

Al₂O₃ 表面上における炭素膜の成長過程に関する研究

岳強

岡山大学大学院自然科学研究科

1. はじめに

非晶質炭素体は作製方法によって異なる sp³量を含むことができる。これにより、非晶質炭素体は特性を一定の範囲内で変えることができる。¹ 非晶質炭素体への研究に分子動力学シミュレーションを用いて、非晶質炭素体の成長過程を原子レベルから調べることができる。これまで、ダイヤモンドやシリコンなどの基板上的非晶質炭素体の成長は多く研究されてきた。^{2,3} サファイア基板はより高い汎用性を有しているが、これまでその上に非晶質炭素体の成長状況はまだ研究されていない。

2. シミュレーションの設定と実施

本研究は LAMMPS コード⁴を利用して分子動力学シミュレーションを行った。原子間の相互作用を表すよう、Reaxff 反応力場を用いた。⁵ また、基板原子が重ならないように、サファイアの慣用単位胞を直交化した。基板のサイズを 23.803 Å × 24.7368 Å × 12.994 Å に設定した。基板の表面との 140 Å のところから炭素単原子が一定の速度で一つずつ入射すると設定した。基板は、上から下へそれぞれに自由層、恒温層、固定層の3層に分けた。自由層にある原子はニュートン運動の法則に従って運動できるようにした。恒温層で温度が 300 K に維持されるようにした。また、固定層にある原子を固定し、無限大基板を模倣した。炭素粒子の入射時間間隔を 10 ps、タイムステップを 0.25 fs に設定した。また、堆積前と堆積後に 400 ps の熱緩和を行った。本研究は粒子の運動エネルギーを 10 eV、20 eV、30 eV、40 eV、50 eV、60 eV、70 eV、80 eV、90 eV、100 eV に変えて、膜の成長状態を調べた。

3. 分析と結果

炭素原子はサファイア基板内部に侵入できて、侵入深さは粒子の運動エネルギーの増加につれて大きくなった。サファイア基板中にある酸素原子の一部分は入射炭素粒子にエッチングされることも分かった。炭素粒子の入射量の増加とともに、炭素粒子、酸素粒子とアルミニウム粒子が混ざる遷移層が見られた。この遷移層の上に、純粋な炭素層が成長した。しかし、どんな粒子運動エネルギーを設定しても、大量の粒子が堆積した後（約 1800 個）、熱蓄積の問題が見られた。熱の蓄積が一定の程度に達すると、作製した膜は急に崩れる現象が発生した。

熱の蓄積は以下の原因に発生したと考えられる：（1）力場が妥当ではないこと。本研究は新たな力場を使用した。しかも、この力場は本研究に適切かどうかを事前に判断できなかった。

（2）入射粒子による熱の緩和は入射時間間隔の 10 ps より長いこと。入射した粒子の運動エネルギーは膜の表面に熱の発生を引き起こした。この熱を拡散させるように、システムに一定の冷却時間を与える必要がある。今回のシミュレーションにより、この冷却時間を 10 ps の以上に設定する必要があると思われる。（3）モデルの調整。熱の蓄積問題は先行研究にも存在する可能性がある。一部分の先行研究では自由層の形を円柱に調整して、その円柱の形をする

自由層の周りの温度をコントロールしている。

4. まとめ

本研究では、サファイア基板上の非晶質炭素膜の成長について研究した。研究により、純粋な炭素膜が成長する前に、遷移層が現れることが明らかになった。また、サファイア基板上に成膜すると、熱蓄積の問題が発生しやすいことを発見した。計算には熱を散逸する方法を取り込む必要がある。本研究は予定された目標に達していないが、将来のさらなる研究に経験を提供している。

参 考 文 献

- [1] A. Tyagi, R. S. Walia, Q. Murtaza, S. M. Pandey, P. K. Tyagi, B. Bajaj, A critical review of diamond like carbon coating for wear resistance applications, *Int. J. Refract. Met. H.* 78 (2019) 107-122.
- [2] T. Ma, Y-Z. Hu, H. Wang, X. Li, Microstructural and stress properties of ultrathin diamondlike carbon films during growth: Molecular dynamics simulations, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 035425.
- [3] D. Huang, J. Pu, Z. Lu, Q. Xue, Microstructure and surface roughness of graphite-like carbon films deposited on silicon substrate by molecular dynamic simulation, *Surf. Interface Anal.*, 44 (2012) 837-843.
- [4] A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, S. J. Plimpton, LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, *Comp. Phys. Comm.*, 271 (2022) 10817.
- [5] S. Hong, A. C. T. Van Duin, Atomistic-scale analysis of carbon coating and its effect on the oxidation of aluminum nanoparticles by ReaxFF-molecular dynamics simulations, *J. Phys. Chem. C.* 120 (2016) 9464-9474.