

目次

<b>巻頭言</b>	薄膜・表面分科会とカーボン系薄膜	川原田洋	1
<b>研究</b>	太陽電池技術の最新動向	近藤道雄	2
	表面・界面制御によるシリコン太陽電池の高効率化	小林光	12
	有機太陽電池における有機・無機界面評価技術	島田敏宏	21
<b>最新技術情報</b>	ガラス基板上薄膜 Si 結晶成長過程の分子動力学シミュレーション	本岡輝昭	28
<b>談話室</b>	研究室紹介		
	筑波大学 数理物質科学研究科 電子・物理工学専攻 ナノ構造制御研究室	山部紀久夫	38
<b>Brush up English</b>	科学英語一言メモ(10) : <i>Because I love you</i>	山下理恵	42
<b>掲示板</b>			
	<b>研究会概要報告</b>		
	第 38 回 薄膜・表面物理セミナー 開催報告	佐藤信太郎	43
	電子デバイスにおける原子輸送・応力問題研究会開催報告	小川真一	44
	2010 年秋季応用物理学会 学術講演会 シンポジウム開催報告		
	「グリーンエレクトロニクスのための機能性多層ウェハー技術」	山崎聡	45
	「ここまで来ているダイヤモンド電子デバイス-結晶成長からデバイス応用まで-」		
		小出康夫	46
	<b>開催案内</b>		
	表面・ナノ科学シンポジウム 2011 (2011 年 1 月 19-21 日)		48
	2011 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ELECTRON DEVICES -SCIENCE AND TECHNOLOGY- (IWDTF11) (2011 年 1 月 19-21 日)		51
	ゲートスタック研究会 ―材料・プロセス・評価の物理― (第 16 回研究会)		
		(2011 年 1 月 21-23 日)	53
	平成 23 年春季応用物理学関係連合講演会シンポジウム (2011 年 3 月 24 日)		54
<b>議事録</b>			
	第 39 期第 1 回 幹事会議事録抄録		55
	第 39 期第 2 回 幹事会議事録抄録		57
	第 39 期第 2 回 常任幹事会議事録抄録		59
<b>会告</b>	ニュースレター投稿規定		61
	応用物理学会 薄膜・表面物理分科会 第 39 期常任幹事名簿		62
	応用物理学会 薄膜・表面物理分科会 会員数、賛助会社名簿		63
<b>編集後記</b>			64

\*分科会会員はホームページ (<http://annex.jsap.or.jp/tfspd/>) からカラー版 PDF ファイルをダウンロードすることができます (パスワードは“Audrey”です)。

**表紙の図：原子ステップ端に沿って形成された Cu のアトミックチェーン**

(山部氏提供, 詳しくは本紙 38 ページ参照)



## 薄膜・表面分科会とカーボン系薄膜

早大理工 川原田 洋

現在、「薄膜・表面分科会」という大分類分科（全部で 18 分科）がカバーする領域は、強誘電体薄膜、カーボン系薄膜、酸化物エレクトロニクス、薄膜新材料、表面物理・真空、プローブ顕微鏡と非常に幅が広い。材料を問わず、薄膜そして固体表面が研究の対象である。これだけで、一つの学会が出来そうな大きな分野をカバーしている。薄膜として新物質の合成、新しい表面現象の観察などが大きな柱である。創意工夫を凝らした実験設備、精緻な解析、時には非常に大胆な実験手法が共存する。薄膜合成技術や表面分析技術の装置開発も併せて行われるところもダイナミックな一面である。この中で、私自身は「カーボン系薄膜」という分野で 25 年近く、研究をさせていただいている。「カーボン系薄膜」は、ダイヤモンドおよびダイヤモンドライクカーボン (DLC) 膜の発展に大変大きな役割を担い、その後に出現したカーボンナノチューブやグラフェン研究の進展に大きな影響を与えている。

1982 年春に JJAP, Vol.21, L183 (1982) に世界初の再現性のあるダイヤモンド気相合成方法が無機材質研究所（現、物材機構）より明らかにされると、真空・薄膜・表面分類（現、薄膜・表面 大分類）でカーボン系薄膜に関する発表件数は増加し、1984 年春の関連連合会では、ダイヤモンド薄膜に関するシンポジウム「イオンおよびプラズマ法によるダイヤモンド薄膜研究の現状」が開催された。しかし、「ダイヤモンド薄膜は真にダイヤモンドか？」という今では考えられない厳しい評価も依然多く、適切な評価方法の確立が指摘されたシンポでもあった。この厳しい目がダイヤモンド薄膜の研究を国際的にも日本オリジナルな研究として進展させ、後にカーボンナノチューブやグラフェンの評価に非常に役立つこととなり、日本の純炭素材料科学の基礎を作ったと考える。ダイヤモンド薄膜では、その後、アルコール合成、燃焼炎合成、ヘテロエピタキシャル技術、n 型半導体、電界効果トランジスタ、電界放射、原子レベルでの表面評価、エキシトン発光、表面修飾、バイオセンサ等、日本初の新たな合成方法、評価、応用例が発表され、ダイヤモンド薄膜や DLC を日本の貢献度が高い物質研究として位置づけるのに「薄膜・表面分科会」は大きな役割を担ったと言える。

私自身は 1987 年から発表をさせていただき、電子サイクロトロン共鳴点の高密度プラズマという、当時は成膜にもエッチングにも使わない過酷な環境にて従来 (1000Pa 以上) よりも 2 桁以上低圧で作製する技術を開発した。低温化や大面積化に有利なはずの低圧だが、合成で本当に苦労した。これは、現在のナノダイヤモンド薄膜合成条件に受け継がれている。従来の炭化水素だと 100Pa 以下でシリコンカーバイドやグラファイトが形成される。そこで、一酸化炭素 (CO) にて 10Pa でダイヤモンド合成可能としたが、有毒ガスであることが欠点であった。同一効果を得るガスとして到達したのが、炭素と酸素の比が CO と同様に 1:1 となる、メタンと二酸化炭素の 1:1 混合ガスであった。この反応式は、 $\text{CH}_4 + \text{CO}_2 \rightarrow 2\text{C} + 2\text{H}_2\text{O}$  となり、現代風に言えば温室効果の高いメタンと二酸化炭素からダイヤ（純炭素）と水ができるという環境に優しそうな、単純な化学式であった。現在、カーボンナノチューブもこの混合比で高品質が得られるし、ナノダイヤモンド合成に重要であるとの報告がある。「美しい 10 の化学反応式」なるものがあれば、是非、推奨したい。

ダイヤモンドは炭素のシリコン版である。ダイヤモンドの前にシリコン半導体の研究をしていた経験をもとに、そこで習った原則にてダイヤモンド研究を表面とそれを利用したデバイスという観点から行って来た。表面終端構造は、シリコン以上にバリエーションに富み、非常に機能的な表面構造が大気中はもとより、液体中でも安定で、電気化学電極、バイオセンサだけでなく、多角的なデバイス応用が可能となっている。また、ダイヤモンド合成で世話になった炭素ラジカルにて、カーボンナノチューブの高密度合成も経験することが出来、 $\text{sp}^3$  結合と  $\text{sp}^2$  結合の制御がおぼろげながら見えるような気がしてきた。純炭素材料に移動して、1/4 世紀になるが、今後とも純炭素材料のよりチャレンジングな合成と物性制御に挑戦していきたい。

## 第 39 回 薄膜・表面物理基礎講座

## いまさら訊けない 太陽電池のための薄膜形成・分析技術

## 太陽電池技術の最新動向

産業技術総合研究所 近藤 道雄

## 1. はじめに

現在主流の結晶シリコン太陽電池は 1954 年に米国のベル研究所で生まれたが、その後、電力用として期待されながらコストの面でなかなかその夢はかなわず、人工衛星、遠隔地の通信中継器、灯台といった代替のない、コストの制約が緩いところから始まり、住宅用、そしてついに太陽光発電所が建設されるまでに発展してきた。

太陽の恵みは膨大である。地球の陸地面積のわずか 0.7% の面積の太陽電池によって地球のすべてのエネルギー消費をまかなうことができる。太陽電池の利点は利用可能な地域を選ばないことである。風力や水力もあわせて利用すれば日本のようなエネルギー資源のない国でも化石資源への依存度を下げエネルギー自給率を上げることができる。

太陽電池を産業としてみると、従来日本が得意としてきた半導体産業やフラットパネルテレビの技術を太陽電池にも生かすことができる。国内はもちろん、輸出産業としても市場は膨大である。雇用創出効果という点でも有望である。従来のように経済発展は環境を破壊するという従来のジレンマを打ち破るパラダイムシフトを起こすことができる。太陽電池を使えば温暖化ガスの排出を増加させないで、世界中の人々が等しくエネルギーを得ることができる。太陽光発電の最大の特徴は電力が必要なところにほとんどどこでも短期間に設置してその恩恵を受けることができる点にある。

## 2. 太陽光発電の仕組み

太陽電池は太陽光発電のシステムの中で電力を発生する最も中核的なデバイスではあるが、それがシステムの中でどのように利用されているかということは理解しておく必要がある。図 1 に、典型的な太陽光発電システムの模式図が示されている。

太陽電池パネルは一枚当たり 20V 程度から 200V 程度の直流電圧を発生するが、それらのパネルを直並列を組み合わせ、最終的に家庭用では 200V 程度、大規模な発電所では 600~1000V 程度の直流電圧を発生させる。これをパワーコンディショナーあるいはインバーターと呼ばれる直流-交流変換機によって電力系統に合わせた交流電圧に変換する。この出力は家庭内の電気機器で消費され、余った電気は電力系統に流れ出して(逆潮流という)電力会社に買い取られる。この時、外向きに出ていく電力量と足りない時に外から流れ込んでくる電力量がそれぞれ計量される。外向きの量が買い取り量であり、現在では 1 キロワット時当たり 48 円で買い取られている。外から流れ込んでくる電力は契約に応じて 1 キロワット時当たり 23 円から 29 円程度で家庭に売電されている。

電力会社から見るとこの買い取り金額は割高であるので、発電コストは買い取られた電力量が増えるほど増えることになるが、電気料金を値上げすることで電力ユーザ全体がこれを広く浅く負担することになる。

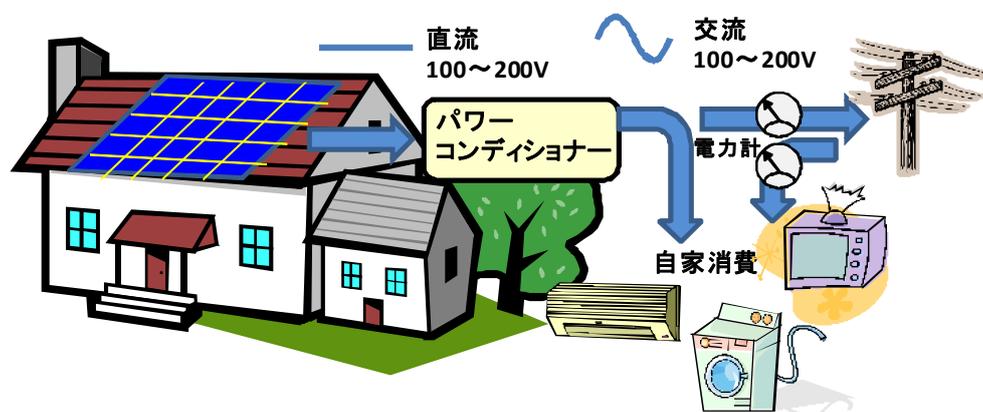


図1 住宅用太陽光発電システムの模式図。

### 3. 太陽電池の動作原理

太陽電池はその発見の起源がpnダイオードに光照射されると異常な電流が流れたというところにあることからわかるように、いわゆるダイオードに流れる一方方向電流  $p \rightarrow n$  とは逆方向の電流が流れる。図2にpnダイオードに光が照射された場合のキャリアの動きが模式的に示されている。太陽の光によって励起された電子-正孔対は内部電界によって逆方向に振り分けられた後、拡散によって電子はn型層に正孔はp型層に向かって移動していく。電流はp側から流れ出してn側に流れ込む、つまり整流特性と逆向きの電流、言い換えると異常な電流である。ここで太陽電池の変換効率について考えると、太陽光に対してそのエネルギーを100%電気エネルギーに変換することはできない。まず第一の損失は図2に①で示される光吸収において、バンドギャップよりエネルギーの小さい光は吸収されない。また、逆に②に示されるようにバンドギャップよりエネルギーの大きい光は熱い電子を生成するが、それは瞬時に熱緩和してエネルギーを損失する。これらを併せてスペクトルミスマッチ損失といい、55%のエネルギーが失われる。さらに残り15%が電子正孔の再結合損失などで失われ、原理的な変換効率は30%が物理的限界ということになる。

しかしながら、スペクトルミスマッチはあとで述べる多接合という方法で大幅に回避することができ、最高70%近い効率も原理的には可能である。現在最も良く用いられている結晶シリコンの変換効率は実験室で最高25%、実用化レベルで23%程度まで得られており、かなり成熟度が高い。一方多接合超高効率では現状最高が35%程度と、まだまだ原理的には余裕がある。

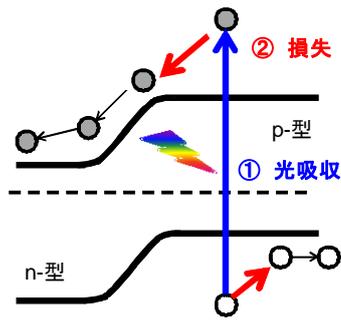


図2 pn ダイオードに光照射された時のキャリアの動き。

太陽電池の特性を理解する上で電流電圧特性を読むということが非常に重要な意味を持つ。図3に太陽電池の電流電圧特性を示す。この時電流の向きはダイオードでいうと、電流のプラス方向が逆方向(n→p)であることに注意する。ここでいくつかの重要なキーワードは短絡電流 ( $J_{sc}$ )、開放電圧 ( $V_{oc}$ )、フィルファクター (曲線因子ともいう、 $FF$ ) である。短絡電流は太陽電池をショートした時に流れる電流であり、これは通常、入射光量に正比例する。一方、開放電圧は太陽電池に何もつながらない状態で発生する電圧であり、これは理想的には光量にできるだけよらず一定であることが望ましいが、実際には光量が低下すると少しずつ低下する。開放電圧( $V_{oc}$ )はバンドギャップ( $E_g$ )と一対一に対応しており、単結晶のような高品質な材料では  $V_{oc}=E_g-0.4$ 、多結晶では  $E_g-0.5\sim 0.6$ 、アモルファスなどでは  $E_g-0.7\sim 0.9$  となることが多い。太陽電池に負荷を接続するとその負荷抵抗に応じて動作点が決まる。最も出力をたくさん取りだせる動作点を最大出力点と言い、その時の出力を  $P_{max}$  と表わすことにすると  $P_{max}=J_{sc} \cdot V_{oc} \cdot FF$  となるように  $FF$  を定義する。図3では  $FF$  は  $V_{oc}$  と  $J_{sc}$  で決まる長方形の面積と最大出力点における長方形の面積の比ということになる。したがって  $FF$  は1を最大とし、現実的には非常に優秀な太陽電池で0.8程度、合格ぎりぎりの太陽電池では0.6程度となる。 $FF$  は例えば薄膜太陽電池では欠陥密度と関連することも指摘されている。

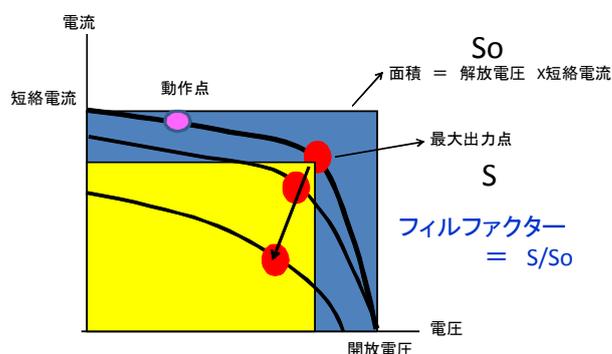


図3 太陽電池の電流電圧特性。

#### 4. さまざまな材料

太陽電池には図4に示されるように様々な材料からなるものが共存している。結晶シリコン、薄膜シリコン、化合物半導体、有機材料などである。太陽電池技術の特色はいろんな材料、技術が並行して共存していることであり、これはエレクトロニクス産業の中で異色ともいえるものである。いいかえると、まだ自然淘汰が十分でないということなのかもしれないし、決定的と言える材料がまだ出現してきていないということかもしれない。

太陽電池と他のエレクトロニクスデバイスの決定的な違いはまずコストありきという点にある。どんなに高性能な太陽電池であっても、値段が2倍違うとそれはほとんど意味がない。なぜなら、発電コストが高すぎて経済性に見合わないからである。これがエネルギーを生み出すデバイスの難しさである。競争相手は他の太陽電池ではなく、火力発電であり、風力発電であり、原子力発電である

