

5. 成果の公開状況

5.1 出願特許一覧

5.1.1 国内出願

平成7年度

- | | |
|-----------|-----------------------------|
| (1) 発明の名称 | 走査型プローブ顕微鏡における超短パルス高電圧印加方法 |
| 提出日 | 平成7年12月26日 |
| 発明者 | 森 勇藏 (大阪大学教授)、坂本正雄 (新技術事業団) |
| 特許出願人 | 新技術事業団 |

平成8年度

- | | |
|-----------|-----------------------------|
| (1) 発明の名称 | 高密度ラジカル反応による高能率加工方法に用いる回転電極 |
| 提出日 | 平成8年7月8日 |
| 発明者 | 森 勇藏、石川俊夫 |
| 特許出願人 | 新技術事業団 |

平成9年度

- | | |
|-----------|-------------------------------|
| (1) 発明の名称 | 固体材料供給方法 |
| 発明者 | 市丸 広志、中川 伸介 |
| 出願人 | 科学技術振興事業団、セントラル硝子株式会社、森 勇藏 |
| 出願日 | 平成9年6月13日 |
| (2) 発明の名称 | 回転電極を用いた高密度ラジカル反応による高能率加工装置 |
| 発明者 | 森 勇藏、赤田 浩三 |
| 出願人 | 科学技術振興事業団、明昌機工株式会社、森 勇藏 |
| 出願日 | 平成9年9月30日 |
| (3) 発明の名称 | 回転電極を用いた高密度ラジカル反応による高能率加工装置 |
| 発明者 | 森 勇藏、赤田 浩三 |
| 出願人 | 科学技術振興事業団、明昌機工株式会社、森 勇藏 |
| 出願日 | 平成9年9月30日 |
| (4) 発明の名称 | 研磨装置 |
| 発明者 | 森 勇藏、平岡 大治、浜崎 耕二、松村 謙二郎、川口 幸志 |
| 出願人 | 森 勇藏、科学技術振興事業団、光洋精工株式会社 |
| 出願日 | 平成9年12月9日 |
| (5) 発明の名称 | 純水用アキュムレータ |
| 発明者 | 森 勇藏、平岡 大治、浜崎 耕二 |
| 出願人 | 森 勇藏、科学技術振興事業団、光洋精工株式会社 |
| 出願日 | 平成9年12月9日 |
| (6) 発明の名称 | シール装置 |
| 発明者 | 森 勇藏、浜崎 耕二、平岡 大治 |
| 出願人 | 森 勇藏、科学技術振興事業団、光洋精工株式会社 |
| 出願日 | 平成9年12月9日 |

- (7) 発明の名称 研磨装置
 発明者 森 勇藏、浜崎 耕二、平岡 大治
 出願人 森 勇藏、科学技術振興事業団、光洋精工株式会社
 出願日 平成 9 年 12 月 9 日
- (8) 発明の名称 研磨装置
 発明者 森 勇藏、浜崎 耕二、平岡 大治
 出願人 森 勇藏、科学技術振興事業団、光洋精工株式会社
 出願日 平成 9 年 12 月 9 日
- (9) 発明の名称 静圧送りねじ機構
 発明者 森 勇藏、平岡 大治
 出願人 森 勇藏、科学技術振興事業団、光洋精工株式会社
 出願日 平成 9 年 12 月 9 日
- (10) 発明の名称 微粒子測定装置の光学系
 発明者 渡辺 伸一郎、森 勇藏
 出願人 森 勇藏、科学技術振興事業団、日本分光株式会社
 出願日 平成 9 年 12 月 25 日
- (11) 発明の名称 試料ステージ及びそれを用いた粒径計測装置
 発明者 渡辺 伸一郎、森 勇藏
 出願人 森 勇藏、科学技術振興事業団、日本分光株式会社
 出願日 平成 10 年 3 月 30 日

平成 10 年度

- (1) 発明の名称 高剪断流による高能率濾過方法及びその装置
 発明者 森 勇藏、津村 尚史
 出願人 科学技術振興事業団、森 勇藏、株式会社ジェイテック
 出願日 平成 10 年 7 月 7 日
- (2) 発明の名称 走査型プローブ顕微鏡に用いる超短パルス高電圧発生装置
 発明者 森 勇藏、堤建一、岩槻正志
 出願人 森 勇藏、日本電子株式会社、科学技術振興事業団
 出願日 平成 10 年 8 月 28 日
- (3) 発明の名称 高速剪断流による洗浄方法
 発明者 森 勇藏、石川俊夫
 出願人 科学技術振興事業団
 出願日 出願準備中
- (4) 発明の名称 超純水の水酸化物イオンによる洗浄方法
 発明者 森 勇藏、石川俊夫
 出願人 科学技術振興事業団
 出願日 出願準備中
- (5) 発明の名称 高速剪断流による加工方法
 発明者 森 勇藏、石川俊夫
 出願人 科学技術振興事業団

出願日	出願準備中
(6) 発明の名称	超純水の水酸化物イオンによる加工方法
発明者	森 勇藏、石川俊夫
出願人	科学技術振興事業団
出願日	出願準備中

5.1.2 海外出願

平成9年度

- (1) 発明の名称 「走査型プローブ顕微鏡による元素分析法、及びそれに用いる超短パルス高電圧印加方法」について
- | | |
|-------------|-------------|
| PCT 出願日 | 1995年12月26日 |
| PCT 出願の移行出願 | |
| アメリカへの移行 | 1997年6月25日 |
| EPC への移行 | 1997年6月25日 |
| 発明者 | 森 勇藏、坂本正雄 |
| 出願人 | 新技術事業団 |
- (2) 発明の名称 「回転電極を用いた高密度ラジカル反応による高能率加工方法及びその装置並びにそれに用いる回転電極」について
- | | |
|-------------|------------|
| PCT 出願日 | 1996年7月11日 |
| PCT 出願の移行出願 | |
| アメリカへの移行 | 1997年3月11日 |
| EPC への移行 | 1997年3月11日 |
| 発明者 | 森 勇藏、石川俊夫 |
| 出願人 | 新技術事業団 |

