

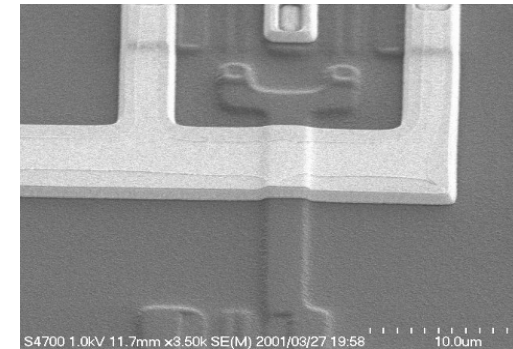
## 種々の非晶質薄膜材料

- ・DLC (ダイヤモンドライクカーボン、コーティング用など)
  - ・ $\text{SiO}_2$ 、 $\text{SiN}_x$  (半導体デバイス用絶縁膜)、etc
- ⇒重要な機能性材料

DLCコート  
工具製品



半導体  
デバイス



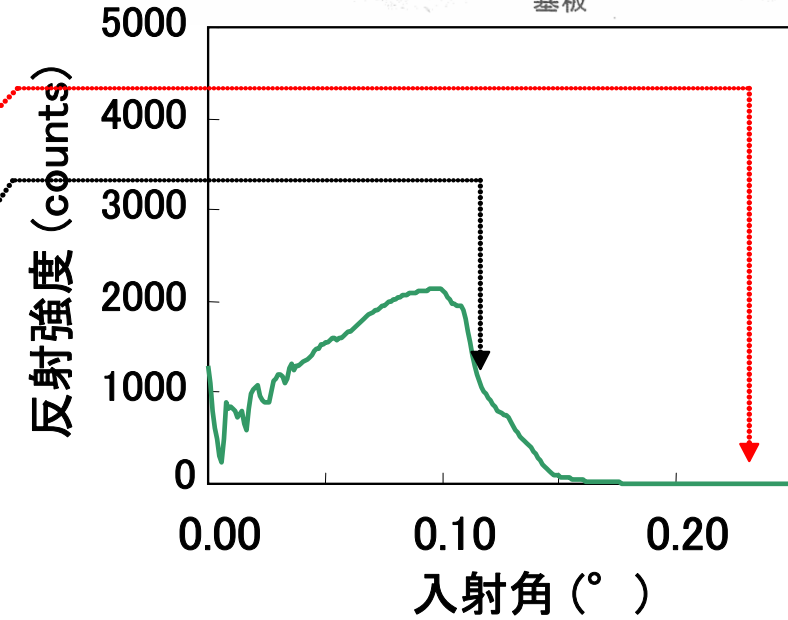
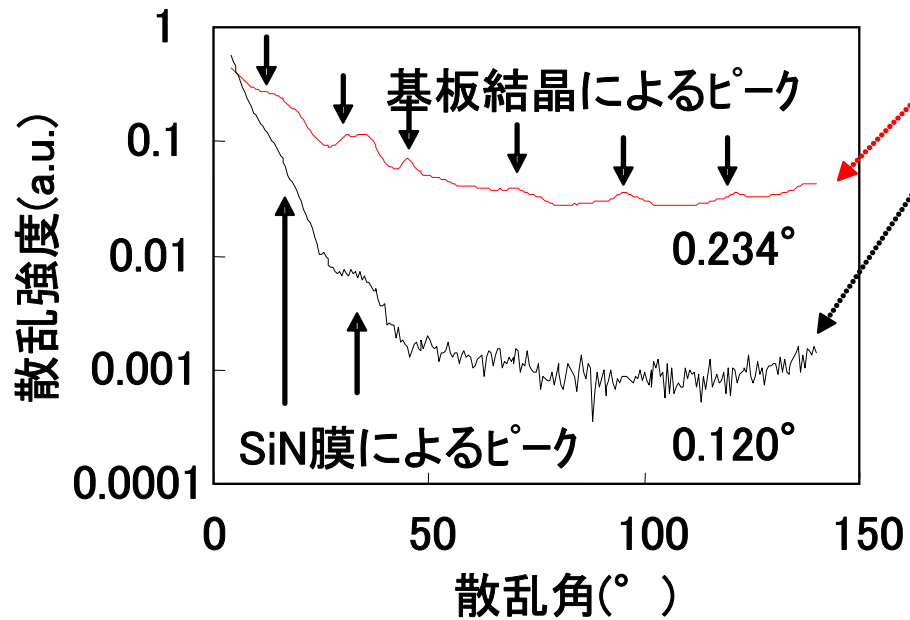
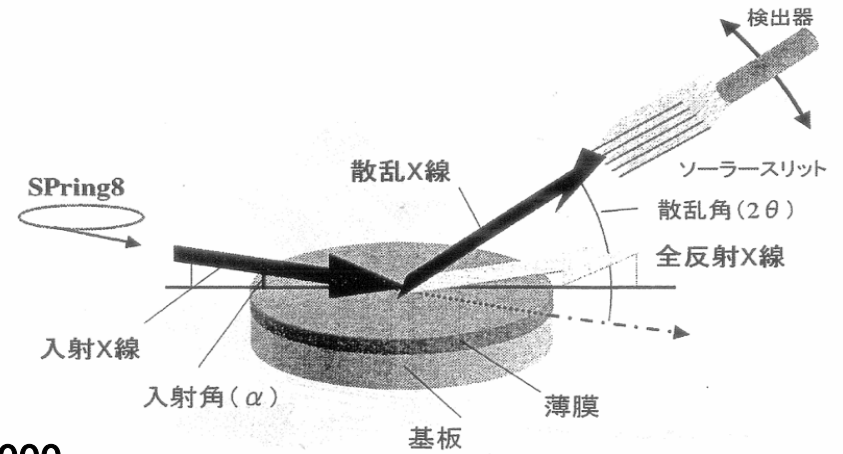
## 非晶質薄膜の特徴

