

ダイヤモンドライクカーボン薄膜のラマン解析と XPS 解析との関係

Relationship between Raman and XPS Analyses of Diamondlike Carbon Films

東北大・通研¹, 広島大院・先端研², 鷹林 将¹, 高萩 隆行²RIEC, Tohoku Univ.¹, AdSM, Hiroshima Univ.², [○]Susumu Takabayashi¹, Takayuki Takahagi²

E-mail: stak@riec.tohoku.ac.jp

アモルファス炭素同素体であるダイヤモンドライクカーボン(DLC)は、平滑性、耐摩耗性、そして導電体から絶縁体までの幅広い電気特性などの特異な物性を有する、幅広い応用が期待されている材料である。その特性は、構成成分である sp^2 炭素・ sp^3 炭素・水素の比で制御され、中でも「 sp^2/sp^3 炭素比」は特に注目される因子である。しかしながらこの算出は、両成分の明確なスペクトル分離が困難なために、評価が困難である。著者らはこれまで、X線光電子分光法(XPS)を駆使することによって、DLCの成分解析を試みてきた。¹ 其中で、DLCのC 1sスペクトルは、Gauss関数を重畳したDoniach-Šunjić関数を用いて、炭素-炭素結合を有する sp^3 炭素、同 sp^2 炭素、炭素-水素結合を有する sp^2 炭素、同 sp^3 炭素の計4成分に分割されることを実証してきた。本研究では、DLC薄膜のラマンスペクトルを解析することによって、同試料のXPS解析との関係を考察し、解析成分とDLC薄膜構造との関係について議論する。

図1に、ベンゼンガスを用いたイオン化蒸着法で製膜したDLC薄膜のラマンスペクトルを示す。スペクトルは、 1560 cm^{-1} 付近に一つのピーク成分と 1380 cm^{-1} 付近に肩を有し、これらはそれぞれ、 sp^2 炭素対の伸縮振動を表すGバンド、芳香環のブリージングモードを示すDバンドと理解されている。これらのバンドはそれぞれ、ラマンシフト $\bar{\nu}$ の関数であるBWF関数($B(\bar{\nu})$)およびLorentz関数($L(\bar{\nu})$)で解析される。

DLCのアモルファス性のスペクトルへの表現は、著者らは先述のXPS解析において、Gauss関数で記述した。アモルファス物質の場合、各成分において結合長・角などの化学結合状態がひずみなどのために微小に変化し、それに応じて化学シフトに分布が生じることが考えられる。この分布がランダムなものと考えると、各成分における分布は共通のGauss分布($G(\bar{\nu})$)で表されると想定できるためである。本ラマンスペクトル解析においても同様に考えると、全解析関数($T(\bar{\nu})$)は、バンド関数にGauss関数を重畳させた、

$$T(\bar{\nu}) = [(L + B) * G](\bar{\nu}) = \int_{-\infty}^{+\infty} [L(\bar{\nu}') + B(\bar{\nu}')] G(\bar{\nu} - \bar{\nu}') d\bar{\nu}'$$

と表される。

図1中に、本関数を用いたフィッティングカーブを示した。BWFおよびLorentz関数単体では、実験値をうまく表現できなかったが、Gauss関数を重畳することで表現が可能となった。ただし、各関数においては数式的にスペクトル広がりが無限となってしまうため、実験値両端での記述は難しかった。

炭素材料のラマンスペクトル解析においては、一般に、「Dバンド/Gバンド強度比 ($I(D)/I(G)$)」が有力な指標として用いられているが、本解析においては、任意の幅を持つGauss関数が組み込まれているために、これは一般性を欠く。そのため、評価にはより一般性のある「面積比 ($A(D)/A(G)$)」を用いた。当日は、スペクトルの試料温度依存性、および同XPSスペクトルとの相関関係について議論する。

参考文献: 1. S. Takabayashi et al., J. Appl. Phys. **104**, 043512 (2008); 鷹林, 高萩, J. Surf. Anal., in press.

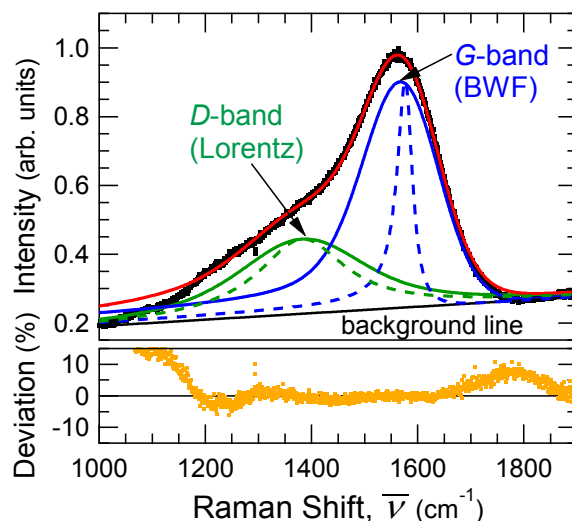


図 1. (上図) フィッティング関数を含む DLC 薄膜のラマンスペクトル: (青実線) $(B * G)(\bar{\nu})$, (青点線) $B(\bar{\nu})$, (緑実線) $(L * G)(\bar{\nu})$, (緑点線) $L(\bar{\nu})$, (赤) $T(\bar{\nu})$. (下図) フィッティング関数値の偏差(%).