5.1.3 その他関連特許出願

- (1) 発明の名称 プラズマ洗浄方法及びその装置
- | | |
|-----|-------------------|
| 発明者 | 森 勇藏、村井正巳他 |
| 出願人 | セイコーエプソン株式会社、森 勇藏 |
| 出願年 | 平成4年 |
- (2) 発明の名称 ラジカル反応による有機物質の加工方法及び装置
- | | |
|-----|----------------------|
| 発明者 | 森 勇藏、関正治他 |
| 出願人 | 新技術事業団、日東電工株式会社、森 勇藏 |
| 出願年 | 平成4年 |
- (3) 発明の名称 プラズマ CVM 加工電極
- | | |
|-----|-------------------|
| 発明者 | 谷 健徳 |
| 出願人 | 新技術事業団、大阪富士工業株式会社 |
| 出願年 | 平成5年 |
- (4) 発明の名称 プラズマ CVM における残留不純物低減法
- | | |
|-----|------------|
| 発明者 | 森 勇藏、中川伸介他 |
|-----|------------|

- | | |
|-----------|---------------------|
| 出願人 | 森 勇藏、セントラル硝子株式会社 |
| 出願年 | 平成 6 年 |
| (5) 発明の名称 | プラズマ CVM 加工用ガス |
| 発明者 | 森 勇藏、中川伸介他 |
| 出願人 | 森 勇藏、セントラル硝子株式会社 |
| 出願年 | 平成 6 年 |
| (6) 発明の名称 | 多孔体の処理方法及び装置 |
| 発明者 | 森 勇藏、小田高司他 |
| 出願人 | 森 勇藏、日東電工株式会社 |
| 出願年 | 平成 7 年 |
| (7) 発明の名称 | 多孔体の処理方法及び装置 |
| 発明者 | 森 勇藏、小田高司他 |
| 出願人 | 森 勇藏、日東電工株式会社 |
| 出願年 | 平成 7 年 |
| (8) 発明の名称 | プラズマ CVM 排ガスの精製回収方法 |
| 発明者 | 森 勇藏、中川伸介他 |
| 出願人 | 森 勇藏、セントラル硝子株式会社 |
| 出願年 | 平成 8 年 |

5.2 外部発表一覧

平成 6 年度

- ・"材料表面現象の第一原理分子動力学シミュレーションーシリコン単結晶(001)表面の水素終端化反応ー"
広瀬喜久治、後藤英和、土屋八郎、森 勇藏、遠藤勝義、山内和人；精密工学会誌，60 [3] (1994) 402
- ・"水分子と相互作用するシリコン単結晶(001)水素終端化表面の第一原理分子動力学シミュレーション"
広瀬喜久治、後藤英和、土屋八郎、森 勇藏、遠藤勝義、山内和人；精密工学会誌，60 [98] (1994)113
- ・"プラズマ CVM に関する研究ーF系およびCl系ガスを用いたSiの加工特性ー"
森 勇藏、広瀬喜久治、山内和人、後藤英和、山村和也、佐野泰久；精密工学会 1994 年度関西地方定期学術講演会講演論文集，p117
- ・"プラズマ CVM に関する研究ーハロゲンとSiの表面反応の第一原理分子動力学シミュレーションー"
森 勇藏、広瀬喜久治、山内和人、後藤英和、山村和也、佐野泰久；1994 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集，p643

平成7年度

- ・"プラズマ CVM における加工現象の第一原理分子動力学シミュレーション(第3報)-Si 表面とハロゲン原子の相互作用の結合次数による解析-"
山村和也、佐野泰久、山内和人、広瀬喜久治、後藤英和、坂本正雄、森 勇藏；1995 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, p175
- ・"EEM における加工現象の第一原理分子動力学シミュレーション(第一報)-Si 表面と SiO₂ 粒子の相互作用の結合次数による解析-"
山内和人、山村和也、佐野泰久、広瀬喜久治、後藤英和、坂本正雄、森 勇藏；1995 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, p437
- ・"Si(001)-2×1 再構成表面におけるアンモニア分子の解離吸着過程の第一原理分子動力学シミュレーション(第一報)"
垣内弘章、広瀬喜久治、後藤英和、森 勇藏、芳井熊安、安武 潔、坂本正雄、堤 建一；1995 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, p793
- ・"プラズマ CVM における加工現象の第一原理分子動力学シミュレーション(第4報)-Si 表面とハロゲン原子の相互作用の解析(その2)-"
山村和也、佐野泰久、山内和人、広瀬喜久治、後藤英和、坂本正雄、森 勇藏；精密工学会 1995 年度関西地方定期学術講演会講演論文集, p5
- ・"EEM における加工現象の第一原理分子動力学シミュレーション(第2報)-SiO₂ による Si(001)の加工-"
山内和人、山村和也、佐野泰久、広瀬喜久治、後藤英和、坂本正雄、森 勇藏；精密工学会 1995 年度関西地方定期学術講演会講演論文集, p3
- ・"First-Principle Molecular-Dynamics Simulation of Interaction Between Oxide and Si Surface in EEM(Elastic Emission Machining)"
Kazuto Yamauchi, Kazuya Yamamura, Yasuhisa Sano, Kikuji Hirose, Hidekazu Goto, Masao Sakamoto and Yuzo Mori ; Workshop on Computational Methods as Applied to Industrial Problems, September 21-22,1995,Tukuba,Japan
- ・"First-Principle molecular-dynamics simulations of H-terminated Si(001)surface interacting with H₂O molecule"
Hidekazu Goto, Kikuji Hirose and Yuzo Mori; Workshop on Computational Methods as Applied to Industrial Problems, ,September 21-22,1995,Tukuba,Japan
- ・"First-principles Molecular-dynamics Simulations of Ammonia Adsorption on Si(001) Surface"

K. Yasutake, K. Hirose, H. Goto, Y. Mori, K. Yoshii, H. Kakiuchi, M. Sakamoto and K. Tsutsumi; Workshop on Computational Methods as Applied to Industrial Problems, September 21-22, 1995, Tukuba, Japan