- ・構造/物性に多様性
- ・構造解析が難しい(特に軽元素の場合)
- ・物性との相関＝未解明の部分多い

## 本研究の目的

- ・非晶質薄膜の構造解析法の確立  
(X線散乱測定&シミュレーションによるモデル化)

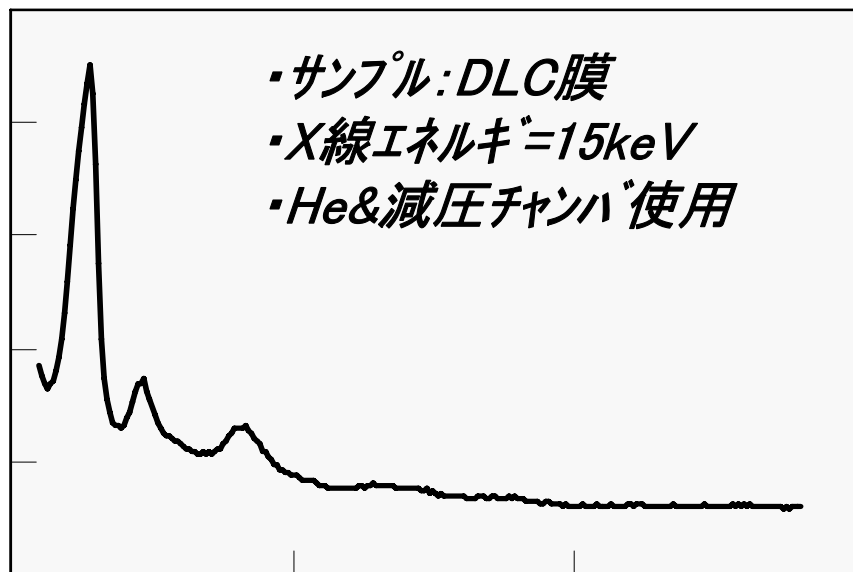
微小角入射法⇒  
薄膜サンプルに有効



しかし、 $\text{SiN}_x$ など軽元素膜では散乱強度が不足

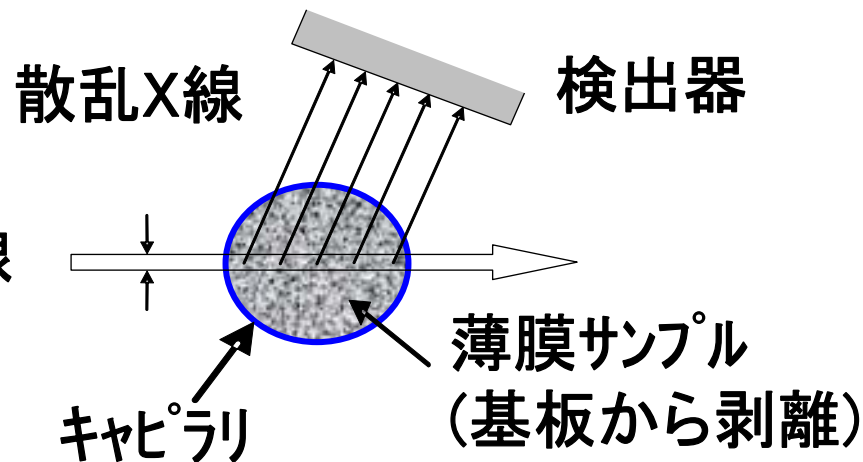
薄膜を基板から分離  
回収する技術を開発

散乱強度(arb.unit)



