

薄膜成長シミュレーションを用いた REBCO 薄膜中 BMO 自己組織化における成長温度および成膜レート依存性

Growth Temperature and Deposition Rate Dependencies of BMO Self-organization within REBCO Thin Film by Using Thin Film Growth Simulations

名大エコ研¹, 名大院工² ○一野 祐亮^{1,2}, 吉田 隆²

EcoTopia Science Institute, Nagoya Univ.¹, Nagoya Univ.² ○Y. Ichino^{1,2}, Y. Yoshida²

E-mail: ichino@nuee.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

REBa₂Cu₃O_y (REBCO, RE=Y, Sm, Gd など) 薄膜をパルスレーザー蒸着(PLD)法などの気相法で作製する際に BaMO₃ (BMO, M=Zr, Sn, Hf など) を添加すると BMO が REBCO 中で自己組織化し、ナノロッドやナノパーティクルを形成する[1]。これまで我々は、この自己組織化の詳細なメカニズムを明らかにするために、REBCO と BMO を立方体からなる粒子として単純化し、それらの粒子が基板表面上でマイグレーションし、結合や脱離する挙動を Monte Carlo (MC)法を用いてシミュレーションすることで自己組織化の再現を行ってきた[2, 3]。

本発表では、成長温度や成膜レートが BMO の自己組織化に与える影響についてシミュレーションした結果について報告する。

2. シミュレーションモデル

本研究で用いたモデルでは、一辺 0.4 nm の立方体が三つ重なった A 粒子 (REBCO 相当) と立方体一つから成る B 粒子 (BMO 相当) が基板表面に吸着し、ランダムウォークしている。ここで、基板は A 粒子で構成されているとした。基板上のランダムウォーク前後の配置エネルギー差 ΔE が小さくなる方向に粒子が優先的に動く。配置エネルギーとして、隣接粒子との間の結合エネルギーの和を用いた。また、粒子は $\exp(-E_{\text{des}}/k_{\text{B}}T_{\text{s}})$ の確率で蒸発するとした。ここで E_{des} は脱離エネルギーである。B 粒子の割合は 3.0 vol.%、成長温度 (基板温度 T_{s}) は 1,023~1,193 K とし、成膜レート 10~3,000 nm/h に相当する条件下で B 粒子の自己組織化シミュレーションを行った。

3. 結果及び考察

図 1 に成膜レート 1,000 nm/h の場合の B 粒子の自己組織化形状を示す。ここで、A 粒子は透明にしている。図より、 T_{s} が低い場合には細く短いナノロッドと細かいナノパーティクル状に自己組織化していることがわかる。 T_{s} が高くなるにつれてナノロッドは太く長くなり、ナノパーティクルは減少した。 $T_{\text{s}}=1,193$ K ではナノパーティクルは消え、やや傾いたナノロッドのみになった。また、成膜レートを変えたシミュレーション結果から、成膜レートが早いほどナノロッドは細く高密度になる結果が得られた。低温、高成膜レートでは粒子 A 結晶の核生成頻度が高く、かつステップ前進速度が非常に速いため、粒子 B の自己組織化が十分進行できず、細く短いナノロッド、あるいはナノパーティクル形状に留まる。

77 K 以下の温度で、かつ高磁場中での使用に適した超伝導線材を作製する場合には、低温・高成膜レートで成長させることが有効と言える。また、ナノロッド間に生じるナノパーティクルによって、磁束キルクの運動抑制も期待できる。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 23226014、25289358、15H04252、15K14301 及び 15K14302 の助成を受けたものである。

参考文献

- [1] J. L. M-Driscoll et al., Nat. Mater. 3 (2004) 439
- [2] Y. Ichino et al., IEEE TAS 25 (2015) 6604506
- [3] Y. Ichino et al., 2015 MRS Spring Meeting, VV6.02, Apr. 6-10, 2014, San Francisco, USA

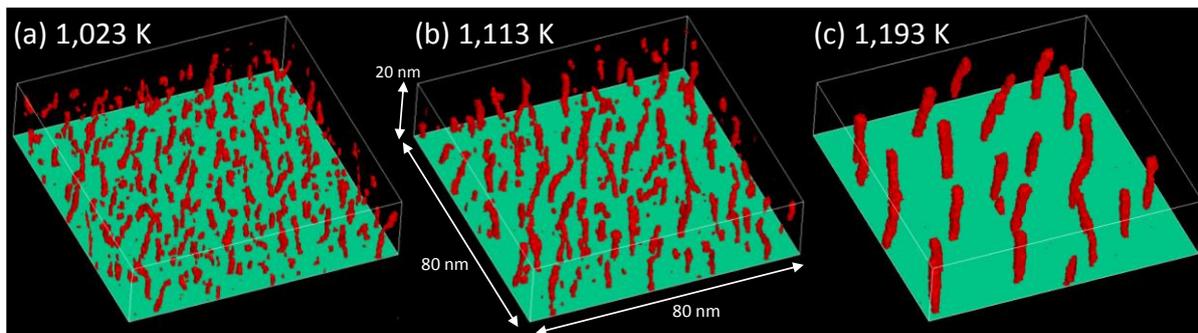


Fig. 1 Self-organizations at different growth temperatures of particle Bs within the matrix consisting of particle As. The deposition rate corresponds to 1,000 nm/hour in these simulations. We made the particle As transparent in this figures.