- ・"プラズマ CVM における加工現象の第一原理分子動力学シミュレーション(第 5 報)－Si 表面とハロゲン原子の相互作用の解析(その 3)－"
山村和也、佐野泰久、山内和人、広瀬喜久治、後藤英和、坂本正雄、森 勇藏; 1995 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, p625
- ・"Si(001)表面におけるアンモニア吸着過程の第一原理分子動力学シミュレーション"
広瀬喜久治、後藤英和、森 勇藏、芳井熊安、安武 潔、垣内弘章、坂本正雄、堤 建一; 精密工学会誌, 61[12](1995), p1755
- ・"STM 探針をプローブとしたオージェ電子分光法の開発"
堤 建一、森 勇藏、坂本正雄、遠藤勝義; 1996 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, p965

平成 8 年度

- ・"Auger Electron Spectroscopy by using STM probe"
K.Tsutsumi, H.Okada, Y.Mori, M.Sakamoto, K.Yoshii, T.Kataoka K.Endo S.Shiota, Y.Nagasawa; The proceeding of "1996 the Japan-China Bilateral Symposium on Advanced Manufacturing Engineering (JCBSAME),p131
- ・"STM 探針をプローブとしたオージェ電子分光法の開発 (第 2 報)－高電圧極短パルス電圧下の原子の挙動－"
堤 建一、岡田浩巳、森 勇藏、坂本正雄、遠藤勝義 他; 1996 年度精密工学会関西地方定期学術講演会講演論文集, p125
- ・"STM 探針をプローブとした X 線分光分析法の開発"
堤 建一、岡田浩巳、森 勇藏、坂本正雄、遠藤勝義 他; 第 44 回応用物理学関係連合講演会講演予稿集, No.2(1997), p476

平成 9 年度

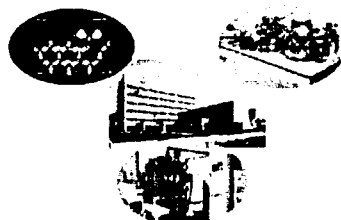
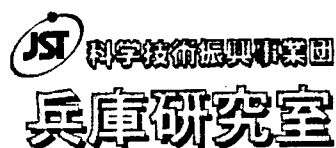
- ・"数値制御プラズマ CVM 加工装置の開発(第一報)"
森 勇藏、山村和也、佐野泰久、石川俊夫、岡本利樹、足立真士; 1997 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, p186
- ・"STM/STS によるハロゲン原子が吸着した Si(001)2x1 表面の観察"
岡田浩巳、森 勇藏、堤 建一、広瀬喜久治、遠藤勝義; 1998 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, p634

- ・”プラズマ CVM による高融点金属材料の表面加工”
柴原正文、西岡敏明、沖田耕三、森 勇藏、山村和也、佐野泰久；1997 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集， p189
- ・”プラズマ CVM による集積型 a-Si 太陽電池の高速パターニングに関する研究”
中野真吾、堂本洋一、平野 均、樽井久樹、木山精一、中野昭一、佐野泰久、山村和也、森 勇藏；1997 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集， p190

平成 10 年度

- ・”数値制御プラズマ CVM 加工装置の開発（第 2 報）”
森 勇藏、山村和也、佐野泰久；1998 年度精密工学会関西地方定期学術講演会講演論文集， p514
- ・”プラズマ CVM による高融点金属材料の表面加工（第 2 報）”
柴原正文、西岡敏明、脇坂彰一、沖田耕三、森 勇藏、山村和也、佐野泰久；1998 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集， p515
- ・”STM/STS によるハロゲン吸着 Si(001)2x1 表面の観察（第 2 報）”
岡田浩巳、堤 建一、石川俊夫、遠藤勝義、広瀬喜久治、森 勇藏、；1998 年度精密工学会関西地方定期学術講演会講演論文集， p91
- ・”STM-XMA 法における X 線発生過程のシミュレーション”
六車義宏、堤 建一、遠藤勝義、広瀬喜久治、森 勇藏；1998 年度精密工学会関西地方定期学術講演会講演論文集， p95
- ・”STM 探針をプローブとした X 線分光分析法の開発(2)”
森 勇藏、堤 建一、岡田浩巳、遠藤勝義、片岡俊彦、青野正和、広瀬喜久治、岩槻正志；第 59 回応用物理学会学術講演会講演予稿集(1998.9)， p561
- ・”STM/STS によるハロゲン吸着 Si(001)2x1 表面の観察（第 3 報）”
岡田浩巳、石川俊夫、中野雅美、遠藤勝義、広瀬喜久治、森 勇藏；1998 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集， p421

5.3 インターネット公開内容



共同研究テーマ

「固体表面の電子状態シミュレーションとソフト加工による実証」

- ① [兵庫研究室の概略](#)
- ② [共同研究体制](#)
- ③ [研究内容](#)
- ④ [研究業績](#)
- ⑤ [What's New \(最近のトピックス\)](#)

科学技術振興事業団 兵庫研究室

「固体表面の電子状態シミュレーションとソフト加工による実証」

[概要]

科学技術振興事業団では科学技術の研究開発促進のため様々な事業を行っておりますが、地域における研究交流という分野では地域での科学技術の振興と新産業・新技術創出の促進を目的とした「地域研究開発促進拠点支援事業」と、研究者が研究分野・所属組織を越えて共同して研究に取り組むことによって、互いの知識、技術を最大限に利用し合い、独創的な研究を円滑かつ効果的に進められるよう、共同研究を提案・支援・促進する「共同研究等促進事業」を推進しています。当兵庫研究室はこの「共同研究等促進事業」の第一号研究室として、平成5年度に発足しました。これに関連しての共同研究等促進事業の組織としては、共同研究推進委員会（委員長 森勇藏 大阪大学教授）の指導の下、兵庫研究室を核として、工業技術院大阪工業技術研究所、兵庫県立工業技術センター、並びに(財)大阪科学技術センター〔プラズマ CVM 応用技術研究会として企業・大阪大学が参加(事務局：大阪科学技術センター)〕が協力して、共同研究を行う体制を取っています。当研究室はこれらの部門と協調して、共同研究等促進事業が大きな成果に結びつくよう尽力しています。

