

BaMO₃ 添加 VLS-REBa₂Cu₃O_y 膜のシミュレーションと組成偏析

The simulation of BaMO₃-doped VLS-REBa₂Cu₃O_y coated conductors and component segregation

名大工¹, 愛工大² ◯(M1)有田 知徳¹, 一野 祐亮², 吉田 隆¹

Nagoya Univ.¹, Aichi Inst. of Technol.², ◯Tomonori Arita¹, Yusuke Ichino², Yutaka Yoshida¹

E-mail: arita.tomonori.n9@s.mail.nagoya-u.ac.jp

1.はじめに

我々はこれまで、液相を介した成長法である Vapor-Liquid-Solid(VLS) 成長法による REBa₂Cu₃O_y (REBCO)線材の高速成膜について報告した [1]。図 1 に人工ピン材料 BaHfO₃ (BHO)を 3vol.%添加して VLS-YBCO+BHO 膜の断面 TEM 像と EDX による Y および Hf 元素の組成分布を示す。図 1 より、層状に Hf(BHO)が多く、Y (YBCO)が存在しない領域が存在し、BHO が偏析していることが確認される。そこで、BHO の組織制御を行うためには BMO 偏析機構を明らかにする必要がある。

これまで、VLS 成長法を模擬した BaMO₃ (BMO)添加 REBCO 薄膜結晶成長シミュレーションを開発してきたが、BMO が偏析する結果は確認されなかった[2, 3]。そこで、本研究では前報[3]で用いたシミュレーションを改良することで BMO 粒子の偏析を再現し、VLS 成長法における BMO 偏析の原因について検討する。

2.シミュレーション方法

本研究では、前報[3]で検討した Monte Carlo 法を用いた結晶成長シミュレーションを改良したものを使用した。液相成長を扱うため、分子どうしの結合エネルギーに加えて液相が存在することによる溶媒和も考慮したものとなっている。これまで、REBCO および BMO の溶媒和のエネルギーや成膜温度の違いについて報告した[2, 3]。なお、本研究では新たに、表面拡散においてステップを乗り越えられるように設定した。また、気相成長を模擬したシミュレーションも実行し、比較を行うことで偏析の原因について検討した。

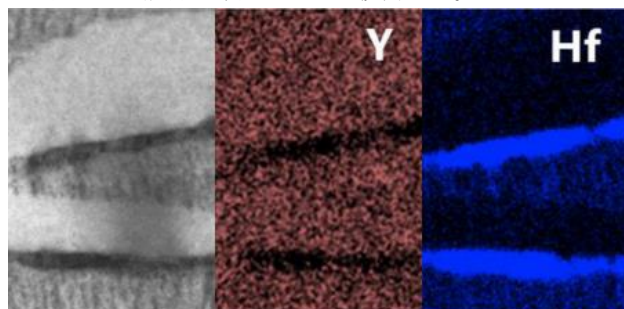


Fig. 1 The TEM image of VLS-YBCO+3vol.%BHO film. And the EDX mapping of Y and Hf. Hf (blue) was aggregated under the pure YBCO layer. [1]

3.結果と考察

図 2 に VLS 法で $T_s=1113$ K、BMO を 10 vol.%添加した際の REBCO 成長シミュレーション結果を示す。この図において、底面を種結晶(Solid layer)表面である REBCO(001)表面、最上面を液相表面としている。図より BMO はナノロッドなどを形成せず、BMO 偏析層のような巨大なクラスターを形成している様子が確認できた。また BMO クラスターの上面にも REBCO が成長し始めており、BMO 偏析層の上に REBCO のみの層が存在する図 1 の実験結果と類似した構造がみられた。この結果から、本シミュレーションによって実験結果を再現可能であると考えられる。また、当日は図 1 の膜と同じ添加量である BMO3vol.%添加のシミュレーション結果についても検討するとともに、気相成長の結果との比較を行い、VLS 成長において BMO が偏析する原因について述べる予定である。

謝辞

本研究の一部は JSPS 科研費(20H02682、19K22154)、(公財)中部電気利用基礎研究振興財団助成(R-02223)、NEDO、大倉和親記念財団及び日比科学技術振興財団の助成を受けて実施した。

参考文献

- [1] T. Ito et al. 2021 IEEE TAS 31 (2021) 6601205
- [2]一野祐亮 他, 第 69 回 応物学会春季学術講演会, 23a-D215-5 (2022).
- [3]有田知徳 他, 第 83 回 応物学会秋季学術講演会, 21p-A304-12 (2022)

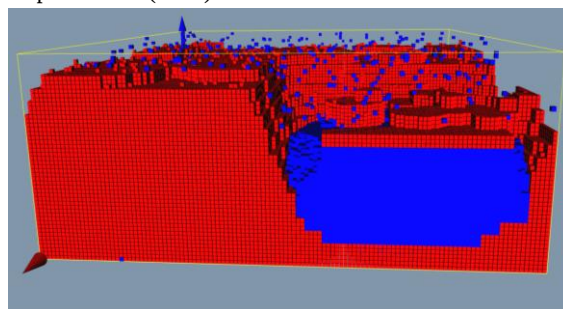


Fig. 2 Snapshot of VLS-REBCO simulation with 10vol.% BMO. The film is separated by BMO (blue) and pure-REBCO(red).