

# 金属・ダイヤモンド界面でのグラファイト化とその剥離による ダイヤモンド表面エッチングの第一原理計算

## First-Principles Analysis of Diamond Surface Etching via Graphitization and Delamination at Metal-Diamond Interface

阪大院工<sup>1</sup>, 阪大ナノ<sup>2</sup>, 住友電気工業<sup>3</sup>

○稲垣 耕司<sup>1</sup>, John Isaac Enriquez<sup>1</sup>, 森川良忠<sup>1</sup>, 下司雅章<sup>2</sup>, 道内 真人<sup>3</sup>

Osaka Univ.<sup>1</sup>, Osaka Univ. Nano<sup>2</sup>, Sumitomo Electric Industries<sup>3</sup>,

○Kouji Inagaki<sup>1</sup>, John Isaac Enriquez<sup>1</sup>, Yoshitada Morikawa<sup>1</sup>, Masaaki Geshi<sup>2</sup>, Masato Michiuchi<sup>3</sup>

E-mail: inagaki@prec.eng.osaka-u.ac.jp

ダイヤモンド(111)表面はステップ周辺でグラファイト(GRP)化することが良く知られているが、下地との強固な炭素間結合により簡単には剥離できない。本研究では第一原理計算により、ダイヤモンド(DIA)と金属の界面を解析し、界面のDIA側に生成したGRPとDIAとの間の炭素間結合が金属原子の触媒作用により比較的容易に切断されることを示した。また、金属が鉄である場合に、その界面が分離する際にGRPがDIA表面から剥離することを示した。これによってDIA表面の化学反応に基づくGRP単層剥離による平滑化加工応用への可能性が示された。化学反応による現象でありDIA表面には余分な欠陥を残しておらずエッチングといえると考えている。計算には、我々が開発している第一原理計算アプリであるSTATE-senri<sup>1</sup>を用いた。金属としては鉄及びアルミを用い、ステップのあるDIA(111)表面との界面の構造を調べ、ステップ周辺でGRP構造の生成を確認した。鉄原子が炭素間結合に割り込むことによる炭素間結合切断のエネルギー障壁をNEB法により解析し、ステップの方向に沿って順に炭素間結合が切断されていくのに必要な反応障壁が0.8eV程度という低い高さであることが分かった。さらにGRP-DIA間の結合が切れた鉄-DIA

界面(Fig.(a))を引き離していくと、DIA表面からGRPシートが剥離することがわかった(Fig.(b))。一方、アルミの場合は、引き離しの解析で、アルミ表面層内部で破壊が生じることでGRP剥離は生じず、研磨剤材料として鉄が有効である可能性が示された。

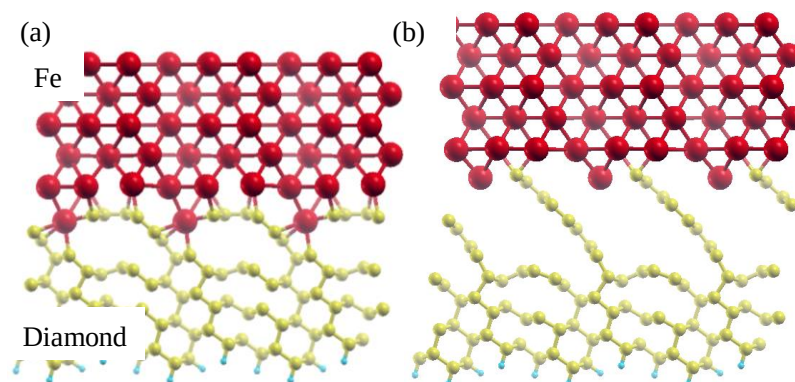


Fig. Atomic structure of metal(Fe)- diamond interface. (a) C-C bond broken with an Fe atom inserted in between the C-C. (b) After separation between Fe and diamond surface. Cleavage of graphite sheet from diamond surface is observed.

1) [http://www-cp.prec.eng.osaka-u.ac.jp/puki\\_state/](http://www-cp.prec.eng.osaka-u.ac.jp/puki_state/)、Y. Morikawa, Phys. Rev. B **63**, 033405 (2001).