兵庫研究室の研究テーマおよび内容については「[研究内容](#)」を参照

[研究室スタッフ]

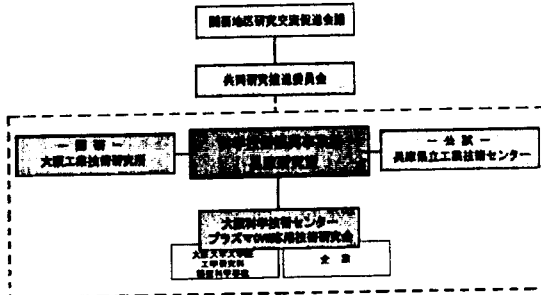
- | | |
|--------|--------------|
| ・ 研究主任 | 石川俊夫 |
| ・ 研究員 | 岡田浩巳
堤 建一 |
| ・ 事務参事 | 芝本亘司 |
| ・ 事務員 | 中山幸子 |

[連絡先]

〒660-0083
兵庫県尼崎市道意町 7-1-3 Aric 内
TEL: 06-415-2530 FAX: 06-415-2531
E-mail: hyogo@hyogo.jst.go.jp

共同研究体制

科学技術振興事業団の共同研究等促進事業のもとに平成5年度に兵庫研究室が設置され、そこを核として工業技術院大阪工業技術研究所、兵庫県立工業技術センター、(財)大阪科学技術センターと共に共同研究を展開しています。



☆ 各研究機関の詳細については、各枠内を直接クリックしてください。 ☆

[兵庫研究室のホームへ戻る](#)

研究内容

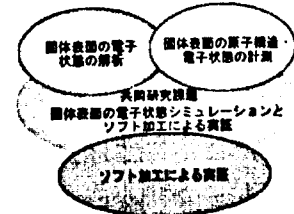
共同研究課題

「固体表面の電子状態シミュレーションとソフト加工による実証」

〔目的〕

最先端の科学技術を支える機能性材料や機器要素である次世代半導体ウエハやX線用ミラーなどでは、原子配列の乱れがなく、原子レベルで平坦な表面が必要とされています。しかし、一般に用いられる機械加工では、過大なエネルギーを外部から与えるため、原子よりはるかに大きな単位の破壊によって加工が進むため、原子配列の乱れや、大きな凹凸を伴った表面しか得ることができません。そこで、材料表面で穏やかに進む物理・化学現象を利用した、原子単位の加工プロセス（ソフト加工プロセス）を開発する必要があります。

本共同研究「固体表面の電子状態シミュレーションとソフト加工による実証」では、ソフト加工プロセスへの応用が期待される様々な固体表面化学反応について、その現象を量子力学の第一原理に基づく分子動力学シミュレーションによって理論的に解析し(固体表面の電子状態の解析)、また原子レベルの分解能をもつ表面観測手段を用いた実験から明らかにすること(固体表面の原子構造・電子状態の計測)で、新しい加工技術へと応用・発展させること(ソフト加工による実証)を目的としています。



〔研究テーマ〕

1. 固体表面の電子状態の解析

- ① 新しいシミュレーションソフトウェアの開発
- ② スーパーコンピュータを用いた固体表面反応の分子動力学シミュレーション



兵庫研究室では、大阪大学のスーパーコンピュータと光ファイバーケーブルの専用回線で接続しており、随時、量子力学に基づく分子動力学シミュレーションを行っています。

2. 固体表面の原子構造・電子状態の計測

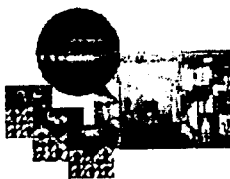


- ① 単一原子を分析する表面元素分析法の開発およびそれを用いた表面分析
- ② シリコン表面とハロゲンガスとの反応素過程のSTM/STSによる解析

3. ソフト加工による実証

- ①プラズマ CVM を使った
高機能材料の高精度・
高能率加工

[加工原理・方法]
[応用加工例]



兵庫県立工業技術センターおよびプラズマ CVM 応用技術研究会参加の企業でも研究活動を行っています。

- ②EEM を使った原子レベルで平坦な表面加工

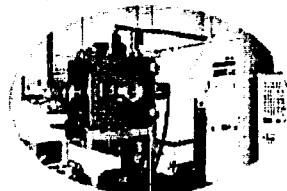
[加工原理・方法] [数値制御EEM加工例]
[EEM加工表面の観察例]

大阪工業技術研究所が研究活動を行っています

[兵庫研究室の代表的な設備]

兵庫研究室では、研究室に設置してある研究設備等を、共同研究を行っている研究機関に対して解放しており、プラズマ CVM を始めとしたソフト加工プロセスの応用研究の促進を行っています。これに関連した代表的な設備を紹介します。

1. 大気圧プラズマ CVM 装置
(切断加工用、形状加工用、平面ポリシング用)



大気圧プラズマ CVM 装置

2. クリーンブース
清浄度 クラス 100
3. 超高真空 STM 装置 [日本電子(株) JSTM-4500XT]
10⁻⁸ Pa 以下の超高真空中で、不純物に汚染されることなしに試料表面の観察が可能
4. 超純水精製装置
[オルガノ(株) PURIC-MX HPLC タイプ]
試料の洗浄・溶液処理に用いる超純水を精製
5. ワークステーション
O₂ Desktop Workstation [Silicon Graphics Inc.]
NEWS-5000 [SONY(株)]

その他に、加工表面の形状等を測定・評価するために触針式表面粗さ形状測定器、ノマルスキー型顕微鏡等の装置を設置しています。

兵庫研究室のホームへ戻る

新しいシミュレーション ソフトウェアの開発

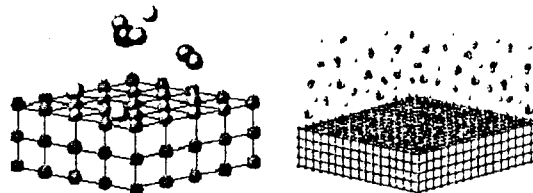
[紹介]

ソフト加工プロセスにおいて利用している様々な固体表面化学反応の素過程を量子力学の第一原理に基づく分子動力学シミュレーションによる解析、固体表面の電子状態の解明などを行っています。

