

# 材料プロセスにおける異常成長の制御

## Control of Abnormal Structure Formation in Materials Processing

(研究プロジェクト番号：JSPS-RFTF 96P00402)

プロジェクトリーダー

小宮山 宏 東京大学大学院工学系研究科・教授

コアメンバー

奥山喜久夫 広島大学大学院工学研究科・教授

松方 正彦 早稲田大学理工学部・教授

江頭 靖幸 大阪大学大学院基礎工学研究科・助教授



### 1. 研究目的

20世紀は、科学技術の飛躍的な進歩により、物質面での豊かさが実現され、人類の知識も膨大となった。一方で、問題の複雑化と領域の細分化が進み、全体像を把握できない困難も生じている。

金属やセラミックス、半導体、プラスチックといった材料をつくるプロセスに置いても、同様の困難が生じている。例えば、平滑な薄膜を作る際、思いがけず凹凸が生じるといった「異常成長」がしばしば起きている。材料種毎に専門分化している為、同じメカニズムで異常が生じても個別に対策が取られ、かつ“異常”である為、苦労して得た対策も報告されずに埋もれてしまうことが多い。

本プロジェクトでは以下を目的に研究を推進した。

散在している膨大な異常の知見の収集・解析による異常成長対策

“異常”に顕在化する材料の成長機構の理解に基づく、材料形態制御の為の知識基盤の構築

### 2. 研究成果概要

#### 2.1. 異常成長事例の収集・解析

シンポジウムの開催、企業・大学へのアンケート、文献調査を行い、気相/液相プロセス、膜/粒子といった多様な系での異常成長事例を700件以上収集した。その一部を図1に示すが、粒子、突起、ファイバー・ウィスカ、抜け等の多様な構造があることがわかる。その解析を通じ、次項の要素研究の対象を絞り込むとともに、後述のエキスパートシステムに登録している。



図1 収集した多様な異常成長

#### 2.2. 実験的要素研究

図2は、材料種を跨って現れる異常成長の一例で、成長表面への原料の拡散が律速となると現れることが、実験的にもシミュレーションによっても実証された。また、この特異な形状から表面反応の速度情報を抽出する解析手法も確立した。

この様なマクロな“異常”の解析を進める一方、よりミクロな現象解明も行った。図3は、 $\text{SiO}_2$ 上にAuをスパッタリングした材料の透過型電子顕微鏡写真で、成長の初期はナノ粒子がマイグレーションと融合を繰り返し、堆積量が増大すると連続膜に移行することが分かった。CuやGaAs等の様々な材料でナノ粒子が“自発的”に生成し、更に基板の表面修飾によりこの構造を制御できることを確認、ナノテクノロジーへの応用も検討している。

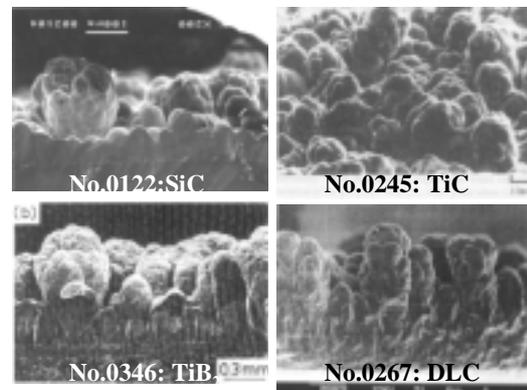


図2 拡散律速下での異常突起成長

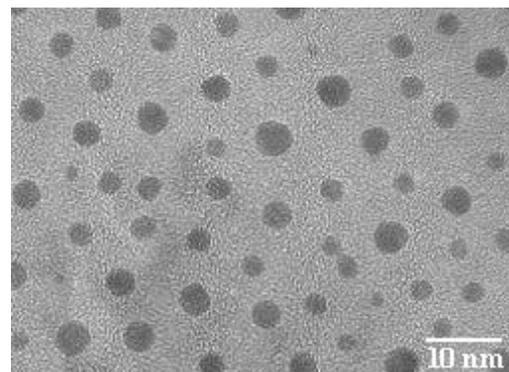


図3 自発的に形成される金ナノ粒子

### 2.3. コンピュータシミュレーション

一方で、材料の成長過程を再現するモンテカルロシミュレーションも開発した。材料の合成条件に対応する、入力パラメータを変えて計算することで、材料構造の予測や異常を防ぐプロセス条件の算出だけでなく、成長の過程の動的・視覚的理解も可能とした(図4)。



図4 シミュレーションでの異常の再現

る異常成長の知識を構造化し、異常の解決支援、材料プロセスの教育支援に利用できる、エキスパートシステムを開発・公開した。

### 2.4. 知識の構造化・Web コンテンツ公開

これらの解析を通じて、成長機構と構造が密接に対応することが分かった。全ての事例に関して、その機構や対策を明らかにするのは不可能に近いが、構造に関しては電子顕微鏡等で情報が得られる。そこで、構造に関する複数の要素を軸とする空間を考え、その上に事例をマッピングし整理した。プロセスに関しても、同様に要素を抽出し、要素でプロセスモデルを再構成することで一般化し、ディレクトリ構造に整理した。これらの多様な知識を相互に関連付け、構造形成に関する知識を構造化した。

材料プロセスをプロセス - 構造 - 機能と捉え、ここではプロセス - 構造の知識を構造化し、事例を接続したと位置付けられる。上述の知識構造に従ってコンピュータ環境に実装し、異常成長対策や材料の形態発現の学習等に利用できるシステム(図5)として、インターネット上に公開した。



図5 エキスパートシステムホームページ

<http://www.a-growth.t.u-tokyo.ac.jp/>

## 3. 結言

材料開発・生産現場で共通の問題となってい