

プラズマ曝露により形成される材料中の局所構造解析
Analysis of local structures in plasma-damaged materials

京都大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻 推進工学分野 占部 継一郎

研究成果概要

窒化ホウ素 (Boron Nitride: BN) は高温等の過酷な環境下においても安定な絶縁体であり、電気推進器の内壁などに用いられ、航空宇宙工学における重要な材料である。BN 膜の代表的な作製手法であるプラズマプロセスでは、成膜中に意図しない局所構造 (欠陥) が形成されることが知られている。例えば、真空アーク放電を活用した成膜プロセスでは、電極由来の金属原子が BN 膜中に混入する[1]。これらの欠陥が BN 膜に与える影響を正確に理解し、膜特性を制御することが BN 膜応用技術の発展に必要である。本研究では、不純物侵入型欠陥を含む多層 BN 構造の電子状態解析結果から、欠陥が BN 膜特性に与える影響を予測し、実験結果と比較した。電子状態の解析には、密度汎関数理論[2]に基づく第一原理計算コード Quantum-Espresso[3]を用いた。

Fig. 1 に、本研究で解析した、金属原子を挿入した多層 BN 構造の一例を示す。金属原子は真空アーク放電の電極材料であるタングステン(W)とした。Fig. 2 に、W 混入率が異なる 4 種の BN 初期構造を構造緩和し、緩和後の BN 構造から得られた電子状態密度 (DOS) 分布を示す。W 混入により BN の禁制帯中にギャップ内準位が出現し、混入率増加に伴いギャップ内準位が伝導帯側に広がった。この DOS から BN 膜光学特性を予測すると、W 混入率増加によりギャップ内準位を介した光吸収過程が顕著になり、低エネルギー光子の吸収率増加が考えられる。この予測は実験により得られた W 混入率が異なる BN 薄膜の光消衰係数計測結果 (Fig. 3) と定性的に一致した。以上の知見は、第一原理計算によって BN 膜特性に欠陥が与える影響の解析が可能であることを示唆しており、本研究の計算手法を様々な BN および欠陥構造に適用することで BN 成膜プロセスの設計指針が得られることが期待される。

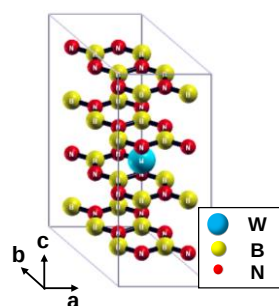


Fig. 1: Structure of multi-layer BN with W interstitial.

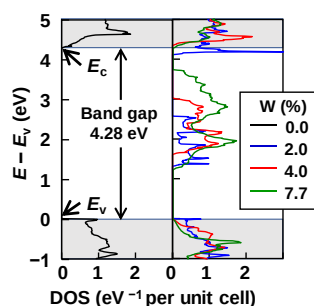


Fig. 2: Calculated DOS of multi-layer BN with W interstitials.

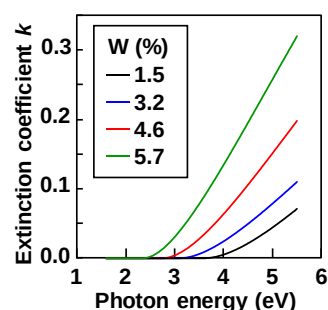


Fig. 3: Extinction coefficient of BN films with various W ratios measured by spectroscopic ellipsometry method.

参考文献:

[1] 朝本 他, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 21a-A302-6 (2023). [2] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, 1133 (1965). [3] P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter **29**, 465901 (2017).