表面化学反応素過程の解明、表面の原子オーダーの観察法の開発、観察結果の解析のため、より現実の結晶に近い大きさのモデルで、固体表面の電子状態の解析などをより精度よくシミュレーションする必要性が出て来ました。

より現実に近いモデルでの第一原理分子動力学計算を可能にするオーダーN法、より高精度な計算を目的とする実空間差分法、表面の電子状態を解析できるトランスフォーマトリックス法などを取り入れた計算ソフトウェアの開発を行っています。

[オーダーN法]



平面波展開法で扱える
モデルの大きさ
原子数：数十個

オーダーN法で扱える
モデルの大きさ
原子数：数千個？数万個

表. 平面波展開法とオーダーN法の必要計算量およびモデルの大きさの比較

	平面波展開法	オーダーN法
必要計算量 (N: 原子数)	N ³	N
モデルの大きさ (原子数)	数十個	数千個？数万個

一般に用いられている平面波展開法や分子軌道法ではその計算量が原子数Nの3乗に比例して多くなります。しかし、それに比べてオーダーN法では、必要な計算量を原子数Nに比例する程度に少なくすることができ、数千個？数万個の大きさモデルの計算が出来る方法です。これによって、より現実に近いモデルでの計算が可能となります。現在、この手法に基づくシミュレーションプログラムを開発中です。

このオーダーN法に基づくプログラムにより、より現実に近いモデルでの第一原理分子動力学シミュレーションを行い、表面化学反応素過程の解析などを行い、ソフト加工プロセスの原子オーダーでの解明をより詳細に行っていきます。

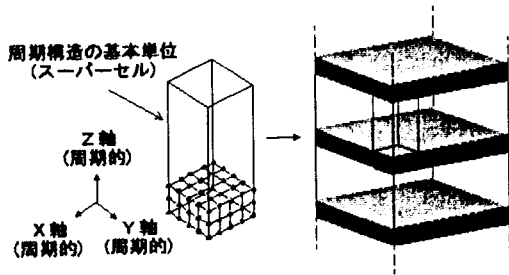
[実空間差分法]

一般に用いられている平面波基底関数や原子軌道関数に展開する計算法では、電子の状態を決定する波動関数を計算する際に、その結果が用いた基底関数に依存することが多く、たとえ同じ計算方法で計算しても用いた基底関数によって精度が変わってしまいます。そこで本研究では、基底関数を用いない方法として、実空間差分法と呼ばれる方法に注目し、精度のよい計算ソフトウェアの開発を行っています。

この実空間差分法に密度汎関数法、GGA法を取り入れた計算ソフトウェアを開発し、2原子分子の平衡原子間距離や結合エネルギーの計算を行った結果、実験値とよく一致していることが確かめられています。

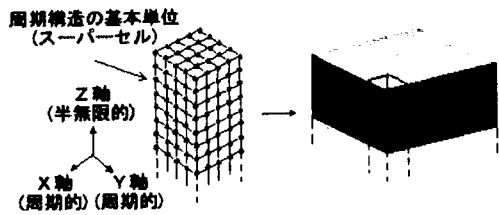
今後、さらに、クラスター、結晶などに対する計算を実行し、表面化学反応過程の解析、表面電子状態の解析を行い、ソフト加工プロセスの原子オーダーでの解明、および表面の原子オーダーでの観察法の理論的解明をより高精度で行っていきます。

[トランスフォーマトリクス法]



平面波基底法における計算モデル

- ・スラブ構造と呼ばれるモデルです。表面電子状態の正確な計算が困難なモデルです。

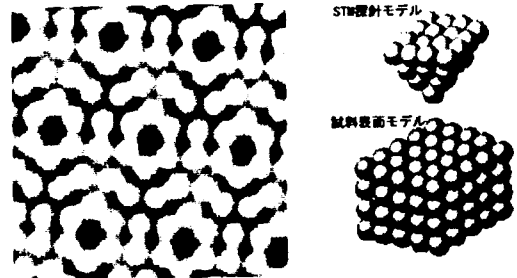


トランスフォーマトリクス法における計算モデル

- ・現実の結晶と同等なモデルです。表面の性質をより正確かつ詳細な解析が可能なモデルです。

一般にはスーパーセル法と呼ばれる方法の場合は、スラブ構造と呼ばれる結晶層と真空層とが交互に積み重ねられたモデルになり、その構造に起因する影響が表面電子状態の解析結果に出ってきます。トランスフォーマトリクス法によると、半無限体のモデルを構成でき、表面電子状態をより高い精度で解析できるようになります。現在、このトランスフォーマトリクス法を採用した計算プログラムを開発しています。

この計算ソフトウェアを用いて、表面電子状態の解析を行い、表面の原子オーダーの観察法の開発、観察結果の理論的解明をしていきます。



Si(111)表面 7×7再構成表面のSTM像

STM像解析モデル

本トランスフォーマトリクス法の適用例として、STM像の理論的解析が挙げられます。STM像は、表面原子周囲の電子分布を観察していると考えられます。従って、その分布を精度よく解析する事により、STM像を理論的に求めることが出来ます。

試料表面原子とチップ表面原子の計算モデルを考え、その上強電界を印加したトランスフォーマトリクス法を用いた表面電子分布状態の計算により、STM像の理論的解析が可能となり、観察した試料表面のSTM像を、より詳細に評価することができると考えています。そこで現在、トランスフォーマトリクス法の一つの応用例である recursion matrix 法でSTM像の理論的解析を行っています。

スーパーコンピューターを用いた 固体表面反応の分子動力学シミュレーション

[紹介]

スーパーコンピューターの出現や高速計算アルゴリズムの開発により、「第一原理に基づく分子動力学シミュレーション」が可能になってきました。このような技術を用いると、量子力学的な化学反応の過程、すなわち原子間に結合が生じたり消滅したりすることにより原子が動いてゆく様子、を明らかにすることができます。

