

異なる BMO 添加量を持った REBCO 薄膜中における ナノロッド自己組織化の結晶成長シミュレーション

Crystal growth simulation for nanorods self-organization in REBCO thin films with various BMO volume fractions

名大未来研¹, 名大院工² ○一野 祐亮^{1,2}, 吉田 隆²

IMaSS, 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

パルスレーザー蒸着(PLD)法などの気相法で $\text{REBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ (REBCO, RE=Y, Sm, Gd など)薄膜を成膜する際に BaMO_3 (BMO, M=Zr, Sn, Hf など)を添加すると BMO が REBCO 中でナノロッドやナノパーティクルに自己組織化し、強力な磁束ピンニングセンターとなる。そのため、自己組織化機構を明らかにすることが重要である。これまで我々は、Monte Carlo (MC)法を用いて、成膜温度や成膜レートが自己組織化に与える影響について検討した[1]。

自己組織化は BMO 添加量にも影響を受けるため、本発表では、BMO 添加量が自己組織化に与える影響を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。基板上的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 $\exp(-E_{\text{des}}/k_B T_s)$ 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る。成長温度 (基板温度 T_s) を 1,193 K、成膜レートを 300 nm/h に固

定し、B 粒子の割合を 60 vol.%まで変化させた。

3. 結果及び考察

異なる BMO 添加量の条件下で、3D-MC シミュレーションを行った。図 1(a)に BMO 添加量に対するナノロッドの数密度と直径を示す。BMO 添加量の増加に対して直径は単調増加したが、数密度は最大値を持つ傾向を示した。

図 1(b)と(c)に BMO 添加量が 30 vol.%と 60 vol.%の場合の自己組織化形態を示す。BMO は赤で表されており、REBCO は見易さのために透明にしている。数密度が最大になる前の 30 vol.%では比較的太いナノロッドが密に成長していた。一方、数密度が最大値を超える 60 vol.%ではナノロッド同士が結合している形態が観察された。60 vol.%では、ナノロッド間隔よりも直径が大きくなるため、ナノロッド同士が結合することで見かけ上の数密度が低下したと考えられる。

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] Y. Ichino et al., IEEE TAS 25 (2015) 6604506; Y. Ichino et al., ISS2015, WTP-1, Nov. 16-18, 2015, Tokyo, Japan 他

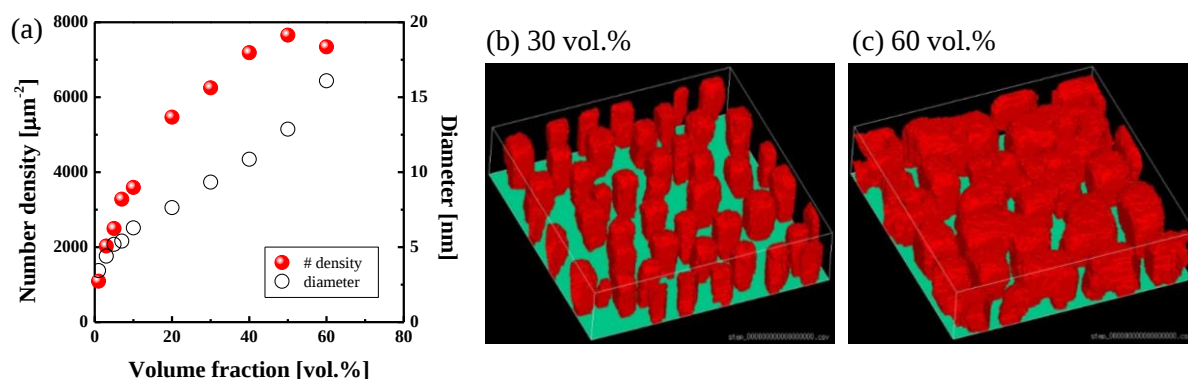


Fig. 1 BMO volume fraction dependence of nanorods morphologies. The growth temperature is 1,193 K and the deposition rate is 300 nm/h. (a) Number density and diameter of the nanorods as a function of VMO volume fraction. Figs. (b) and (c) correspond to BMO structures within the films.