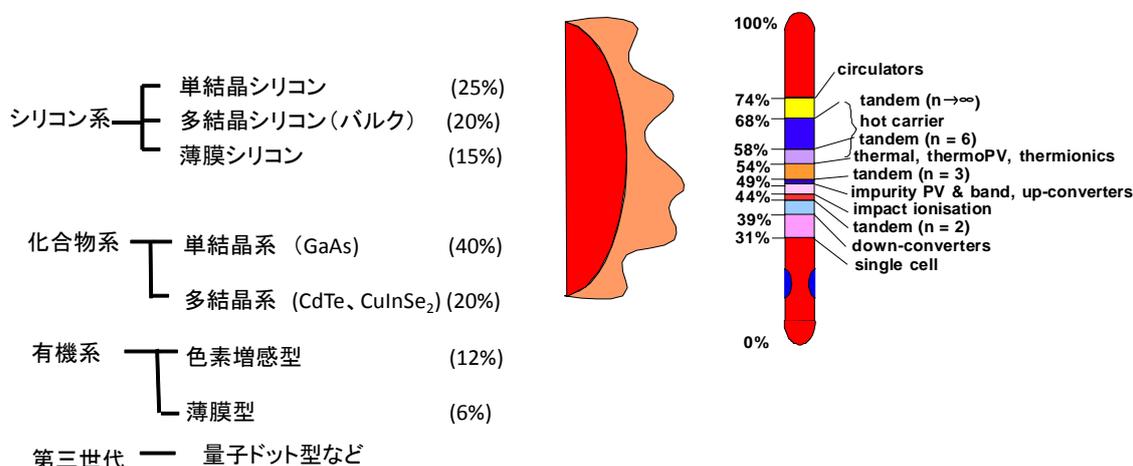
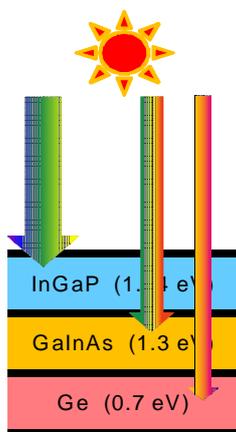


図4 左 : さまざまな太陽電池材料の一覧。

カッコ内は実験室レベルの最高効率を表す。右：単接合太陽電池から無限に接合数を増やした時までの様々な太陽電池の効率限界。



前節でも述べたように、太陽電池は単一材料で作られたものは効率の物理限界が30%程度になる。この壁を破る方法は多接合と呼ばれる方法である。たとえば図5に示されるように、3種類の材料をもちいて、短波長の光をInGaPで、中間波長をGaInAsで、長波長をGeで吸収させることで、より広範囲な波長範囲の太陽光を利用しながら、光のエネルギーとバンドギャップのエネルギー差から起こる損失を最小化することができる。この組み合わせで現在、36%程度の変換効率が報告されている。

図5 多接合太陽電池の構成を表わす模式図

次に様々な太陽電池材料が設置環境で受ける影響について述べる。太陽光は遍く存在するが、設置環境によって最適な太陽電池は温度や太陽光のスペクトルの違いにより異なっているが、いわゆる公称出力や変換効率はある一定の太陽光スペクトルと温度(25℃)という条件下で測定されたものが用いられる。従って屋外での出力や効率が公称値と異なることがしばしば起こりうる。

太陽光のスペクトルはエアマス (AM) という量で規定されるが、これは太陽光が通過する大気の厚みを表わしている。AM0 とは大気圏外でのスペクトルであり、太陽が放射している光のスペクトルそのもの、つまり 6000K の黒体輻射である。AM1 は地表に垂直に入射した太陽光のスペクトルで春秋分の日赤道上でスペクトルに相当する。基準太陽光と呼ばれる太陽電池の性能評価に用いられているスペクトルは AM1.5 であり、(AM) =sec Z (Z は天頂角) で定義されるので Z=48 度となる。これは日本の緯度から考えるとかなり高緯度よりの値に相当する。(日本の春秋分の日太陽光の天頂角は 55 度である) エアマスが大きくなると夕焼けと同様、赤い成分の割合が高くなり、小さくなると青い成分が大きくなる。したがってナローギャップな材料ほど AM が小さいほど有利であり、逆もまた同様である。

次に設置温度についてであるが、太陽電池の温度は、気温に加えて、太陽光を吸収して熱に変換することで発電部分の温度が上がる。真夏では気温 30 度に対して太陽電池の温度は 60 度から 80 度にまで達することがある。これには風による冷却効果も加味する必要があるので、太陽電池部分の温度が重要である。この温度を T とすると、結晶シリコン太陽電池の変換効率は 1℃ 当たり、-0.45% 下がるというのが典型的な場合である。バンドギャップの大きい材料やそのような材料をヘテロ接合で用いている場合はこの温度係数がより小さくなる方向である。

これらの違いは例えば夏と冬では太陽電池の種類によって発電出力に大きな差異を生じさせることがある。

#### 4-1. 結晶シリコン太陽電池

市場の 90% 近くを占めているのは単結晶および多結晶シリコンで、薄膜シリコンと CdTe や CuInSe<sub>2</sub> などの化合物薄膜が残り占める。しかし、依然としてウエーハベースの結晶シリコン太陽電池は市場の主流を占めている。これは実績があつて長期間安心して使え、効率が高いことがその理由である。単結晶型においては実用サイズでの変換効率の最高値はセルと呼ばれる 10~15 cm 角程度の単位素子で 23% 程度で、パネルとしての効率でも 20% のものが実用化されようとしている。これからの課題はむしろ効率ではなくいかにコストを下げるかという点に焦点が移りつつある。太陽電池を主要なエネルギー源と考えると、供給可能量は一つの重要な因子である。シリコンはどこにでもある元素だが、太陽電池用といえども現在用いられている高純度シリコンは無制限にあるわけではなく現在の太陽電池生産量はこのシリコンの供給量で決まっている。そこで薄型化は限られた原料からより多くのシリコンを得るためにも必要である。シリコンのウエーハはインゴットと呼ばれるブロックからワイヤソーで 200 ミクロン程度の厚さに切りだされるが、これを数十ミクロン程度まで切り代のロスなくウエーハを作製する技術開発が進

んでいる。もう少し近未来的には 100 ミクロン程度までの厚さで効率の低下を抑制する技術開発が活発である。

#### 4-2. 薄膜シリコン太陽電池

原料の使用量をさらに減らす選択肢は薄膜シリコン太陽電池である。日本ではシャープ、カネカ、三菱重工、富士電機の 4 社が実用化している。薄膜シリコン太陽電池の技術は液晶テレビに用いられる薄膜トランジスタの技術と共通する点も多く、日本の得意分野でもある。薄膜太陽電池ではシリコンの厚さがせいぜい数ミクロンでウエーハの厚さに比べると 1/1000~1/100 程度である。薄膜シリコンはモノシランガス( $\text{SiH}_4$ )を原料とし、減圧下でのグロー放電プラズマによってガスを分解し、薄膜を堆積させる。

課題は薄膜太陽電池の効率がまだ低い点である。市販モジュールでは効率は 8~9%であり、多結晶シリコンや単結晶シリコンと比べると半分程度である。

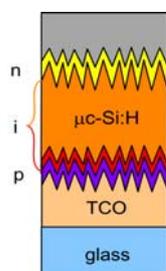


図6 薄膜シリコン多接合太陽電池の構造模式図。

効率向上の手法の一つは図6に示されるような多接合型太陽電池である。これは入射光の異なる波長帯に対応する発電層を積層して直列接続する構造でタンデム型とも呼ばれる。現在までに3接合で15%程度の初期効率が得られている。今後さらなる効率向上にはここで用いられているトップセルのアモルファスシリコンの光劣化の抑制、ボトムセルの微結晶シリコンの高速製膜と高品質化、さらには全体的に薄膜での電流を増大させる光閉じ込め技術の開発が鍵となる。

#### 4-3. 化合物薄膜太陽電池

結晶シリコンが市場では最も優位であるが、シリコン以外の太陽電池の開発も近年活発化している。いわゆる化合物半導体と呼ばれるもので  $\text{CdTe}$  や  $\text{CuInGaSe}_2$  などの材料を用いた太陽電池である。 $\text{CdTe}$  太陽電池はパネル効率にして 9~10%程度であるが、製造コストが安く、価格競争力が最も高いと言われている。課題は  $\text{Cd}$  (RoHS 指令対象物質である) であるが、これはモジュールを管理された場所にしか設置せずかつリサイクルするという前提で販売されている。長期的には  $\text{Te}$  も希少な元素であるので資源供給量が懸念される。カルコパイライト系材料である  $\text{CuInGaSe}_2$  (CIGS) は小面積での最高効率が多結晶にして 20%と高い。モジュールにおいても 15%程度の効率が報告されている。日本では昭和シェルソーラーとホンダソルテックが実用化している。

CIGS 系太陽電池は多結晶でも 20%程度の変換効率が得られるということで注目されている。パイロットレベルではモジュール効率で 15%を超えるものも開発されてきている。しかし

量産プロセスはセレン化法と呼ばれる方法で行われており、一方、最高効率の太陽電池は蒸着法で作製されている。したがってさらなる高効率を製品レベルで狙うには蒸着法を実用化に結びつけることも有望な方策となろう。最近ではミニモジュールで 16%程度の効率が報告されはじめている。

#### 4-4. 結晶か薄膜か

産業構造は今結晶型から薄膜型に移り変わりつつある。これは薄膜型が量産によるコスト低減効果が大きいというコスト優位性に起因しているといえる。

これら薄膜太陽電池は単一のサイズのを大量に作ることに適しているので様々な形状に対応することが求められる住宅用よりは、フィールドに大量において大規模な発電所を形成するのに適していると考えられる。世界では 50 メガワットの規模の発電所が建設されている。これは住宅用に換算して 1 万軒分に相当する。今後日本でも大型の屋根用やフィールド設置された大規模用途が増えていくことが期待される。



図 7 フレキシブル薄膜シリコン太陽電池の一例

(富士電機 HD 提供)

また薄膜の特徴としてフレキシブル型太陽電池が挙げられる。これは軽量の金属やプラスチック基板上に形成される。結晶シリコン型ではウエーハが硬くて曲げることができないので硬いカバーガラスが必要となり、重量が重くならざるを得ない。図 7 に示されるようなフレキシブル型では重量が軽いのでプレハブのような耐荷重の低い屋根の上にも設置できる、また設置工事が簡単なので DIY 的な設置も可能である。用途拡大という点では大変興味深い。

#### 4-4. 有機系太陽電池

将来の候補として注目されているのは色素増感と有機薄膜であるが、耐久性や効率の向上などまだまだ課題は多い。まずは民生用のニッチマーケットからの出発であろう。図 8 に有機太陽電池の一例を示すが、無機材料と異なり、材料によってバラエティに富んだ色調を得ることができるので、デザイン性を求められるような場合には重宝されることもあるだろう。

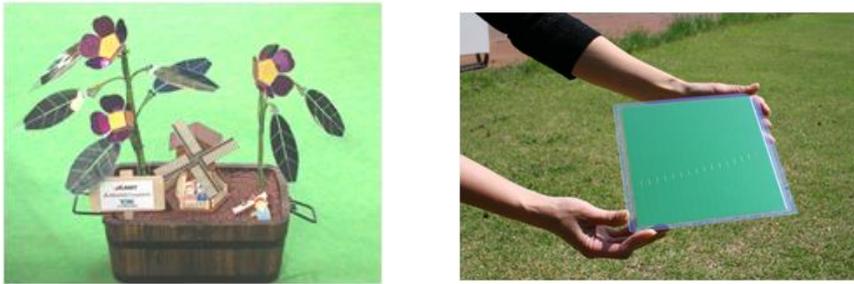


図8 有機薄膜太陽電池のデザイン性を生かした一例。左図；葉の緑の部分と、花卉の紫の部分が太陽電池。右図；モジュール化された例。（産業技術総合研究所提供）

有機系太陽電池では色素増感型が性能的には先行しており、12%程度のセル変換効率とモジュールレベルでも10%に手が届くところまで来ている。耐久性や規格試験に対しても対応が可能になって来ており、製品化も近いことが期待される。有機薄膜太陽電池は数年前には3%程度の変換効率で色素増感太陽電池と比較すると見劣りしたが、今は非公式データでは8%を超えるものも出てきており、長足の進歩を遂げつつある。

これらの太陽電池の最大の課題は信頼性と耐久性であり、無機薄膜太陽電池より信頼性が劣れば、コスト的には相当安くないと競合できないだろう。無機薄膜太陽電池はいずれも屋外フィールドで10年以上の実績を持っている。

#### 4-5. 集光型太陽電池

効率という点では、単結晶 III-V 族半導体をベースとした InGaP/InGaAs/Ge<sub>3</sub> 接合太陽電池では変換効率において非集光で35%、集光で42%が達成されている。これらの太陽電池は高価で量産性にも乏しいため地上電力用には集光システムが必須であり、複雑で精密な追尾システムの必要性、晴天時にしか発電しない地域制約などから、設置場所は限定される。たとえばカリフォルニアや南ヨーロッパなど年間日射量が高い、晴天の多い場所であろう。この材料の組み合わせは多くの化合物半導体、たとえば GaAs がゲルマニウムと格子整合するところが起源であるが、バンドギャップのマッチングとしては必ずしもベストではない。そこで GaAs 基板上に AlAs 犠牲層を介して InGaP、GaAs の順に格子整合させた状態で堆積させ、組成傾斜バッファ層を介して歪系 InGaAs 層を最後に堆積し、AlAs 層から剥離させるという逆エピ構造を有する太陽電池も開発されている。これらの太陽電池は現状のシリコン系や薄膜系太陽電池では達成困難な40%近い変換効率を可能にするが、発電コストという点は必ずしも圧倒的に優位なわけではない。その理由はゲルマニウムあるいはガリウム砒素の単結晶基板のコストとその供給量にある。将来的に薄膜で同様な多接合太陽電池が実現されればコスト的にも大幅に下がる余地が出てくると思われる。

#### 4-6. 新概念太陽電池

ここまでの太陽電池はある意味で全て従来型の発電原理と設計概念に基づいている。そのバンドギャップと組み合わせが異なるだけである。しかし、図 9 に示されるように、最近この概念を根底から覆す太陽電池のアイデアがいくつか現れてきた。

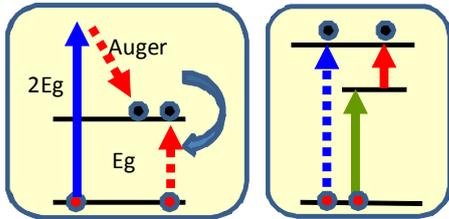


図 9 左：多重励起子生成を表わす模式図。右：中間バンド太陽電池の動作原理を表わす模式図。

その中の一つは幅広く分布する太陽光スペクトルの有効利用のためにバンドギャップの整数倍の高エネルギーフォトンから複数のキャリアを生成させる多重キャリア生成である。たとえばバンドギャップエネルギー  $E_g$  に対して  $2E_g$  以上の光のエネルギーが入射されたとき、電子が励起状態から低エネルギー状態まで緩和するときに放出されるエネルギーで別の電子が励起され結果的に 2 個のエキシトンが形成される。これはバルク半導体ではほとんど起こらず、量子ドット内におけるエネルギー準位の離散性とそれに伴うオージェ冷却速度の低下のために量子ドットでのみ特徴的に観測される現象であるとされている。この原理に従うと通常バンドギャップ光  $E_g < h\nu < 2E_g$  に対しては従来の原理に基づいた発電が起こり、それ以上のエネルギーの光に対しては 1 フォトンあたり二倍以上の電流が得られることになる。課題は量子ドットからのキャリアの取出しである。量子準位は簡単には無限に高い障壁に囲まれることによって発生するのであるから、太陽電池におけるキャリアの取出しとは基本的に矛盾する要素を含んでいることになる。

別の光の有効利用の例として規則的に配置された量子ドットによるミニバンドを利用した中間バンド太陽電池が挙げられる。これは上の考え方と逆で、太陽光で捨てられている長波長の光や熱エネルギーを有効に利用して発電に活用しようというものであり、図 9 に示されるように複数のパスで電子正孔対を生成することを意図されている。従って、このデバイスは二端子でありながら直並列が物質の中で自動的に実現されているというものである。その結果、適当なバンドギャップの組み合わせで従来の 3 直列タンデムより高効率を実現でき、最高で 60% を超える変換効率が可能になるというものである。

これらのアイデアは従来の壁を打ち破る可能性があるものとして注目を集めているが、まだ太陽電池としての原理検証に至っておらず、今後の進展が待たれるところである。

## 5. 最後に：太陽電池の普及に向けて

日本では住宅やビルでの消費電力がかなりの割合を占める。太陽光は日中にたくさん発電するのでピークカットには最適である。最近では新築住宅のかなりの割合が太陽光発電つきで売られているようである。マンションでも最近は人気があると聞く。オフィスビルは全体の消費電力量に比して屋根の面積が十分でないケースもあるが、垂直壁の利用や遠隔での太陽光発電電力（いわゆるグリーン電力）の利用によって、ビル全体としてのゼロエミッションが可能になる。

今後、さらなる普及を推進しようとするといわゆる図 10 で示されるようなメガソーラ市場が鍵となるであろう。メガソーラ市場は完全な投資市場であるため、採算性が合うか合わないかが最重要課題である。そのためにはパネルのコストだけでなく、パワーコンディショナー、配線、設置などの周辺コストを低減する努力が必要である。



図 6 スペインでのメガソーラの一例  
(アモルファスシリコンのパネルで1.4MWの規模)