本共同研究では、このようなシミュレーション技術を利用して、さまざまな固体表面上での化学反応を解析し、ソフト加工への応用が期待される反応系を探索しています。

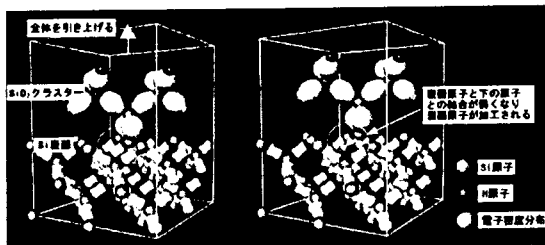
以下に挙げる2つの適用例では、実際にソフト加工、すなわち原子単位の加工が起こりうることを示すことができました。

[適用例 1] 酸化物微粒子による Si 表面原子単位加工

—EEM(Elastic Emission Machining)の可能性—

図のように Si の表面に SiO_2 クラスターを接近させ、表面の Si 原子と SiO_2 クラスターが結合した時点で SiO_2 クラスターを引き上げていくと、表面の Si 原子が SiO_2 クラスターに結合したままで持ち上げられ、Si 表面から取り除かれる様子が明らかになりました。

このシミュレーションによって EEM における加工単位が原子の単位である可能性を示すことができました。



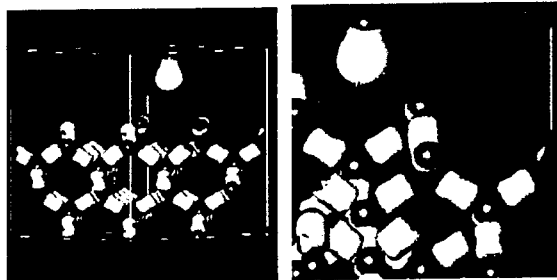
(a)初期吸着状態の原子位置と電子密度分布 (b) 引き上げ後の原子位置と電子密度分布

[適用例 2] 水酸基の作用による原子単位の加工

—超純水電気化学加工の可能性—

図のように Si の表面に OH 分子を接近させると、表面第1層の Si 原子と第2層の Si 原子との結合が弱まり、さらに OH 分子を接近させると、表面の Si 原子が Si 表面との結合を失い、 $\text{Si}(\text{OH})_2\text{H}_2$ 分子として Si 表面から除去されてゆく様子が明らかになりました。図の青色が Si 原子、赤色が水素原子を示し、白い部分が電子密度の高いところを示しています。

このシミュレーション結果に基づき、超純水からイオン交換により多量に発生させた水酸基を用いたソフト加工が試みられています。



[今後の展開]

加工や成膜など実際にモノを作るためのプロセスにはまだまだ解決すべき問題点がたくさんあります。

上で紹介したようなシミュレーションを様々な系に適用することにより、これまで加工できなかった材料を加工できる現象や、質の良い薄膜が成膜できる現象を発見し、様々なソフト加工を提案してゆくことがこのテーマの目標です。

共同研究内容 一覧へ

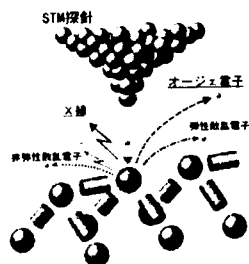
固体表面における単一原子元素分析法の開発 およびそれを用いた表面分析

[目的]

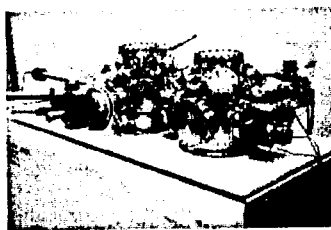
ソフト加工プロセスにおける固体表面での反応を調べるためには、表面における電子状態と原子構造の分析は欠かすことができません。そこで、本研究室では STM (Scanning Tunneling Microscopy) の原子分解能をもった新しい元素分析法 (STM-X 線分光分析法) を創出し、STM-EDS^{*1)} 装置を開発しました。この装置を使って、STM-X 線分光分析法の効率的な使用方法について検討を進めると共に、測定された固体表面の電子状態や原子構造とシミュレーションの結果と併せて検討することで、今までにない詳細な表面研究を行います。

*1) EDS...Energy Dispersion Spectroscopy (エネルギー分散型 X 線分光分析装置)

[STM-X 線分光分析法の原理]



STM-XMA 概念図



STM-EDS 装置

試料表面の STM 測定時に、探針に数 kV の電圧をパルス状に極短時間 (ns 程度) 印加します。STM の探針から出た電子は、その電界によって加速され、試料表面の原子に照射されます。この電子は原子の内殻の電子を励起し、個々の原子固有のオージェ電子や特性 X 線を発生させます。この特性 X 線を検出する方法を STM-X 線分光分析法 (STM-XMA^{*2)}) と呼び、この特性 X 線を検出するための装置として新しく STM-EDS 装置を開発しました。現在、制作した STM-EDS 装置を使ってソフト加工における材料表面状態を分析する研究を行っています。この STM-X 線分光分析法は STM の長所である原子レベルの空間分解能を持つために、表面原子一個一個の元素分析が可能になると考えています。

*2) XMA...X-ray Micro Analysis

[研究内容]

今までの研究の結果、STM と X 線分光分析装置を組み合わせた STM-XMA 装置を開発しました。それを用いて、以下の研究を進めています。

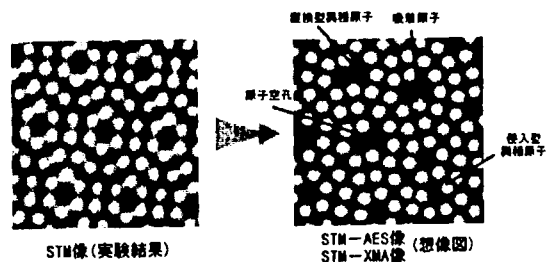
- ① STM-XMA を行うための最適なパルス成形および印加方法の検討
- ② STM-XMA によって発生する X 線のエネルギーと表面原子構造との関係を調べる研究
- ③ STM-XMA の空間分解能やエネルギー分解能の検討

以上の指針で、開発された STM-XMA 装置を利用して STM-XMA の検討を行い、同時にソフト加工プロセスにおける表面原子構造の変化や表面反応について研究を行っています。

