

### 3. 研究教育拠点形成活動実績

#### 3.1 目的の達成状況

##### 3.1.1 世界最高水準の研究拠点の形成

「原子論的生産技術の創出拠点」では、有史以来続いてきた機械加工等の製造技術では製作が不可能な、21世紀の日本を担う先端産業や自然の根源を明らかにする基礎科学から要請される「原子レベルの精度をもった電子・光デバイス等(実用サイズの物)」を創るための、物理・化学現象を原子・電子論的立場から理解して極限まで活用する、すなわち科学を規範にする新しい製造プロセスおよび計測評価技術の創出を目的とした。

原子論的生産技術を創出するためには、学問的に総合力が必要である。本拠点では、加工・材料・計測・デバイス・計算物理の学問領域を結集して、物理学を基盤にした「精密科学」というべき新しい学問分野に体系化した。具体的には、精密科学・応用物理学専攻精密科学講座の(1)機能材料、(2)先端機器システム、(3)量子計測、(4)原子制御プロセス、(5)超精密加工、(6)計算物理、(7)応用表面科学の7領域と超精密科学研究センターが一体となった組織体制で、以下のように研究を推進した。まず、要求に応える原子レベルの精度の「物」を創るために、加工・材料(成膜)プロセスに利用する、表面上の物理・化学現象を量子力学の第一原理に基づく計算機シミュレーションにより解明するとともに、表面科学の手法により原子構造・電子状態を観察し、現象を原子・電子レベルで理解した。次に、それら原子・電子論的に解明した物理・化学現象を制御する、独創的な超精密加工法や成膜・微細加工法を開発した。また、これらのプロセスによって作られた表面や膜、微細構造の機能を評価する極限計測技術を開発した。そして、開発した製造プロセスを組み合わせることで目的のデバイスを製作し、その機能を原子・電子論的立場から評価した。以上を統括し、具現化する場として、超精密科学研究センターを充てた。

まず、研究施設および設備に関しては、初年度の平成15年度には研究開発および教育環境の整備に力を注ぎ、その結果世界最高性能の研究開発用ウルトラクリーン実験施設(プロセスフロア面積:440m<sup>2</sup>)を平成16年3月に完成させた。これで、新しい原子論的生産技術開発の基礎研究を前COEで設置したウルトラクリーンルーム(415m<sup>2</sup>)で推進し、応用研究、特に企業との実用化研究をウルトラクリーン実験施設で実施する体制が整った。平成15、16年度には、実用化を目指した装置として、数値制御プラズマCVM (Chemical Vaporization Machining)装置および大気圧プラズマCVD (Chemical Vapor Deposition)装置を新規に開発し、民間企業との共同研究に活用した。平成17~19年度には、拠点での研究開発および博士課程学生の研究教育のための汎用共通設備であるFIB(Focused Ion Beam)、XPS(X-ray Photoelectron Spectroscopy)、SEM(Scanning Electron Microscope)、TEM(Transmission Electron Microscope)を導入した。前COEで開発・導入した実験設備も含めて充実した施設・設備に関しては、世界最高水準の「物づくり」研究教育拠点と評価できる。

「原子論的生産技術の創出拠点」の目標として、独自に開発した製造プロセスであるEEM (Elastic Emission Machining)やプラズマCVM、大気圧プラズマCVD、超純水のみによる洗浄および電気化学加工法の応用展開を当初掲げていた。まず、EEMとプラズマCVMに関しては、波長0.8Å(15keV)の硬X線用集光ミラーを開発し、SPring-8において世界最小集光径25nmを達成した。このように、硬X線ミラーの加工と計測に関しては、世界最高である。特に、次世代の放射光やX線自由電子レーザー、中性子ビーム等の光学素子の開発に関しては、SPring-8、J-PARC(Japan Photon Accelerator Research Complex)、APS(Advanced Photon Source 米国)、ESRF(European Synchrotron Radiation Facility)、ONL(Oakridge National Laboratory 米国)等からは、X線、中性子線光学素子を開発できる世界唯一の拠点と認められている。また、生体細胞観察用顕微鏡システムを開発し、SPring-8 BL29XULの専用ハッチ内に走査型蛍光X線顕微鏡を完成させ、高感度・高分解能元素マッピング技術を確立した。国立国際医療センター研究所と共同で実験を実施し、細胞内のミトコンドリアの解像や、X線CT観察による毛根の断

面観察等に成功し、医学・生物学へ応用した実績を持つ。さらに、EEM では、国家プロジェクト「極端紫外線露光システム技術開発機構(Extreme Ultra-Violet lithography system development Association; EUVA )」に参画して、EUV 用光学素子の最終仕上げ加工の当初困難と考えられていた要求仕様である、 $\phi 300\text{mm}$ の大きさと形状誤差が $0.2\text{nmRMS}$ 以下、あらゆる空間波長で表面粗さが $0.15\text{nmRMS}$ 以下、加工速度が $0.02\text{mm}^3/\text{h}$ 以上(従来の100倍)を満たすことに成功した。EEM は、EUVリソグラフィー用光学素子の最終仕上げ加工として活用されることが決定し、民間企業への技術移転にも成功した。プラズマCVM では、国家プロジェクト「高効率 UV 発光素子用半導体開発」において、エピタキシャル成長前のGaN 半導体基板の超平坦化に成功し、デバイス特性を向上した。このように、二つの国家プロジェクトにおいて、担当分野をそれぞれ成功に導いており、社会的貢献は極めて高い。また、大気圧プラズマCVD、超純水のみによる洗浄および電気化学加工法に関しては、民間企業との共同研究を実施し、実用化に繋がる成果を上げた。

