同士の相互作用を計算し、実験データや経験パラメータを用いることなく物理機構の解明や物性予測を行う計算手法。

注4：偏析

金属、セラミックスなどの材料中の不純物あるいは成分元素が局所的に不均一となる現象。材料の界面や表面においてしばしば起きる。

注5： パワーモジュール用絶縁回路基板：パワーモジュールは、電力を変換・制御するための半導体素子と各種回路を集積化したものであり、その絶縁体基板としては十分な耐圧・機械的特性を有する窒化物や酸化物などのセラミックスが通常用いられる。

9. 添付資料：

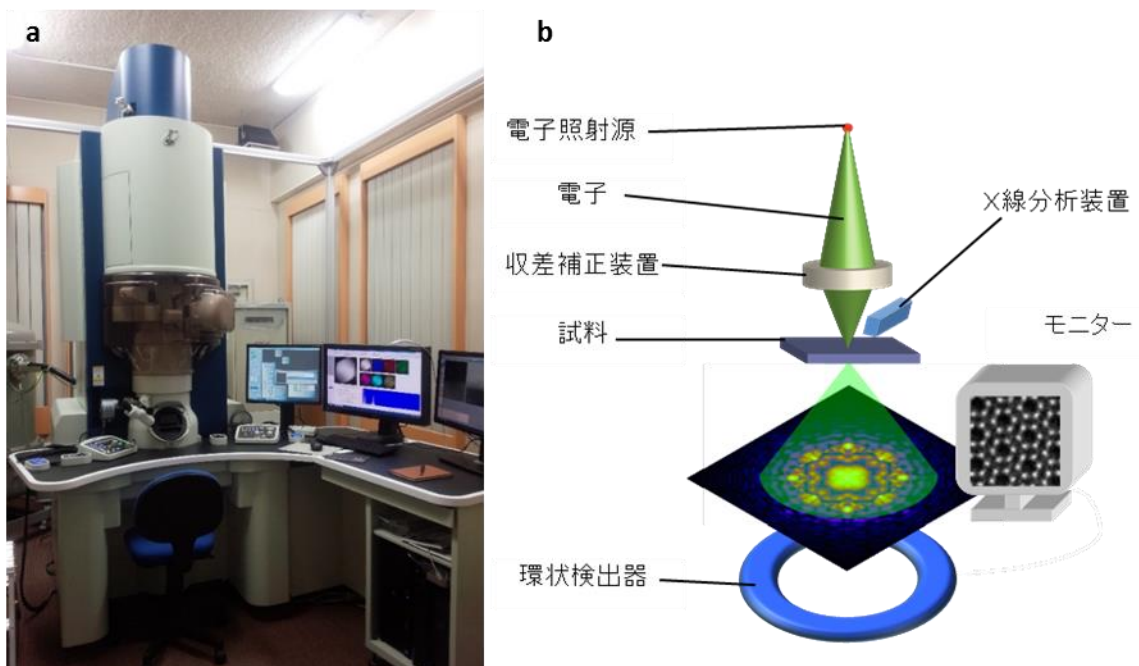


図1 原子分解能走査型透過電子顕微鏡法（STEM）の概要

(a) STEMの実機写真。

(b) STEM法の模式図。照射源（赤点）から照射された電子（緑色）は、収差補正装置（灰色円盤）を通過すると非常に細く絞り込まれる。試料（藍色四角）を透過する際、原子の種類に応じて散乱するので、これを環状の検出器（青色ドーナツ環）を用いて計測し、画像として観察する。また、X線検出器を試料近傍に配置することにより、電子線が当たった位置からの特性X線を検出し、局所的な組成分析を行うことが出来る。