[STM-XMA の展開および応用]

STM-XMA によって、固体表面の原子レベルでの分析が可能となると、今まで明らかとされてなかった表面での原子位置や構造が実験的に測定することができます。つまり、固体表面における反応素過程の解明 (吸着反応、表面構造変化、触媒反応など) はもちろん、不活性な固体表面上に置いた DNA, RNA など有機構造物の原子レベルでの解析などが可能となると考えられます。また、印加するパルス電圧を制御することで、原子の除去・吸着作用を利用した表面微小構造の作製などもでき、STM-XMA は表面研究を行う上で強力なツールになると推測されます。

また、試料原子の特性 X 線だけでなく同時に発生しているオージェ電子を検出する STM-オージェ電子分光法 (STM-AES) も考えており、次の研究対象として挙げています。



共同研究内容 一覧へ

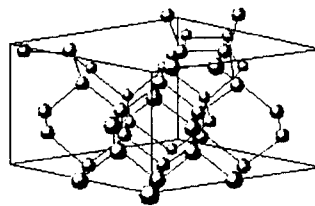
**シリコン表面とハロゲンガスとの反応過程の
STM/STSによる解析**

【目的】

ソフト加工プロセスの一つである高周波・大気圧プラズマ CVM(Cheical Vaporization Machining)では、ハロゲン系のガスを反応ガスとして用い、原子オーダーで平滑な材料表面加工や難削材の切断などの加工を行います。その原理を要約すると、高周波大気圧プラズマ中で励起されたハロゲンラジカルが試料表面の原子に作用して気化させることで、加工が進むと考えられています。現在、試作した加工機を使って、加工の研究を行っていますが、使用する反応ガス等によって加工状態が異なる結果が出ています。そこで、材料表面における反応性について原子レベルで構造解析や電子状態の計測を行い、同時に量子力学の第一原理に基づく計算機シミュレーションを行うことによって、ハロゲン原子吸着時の電子状態を求め、これらの結果と実験結果とを対比させ検証する必要があります。当研究室では計算機シミュレーションと STM/STS(Scanning Tunneling Microscopy/Scanning Tunneling Spectroscopy)を使って高周波・大気圧プラズマ CVM の反応ガスによる原子レベルでの反応状態の解明を行い、さらにそれを基に最適加工条件の設定へフィードバックを行います。

【研究内容】

高周波・大気圧プラズマ CVM においては、同じハロゲン系のガスでも、フッ素系ガスを用いた場合、加工現象が見られますが、塩素系ガスを用いた場合、加工現象は見られないといった実験結果が得られています。ところで、塩素系ガスを用いても、低圧プラズマエッチングでは加工が可能です。勿論これは、塩素イオンの作用なのか塩素ラジカルによるものなのか、詳細については解明されていません。本研究では、Si(100)表面にハロゲン原子(フッ素、塩素)を作用させた時の、表面原子構造変化や電子状態の変化を STM/STS を使って測定・研究しています。Si(100)表面は、半導体デバイスを作製するうえで必要な酸化膜形成やその他の化学反応特性が他の面方位のシリコン表面に比べて高く、工業的に最も使用されているため、本研究においてもこの面を使って研究を行っています。

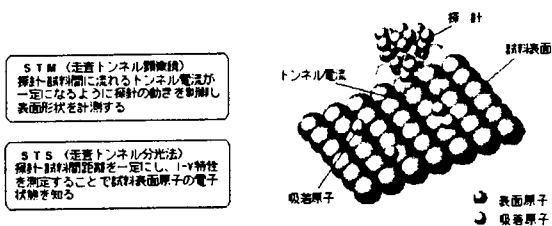


● シリコン原子
○ フッ素原子、塩素原子

【今後の展開】

本実験の結果をふまえて、シリコン以外の材料についても、高効率なガス成分等の加工条件を STM/STS による検証と計算機シミュレーションからプラズマ CVM による加工プロセスへフィードバックしていきます。

共同研究内容 一覽



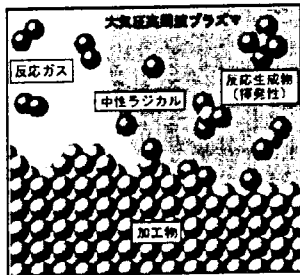
さらにハロゲン原子が吸着したときのシリコン表面の原子構造や電子状態を正確に分析するために、量子力学に基づくシミュレーションも重要です。そこで、シリコン表面とガスとの反応現象を計算機シミュレーションによって解析し、STM/STS による測定結果とつぎあわせてより詳細な内容の検討を行います。

**プラズマCVMを使った
高機能材料の高精度・高能率加工**

プラズマCVM(Cheical Vaporization Machining)とは1気圧という高圧力雰囲気下において高密度のプラズマを発生させ、そこで生成した中性のラジカル分子を、試料表面原子に作用させて揮発性の物質に変えることで除去を行なう化学的な加工法です。

本加工法は高い加工能率と形状加工能力を併せ持つため、従来の機械加工に置き換えることができます。

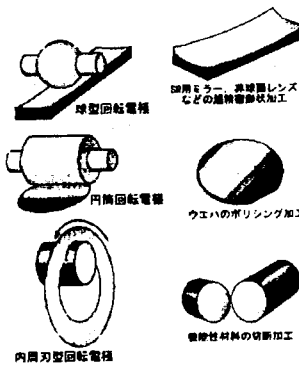
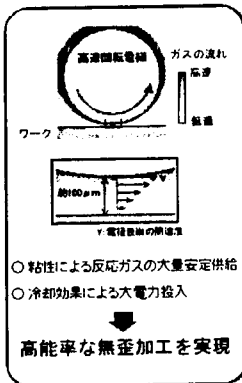
加工原理・方法



プラズマCVMではプラズマを発生させるのに高速で回転する電極を用いています。電極を回転させることにより、加工部に反応ガスを大量かつ安定に供給するとともに電極自体が冷却されるため、大電力の投入が可能となり、非常に大きな加工