太陽光発電が環境的にもエネルギー的にも目に見える程度に貢献し始めるには膨大な量の太陽電池が必要となる。これは一見ネガティブな側面であるが、逆にそれができれば今後の未来永劫安泰ということになる。そのためには、低コストの太陽電池を大量に供給する必要がある。そのための決定打となる技術が今こそ待ち望まれている。

## 表面・界面制御によるシリコン太陽電池の高効率化

小林 光

大阪大学 産業科学研究所

〒567-0047 茨木市美穂ガ丘 8-1

## 1. 序論

太陽電池のエネルギー変換効率は、半導体中の欠陥準位や表面の金属汚染によって大きく劣化する。欠陥準位や金属は、半導体のバンドギャップ内にエネルギー準位を形成する。半導体のバンドギャップ内にエネルギー準位が存在しない場合、光生成した電子とホールは速やかに分離される。すなわち、電子はポテンシャルの低い方向に、一方電子が抜けた穴であるホールはポテンシャルの高い方向に移動する。一方、シリコンダングリングボンドなどの欠陥準位は、半導体のバンドギャップ内にエネルギー準位を生成する。欠陥準位が存在すれば、そこに電子やホールが蓄積して、その結果バンドが平らになる部分が生成する。バンドが平坦になれば、電子とホールの分離が困難になる。さらに、電子とホールが欠陥準位に捕獲されてこれらが消滅してしまう。半導体に存在する欠陥準位や金属汚染は極微量（例えば 10 万個に 1 個の原子が欠陥準位となっている場合、表面に 1/10,000 モノレーヤーの汚染金属が存在する場合）でも、太陽電池の特性を大きく劣化させる。本講演では、新規の化学的手法を用いて、シリコンの欠陥準位を消滅させると同時に金属汚染物を除去する方法やシリコン表面をパッシベーションすることによって、シリコン太陽電池を高効率化させる手法を紹介する。

## 2. 欠陥消滅型半導体洗浄法によるシリコン材料上の金属汚染の除去

図 1 に、従来の一般的な半導体洗浄法である RCA 洗浄法 [1] と、我々が開発した欠陥消滅型半導体洗浄法 [2-5] の違いの概要を示す。従来の半導体洗浄法では、半導体の表面を少しエッチングすることによって金属汚染やパーティクル汚染を除去する方法がとられていた (図 1a)。このエッチングが、半導体プロセスを非常に複雑にしてきた。また、エッチングによって表面がラフに

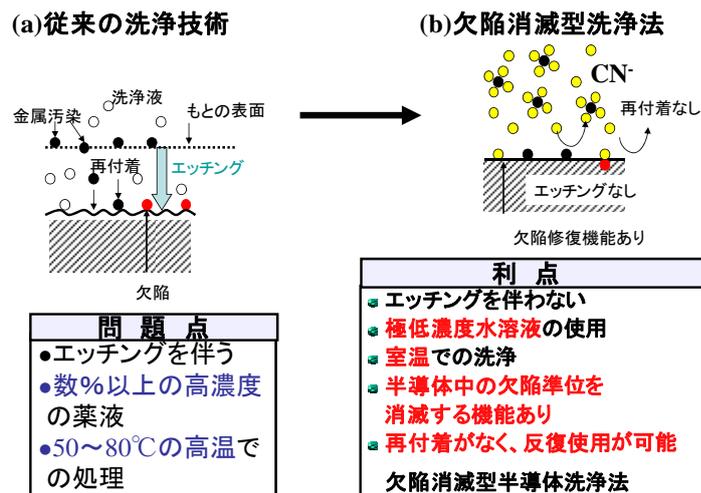


図 1 従来の洗浄法 (RCA 洗浄法) と欠陥消滅型洗浄法の比較

なり、欠陥準位が生成する可能性もある。洗浄液の洗浄能力はそれほど高くなく、そのため洗浄は、50~80℃程度で行う必要があり、洗浄液の濃度も5%程度の高いものが必要であった。さらに、除去された金属は洗浄液中で単体の金属イオン（例えばCu<sup>2+</sup>）として存在するために、再付着が起こる。このため、洗浄液は常に清浄である必要があり、洗浄には多量の洗浄液が必要であった。

欠陥消滅型洗浄法では、洗浄液中のCN<sup>-</sup>イオンが直接金属汚染と反応して、非常に安定な錯イオンを形成する結果、金属汚染物が除去される（図1b）。洗浄液の金属除去能力は

非常に大きいため、室温でしかも0.2%以下の極低濃度の洗浄液で十分に洗浄効果を発揮する。さらに、洗浄液中に除去された金属は非常に安定な錯イオンとして存在するため、再付着が無く、洗浄液の反復使用も可能である。さらに、CN<sup>-</sup>イオンはシリコンダングリングボンド等の欠陥準位に選択的に反応して、洗浄と同時に欠陥消滅が行われる[5-8]。

シリコンを銅で強制汚染して、その後濃度0.14%の欠陥消滅型半導体洗浄液を用いて、室温で10秒間洗浄を行った（図2）。洗浄液のpHが増加するに伴い洗浄能力が向上して、pH10以上では、室温で極低濃度の洗浄液を用いて、しかも10秒という短時間で銅汚染が $\sim 3 \times 10^9$ 原子/cm<sup>2</sup>以下（観測に用いた全反射蛍光X線分光装置の検出下限）にまで除去されることがわかる。pHの上昇と共に洗浄効果が向上する理由は、欠陥消滅型洗浄液中のHCNの電離確率がpHと共に増加し、洗浄効果が大きなシアン化物イオン（CN<sup>-</sup>）の濃度が増加するためである。

欠陥消滅型洗浄液の反復使用が可能であることを示すために、洗浄液を64ppmの銅イオンで汚染した。強く銅で汚染された洗浄液を用いても、シリコン表面上の銅（洗浄前の濃度： $\sim 1 \times 10^{14}$ 原子/cm<sup>2</sup>）は $\sim 3 \times 10^9$ 原子/cm<sup>2</sup>以下にまで除去された。これは、洗浄液中に存在する銅が再付着しないことを示す結果である。

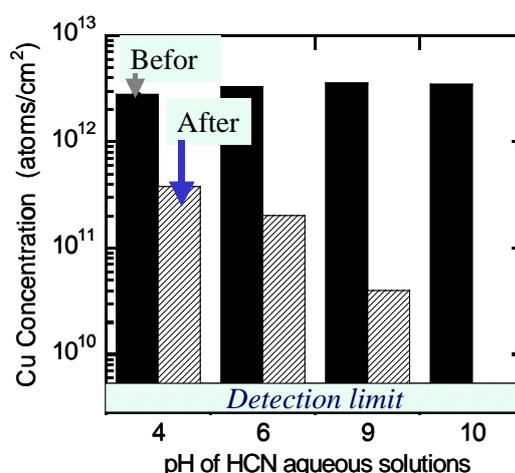


図2 SiO<sub>2</sub>/Si上の銅濃度：濃度0.026%の欠陥消滅型洗浄液を用いて室温で10秒間洗浄

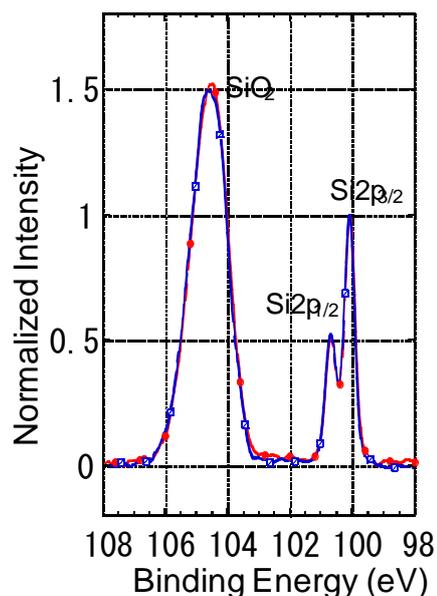


図3 SiO<sub>2</sub>/Si構造のSi 2p領域のXPSスペクトル、青：洗浄前、赤：欠陥消滅型洗浄液に20時間浸漬後

シリコン表面上に 6.1nmのSiO<sub>2</sub>膜を形成し、それを欠陥消滅型洗浄液中に 20 時間浸漬した。(洗浄は、数分で十分であるが、エッチングの有無を調べるためにこのように長時間の浸漬を行った。) 図 3 に示されたXPSスペクトルから、洗浄前にはSiO<sub>2</sub>膜の膜厚が、浸漬後全く変化せず、エッチングが起こらないことが証明された。

6 インチシリコンウェーハを種々の金属で強制汚染した (図 4)。表面上には、鉄、亜鉛、銅、ニッケル、コバルト、マンガン、カルシウム、ナトリウムが存在している。このシリコンウェーハを、濃度 0.14%のDPEL洗浄液で室温で 30 分洗浄した。洗浄後、金属汚染によるピークは全く観測されず、すべての種類の金属の濃度は、全反射蛍光X線分光装置の検出下限 (~3×10<sup>9</sup>原子/cm<sup>2</sup>) 以下に低減したことがわかる。

欠陥消滅型洗浄液の金属除去効果は非常に大きく、極低濃度の洗浄液でも十分に大きな金属除去効果を示す。図 5 に、銅汚染が存在するSiO<sub>2</sub>/シリコンウェーハを 2.7ppmの濃度を持つ欠陥消滅型洗浄液で室温で洗浄した結果を示す。ppmオーダーの濃度にもかかわらず、2分以内で銅汚染が完全に除去できることがわかる。

### 3. 欠陥消滅型半導体洗浄法によるシリコン欠陥準位の消滅とシリコン太陽電池の高効率化

欠陥消滅型半導体洗浄法では、CN<sup>-</sup>イオンがシリコンダングリングボンド等の欠陥準位に選択的に結合する結果、これが消滅する。欠陥消滅型洗浄法を用いれば、金属汚染の除去と共に欠陥準位が消滅するという 2 つの効果によって、シリコン太陽電池の高効率化を行うことができる。

図 6 に、多結晶シリコン pn 接合太陽電池に欠陥消滅型洗浄法を施した結果を示す。処理前は、主

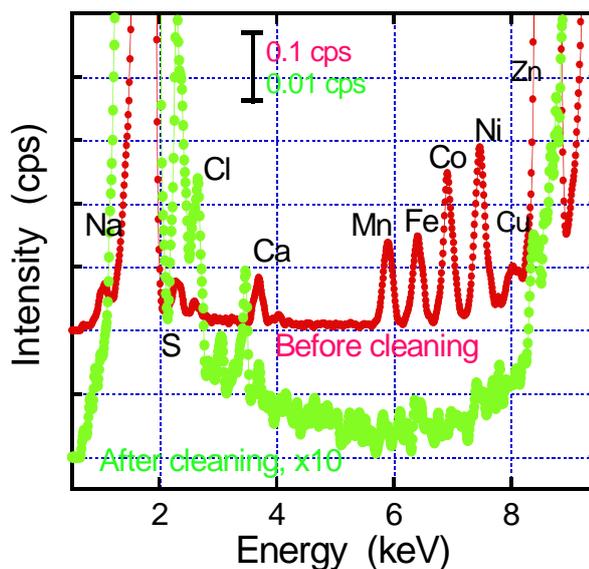


図 4 種々の金属汚染があるシリコンウェーハを欠陥消滅型洗浄液を用いて室温で洗浄する前後に観測した全反射蛍光 X 線スペクトル

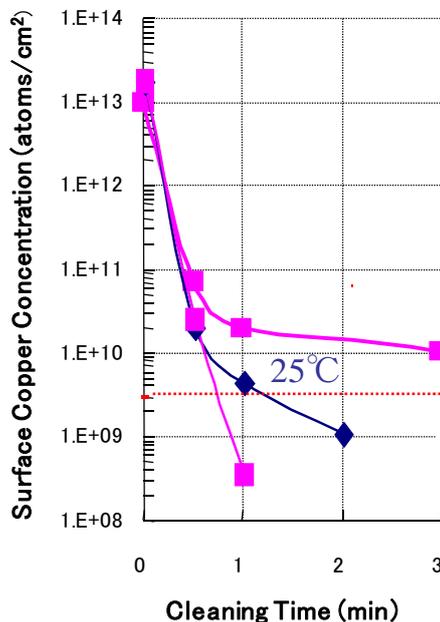


図 5 2.7ppmの濃度を持つ欠陥消滅型半導体洗浄液を用いて、銅で汚染したSiO<sub>2</sub>/Si試料を室温で洗浄した場合の銅濃度と洗浄時間の関係

に多結晶シリコンの粒界領域に高準位密度の欠陥準位が存在し、その結果エネルギー変換効率は10%以下であった(図6a)。欠陥消滅処理を施した場合、エネルギー変換効率は13%に向上した。この太陽電池では、無反射コーティングは行っておらずそれを用いることによって15%以上の変換効率が得られる。

図7に、欠陥消滅型洗浄処理を行ったシリコン太陽電池の長期安定性を示す。太陽電池のエネルギー変換効率は、1000時間以上の光照射(AM1.5 100mW/cm<sup>2</sup>)によって全く変化しなかった。これは、太陽電池が安定に動作することを示すのみならず、欠陥消滅の結果形成されるSi-CN結合が紫外・可視光照射によって切断されないことを示している。Si-CN結合は、800°Cの加熱処理によって

も切断されないことがわかっている。紫外光照射や加熱処理に対する安定性は、従来の水素処理による欠陥消滅では達成できなかったものであり[9,10]、欠陥消滅型洗浄法の重要な利点である。このような光照射や加熱処理に対する安定性は、Si-CN結合が4.5eVとSi-H結合に比較して1eV以上大きな結合エネルギーを有していることによる[7]。

多結晶シリコンを用いた<ITO/SiO<sub>2</sub>/Si> MIS型太陽電池に欠陥消滅型半導体洗浄処理を施した結果、エネルギー変換効率が8%程度から12.5%に向上した。MIS型太陽電池では、表面領域に存在する欠陥準位が太陽電池特性に大きく影響し、それが欠陥消滅処理によって効果的に消滅した結果、このような大きな変換効率の向上が得られた。

図8に、この太陽電池の暗電流密度の温度依存性を示す。処理を施さない場合、暗電流密度の温度依存性は低かった。欠陥消滅型洗浄処理を施すことによって暗電流密度が約1桁低減するとともに、温度依存性が大きくなった。

図8の暗電流密度の温度依存性を解析した結果、暗電流の機構が得られた。欠陥消滅処

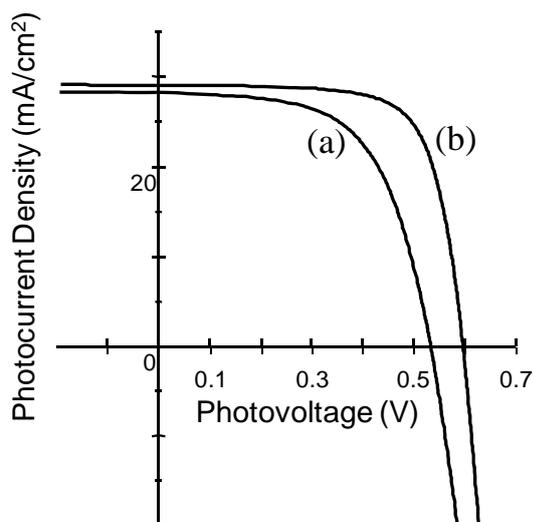


図6 多結晶pn接合太陽電池の光起電力-光電流密度曲線:(a) 処理なし、(b) 欠陥消滅型洗浄処理あり

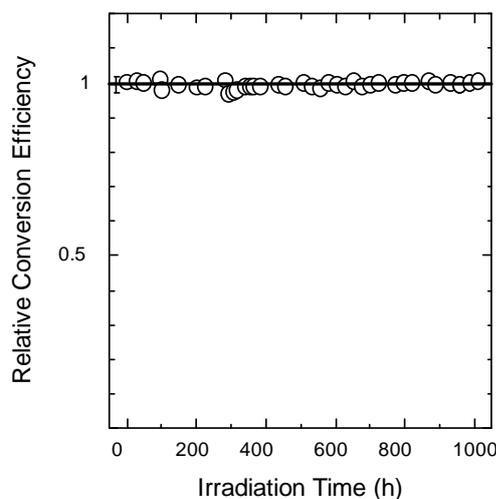


図7 欠陥消滅型洗浄処理を施したシリコン太陽電池のエネルギー変換効率の光照射時間依存性

理を行わない場合、多結晶シリコンの空乏層中には多くの欠陥準位が存在する (図 9 a)。電子は欠陥準位をホッピング的にトンネル伝導することによって空乏層を流れる。トンネル

伝導の結果、暗電流密度の温度依存性は小さい。一方、欠陥消滅型洗浄処理を施した場合、空乏層中の欠陥準位が消滅する。その結果、暗電流が流れるためには熱励起が必要となる (図 9b)。暗電流が熱励起機構で流れるために、温度依存性が大きくなる。トンネル機構で電流が流れることができないために、暗電流密度は小さくなる。(太陽電池の光起電力は、暗電流密度が 1/10 になれば、約 60mV 増大する。) シリコンの

空乏層幅は約  $0.5\mu\text{m}$  であり、この領域に存在する欠陥準位が欠陥消滅処理によって消滅する。つまり、 $\text{CN}^-$  イオンが少なくともシリコン表面から  $0.5\mu\text{m}$  浸入すると結論できる。