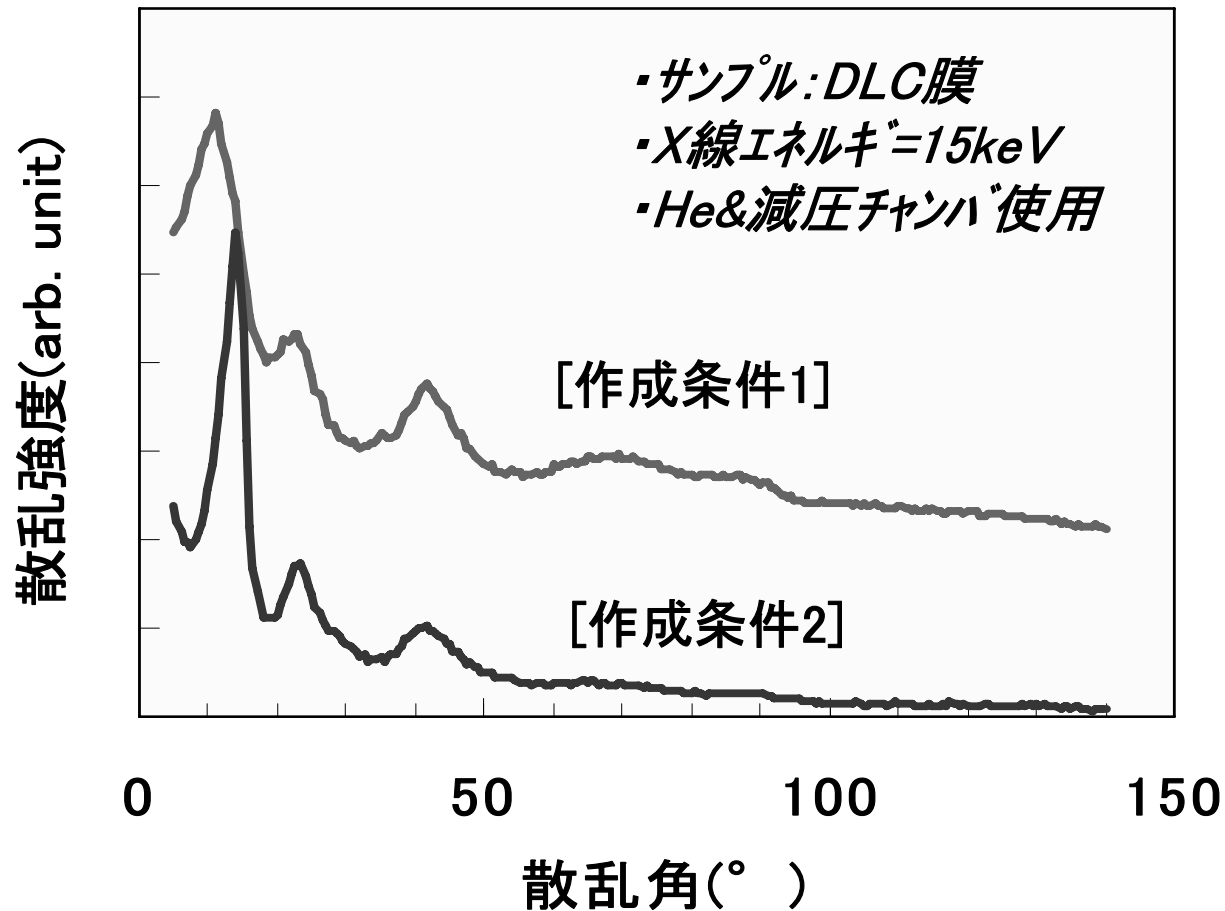
0 50 100 150  
散乱角(°)

入射X線  
(0.2mm)