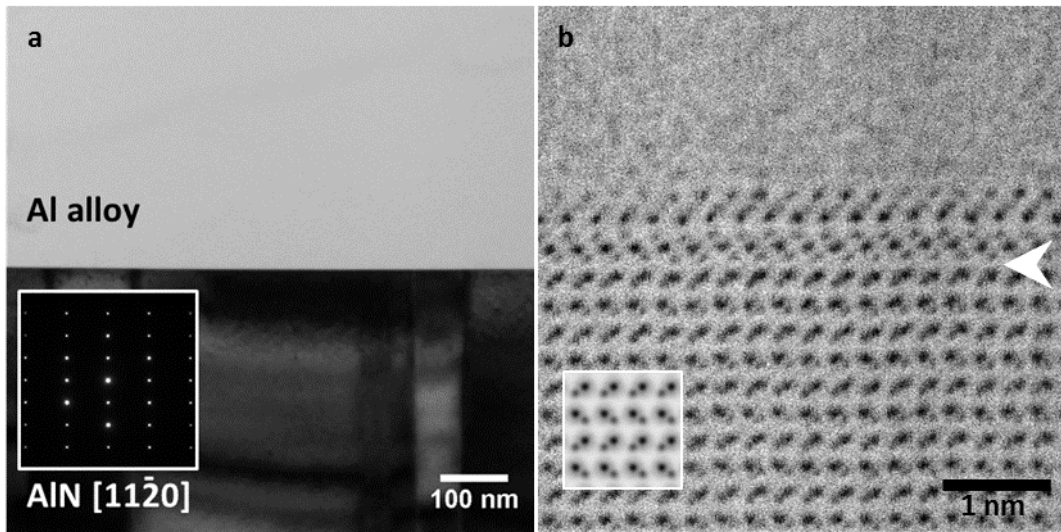


図2 Al合金とAlN基板界面の低倍TEM像(a)と原子分解能STEM像(b)

低倍TEM像から接合界面は平坦であることがわかる。原子分解能STEM像によりAlN側の原子が明瞭に観察できてくることわかる。Al合金側は結晶方位がランダムな方向を向いているため、原子位置は観察できていない。図b矢印で示した位置にAlN構造とは異なるコントラストが観察されており、界面に層状の遷移構造が存在することが示唆される。右図のスケールは1nmに対応。

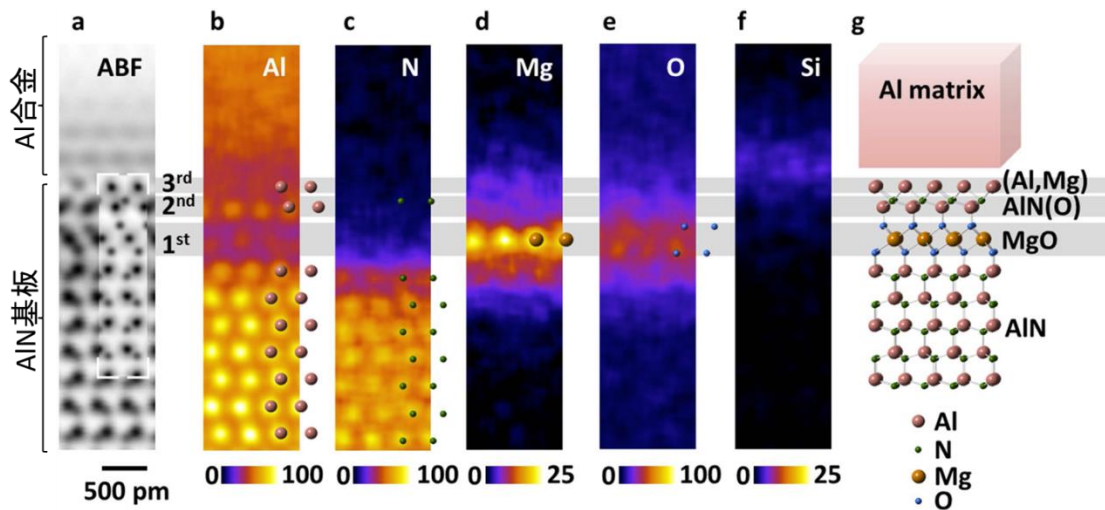


図3 Al合金とAlN基板界面の超高感度原子分解能X線分析結果

a, 環状明視野(ABF)STEM像。原子位置が黒いコントラストで観察できる。シミュレーション像も右側に挿入されている。b-f, 各元素の特性X線強度でマッピングしたX線マッピング像。Mgが界面部分に単原子レイヤーの構造を形成していることがわかる。また、その周囲には酸素原子レイヤーが存在しており、複雑な界面層状構造を形成していることがわかる。SiはAl合金側に偏析している。g, 今回の観察から得られた界面原子構造の模式図。