速度が得られています。また、電極形状を変えることで、NC制御による形状加工、切断加工、ポリッシング加工など任意の加工形態をとることが可能です。

高速回転電極による種々の加工形態



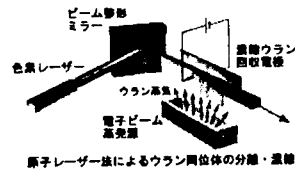
プラズマCVM 応用加工例へ
共同研究内容 一覧へ

**プラズマCVMを使った
高機能材料の高精度・高能率加工**

■ 応用加工例

任意の形状加工能力 (NC加工)

天然ウラン (238U, 235U) には燃料として用いられる 235U がわずか 0.71%しか含まれていません。本方法では図に示すように天然ウランの蒸気に、特定の波長を有するレーザー光を照射し、235U のみを選択的にイオン



プラズマCVMにより作製したビーム整形用非球面ミラー



化させ、発電用燃料として要求される3%程度の濃度まで分離・濃縮します。その際、レーザービームの形状を矩形にし、強度分布を均一にすることで、分離反応および回収の効率を上げることが出来ます。

図の例はプラズマCVMで作製したレーザービーム整形用非球面ミラー(12mm角内において最大深さ3μm)ですが、この様な加工は従来の機械加工では不可能でした。

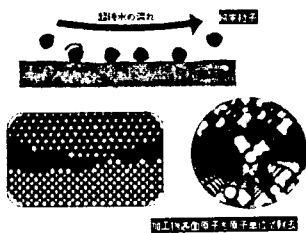
〔(財)電力中央研究所, (株)ニコン, 大阪大学精密科学専攻による共同研究成果〕

共同研究内容 一覧へ

EEMを使った 原子レベルで平坦な表面加工

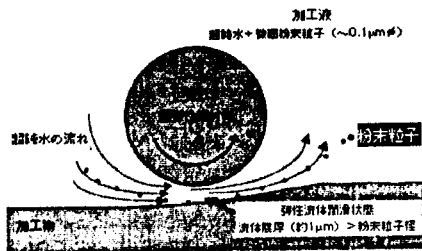
EEM は、固体表面間の化学反応を利用する、全く新しい加工メカニズムにもとづく超精密加工です。加工物表面と反応性を持った微細粉末粒子を超純水の流れを利用して加工物表面に供給し、両表面間で起こる化学反応の結果、加工物表面の原子を微細粉末粒子が持ち去ることによって加工が進みます。加工物表面の原子配列を全く乱すことなく、原子サイズのオーダーで平坦な表面を作ることができます。

[加工原理・方法]



超純水の流によって、加工物表面上に供給された微粒子は、加工物表面上に化学的に吸着します。この時の加工物表面原子周りの電子状態の変化により、表面原子が除去されます。この現象は本共同研究

において、第一原理分子動力学シミュレーションにより確認されました。



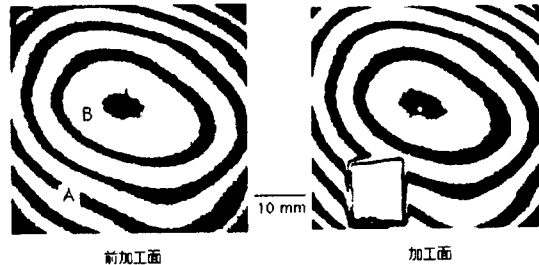
微細粉末粒子を供給するために必要な超純水の流れを回転球によってつくります。加工物と回転球が接近した領域だけが加工されるため、必要な加工量に合わせて速度を変えながら回転球を送ることによって、自由曲面を創成することができます。

[数値制御 EEM 加工例](#)
[共同研究内容 一覧](#)

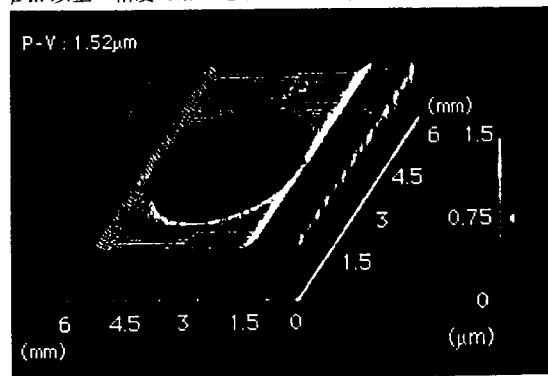
EEMを使った 原子レベルで平坦な表面加工

[数値制御 EEM 加工例]

加工表面において、回転球のヘッドを所定の速度で走査することにより、任意の形状加工を行うことが出来ます。



上の図は、石英ガラスを数値制御加工した例です。加工前は中心部が周辺に比べて低くなっています。A部をB部の高さにあわせて平面状に数値制御加工したものです。干渉縞の1フリンジは $0.27\mu\text{m}$ です。下の図は $\lambda/100$ のオプティカルフラット状に球面を形成したものです。 $0.01\mu\text{m}$ 以上の精度で加工されています。

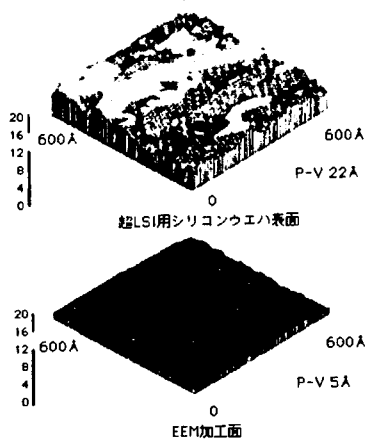


[EEM 加工表面の観察例](#)
[共同研究内容 一覧](#)

EEMを使った 原子レベルで平坦な表面加工

[EEM 加工表面の観察例]

EEM 加工によって、原子レベルで平坦な表面を作ることが出来ます。左の図は、超 LSI 用のシリコンウエハの加工例です。粗さ測定は、STM(Scanning Tunneling Microscopy)によって行っています。



上が、現在超 LSI 用に用いられているシリコンウエハの表面であり、約 20 オングストローム(原子 10 個分)の凹凸がありますが、これを EEM 加工すると表面の凹凸は 4 オングストローム(原子 2 個分)以下の超平坦面になります。

共同研究内容 [一覧へ](#)