#### 4. 欠陥消滅型半導体洗浄法の安全性確保

欠陥消滅型半導体洗浄液中には、微量であるが毒物の HCN が含まれている。安全性を確保するため、1) 無毒物質からの HCN 合成方法、2) 使用後の洗浄液の処理として完全無毒化・分解する方法を開発した。

メタンとアンモニアを触媒を用いて反応させたところ、濃度 0.5% の HCN 水溶液を収率 58% で合成できた。HCN 水溶液中の金属不純物濃度は、0.5ppb 以下であった。上述したように、洗浄液の濃度は ppm オーダーでよいから、合成した HCN 水溶液を 1000 倍程度に希釈して使用することが可能であり、研究室レベルの小型の合成装置でも 1 時間当たり

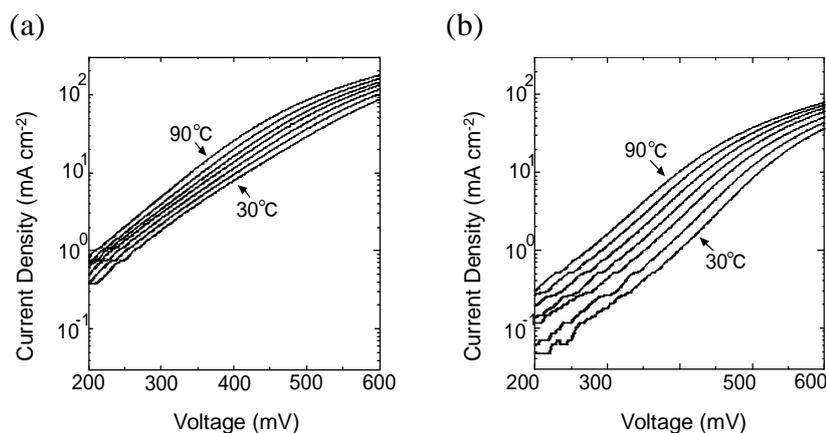


図 8 <ITO/SiO<sub>2</sub>/多結晶シリコン>MIS型太陽電池の暗電流密度の温度依存性 : (a) 処理なし ; (b) 欠陥消滅型洗浄処理あり

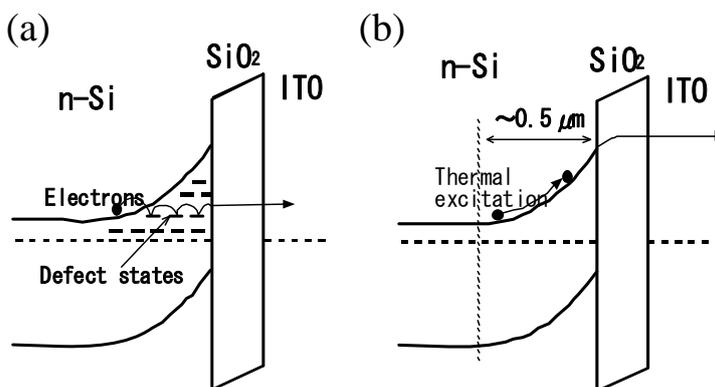
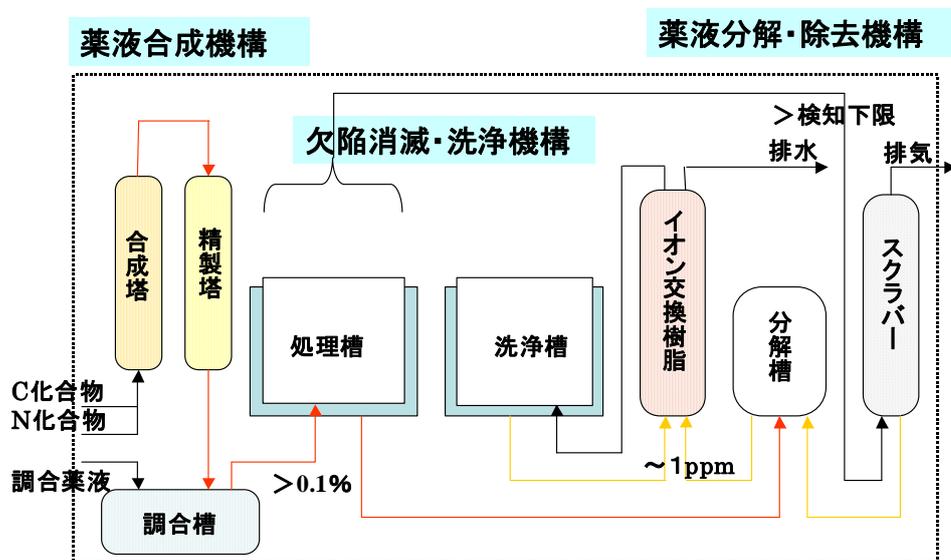


図 9 <ITO/SiO<sub>2</sub>/多結晶シリコン>MIS型太陽電池の暗電流密度の温度依存性 : (a) 処理なし ; (b) 欠陥消滅型洗浄処理あり

数百 L の洗浄液の供給が可能である。

HCNは、紫外線照射+オゾン水処理で簡単に炭酸ガスと窒素に完全無毒化・分解できる。図 8 で用いた欠陥消滅型洗浄液には、140ppm程度のCN<sup>-</sup>イオンが含まれている。オゾン水+紫外光照射処理によって、20 時間でCN<sup>-</sup>イオンの濃度がセンサーの検出下限である0.16ppm以下にまで低減した。一般的な環境排出基準が 1ppmであり、オゾン水+紫外光照射を行うことによって、洗浄液の廃液が排出できる。オゾン水濃度を高めることによって、1 時間以内の処理でシアン濃度を 1ppm以下にまで分解できることがわかっている。

欠陥消滅型半導体洗浄法を、太陽電池（または半導体）工場で利用する場合のシステム構成図を図 10 に示す。太陽電池工場には、炭素源であるメタンまたはメタノール等と窒素源である窒素またはアンモニア等が搬入される。これらから触媒反応を用いて欠陥消滅型半導体洗浄液が合成される。合成された欠陥消滅型洗浄液は、欠陥消滅または洗浄を目的として使用される。金属汚染物の再付着が起こらないため、反復使用が可能である。反復使用後の欠陥消滅型洗浄液は、紫外線照射+オゾン水処理で炭酸ガスと窒素に完全無毒化・分解される。このように、閉鎖された洗浄装置内には毒物が存在するが、その入口と出口では無毒物質の出入りがあるのみである。この結果、完全な安全性を確保して、欠陥消滅型半導体洗浄法を太陽電池プロセスや半導体プロセスに導入することができる。洗浄液の合成にはほとんどエネルギーを消費せず、さらに有毒物質の排出が全くない究極の半導体洗浄・欠陥消滅技術である。



### ゼロエミッション半導体プロセスを達成

図 10 欠陥消滅型半導体洗浄法を太陽電池向上で使用する場合のシステム図

## 5. 硝酸酸化法による高性能SiO<sub>2</sub>/Si構造の低温創製

シリコン表面には多くの欠陥準位（界面準位）が存在し、そこで電子-ホールが再結合するため、シリコン太陽電池の高効率化にはこれを消滅させる必要がある。我々は、硝酸が強い酸化作用を有することに着目し、シリコンを低温で酸化する方法として、硝酸酸化法

(Nitric acid oxidation of Si method, NAOS) を開発した [11-17]。この方法は、シリコンを高濃度の硝酸に浸漬するだけの簡単なものである。硝酸が表面で分解し、酸素原子が発生し、それがSiO<sub>2</sub>/Si界面にまで拡散し、そこで酸化反応が起こる。120°C以下の低温反応であるため、界面ストレスが少なく、良好な電気特性を持つSiO<sub>2</sub>/Si構造が形成できる。

図 11 に、硝酸酸化法で形成した 1.3~1.5nm の膜厚を持つ <Al/SiO<sub>2</sub>/Si>MOSダイオードの電流-電圧特性を示す。濃度が 68%以上の硝酸で形成したSiO<sub>2</sub>

膜のリーク電流密度は、1.5nmの熱酸化膜[18.19]よりも低いリーク電流密度を持つことがわかる。さらに、98%の硝酸を用いて酸化した場合、形成されたSiO<sub>2</sub>膜のリーク電流密度は、同換算膜厚のシリコンオキシナイトライド (SiON) 膜よりも低い。

68%の硝酸を用いて形成されたSiO<sub>2</sub>膜の原子密度は、熱酸化膜[20]よりも約 3%高いことがわかった。また、硝酸の濃度の増加と共に、SiO<sub>2</sub>膜の原子密度が増加することがわかった。さらに、価電子帯スペクトルの測定の結果、硝酸酸化法で形成したSiO<sub>2</sub>/Si構造では、界面でのバンドの不連続エネルギーが熱酸化膜よりも大きいことがわかった。極薄SiO<sub>2</sub>膜をトンネル的に流れるリーク電流密度は、界面での不連続エネルギーの増加と共に、指数関数的に減少する。SiO<sub>2</sub>膜の原子密度が大きい場合、膜中の酸素とシリコン原子の相互作用が強くなり、その結果結合性の軌道である価電子帯と反結合性の軌道である伝導帯のエネルギー差、すなわちバンドギャップが大きくなる。SiO<sub>2</sub>のバンドギャップが大きくなると、当然界面での不連続エネルギーが大きくなり、リーク電流が減少する。

硝酸酸化膜には、サブオキサイド (Si<sup>+</sup>, Si<sup>2+</sup>, Si<sup>3+</sup>) がほとんど存在しないことがわかった。サブオキサイドは一種の欠陥準位となり、電子やホールがこれをホッピング的に伝導すると考えられる。

極薄酸化膜では一般的にリーク電流が高く、電気容量-電圧 (C-V) 測定が非常に困難である。一方、硝酸酸化法で形成した 1.3nmの膜厚を持つSiO<sub>2</sub>膜はリーク電流密度が低い結果、C-V曲線が観測できた。C-V曲線には界面準位によるこぶやヒステレシスが存在せず、界面準位密度が低いことがわかった。

硝酸酸化法で形成した極薄SiO<sub>2</sub>膜のリーク電流密度が熱酸化膜よりも低い原因として、1) 低い界面準位密度、2) 高い原子密度、3) 低いサブオキサイド密度のためと結論した。

太陽電池への応用として、硝酸酸化法をシリコン表面のパッシベーションに利用することができる。図 12 に、多結晶シリコンpn接合太陽電池に硝酸酸化法を適用した結果を示す。40%の硝酸でSiO<sub>2</sub>膜を形成した場合、太陽電池の変換効率は低下した。一方、68%及び 98%

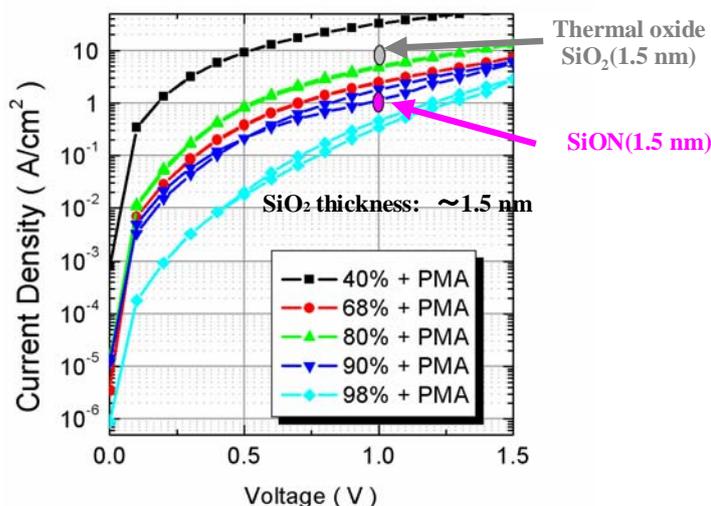


図 11 硝酸酸化法で形成した<Al/SiO<sub>2</sub>/ Si(100)>MOSダイオードの電流-電圧特性

の硝酸でシリコンの表面パッシベーションを行った場合、エネルギー変換効率が約 1.5 割増加した。硝酸酸化法で形成する  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  構造では界面準位密度が低いために、界面再結合が防止された結果、変換効率が増加したと結論できる。

## 6. まとめ

シリコン太陽電池の変換効率を向上させる技術、「欠陥消滅型半導体洗浄法」と「硝酸酸化法」を開発した。欠陥消滅型半導体洗浄法では、シリコン材料を極低濃度の洗浄液に数分浸漬するだけで、シリコンダングリングボンド等の欠陥準位が消滅すると同時に、金属汚染が完全に除去される。この二つの効果によって、太陽電池の変換効率が向上する。硝酸酸化法では、シリコンを 68%以上の濃度を持つ硝酸に浸漬することによって、界面準位密度の低い良好な電気特性を持つ極薄  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  構造を形成できる。これを、多結晶シリコン太陽電池に適用した場合、変換効率が約 1.5 割向上した。

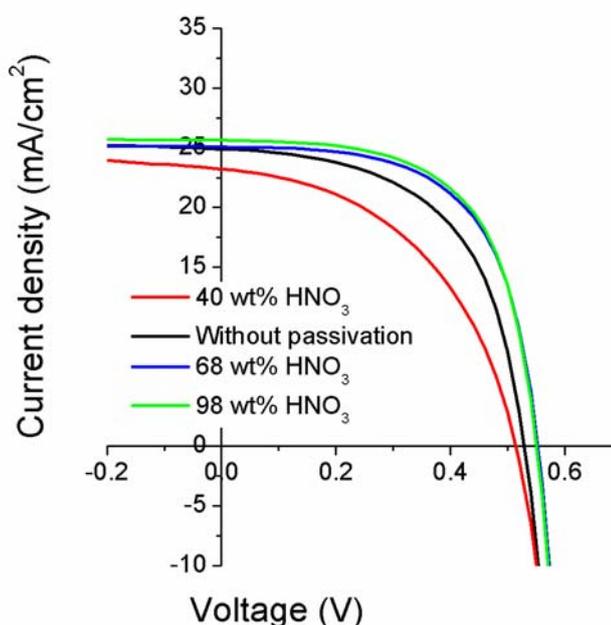


図 12 硝酸酸化法が、多結晶シリコン pn 接合太陽電池に及ぼす効果

## 参考論文

- [1] W. Kern and D. A. Puotinen, R. C. A. Rev. 187 (1970).
- [2] H. Narita, M. Takahashi, H. Iwasa, and H. Kobayashi, Complete removal of copper contaminants on bare silicon surfaces by use of HCN aqueous solutions, J. Electrochem. Soc. **155**, H103 (2008).
- [3] N. Fujiwara, Y.-L. Liu, M. Takahashi, and H. Kobayashi, J. Electrochem. Soc. **153**, G394 (2006).
- [4] Y.-L. Liu, N. Fujiwara, H. Iwasa, M. Takahashi, S. Imai, and H. Kobayashi, Surf. Sci. **600**, 1165 (2006).
- [5] M. Takahashi, Y.-L. Liu, N. Fujiwara, H. Iwasa, and H. Kobayashi, Solid State Commun. **137**, 263 (2006).
- [6] H. Kobayashi, M. Takahashi, O. Maida, A. Asano, T. Kubota, J. Ivanco, A. Nakajima, and K. Akimoto, Appl. Surf. Sci. **235**, 279 (2004).
- [7] O. Maida, A. Asano, M. Takahashi, H. Iwasa, and H. Kobayashi, Surf. Sci. **542**, 244 (2003).
- [8] H. Kobayashi, Y.-L. Liu, A. Asano, Y. Yamashita, J. Ivanco, and M. Takahashi, Solar Energy, **80**, 645 (2006).

- [9] Y. Nissan-Cohen, *Appl. Surf. Sci.* **39**, 511 (1989).
- [10] P. J. Caplan, E. H. Poindexter, B. E. Deal, and R. R. Razouk, *J. Appl. Phys.* **50**, 5847 (1979).
- [11] H. Kobayashi, K. Imamura, W.-B. Kim, S.-S. Im, and Asuha, , *Appl. Surf. Sci.* **256**, 5744 (2010).
- [12] W.-B. Kim, T. Matsumoto, and H. Kobayashi, *Nanotechnology* **21**, 115202 (2010).
- [13] H. Kobayashi, Asuha, O. Maida, M. Takahashi, and H. Iwasa, *J. Appl. Phys.* **94**(11) 7328 (2003).
- [14] Asuha, T. Kobayashi, M. Takahashi, and H. Kobayashi, *Surf. Sci.* **547**, 275 (2003).
- [15] Asuha. T. Kobayashi, O. Maida, M. Inoue, M. Takahashi, Y. Todokoro, and H. Kobayashi, *Appl. Phys. Lett.* **81**(18) 3410-3412 (2002).
- [16] Asuha, S.-S. Im, M. Tanaka, S. Imai, M. Takahashi, H. Kobayashi, *Surf. Sci.* **600**, 2523 (2006).
- [17] K. Imamura, M. Takahashi, Asuha, Y. Hirayama, S. Imai, and H. Kobayashi, *J. Appl. Phys.* **107**(5), 054503 (2010).
- [18] A. I. Kingon, J. P. Maria, S. K. Streiffer, *Nature* **406**, 1032 (2000).
- [19] J. Robertson, *The Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **28**, 265 (2004).
- [20] C. Martinet, R. A. B. Devine, *J. Appl Phys.* **77**, 4343 (1995).

