

スペクトルデータ駆動科学に基づく DLC 膜の炭素構造解析と膜密度予測 Spectral Data-Driven Science for DLC Films: Structural Analysis and Density Prediction

岡山理大¹, 三菱鉛筆²,

○(D)小佐野 芳寿^{1,2}, 中谷 達行²

Okayama Univ. of Sci.¹, Mitsubishi Pencil Co., Ltd.², °Yoshihisa Osano^{1,2}, Tatsuyuki Nakatani¹

E-mail: osanoy@mpuni.co.jp

【緒言】本研究では、Diamond-like Carbon (DLC) 膜の研究開発プロセスの効率化と高精度化をさらに推進することを目的に、スペクトルデータ駆動科学による炭素構造解析と物性予測を試みた。

【実験方法】本研究では、RF-CVD (Radio Frequency Chemical Vapor Deposition) 法により DLC 膜を成膜した。成膜条件は、圧力を 0.5~5 Pa、RF 出力を 30~110 W、CH₄ 流量を 5 sccm、成膜時間を 28 min.とした。続いて、成膜した DLC 膜の膜密度とラマンスペクトルを測定した。その後、最新の自動解析プログラムを用いて、ラマンスペクトルの 5 ピーク分離解析を行い、N, D, G⁻, G⁺, D'の各バンドの解析パラメータに基づいて膜構造を解析した[1,2]。さらに、PLS (Partial Least Squares) 回帰を用いてラマンスペクトルからの膜密度予測を試みた。

【結果と考察】Fig.1 に、膜密度とラマンスペクトルの解析パラメータの成膜条件に対する分布を可視化した。膜密度は RF 出力 30 W、圧力 2 Pa で最大となり、この条件からはずれるほど膜密度が低下する。5 ピーク分離解析パラメータは、膜密度との相関分析の結果、D バンド強度と G⁺バンドの半値全幅を重要指標として抽出した。これらに加え、Fig.1 には先行研究で sp³C-C 結合比率との相関が報告されている N バンド面積比も示している[3]。膜密度の分布と比較すると、膜密度は D バンド強度と負の相関を示し、G⁺バンドの半値全幅とは正の相関を示し、一方で、N バンド面積比との明確な相関は顕在化していないことがわかる。

これらの結果から、本研究で成膜した DLC 膜では、膜密度の変化は、グラファイト構造の影響をより強く受けており、アモルファス性が高く構造欠陥が少ないほど高密度化しやすいことが示唆された。また、Chemometrics を適用して精度と効率を高めたラマンスペクトルの 5 ピーク分離解析と、新たな可視化手法を組み合わせることで、膜物性と膜構造との関連性をより効率的に把握できることが示された。※ 膜密度予測についてはポスター発表にて詳細を報告する。

[1] S.Takabayashi *et al.*, *Diamond & Related Materials*, **81**, (2018) 16-26.

[2] Y. Osano *et al.*, *Journal of Photopolymer Science and Technology*, **37**, (2024), pp. 391-396.

[3] H. Fukue *et al.*, *Diamond and Related Materials*, **142** (2024) 110768.

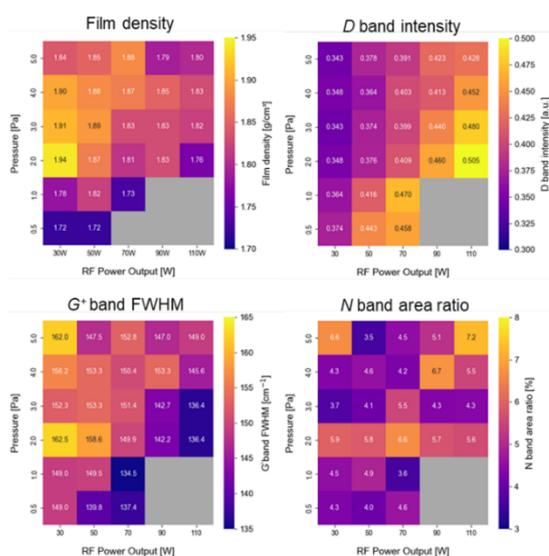


Fig. 1 Film density and Raman analysis parameters vs. deposition conditions