「原子論的生産技術の創出」を理論的に支える第一原理シミュレーションでは、独自に開発した高速・高精度電子状態計算手法に基づく第一原理計算プログラムを作成し、各種超精密加工法や成膜法における反応過程を解析した。そして、EEM における水中での微粒子と加工物相互作用やプラズマCVM における反応ガスの解離過程、大気圧プラズマCVD における水素原子の作用等の解明に成功した。また、新しい水分解触媒や新化学的加工法の反応過程を探索するとともに、世界に先駆けて水分子クラスターの動的構造解析に成功した。さらに、触媒援用加工法や大気圧プラズマ表面処理技術等の表面反応の基礎過程をシミュレーションして検討した。第一原理シミュレーションによるナノスケール構造の機能予測では、量子力学の第一原理に基づく電気伝導特性・電場応答計算手法を完成させ、これを用いて走査型トンネル顕微鏡の電流経路解析や半導体デバイス絶縁用薄膜のリーク電流解析を行った。これらの成果は、K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto: First-Principles Calculations in Real-Space Formalism -Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures-, (Imperial College Press, London, UK, 2005)に執筆されている。特に、MOSFET(Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor)の絶縁膜の研究では、原子欠陥がリーク電流に及ぼす影響について有益な知見を得た。このように、反応設計や機能予測を可能にする新しい量子力学に基づく第一原理シミュレーションアルゴリズムの開発では、世界をリードしている。

もう一つの目標である、新しい原子論的生産技術の開発では、①触媒反応援用研磨法や②ローカルウェットエッチング法、③大気開放型プラズマCVM、④大気圧プラズマ化学的移送法、⑤多孔質カーボン電極大気圧プラズマCVD、⑥数値制御大気圧プラズマ犠牲酸化法を新規に発想し、その技術開発に成功した。その結果、SiC と GaN 基板表面の平坦化、大型液晶用マスク基板の平坦化、水晶振動子薄片化、金属級Siの高純度化、エピタキシャルSiの低温形成、SOIの薄膜化に着手した。それぞれのプロセス技術は、すべてが民間企業との連携またはNEDO 産業技術助成を受けている。産業界での実用化に向けて順調に研究開発が進捗している。

さらに、他の外部研究機関との連携では、高エネルギー加速器研究機構と、放射光やEUV 光用高精度ミラーの超精密加工に不可欠な世界最高精度のスロープエラー  $2 \times 10^{-7}$  rad( $0.02\mu\text{m}/100\text{mm}$ )以上で、自由曲面を測定できる超精密形状測定装置を開発することに成功した。また、東北大学未来科学技術共同研究センターと、STM により、湿式洗浄後の水素終端化 Si(110)表面を原子像の観察を可能にし、Si(110)表面を平坦化する新しいプロセスの開発に成功した。その結果、東北大学との共同研究によって高移動度・低ノイズのSi(110)表面上のCMOSFETの作製に成功した。アナログ/デジタル混載デバイスへの応用等、半導体産業界での期待は大きい。

平成19年5月には、本拠点の成果を応用して社会貢献するために、「電子デバイス生産技術共同研究講座(シャープ株式会社)」が設立した。本21世紀COEで開発された製造技術を液晶ディスプレイや太陽電池、半導体等の電子デバイスの生産技術に活用することを目的としている。このように、本拠点の成果を新しい生産技術として産業界において実用化して応用展開するためにも共同研究講座の意義は大きい。

教育では、様々な基礎科学や先端産業の分野で必要とされる「物」を原子論的生産技術の研究開発

によって具現化し、実用化する人材を育成することを目標とした。そこで、アカデミックポジションに就く研究者のみならず、産業界において製造技術の研究開発を担う即戦力となる博士課程の学生を研究開発プロジェクトに参画させて実践教育を実施した。その結果、博士課程へ進学する学生が増え、学生の国際会議、論文の発表件数が大幅に増加した。また、若手研究者は、JST さきがけ研究者が 3 名、海外留学者が 3 名等、成長は著しい。

さて、世界の大学、民間企業で多くの製造技術の研究開発が進められている。しかし、そのほとんどは従来技術を経験に基づき改良を重ねる方法をとっている。たとえば、航空・宇宙関連や半導体デバイスの最先端製造技術の研究を実施している米国のローレンス・リバモア国立研究所やサンディア国立研究所、バークレー国立研究所では、光学ミラーやレンズを、超精密切削や精密研削、研磨加工等の従来の機械加工技術を高精度化することで作り上げようとしている。したがって、本拠点とは研究開発の思想が根本的に異なる。本拠点のように、科学を規範に世の中にない新しい概念の最先端生産技術を発想し、それを具現化した独自のプロセス装置を開発し、そのまま実用できる「物」を原子レベルの精度で実際に製作できる研究拠点は世界中を見渡しても皆無である。

このように、本研究拠点では当初の目標を上回る成果を得たと言え、他に類を見ない世界最高水準の「物づくり」の研究教育拠点を形成したと総括できる。