## 有機太陽電池における有機・無機界面評価技術

島田敏宏

北海道大学 工学研究院 物質化学部門

〒060-8628 札幌市北区北13条西8丁目

shimadat@eng.hokudai.ac.jp

http://www.eng.hokudai.ac.jp/labo/kotai

### 1. 有機太陽電池の特徴

#### 1.1 はじめに

有機太陽電池の研究が活発化している。その理由は、有機色素が光と強い相互作用を示すこと、光吸収波長とエネルギー準位を自在に設計できること、軽いこと、元素戦略的に有利になる可能性があること、などが挙げられる。本講では、有機太陽電池の動作機構について無機半導体との比較をしながら述べた後、現在研究されている典型的な有機太陽電池の構造と作製法、さらにその研究に用いられる測定手法について解説していく。

太陽電池においては太陽光のスペクトル(AM0: 大気圏外, AM1.5: 温帯地表)のうち、できるだけ広い範囲を利用できることが望ましい。単一のバンドギャップを持つ素子の場合、バンドギャップが1.4eV付近の場合がもっとも効率が高くなるといわれている[1]。様々なバンドギャップを持つpn接合をタンデムに使うと太陽光スペクトルを階段関数で近似できるため、効率は向上するはずである。無機半導体においては図1のようになり[2-4]、候補が限られているが、有機半導体では吸収波長を自在に設計できるため、将来的には高効率化も期待される。有機太陽電池には、本講で主に扱う、有機半導体の接合を用いる太陽電池のほかに、本講座でも別に取り扱われる有機半導体と無機半導体の界面を用いる色素増感太陽電池[5]がある。

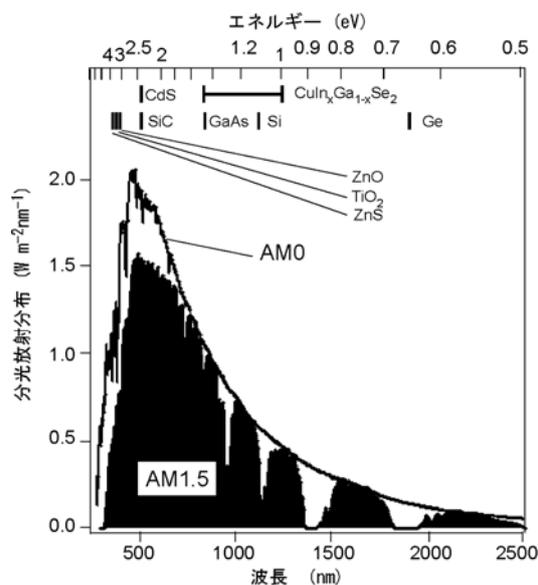


図1

#### 1.2 無機半導体と有機半導体の比較

有機半導体は有機色素の一種とみなすことができる。有機色素の特長としては、光との相互作用が強いことが挙げられる。下記は、典型的なモル吸収係数の値を示したものであるが、有機色素やその秩序会合体であるJ会合体の吸収係数は他の物質に比べて大きいこ

とがわかる。

物質と光学遷移	強い吸収帯の存在する波長域	モル吸収係数(dm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> cm <sup>-1</sup> )
有機色素 ( $\pi-\pi^*$ )	紫外～可視	10000～50000
J 会合体	可視	100000～500000
金属錯体の電荷移動遷移	可視～赤外	10000～50000
同 原子価間遷移	可視～赤外	100～1000
同 d-d 遷移	可視～赤外	1～100

表 1 : 典型的なモル吸収係数

有機半導体は構造が定義されたナノ構造である分子からなる固体である。有機太陽電池における有機半導体中の分子の配列は低秩序で、アモルファスであることが多い。(一方、高いキャリア移動度が要求される有機トランジスタにおいては、結晶性の高いものが用いられる)。アモルファス有機半導体は、電荷を運ぶ $\pi$ 電子系の部分とそれ以外の部分が原子スケールで混在した物質であるとみなすことができる。

有機半導体と無機半導体の最も大きな違いは、正孔・電子や励起子の波動関数の広がりや束縛エネルギーである。有機半導体においては正負キャリアや光励起によって生じる励起子の波動関数は分子にほぼ局在しており、大きさが 1nm 程度である。無機半導体においては典型的な大きさは 10nm 以上である。これは、端的には、誘電率の差によるものであり、有機半導体の構成原子 (C,H,N,O など) の原子番号が小さいことにより分極可能な電子の密度が少ないことに起因している。有機半導体の比誘電率は 4 程度、無機半導体の比誘電率は、たとえば GaAs では 16 程度である。束縛エネルギーをあらわす式にはクーロン力の距離依存性が (比誘電率)<sup>-2</sup> の形で入ってくるので、有機と無機の間では 1 桁以上の違いが生じる。したがって、無機半導体では励起子が容易に熱的に正負キャリアに解離できるのに対し、有機半導体では解離できないということになる。

このような局在した励起子はフレンケル励起子と呼ばれるが、これは太陽電池には使いにくい。なぜなら、光励起で生成した励起子が熱的に解離しないので電荷分離させる部分を別に用意しなければならないためであり、次節で述べるような構造を作り様々な工夫を凝らすところになる。

現段階では、ほとんどの場合において有機半導体は真性半導体と考えるべきであるが、電極から電荷を注入することができれば、伝導帯(LUMO)に電子、荷電子帯(HOMO)に正孔が入り、それらが電場によって移動することが可能である。したがって、電荷を注入するために金属電極のフェルミレベルと HOMO または LUMO のエネルギーの一致が重要になる。金属電極の仕事関数( $\phi$ )の取りうる範囲は決まっているので、典型的な金属 ( $\phi \sim 4.5\text{eV}$ ) のフェルミレベルに対して HOMO が近いものが p 型、LUMO が近いものが n 型として用いられることが多い。

キャリア移動度は、伝導機構がホッピングによるものかバンド伝導的なものかによって

異なるが、有機半導体は一般的に無機結晶固体に比べて低い値を示す。

### 1.3 有機薄膜太陽電池における電荷分離機構

有機薄膜太陽電池の電荷分離機構とそれを踏まえた典型的な構造について述べる。前節で述べたように、有機半導体においては光励起によって熱的に安定な励起子が生じるので、積極的に解離させる機構を作る必要がある。通常用いられるのは、異種分子の接合である。図2のように、同種分子のみでは解離できなくても、隣に異種分子があって、近いエネルギー準位にキャリアを受け入れる準位を持っていれば分子間を電荷が移動して解離できる。励起子波動関数は分子にはほぼ局在しているため、このような効果は隣接分子にしか働かない。励起子が失活しないで移動可能な距離は結晶性に依存するが、実験的には数~10nm 程

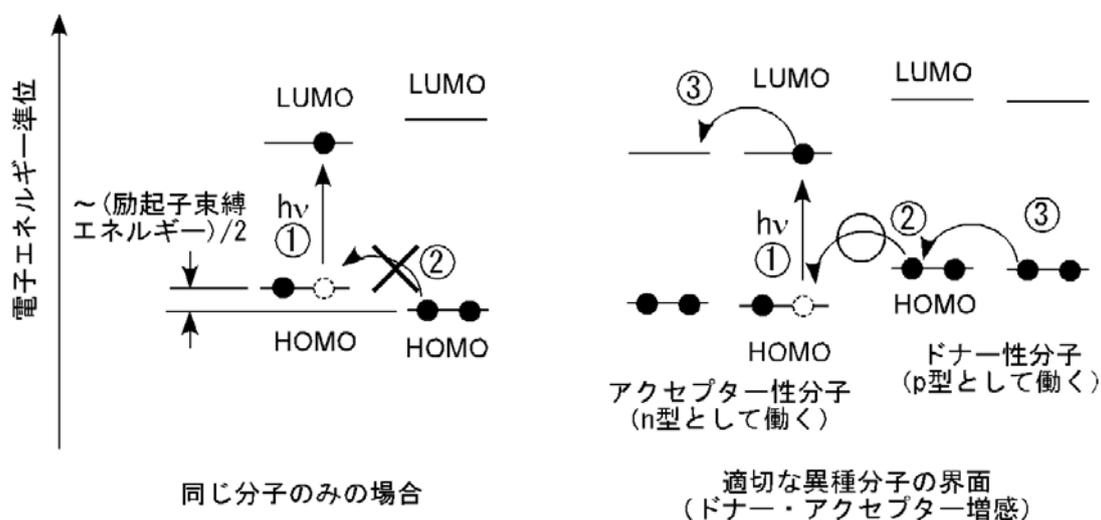


図2

度であるとされているため、接合からこの範囲にある励起子しか発電に寄与できない[6]。したがって、光吸収に必要な厚さ（有機半導体にもよるが1 $\mu\text{m}$ 程度）をもち、数nm程度のスケールで入り組んだ接合が必要である（図3）。このような接合をバルクヘテロ接合と呼び、これをどのように作るかがもっとも重要な研究の方向性となる。低コスト化が有機半導体の身上と考える研究者らによって、分子の構造を適切に設計して自発的にそのような構造ができるようにする方法が研究されている。他にも、励起子が失活しないで移動可能な距離を伸ばすこと（純度や結晶性の影響）、光吸収係数を大きくすること（分子設計）なども有効であると考えられる。

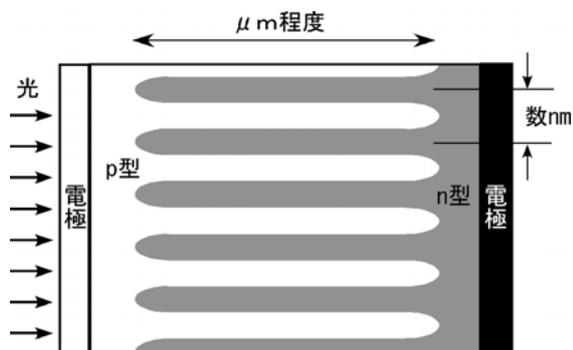


図3

## 2. 有機分子の電子状態の測定法

### 2.1 光電子分光

上で述べた有機太陽電池を設計するには、構成要素である分子に対して、正孔が入る HOMO や電子が入る LUMO のエネルギーレベルを知ることが重要である。有機物と金属電極を統一して扱う必要があるため、真空準位が基準となる。HOMO の測定には、光電子分光と仕事関数測定との組み合わせも用いられるが、有機半導体の現場では表面科学的に清浄でないものを迅速に測定する要望が強いので、表面敏感な手法は使いにくい。気体中でも使える光電子放出の閾値の測定がよく用いられる。これは、試料に照射する紫外光のエネルギーを変えて HOMO から電子が放出される閾値を測定するものであり、市販の測定装置がいくつかある。

### 2.2 逆光電子分光

LUMO のエネルギーを測定するには、原理的には HOMO のエネルギーに光吸収により測定された HOMO-LUMO ギャップを加算すればよいが、有機半導体は比誘電率が小さいので、光励起状態と電子を LUMO に受け入れた状態の終状態の違いによる効果が大きく現れてしまう。有機半導体に電子が入った状態は後者なので、終状態が同じである逆光電子分光が研究用に用いられる。逆光電子分光は光電子分光に比べて量子収率が桁違いに小さいので、有機半導体に与えるダメージが大きい。信頼できる測定を行うには工夫が必要で、自作の装置を用いている少数の研究グループのみがデータを出している状況である。

### 2.3 量子化学計算との比較

有機分子に対しては量子化学計算が発達しており、市販またはフリーのパッケージで満足できる精度でエネルギー準位を計算することができる。図4に示すのは、フラーレン誘導体の計算と光電子分光の比較である[7]。ピークの相対位置は良く合っている。計算では、分子の各構成部分(図の Cp, Fe, Me, C<sub>60</sub> 部分) 寄与も求めることができるため、アモルファスであっても表面の分子の向きなどを議論することが可能である。しかし、簡単に求まるのは真空中においた孤立分子のエネルギー準位であり、固体になりバンドを形成する効果、電荷を入れた後の分子自身または周辺の構造緩和(ポーラロン効果)、遮蔽効果な

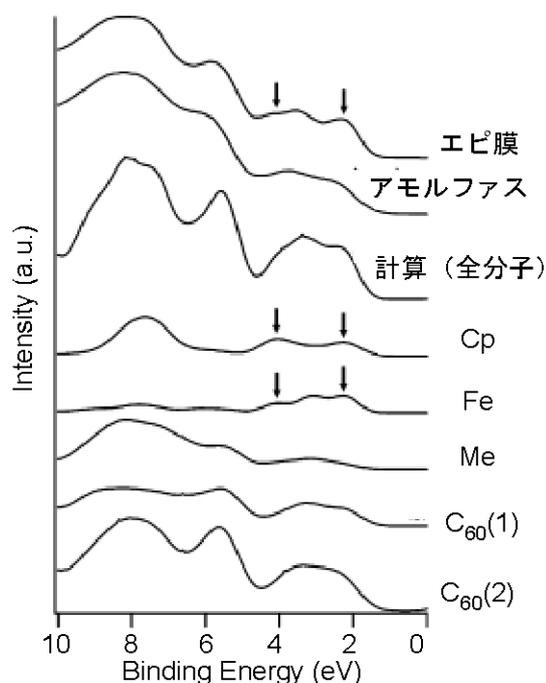


図4

どは別に評価する必要がある。

## 2.4 電気化学測定との比較

合成化学者は分子の HOMO, LUMO 準位を求めるのに電気化学測定 (cyclic voltammetry, CV) を用いる。したがって、電気化学的な数値と真空準位から測ったエネルギー準位の関係を比較することにより統一的な議論が可能となる。いくつか提唱されている変換式があるが、ここでは以下のものを紹介する。

- ・イオン化ポテンシャル ( $IP$ ) = 分子 (または固体) の価電子帯から電子を 1 個無限遠に運ぶのに必要なエネルギー = 真空準位から測った HOMO の位置
  - ・電子親和力 ( $EA$ ) = 真空準位から分子 (または固体) に電子を 1 個入れるときに放出されるエネルギー = 真空準位から測った LUMO の位置
  - ・仕事関数 ( $\Phi$ ) = 金属から電子を 1 個無限遠に運ぶのに必要なエネルギー = 真空準位とフェルミエネルギー (フェルミレベル) の差
- に対して、それぞれ、電気化学的な酸化還元電位と次のような関係があると報告されている。

$$IP, EA = E_{SCE} + 4.44(\text{eV}) \quad (1) [8]$$

$E_{SCE}$ : 飽和カロメル電極 (SCE) を基準として測定した酸化または還元電位

$$\Phi = E_{SHE} + 4.46(\text{eV}) \quad (2) [9]$$

$E_{SHE}$ : 標準水素電極 (SHE) を基準として測定した酸化または還元電位

ただし、

$$E_{SHE} = E_{SCE} + 0.241\text{V} \quad (3)$$

ゆえ、(1)(2)には 0.24eV の差がある。その理由は特に議論されていないが、仕事関数を測る金属表面と、 $IP, EA$  を測る電極上の吸着分子では溶媒和効果が異なることが原因と考えられる。溶媒和効果は分子の種類や電極表面形状にも大きく依存するので、(1)(2)にはこの程度の誤差があると考えたほうがよいと言えよう。

## 3. 有機太陽電池の測定

### 3.1 有機薄膜太陽電池の分光測定

1.3 節で述べたように、有機薄膜太陽電池の素子においてはバルクヘテロ接合の作製と評価が重要であり、素子を直接、表面敏感な手法で測定するのは難しい。したがって電極・有機半導体界面や有機・有機界面を基板上に平坦な超薄膜を構成要素として形成し、電子分光で評価する研究が行われている。このような手法で古くからさまざまな重要な結果が得られている。太陽電池関連としては、電極表面が他の物質で汚染されて界面の有機半導体が高ドープの状態になっているほうが電荷注入が起こりやすいこと [10]、ある種の分子がドーパントとして有効なこと [11] などが電子分光で明らかにされたことを挙げておきたい。

また、表面科学的手法ではないが、太陽電池の動作の解析には電荷分離過程・再結合過

程など電荷のダイナミクスに関する情報が重要である。幸い、有機半導体分子に電荷が入って陰イオン、陽イオンになると光吸収スペクトルが変化するため、過渡吸収など高速分光の手法を有効に用いることができる[12]。特に有機太陽電池の研究には、逆電子移動過程の抑制などに重要な要素として光電気化学の知見が加わっており、分子間電荷移動におけるマーカス理論などが文献によく現れる[13]。

### 3.2 色素増感太陽電池の分光測定

色素増感太陽電池については、別の講義があるが、ここでは有機太陽電池一般に適用可能なものとして、我々のやや変わった実験を紹介しよう[14]。

真空中で作製した導電性の  $\text{TiO}_2$  膜に清浄環境で Ru 色素を吸着させ、色素増感太陽電池の半電池を作製した。これを真空を破らずに超高真空の電子分光装置に移送し、UPS (図5) と低速電子透過分光測定 (low energy transmission spectroscopy; LEET) を可視光照射下と非照射下に行った。UPS においては、図に示すように価電子帯全体のシフトのほかにも HOMO の逆方向へのシフトが観測された。これは、その準位が電荷分離にかかわっていることおよび電荷分離が UPS プロセスに比べて速いことを示すと考えられる。