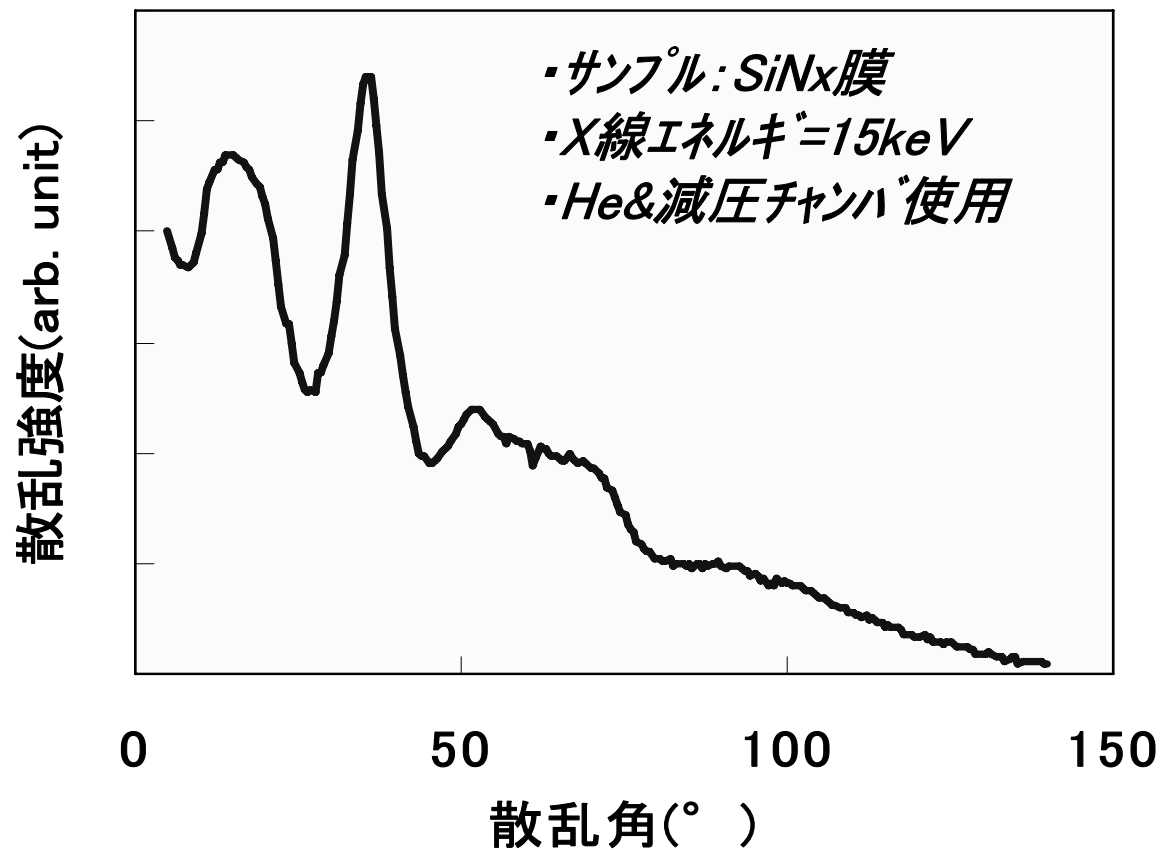
DLC薄膜でも十分な散  
乱強度が得られること  
を確認

## 散乱スペクトル⇒バックグラウンド&amp;コンプトン散乱補正



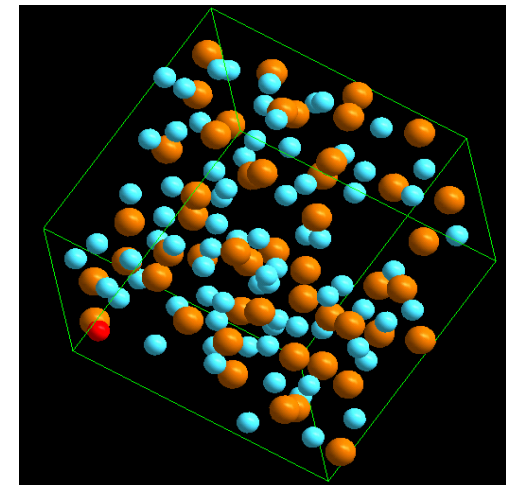
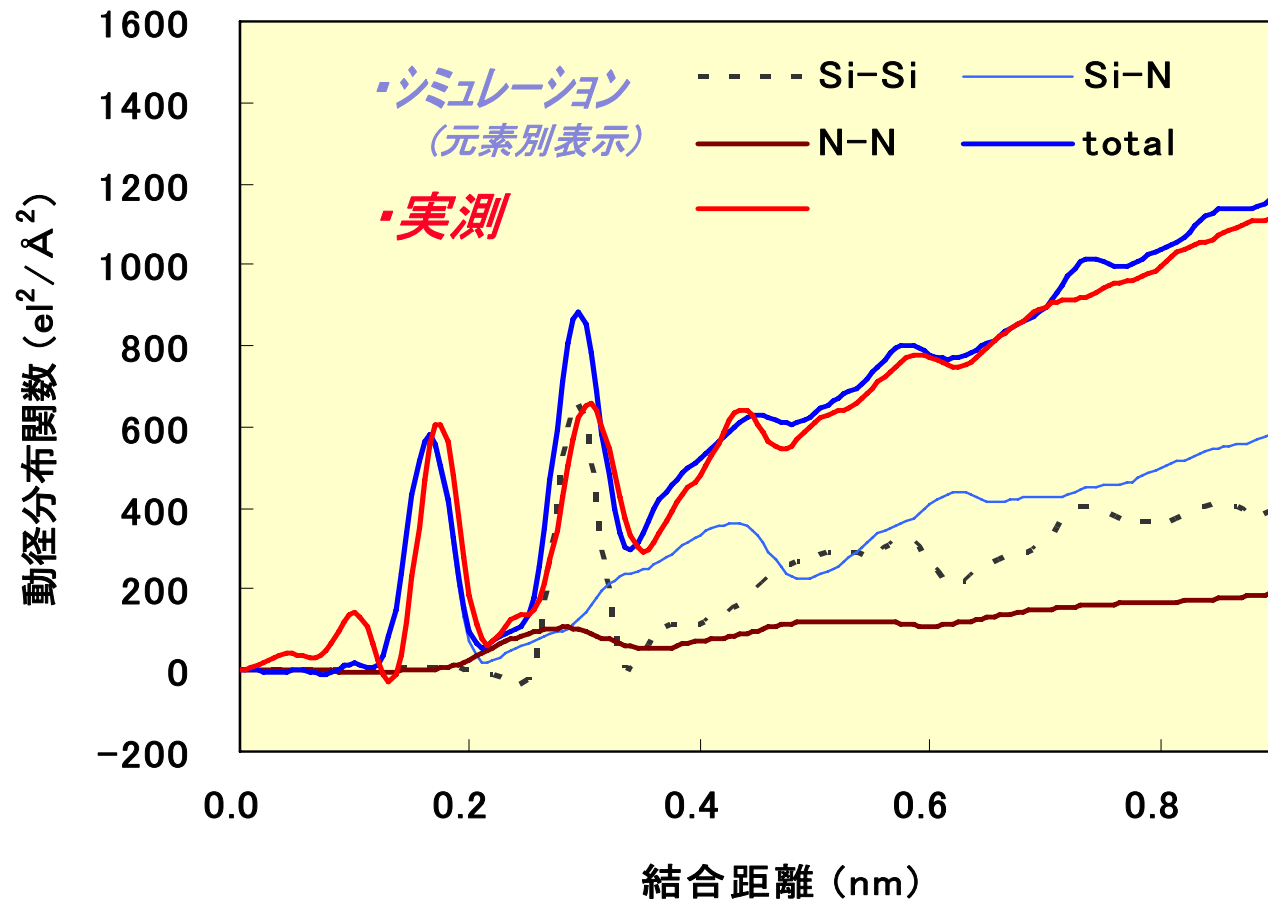
作成条件の違い  
による散乱スペクトル  
の差を検出

## 散乱スペクトル⇒バックグラウンド&amp;コンプトン散乱補正



- ・ピーク位置は文献と一致
- ・低角部にバックグラウンドの裾野あり (小角散乱??)

## MD(分子動力学)シミュレーションによる構造モデル作成



- ・7%のSi原子が配位数異常(5配位)
- ・MDポテンシャルの改良が必要

非晶質薄膜(DLC、 $\text{SiN}_x$ )に関し、X線散乱測定による構造解析を行った:

■ 測定方法の検討:

- ・微小角入射法では、散乱強度が不足
- ・キャピラリ法で測定可能に(薄膜の分離回収技術を開発)

■ DLC膜に関する結果

- ・2種類のDLCで、散乱スペクトルの違いを検出

■  $\text{SiN}_x$ 膜に関する結果

- ・MDシミュレーションによるモデル=実測RDFに近いが、配位数異常あり  
(ポテンシャルの改良が必要)