

令和 3年 3月 4日

若手研究者海外挑戦プログラム報告書

独立行政法人日本学術振興会 理事長 殿

受付番号 202180035

氏 名 上根直也

(氏名は必ず自署すること)

若手研究者海外挑戦プログラムによる派遣を終了しましたので、下記のとおり報告いたします。
なお、下記記載の内容については相違ありません。

記

- 1 派遣先：都市名 State college, PA (国名 United States)
- 2 研究課題名（和文）：化学気相堆積および原子層堆積における堆積機構の反応性力場分子動力的研究
- 3 派遣期間：令和 3年 9月 21日 ~ 令和 4年 3月 2日 (163日間)
- 4 受入機関名・部局名：Pennsylvania state University, Dep. of Mechanical Engineering
- 5 派遣先で従事した研究内容と研究状況（1/2 ページ程度を目安に記入すること）

派遣先である、Pennsylvania state UniversityのAdri van Duin研究室は、独自の計算技術である反応性力場分子動力学法（Reactive Force Field Molecular Dynamics: ReaxFF MD法）を用いることで幅広い工学的課題に取り組んでいる研究室である。自身は修士課程より同手法を用いて化学気相堆積法（CVD法）、原子層堆積法（ALD）法による薄膜成長計算を実施してきた。ReaxFF MD法に限らず、分子動力学法は力場開発が計算の妥当性を決定すると言っても良いほどに重要な要素を占めている。特にReaxFF MD法は原子間の結合の形成と開裂、すなわち化学反応を取り扱うため、その力場開発は古典的な力場開発と比べて極めて複雑である。

今回の研究内容は、 BCl_3 および NH_3 からホウ素窒化物（Boron Nitride: BN）のALD成長を再現するための力場開発である。BNはホウ素と窒素が交互に結合した化合物の総称であり、*h*-BN, *c*-BN, *w*-BNなどの多様な構造が知られている。特に*h*-BNはグラフェンと同様の面内格子定数で原子レベルでの平滑性を有し、電荷のない界面により、2次元（2D）材料ベースの電子機器の有望な誘電体とみなされている。具体的な製造方法としては、機械的な剥離法、CVD法、エピタキシン法などが一般的だが、近年ではその原子レベルでの平滑性の高さなどの利点からALD法による製造に注目が集まっている。しかしALD法は工学的な有用性が優先されるがあまり、基礎的な知見は明らかになっていない部分が多い。例えば、ALD法の特徴の1つとして挙げられるのが、その特異的温度範囲である。詳細は割愛するが、特定の温度範囲でしかALD法の原子レベルでの平滑性は得られない。これほど必要な特性にも関わらず、その発現機構および定量的な推定はなされておらず、実験的に後から確かめる程度である。我々は、ReaxFF MD法によりその発現機構や定量的な見積りに挑戦している。

6 研究成果発表等の見通し及び今後の研究計画の方向性 (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

はじめに今後の研究計画の方向性について述べる前に、現在の力場の開発状況を概観する。現在は、 BCl_3 前駆体がOH基で終端されたSi(100)表面において反応する初期反応のモデリングを実施している。今後はこのモデリングを NH_3 の表面反応に拡張し、また初期反応であるSi表面だけでなく、いわゆるサイクル反応であるBN表面における BCl_3 および NH_3 の反応をも再現することで、ALD法によるBN成長を実現するための力場を完成させるのが当面の研究計画の方向性である。力場の構築が完成した後には、ALDプロセスシミュレーションを実施することで、特異的温度範囲の発現機構や定量的な見積りに挑戦する

また、これらの研究成果について、既に来年度2件の国際会議での報告を予定している。1つは昨年度も参加したALD/ALE2022であり、その名の通りALD関連では世界最大の国際会議である。加えて、来年度中に現在までの研究成果を学術雑誌 (Applied Surface Scienceあるいは、ACS Applied Materials And Interfaces) への投稿を予定しており、継続的に研究成果を国内外に向け発信する。

7 本プログラムに採用されたことで得られたこと (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

研究面に関しては、ReaxFF MD法の力場開発を現地で直接Adri van Duin教授にご指導頂くことが出来たことは極めて有益な経験であった。修士課程では既に開発された力場を使用するか、僅かなアップデートを加えるのみであり、各パラメータがどのような物理化学的な意味を持っているのかについては明確に理解できていなかった。しかし今回、Adri van Duin教授やポスドク、同じくVisiting scholarとして在籍していたメンバーなどに助けられて、力場開発を進めることが出来た。

次に語学面である。Adri van Duin研究室には多様な国々から研究者らが集まっており、当然のことながら英語が公用語であった。自身も渡米半年前程度から本格的に英語の勉強をしていたのだが、実際に米国に来てみると、その速度や各国の独特のアクセントもあり非常に苦労した。そんな中で身につけた重要なスキルとして強調したいのは、英会話能力以上に、言語が完璧に分からなくてもプロジェクトを前に進められる力である。具体的には、打合せの前日に議論したい内容をメールで送っておくことで、実際に打合せの場での内容をある程度絞っておく、打合せの様子を動画で残しておくように依頼して、後から時間を掛けてでも理解することなどが挙げられる。語学力はもちろん重要であるが、多様なアクセントやリズムを理解しておくことは容易ではないことを考えると、このスキルは今後も非常に役に立つだろうと確信している。

3つ目に文化面である。米国と日本の違いについて、この紙面上で語れることは非常に限られているが、米国人の根幹に自由主義が根付いていることが強く実感した。例えば一般的にレストランでも注文する際に聞かれる質問の数は日本とは比にならない。それは全ての物事には個人の選択の自由があるべきであるという自由主義の現れであるとNew York出身のポスドクが言っていた。

最後になりましたが、非常に恵まれた研究環境において、優秀な研究者や学生とともにAdri van Duin研究室で学ぶ機会を与えてくださった本プログラムに深く感謝致します。