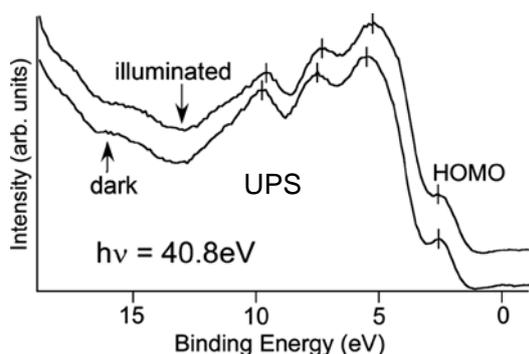


図 5

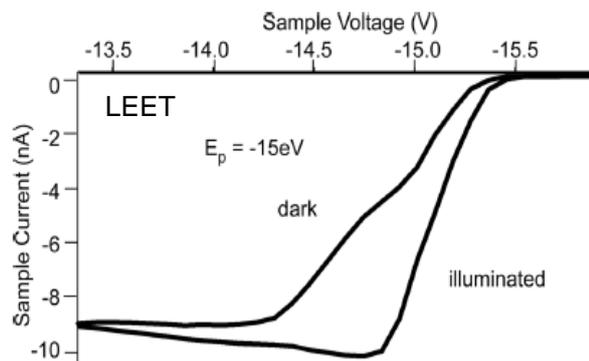


図 6

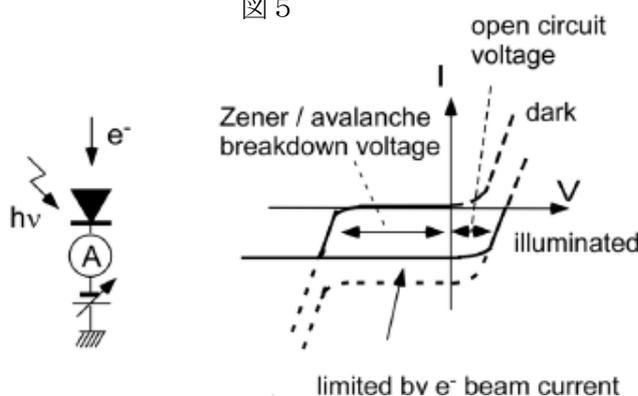


図 7

また、LEET においては半電池の特性に対応するシフトが観測された (図6)。モデル図7に示すように、半電池の状態、真空中を飛ぶ電子による酸化還元 (redox) が行われたとみなすことができる。真空中に正孔を飛ばすことはできないので限界はあるが、半電池、または片側の特性の評価に用いることができる。

### 3.3 素子の電氣的測定のみでわかること

有機太陽電池は複雑な構造を持つので、素子のインピーダンスやチョッパ光に対する応答速度など、素子特性のみの測定も重要な情報を含んでいる[15]。キャリア移動度やトラッ

ブ密度を測定する TOF(time of flight)法と SCLC(space charge limited current)法は太陽電池構造にも適用されており、光照射の効果が測定されている。また、簡便で導電性のある試料にも適用可能なため、CELIV(carrier extraction by linearly increasing voltage)法が最近太陽電池にもよく用いられている。これは、2 端子素子に、時間に対して線形に増大する電圧をかけ、電流を測定するもので、理論モデルと比較することにより多数キャリアの移動度、光照射の効果を調べることにより再結合速度の評価などを行うことができる。しかし、平衡にあることがもともとの理論モデルの条件なので、太陽電池に対する適用には注意が必要である[16]。

#### 4. 今後の展望

有機太陽電池においては、バルクヘテロ接合と呼ばれる異なる有機分子の間の入り組んだナノ構造の形成と評価が重要である。表面科学的な手法をこのような構造に適用するのは難しいが、モデル界面の研究には欠かせないものであり、その重要性は失われない。実際の素子のミクロな評価には、空間分解能が数 nm の分光手法が必要であり、光電子顕微鏡の発達・普及が待たれる。また、電子顕微鏡における高分解能のエネルギー損失分光や過渡応答測定など新手法も多種考えられる。実現すればこの分野に有用なものであろう。

#### 文献

1. S.M. Sze, "Physics of Semiconductor Devices (2nd Ed.)", Wiley-Interscience (New Joursy) ,1981.
2. 生駒編 「最新 化合物半導体ハンドブック」 サイエンスフォーラム 1982.
3. V.E. Henrich, P.A. Cox, "The Surface Science of Metal Oxides", Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1996.
4. M. Topic et al., J. Appl. Phys. 79 (1996) 8537.
5. B. O'regan, M. Grätzel, Nature 353 (1991) 737.
6. 平本、Molecular Electronics & Bioelectronics, 18 (2007)47.
7. T.Kaji, T.Shimada et al., J.Phys.Chem.B 108 (2004) 9914.
8. H. Meng et al., Chem. Mater. 15(2003) 1778.
9. 渡辺,中林 「電子移動の化学－電気化学入門」 朝倉書店 1996.
10. A.Crispin et al., Appl. Phys. Lett. 89 (2006) 213503.
11. Y. Qi et al., Chem. Mater., 22 (2010) 524.
12. Y. Kim et al., Nature Mater.5 (2006)197.
13. S.R.Forrest et al., Phys.Rev. B75(2007)115323.
14. T.Shimada et al., Mol.Cryst.Liq.Cryst. 455 (2006)318.
15. A. Pivrikas et al.,Prog.Photovolt·Res.Appl.15(2007) 677.
16. S.Bange et al., Phys. Rev. B 81 (2010) 035209.

## ガラス基板上薄膜 Si 結晶成長過程の分子動力学シミュレーション

本岡 輝昭

九州大学大学院工学研究院 材料工学部門

〒819-0395 福岡市西区元岡 744

## 1. はじめに

ガラス基板上への多結晶シリコン(Si)薄膜形成技術の高度化は、太陽電池や薄膜トランジスタの高性能化に重要である。本講座では、分子動力学(Molecular Dynamics, MD)シミュレーションを用いて、ガラス基板上薄膜 Si の結晶化過程における原子スケールダイナミックスの可視化や成長メカニズムの解析を行う方法について解説する。以下では、MD法の基礎とともに、具体的な応用例として、紫外領域の波長を持つエキシマーレーザーパルスを用いた Excimer Laser Annealing (ELA)技法による非晶質 Si の結晶化過程の MD シミュレーションについて述べる。

## 2. 分子動力学法の基礎

分子動力学法は、物質の振る舞いを、その物質を作っている原子や分子の古典力学的運動に基づいて調べる方法である。以下では、 $N$  個の Si 原子の集まりを考えることにする。この Si 原子系の古典力学的運動は、時刻  $t$  における各原子の位置ベクトル  $\mathbf{R}_i(t)$  ( $i=1,2,\dots,N$ ) について  $N$  個の Newton 方程式

$$M \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{R}_i(t) = \mathbf{F}_i(t)$$

を連立させて、適当な初期条件のもとに解くことにより定まる。ここに、 $M$  は Si 原子の質量、 $\mathbf{F}_i(t)$  は時刻  $t$  において  $i$ -番目の原子に働く力で、 $\mathbf{R}_i(t)$  ( $i=1,2,\dots,N$ ) の関数となる。

力  $\mathbf{F}_i$  を正確に決めるためには、 $N$  個の Si 原子系を量子力学で取り扱う必要がある。量子力学的取り扱いでは、 $\mathbf{R}_i$  を Si の原子核の位置を表すパラメータとして、原子核のまわりを運動する電子系のシュレーディンガー方程式を解く。例えば、原子番号  $Z$  の原子のシュレーディンガー方程式は、原子核を原点とする電子の位置ベクトルを  $\mathbf{r}_i$  ( $i=1,2,\dots,Z$ ) として次式であらわされる。

$$\left[ \sum_{i=1}^Z \left( -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i|} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^Z \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z)$$

ここに、 $m$ 、 $e$  は電子の質量、電荷の大きさである。左辺の角括弧で囲まれた部分は原子のハミルトニアンで原子の波動関数  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_Z)$  に作用する演算子である。第一項は  $\nabla$  (ナブラ) 演算子を用いて表した電子の運動エネルギーと原子核の引力によるクーロン相互作用エネルギー、第2項は電子間の斥力によるクーロン相互作用エネルギーを表す。このシュレーディンガー方程式が解ければ、原子の全エネルギー  $E$  が求まる。(  $N$  原子系では  $E$  は  $\mathbf{R}_1$ 、 $\mathbf{R}_2$ 、...、 $\mathbf{R}_N$  の関数となる。) しかしながら、原子やさらにその集合体のシュレーディンガ

一方程式を正確に解くことは不可能で、なんらかの近似解法が必要となる。代表的なものは、Kohn と Sham により 1965 年に提案された、電子間相互作用エネルギーを電子密度  $\rho(\mathbf{r})$  を用いて処理する密度汎関数理論(Density Functional Theory, DFT)に基づく方法で、様々な密度汎関数が提案されている。このような量子力学的計算に基づいて得られた力を用いる方法を第一原理分子動力学法と総称しているが、現在では多くの商用プログラムが利用できる[1]。第一原理計算は各時刻における原子配置  $\{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N\}$  に対して電子系のシュレーディンガー方程式を解く必要があり、原子数が多くなると計算時間が膨大となるので、以下に示すような多くの原子を用いて実行する結晶成長のシミュレーションには不適である。Si については多くの経験的ポテンシャル  $V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$  が開発されているので、ここではその中の一つ Tersoff ポテンシャル[2]を用い、力  $\mathbf{F}_i$  はポテンシャルを  $\mathbf{R}_i$  で微分して求めることにする。Tersoff ポテンシャルによる MD シミュレーションでは Si の融点が約 2550K となり実験値(1687K)を大きく上回るが、結晶 Si の熱力学的性質、融液 Si の原子配置[3]、加熱や冷却による原子スケール結晶化過程の計算[4-8]については良い結果を与える。

力が求めれば、Newton 方程式を解いて原子の運動が追跡できるが、それで完了というわけにはゆかない。現実の物質が示す性質、例えば密度や比熱等は温度・圧力等の環境条件に依存する。実験は温度と圧力が定まった条件下で行われるのが通常で、分子動力学によるシミュレーションも同様の条件下で行うのが望ましい。温度や圧力は原子の運動に関する統計平均量として算出される。例えば、絶対温度  $T$  は原子の運動エネルギーの平均値  $\sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i^2 / N$  を  $3/2kT$  (等分配則) と置くことにより定義される。ここに  $\mathbf{v}_i$  は  $i$  番目の原子の速度ベクトル、 $k$  はボルツマン定数である。このような平均操作のことをアンサンブル平均とよぶ。アンサンブルとは原子系の状態 (古典力学では各原子の位置と速度が与えられると系の一つの状態が定まる) の集合である。すなわち、分子動力学を用いて時々刻々の原子の位置と速度を計算することによりアンサンブルを作ることができる。

体積  $V$  と原子数  $N$  を一定として得られるアンサンブルを  $(NVE)$  アンサンブルあるいはミクロカノニカルアンサンブルとよぶ。ここで  $E$  は原子系の全エネルギー (=運動エネルギー + ポテンシャルエネルギー) で時間によらない保存量である。すなわち、 $(NVE)$  アンサンブルでは全エネルギーが一定で、このような状況は原子系が外部と何の相互作用も持たない閉じた系となっているときに実現される。一方、温度が一定の系は、外部とエネルギー交換が許されるときに実現される。外部系は原子系にくらべて十分大きくかつ温度  $T$  の熱平衡にあり熱浴と呼ばれる。この条件下で得られるのが  $(NVT)$  アンサンブルあるいはカノニカルアンサンブルである。温度と圧力が一定の系は、熱浴とエネルギーのみならず運動量の交換も許されるときに実現され、対応するアンサンブルは  $(NPT)$  アンサンブルとよばれる。温度、圧力が一定の系では、それぞれ、エネルギー  $E$ 、体積  $V$  は一定でなくなる。分子動力学による種々のアンサンブル生成技法の詳細については例えば参考書[9]に示されている。以下に示す計算結果は、 $(NVT)$  アンサンブルを用いたものである。本稿では、熱浴の温度に対応する  $(NVT)$  アンサンブルを得るために Newton 方程式のかわりに Langevin 方程式

$$M \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{R}_i(t) = \mathbf{F}_i(t) - M\gamma \frac{d}{dt} \mathbf{R}_i(t) + \mathbf{Random}(t)$$

を用いている。Langevin 方程式は、歴史的には水に浮かぶ花粉の不規則な運動を記述するために考案されたものである。花粉の不規則運動は、ランダムな熱運動をしている水分子との衝突によるものであるが、今の場合には Si 原子がランダム運動をしている多数の電子と衝突をしていると考える。すなわち、電子系が熱浴の役割をしていると考えるわけである。このとき、Langevin 方程式の右辺第 2 項は Si 原子の電子との衝突による摩擦力 ( $\gamma$  は摩擦係数)、第 3 項は Si 原子が電子との衝突により受けるランダム力である。

### 3. Si の原子スケール結晶成長過程

ガラス基板上薄膜 Si の結晶化は非晶質状態から結晶への変換過程である。ガラス基板上に堆積された Si 薄膜は一般に固相非晶質であるが、ELA により融解した状態も得られる。固相非晶質からの結晶化を固相成長、融液からの結晶化を融液成長と呼ぶが、本節ではこれらの過程の MD シミュレーションについて述べる。まず、X、Y、Z 軸を綾とする直方体の箱を考えこの中に原子を入れる。この箱を MD セルと呼ぶことにする。図 1 は MD セルの一例で、約 1 万個の Si 原子を含み、非晶質部分と結晶部分から成る。

#### 3.1 固相成長

固相成長(Solid Phase Epitaxy, SPE)は重要な Si 半導体プロセスの一つで、これまでに多くの研究がなされている。特に、炉やレーザー照射による熱的 SPE の活性化エネルギーは約 2.7eV となることが実験的に知られており、結晶化はアモルファス/結晶 (a/c) Si 界面で起こっ

ているものと考えられている。図 2 は Si(001)基板に Si<sup>+</sup>イオンを高エネルギーで注入した試

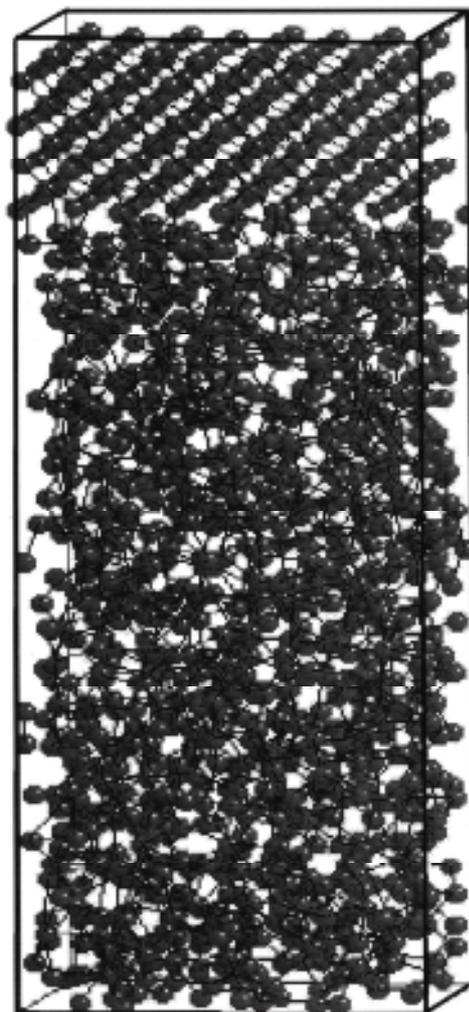


図 1. MD セルの一例 (文献 [5] より引用)

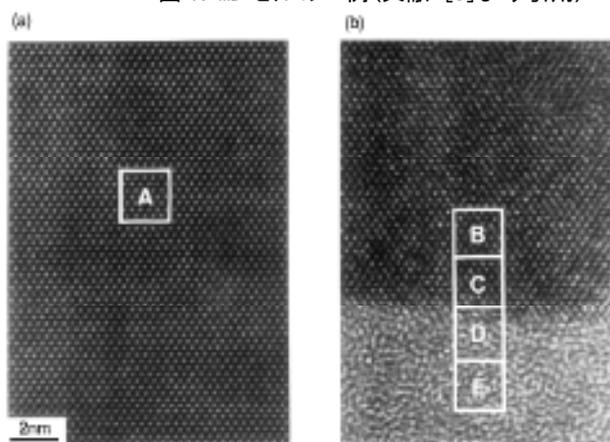


図 2. (a/c) Si 界面の高分解能電子顕微鏡像: (a) 表面近傍、(b) 界面近傍 (文献 [4] より引用)

料の高分解能電子顕微鏡像で、(a)表面近傍では完全結晶に近い原子像が得られ、(b) a/c 界面ではアモルファス Si から結晶 Si への遷移が数原子層で起きていることが分かる[4]。図 3 は MD シミュレーションにより得られた原子スケール SPE 過程で、加熱温度による結晶成長メカニズムの違いを示している。1450K では Si(001) 面に沿った層成長が、2000K では(111)面に沿った層成長となることがわかる。この計算結果から示唆される成長モデルを図 4 に示す。低温側では(001) 面が結晶成長界面となりその面上の 2 次元核形成が律則となる。一方、高温側では(111) 面が結晶成長界面となり(111) 面上の原子の拡散が成長律則となる。このモデルは、アレニウスプロットにより実験的に得られた活性化エネルギーが 2 次元核形成エネルギーに対応することを示している。

