

薄膜結晶成長シミュレーションによる REBCO 薄膜中 BMO の 自己組織化メカニズムの検討

Investigation for BMO self-organization within REBCO thin film by means of thin film growth simulation

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

BaMO₃ (BMO, M=Zr, Sn, Hf など)を添加した 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した場合、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]。これらは量子化磁束のピンニングセンターとして非常に効果的であり、磁場中における臨界電流密度(J_c)を大幅に向上させる。しかし、この自己組織化の詳細なメカニズムは明らかにされていない。自己組織化のメカニズムを明らかにし、制御することができれば磁場中 J_c のさらなる向上が期待できる。本研究では、BMO の自己組織化メカニズムを明らかにする事を目的として、モンテカルロ法を用いて2相混合薄膜の結晶成長シミュレーションを行った。

2. シミュレーションモデル

図1に示したように、一辺 0.4 nm の立方体が三つ重なったA粒子と立方体一つから成るB粒子が基板表面に吸着し、ランダムウォークするモデルを考える。ここで、基板はA粒子で構成されているとした。基板上のある配置 i に吸着した粒子をランダムに移動させ配置 f にした場合、 i の配置エネルギー E_i と f の配置エネルギー E_f の差 $\Delta E = E_i - E_f$ が負の場合には f に移動させ、正ならば $\exp(-\Delta E/k_B T_s)$ の確率で f に移動させた。ここで k_B はボルツマン定数、 T_s は基板温度である。配置エネルギーとして、隣接粒子と下地粒子との間の結合エネルギー E_{AA} 、 E_{BB} そして E_{AB} を

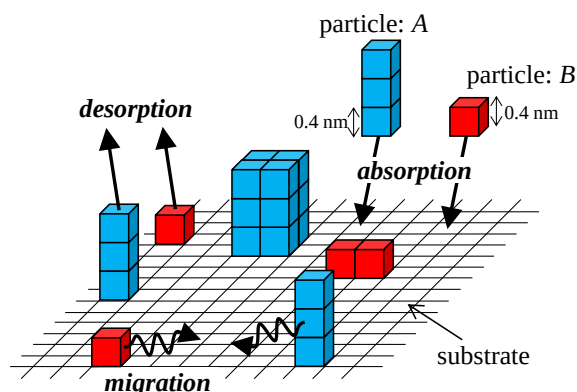


Fig. 1 Schematic drawing of 3D Monte Carlo model in this study. The substrate consists of the A particles.

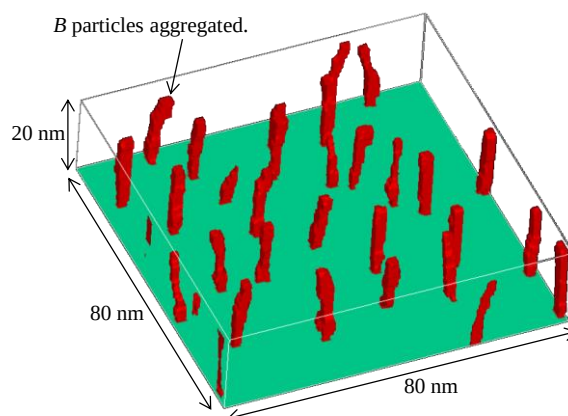


Fig. 2 Simulation result for the case of $E_{AA} = 2,000$ K, $E_{BB} = 3,000$ K, $E_{AB} = 500$ K, $E_{des} = 50,000$ K and $T_s = 1,023$ K. The volume fraction of the B particles is 3.0%. We made the A particles transparent in this figure.

用いた。また、粒子は $\exp(-E_{des}/k_B T_s)$ 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り気相粒子と固相粒子間の化学ポテンシャル差に相当する。

3. シミュレーション結果及び考察

図2にシミュレーション結果の一例を示す。図の条件ではB粒子が自己組織化し、ナノロッド状に成長した。その数密度 $\sigma =$ 約 $3,900/\mu\text{m}^2$ 、直径 $d =$ 約 3.2 nm であった。実際の試料においては、3.0 vol.% BHO 添加 SmBCO 薄膜を $T_s = 1,023$ K で作製した場合、 $\sigma =$ 約 $2,300/\mu\text{m}^2$ 、 $d =$ 約 6 nm であり、シミュレーション結果と完全に一致はしないものの同じオーダーであった。また、図2では基板表面に対して垂直に成長しているナノロッドに混じって、傾いて成長しているナノロッドも見られた。実際の試料においても、 $T_s = 1,023$ K の比較的低い温度では BHO ナノロッドが傾いて成長している結果が得られている。以上から、本シミュレーションで自己組織化を大まかに再現出来たと言える。

謝辞

本研究の一部は科学研究費補助金(23226014 及び 25289358)からの助成を受けて実施したものである。

参考文献

[1] J. L. M-Driscoll et al., Nat. Mater. 3 (2004) 439