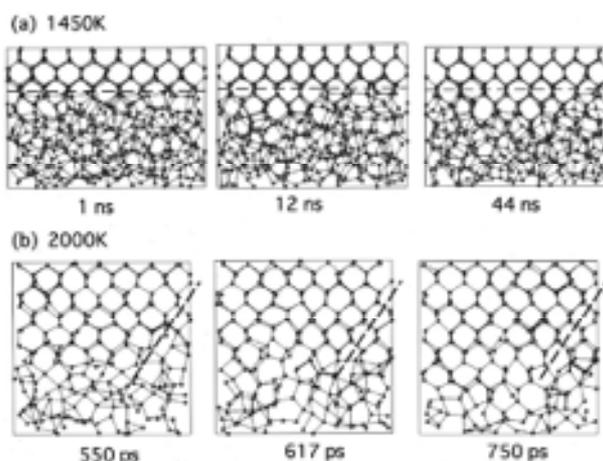


図 3. シミュレーションにより得られた SPE 過程の原子スケール成長界面：(a)低温、(b)高温領域（文献 [5]より引用）

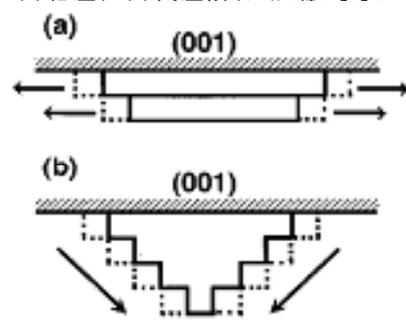


図 4. SPE 成長の模式図：(a)低温、(b)高温領域（文献 [5]より引用）

### 3.2 融液成長

融液成長は、SPE と同様、融液 Si と固相結晶 Si の界面(固液界面)で起こる。固液界面を MD シミュレーションで作るためには、図 1 に示したような Z-軸方向に長い直方体セルを用いて、温度勾配を与えて定常状態を作ればよい。結果は、融液/固相(001)界面は {111} ファセットを含むラフな形状を示すのに対して、融液/固相(111)界面は(001)のそれと異なり、原子的に平坦である[10]。これらの計算結果から、Si の固液界面構造に対して、以下のような物理的描像が得られる。固相側界面原子は固相側の 3 個の原子と結合し、1 本のダングリングボンドを融液側に出し、融液側の原子は{111} ファセット面上を比較的自由に動き回ることにより安定化する。すなわち、固液界面は固相側でポテンシャルエネルギーを下げ、融液側でエントロピーを稼ぐことにより安定化しているものと考えられる。

実験的には図 5 に示すような(001)および(111)固液界面の高分解能電子顕微鏡像が得られており、(111)界面は原子的に平坦に見える。しかしながら、(001)界面には、シミュレーションにより得られたようなラフネスは明瞭には観察されていない[6]。また、両界面において 1nm 程度の遷移層が見られる。図 6 には、MD シミュレーションにより求めた、この遷移層における原子の拡散係数を示しているが、(111)界面近傍の原子は、(001)界面のそれに

比べてより大きな拡散係数を持つ傾向が見られる。

融液成長中に固液界面から導入される点欠陥(原子空孔と格子間原子)がクラスター化することにより形成される成長時導入欠陥(Grown-in 欠陥と呼ばれ空孔クラスターと格子間原子クラスターの両方が電子顕微鏡により観察されている)の形成メカニズム解明には、以上に述べた固液界面のミクロな構造や界面における原子のダイナミクスの理解が重要となる。固液界面から導入される格子間原子の生成およびその Si 結晶中のマイグレーション過程については生成・マイグレーションエネルギーも含めて MD シミュレーションによる解析結果が得られているが[7]、クラスター化過程の原子スケール解析には更なる大規模 MD シミュレーションが必須となる。

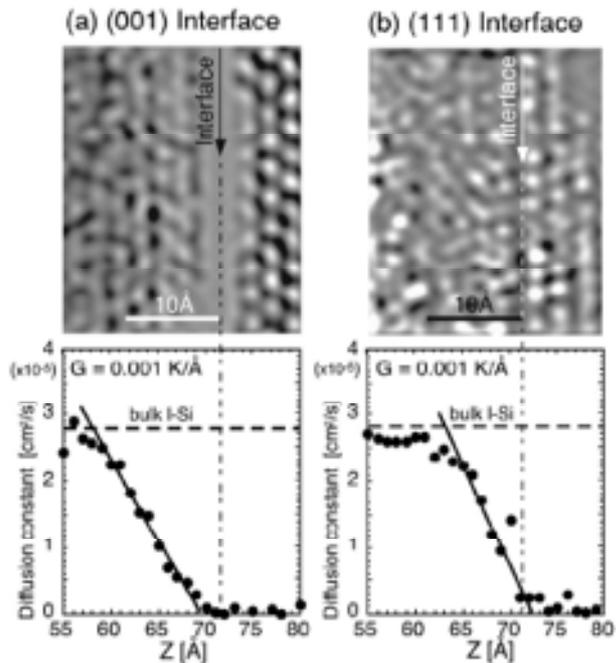


図 5. 固液界面の高分解能電子顕微鏡像と原子拡散係数の計算値: (a) (001)、(b) (111)界面。(文献 [6]より引用)

### 3.3 核形成とその成長過程

核形成は非晶質系の結晶成長の前駆過程である。Si の場合は、固相アモルファス(a-Si)と融液(l-Si)からの核形成が考えられる。いずれも非晶質 Si 中の結晶(c-Si)部分の発生を意味するが、その過程を図 6 に示す自由エネルギーの模式図を用いて考察する[11]。古典核形成理論によると、結晶核を球としてその臨界核半径は  $R = 2\gamma/\Delta\mu$  で与えられる。ここに、 $\gamma$  は結晶核の界面エネルギー、 $\Delta\mu$  は c-Si からのバルク自由エネルギー増加分である。MD シミュレーションにより見積もられた  $\Delta\mu$  は、a-Si( $\Delta\mu_a$ )が約 0.14、l-Si( $\Delta\mu_l$ )が約 0.5 eV/atom となるが、界面エネルギーの直接的な計算は極めて難しい。ここでは、MD シミュレーションに

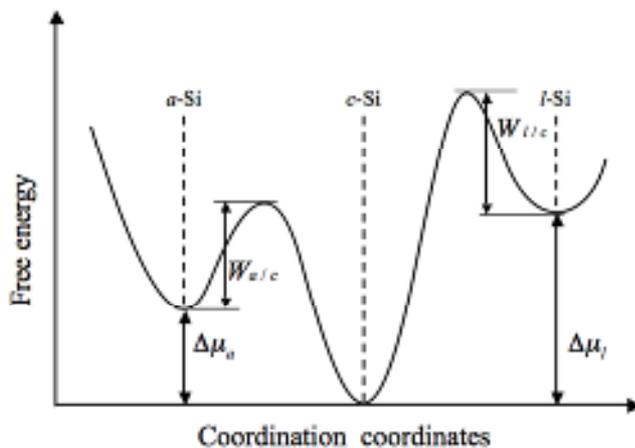


図 6. 固相アモルファス(a-Si)、結晶(c-Si)、融液(l-Si)の自由エネルギーの模式図。(文献 [11]より引用)

よる過冷却融液 Si の核形成およびその成長過程の可視化の例を紹介する。図7は、約 3000K の温度で c-Si を融解して、中心部 1700K、端部 2000K の温度勾配下に置いた場合の原子配置の時間変化を示す。核形成はまず、上のパネル(b)に見られる様に、過冷却度の大きい低温部で起こり、結晶成長は、上のパネル(c)に見られる様に、高温部に向かってより速く進行することがわかる。なお、パネル(d)の上

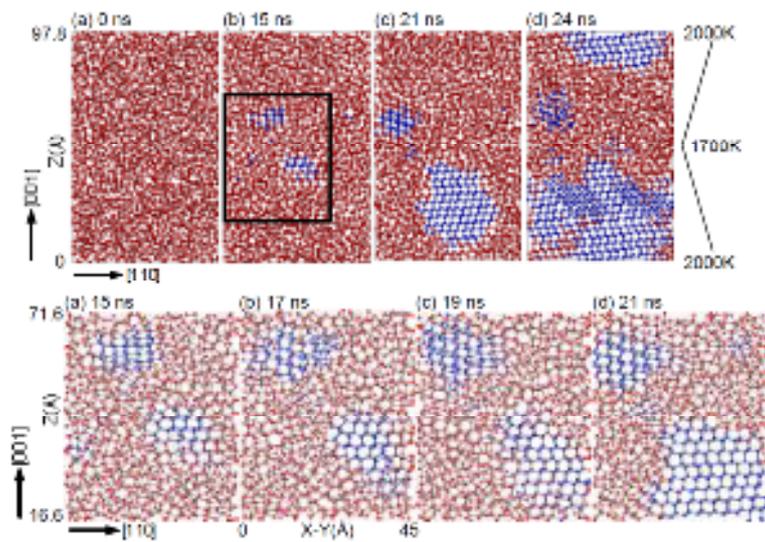


図7. 過冷却融液(l-Si)の核形成とその結晶成長過程。下のパネルは上のパネル(b)の太枠部を拡大したもの。(文献 [8])

部に見られる結晶部分は、パネル(c)における結晶核の先端が MD セルの下部に到達し、周期境界条件により得られた結晶成長である。また、下のパネルに示す様に、結晶核の(111)面は[001]方向すなわち温度勾配最大の方向とほぼ一致している。これは、Si の固液界面が{111}ファセットを作ることにより安定化するためと考えられる。

#### 4. ガラス基板上的薄膜 Si 結晶成長過程

本節ではガラス基板の存在を考慮に入れた MD シミュレーションについて述べる。用いた MD セルの一例を図8に示す。このセルは a-Si 層と SiO<sub>2</sub> 層の2層から成り、約2万8千個の原子を含んでいる。以下では、a-Si 層へのレーザー照射条件や基板形状の工夫による結晶粒径やその面方位の制御可能性を検討した結果について述べる。

##### 4.1 核形成サイトの制御

核形成が起こる場所を制御することができれば、より大きな結晶粒の成長が期待される。松村等[12]はエキシマレーザー強度分布をガラス基板面上で中心部分が最小となるように制御して、核形成サイトを中心部に限ることにより、最大5μm程度の結晶粒の作製に成功している。しかしながら、この方法で

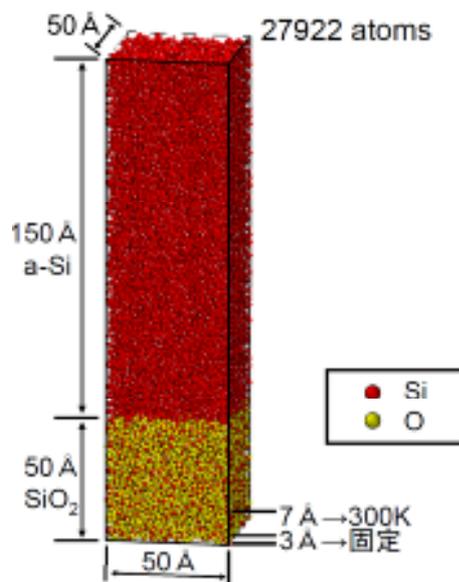


図8. ガラス基板上的非晶質 Si 薄膜 (文献 [11])

は結晶方位の制御が未だ不可能である。図9は核形成サイトと結晶方位の両方の制御を狙って、SiO<sub>2</sub>基板にナノスケール逆ピラミッド構造(a)と基板面直方向に温度勾配を与えることにより行ったシミュレーションの結果(b),(c)である。前節で示した様に、核形成は低温部で起こり易いことと固液界面が Si (111) 面となる傾向があることを利用して、ピラミッド頂点部を初期の核形成サイトとし、ピラミッドの壁面が{111}面となることを期待したものである。

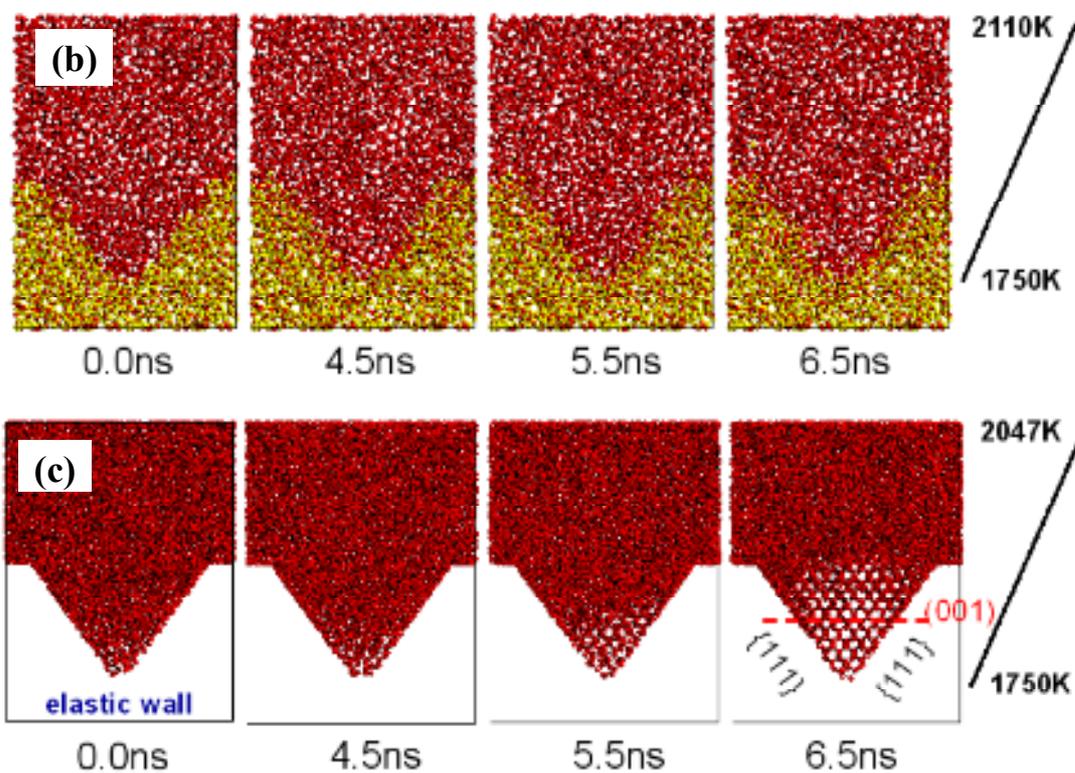
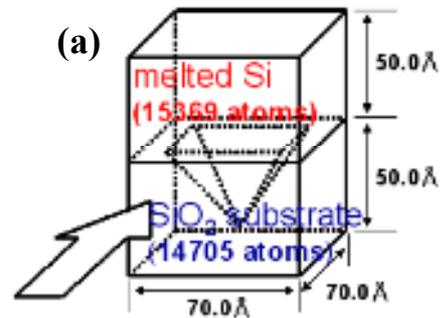


図9. ナノ構造を持つ基板上的過冷却融液 Si の結晶化過程：(a) ナノスケール逆ピラミッド構造と観察方向、(b) SiO<sub>2</sub>基板、(c) 理想弾性壁。

図からわかるように、SiO<sub>2</sub> 基板ではピラミッドの頂点部で優先的な核形成は起こっていない。Si/SiO<sub>2</sub> 界面エネルギーが大きく、核形成の障害となっているためと考えられる。実際、ピラミッドの壁面を理想的な弾性壁とすると期待通りの結果が得られるようである[11]。

#### 4.2 多結晶粒径のレーザーフルエンス依存性

波多野等[13]は、厚さ 50nm の a-Si 薄膜に照射する KrF エキシマレーザ (波長 248nm) のフルエンスを変化させた場合の結晶粒径を調べ、"partial-melt"、"near-complete-melt"、

"complete-melt"状態の存在を提案し、"near-complete-melt"状態からの再結晶化により最大の結晶粒径が得られることを見出している。図 10 はレーザフルエンスと再結晶化の相関を調べるために行った MD シミュレーションの結果である[14]。上のパネルは大きなフルエンスで "complete-melt" した後に冷却、下のパネルはフルエンスを減少させて "near-complete-melt" した後に冷却した場合の MD セルの時間変化を示す。このシミュレーション結果は実験を良く再現している。また、大きな粒径が得られる理由は、融液と接する a-Si 中でまず核形成がおこり、この核が高速な融液成長をするためと考えられる

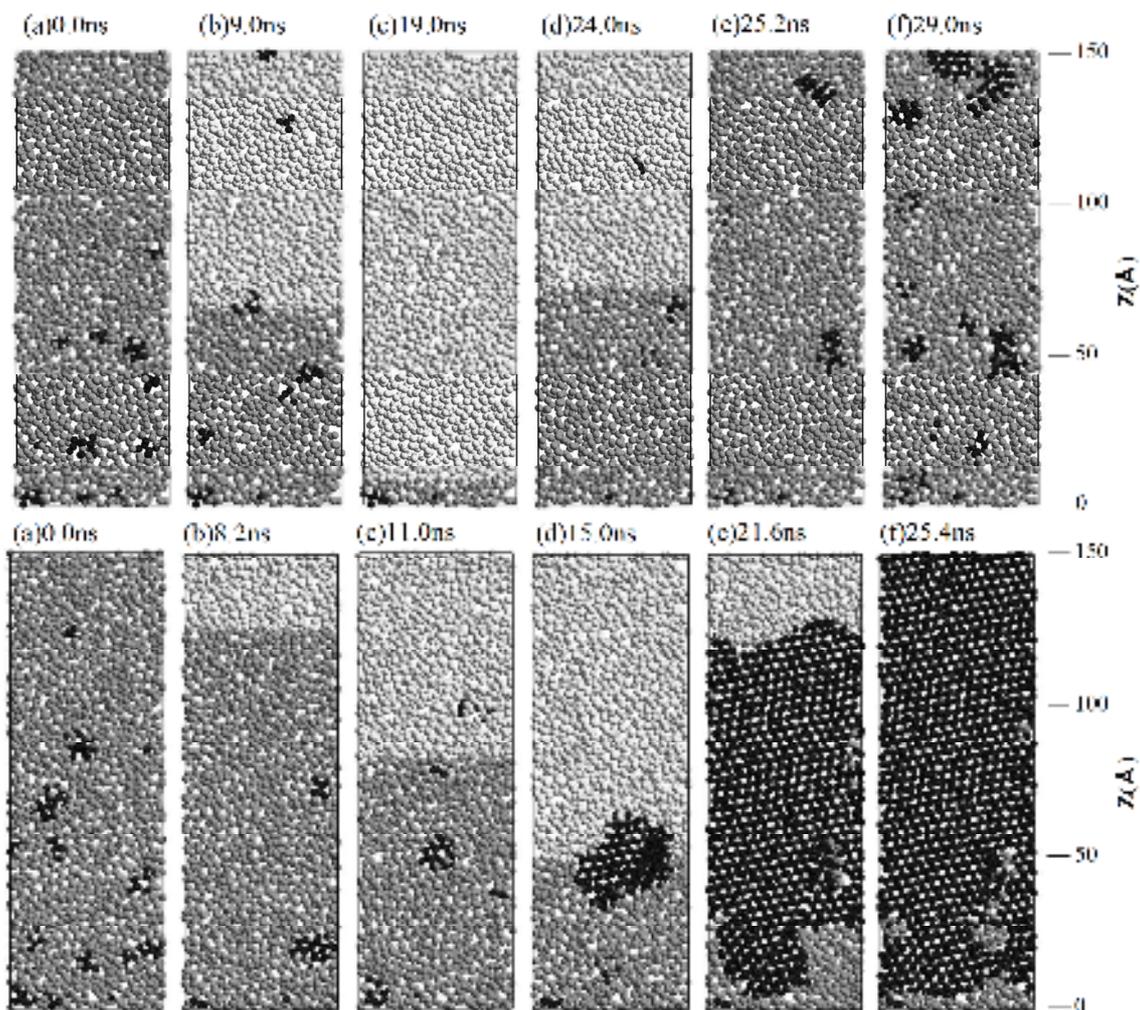


図 10. a-Si 薄膜に照射するエキシマレーザフルエンスと結晶粒径の相関。上のパネルは "complete-melt"、下のパネルは "near-complete-melt" に対応するフルエンスによる結果。濃灰色、薄灰色、黒色は、それぞれ、固体 a-Si、融液、結晶状態を示す。

#### 4.3 エキシマレーザパルスの強度変調

エキシマレーザパルス(幅 $\sim$ 10ns)を多数回照射することにより結晶性は向上する傾向

があることは一般に知られている。松原等[15]は、MD シミュレーションに基づいて、単一パルスを高速で強度変調することによる新しい結晶方位制御技法を提案している。この技法は固液界面の融解・結晶化速度の面方位依存性を利用して、(001)界面を持つ結晶粒を優先的に成長させるものである。モデル的に行ったシミュレーション結果を図 11 に示す。まず、a-Si 中に(001)界面を持つ結晶粒と(111)界面を持つ結晶粒を埋め込んだサンプル(a)を準備する。このサンプルに図 12(a)の様に強度変調したエキシマレーザーパルスを照射することにより、MD セルの温度が(b)に示すように融点の近傍で変動し、(001)界面を持つ結晶粒が、図 11(b)、(c)、(d)に示すように MD セル全体に広がってゆく。この理由は、融解速度は両界面でほとんど変わらないが、結晶化速度は(001)界面がより速いことによる。

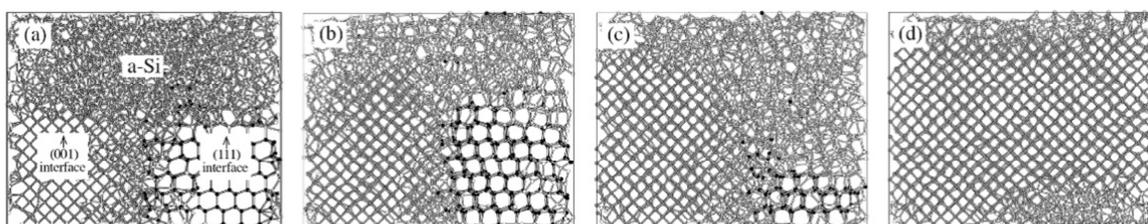


図 11. 強度変調エキシマレーザーパルス照射による結晶粒の面方位制御。(文献 [15]より引用)

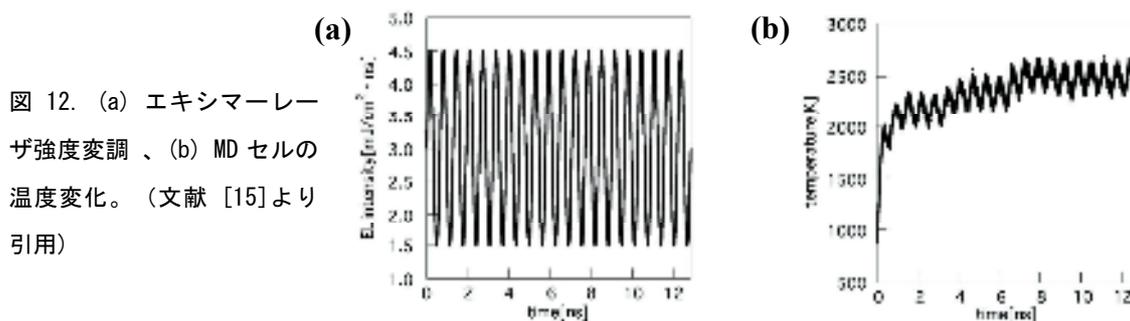


図 12. (a) エキシマレーザー強度変調、(b) MD セルの温度変化。(文献 [15]より引用)

## 5. おわりに

分子動力学(MD)シミュレーションによる原子スケール可視化から得られた非晶質/結晶 Si 界面は高分解能電子顕微鏡により得られた原子像を良く再現している。また、固相成長の活性化エネルギー値や薄膜 a-Si 層のエキシマレーザーアニール結晶化における結晶粒サイズとレーザーフルエンスの相関等の実験事実と十分に比較しうる計算結果も得られている。これらの結果は、MD シミュレーションが時間的・空間的に極めて微小な領域に限られたものであるにもかかわらず、結晶成長メカニズムの解析には十分有用であることを示唆している。ナノテクノロジーや高速・大容量計算技術の進歩と相まって、MD シミュレーションによる原子スケール(マイクロ)解析の有効性は今後増々高まるものと考えられる。しかしながら、実際の太陽電池パネル等の結晶サイズはマクロなスケールで、MD シミュレーションを直接応用してそのプロセス制御等を行うわけにはいかない。マクロな系へのマイクロ解析の応用のためには、例えば multiscale modeling[16]に基づいたシミュレーション技術の更なる発展が期待される。

## 謝辞

本研究は（財）宇宙環境利用推進センター「半導体の結晶成長に関するシミュレーションの研究」、日本学術振興会未来開拓研究「シリコンメルト-結晶界面における母体原子・格子欠陥・不純物原子の動的挙動解明のための実験的理論的研究」、液晶先端技術開発センター「極薄シリコン膜の結晶成長に関するシミュレーションの研究」の助成により行われた。

## 参考文献

- 1 例えば <http://www.advancesoft.jp/>を参照。
- 2 J. Tersoff, Phys. Rev. B **38**, 9902 (1988).
- 3 M. Ishimaru, K. Yoshida, T. Kumamoto, and T. Motooka, Phys. Rev. B **54**, 4638(1996)
- 4 T. Motooka, S. Harada, and M. Ishimaru, Phys. Rev. Lett., **78**, 2980 (1997).
- 5 T. Motooka, K. Nishihira, S. Munetoh, K. Moriguchi, and A. Shintani, Phys. Rev. B **61**, 8537 (2000).
- 6 Teruaki Motooka, Ken Nishihira, Ryuichiro Oshima, Hirosato Nishizawa, and Fuminobu Hori, Phys. Rev. B **65**, 081304(2002)
- 7 K. Nishihira and T. Motooka, Phys. Rev. B **66**, 2333101(2002)
- 8 T. Motooka and S. Munetoh, Phys. Rev. B **69**, 073307 (2004)
- 9 上田 顕： コンピュータシミュレーション—マクロな系の中の原子運動—朝倉書店 (1990)
- 10 本岡輝昭「コンピュータ上の結晶成長—計算科学からのアプローチ」、結晶成長ダイナミクス 1、伊藤智徳責任編集、共立出版、p.20-p.49 (2002).
- 11 T. Motooka, S. Munetoh, R. Kishikawa, T. Mitani and T. Ogata, ECS Transactions, **8** (1) 191-196 (2007)
- 12 M. Matsumura and CH Oh, Thin Solid Films, **337**, 123 (1999)
- 13 M. Hatano, S. Moon and M. Lee, J. Appl. Phys, **87**, 1 (2000)
- 14 Tomohiko Ogata, Takanori Mitani, Shinji Munetoh, and Teruaki Motooka, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 1150, RR04-07 (2008)
- 15 N. Matsubara, T. Ogata, T. Mitani, S. Munetoh, and T. Motooka, Jpn. J. Appl. Phys. **48**, 03B006 (2009)
- 16 T. Motooka, Chap. 9, *Handbook of Silicon Based MEMS Materials & Technologies* (Micro and Nano Technologies) , edited by Veikko Lindroos, Markku Tilli, Ari Lehto and Teruaki Motooka, edited by Veikko Lindroos, Markku Tilli, Ari Lehto and Teruaki Motooka, Elsevier, p. 151(2010)

## 筑波大学 数理物質科学研究科 電子・物理工学専攻

ナノ構造制御研究室 山部紀久夫・蓮沼 隆

筑波大学 数理物質科学研究科 電子・物理工学専攻

〒305-8573 つくば市天王台 1-1-1

<http://vectora.esys.tsukuba.ac.jp/>

### 1. 研究室の概要

当研究室は、電子・物理工学専攻の中の半導体エレクトロニクス分野に所属し、山部と蓮沼隆講師が担当して、半導体集積回路への応用をターゲットに、原子・分子レベルでの物質科学およびプロセス技術の研究を進めている。

低炭素社会、あるいは省エネルギー社会の実現において、エレクトロニクスの比重はますます高まりを見せている。中でも、半導体集積回路の微細化および高信頼化の更新は、不可欠である。その実現には、原子・分子レベルで観察し、高精度に制御する技術の確立が重要なカギである。

当研究室では、このような背景の中、単結晶表面の原子的平坦な原子テラスや原子ステップを使って、極薄膜技術の高精度化、高信頼化のための評価技術の構築と高信頼化技術の提案、およびナノ構造制御技術の基礎研究をターゲットにした研究を展開している。

### 2. 研究内容紹介

#### 2.1 シリコン表面でのナノ構造制御

##### (a) 原子的平坦なシリコン表面

シリコンウエハは、もともと制御された単結晶であり、鏡面研磨技術により高い平坦性を有する表面が実現されている。し

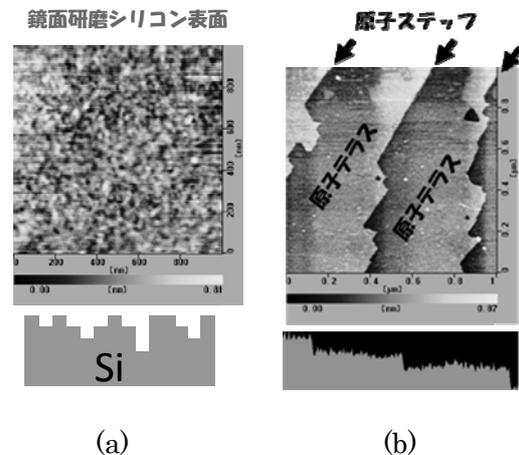


図 1 (a)鏡面研磨されたシリコン表面のAFM像、(b)原子ステップとテラスで覆われたシリコン表面。

かし、その表面ですら、原子間力顕微鏡 (Atomic Force microscopy:AFM)で観察すると、図 1(a)に示すように原子的には平坦ではない。このような表面を純水中の溶存酸素を低減した中に浸漬すると、図 1(b)に示すような原子的に平坦なテラスと原子ステップで構成された、いわゆる well-defined な表面を得ることができる。

##### (b) ステップ制御

前節で用いた方法は、図 1(b)でもわかるように、原子ステップ端の形状もギザギザで、その位置も、不規則である。ナノサイエンスにおいて、テラス表面や原子ステップを用いることはできる。しかし、得られ

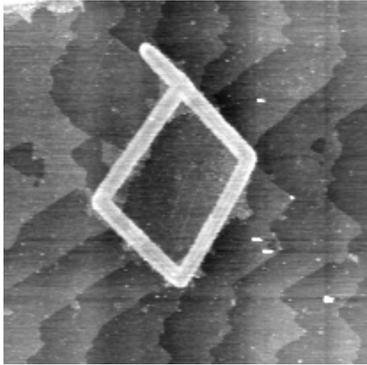


図2 予め指定された領域からの原子ステップの排除例。

た研究成果をデバイスなどのナノテクノロジーへの展開を行うには、指定領域から原子ステップを排除したり、位置指定したりする技術が必要である。

◎指定領域からの原子ステップの排除

原子ステップ端は、テラス表面より、低溶存酸素中での不安定であり、アタックされやすい。図2は、シリコン表面上にSiO<sub>2</sub>のパターンを描いたのちに、低溶存酸素水に浸漬したシリコン表面のAFM像である。SiO<sub>2</sub>で囲まれた領域の外では、ステップ端のラインが観測されるのに対して、内部では、ステップがないことが分かる。

これは、一種のステップ端の位置制御で

あり、ナノテクノロジーへ展開する第一歩である。このように、原子ステップとテラスを用いることで、より精度の高い構造制御技術、あるいは極薄膜構造の微視的制御技術を発展させることができる。さらには、欠陥発生などを伴う信頼性物理を視覚化し、機構解明および新技術の提案を可能にする。

2.2 シリコン熱酸化時の原子的な不均一性

最先端シリコン集積回路のゲート絶縁膜の膜厚は1-2nmとなり、Si-O結合距離がおよそ0.16nmであるから、もはや原子層数層のレベルである。このような膜厚では、1原子層分の増減でも、その初期特性・信頼性にゆらぎをもたらす。当研究室では、従来の熱酸化によるシリコン酸化膜(SiO<sub>2</sub>)の表面・界面の原子的なレベルのラフネス評価を行い、熱酸化でのラフネス発生・成長を観察し、熱酸化機構を原子的なレベルで解析している。

(a) SiO<sub>2</sub>表面ラフネス

図3は、テラス表面を熱酸化して形成されたSiO<sub>2</sub>表面のラフネス変化のようすを、観察されたAFM像で示している。熱酸化が進み、酸化膜厚が増加すると、SiO<sub>2</sub>表面

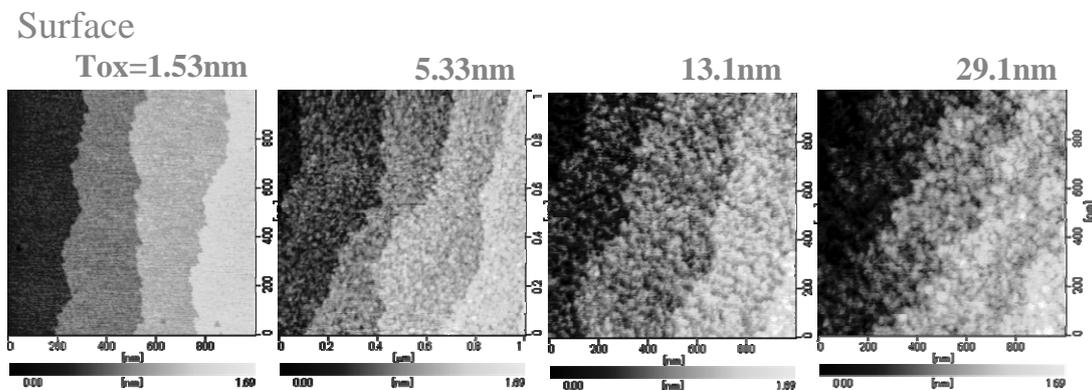


図3 原子的に平坦なシリコン表面の熱酸化時に現れるSiO<sub>2</sub>表面のラフネス。

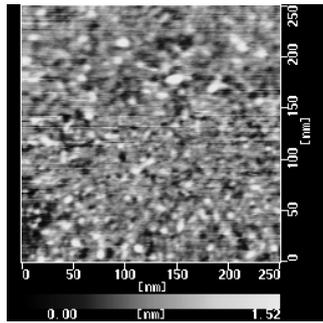


図 4(a) Si/SiO<sub>2</sub> 界面の AFM 像。

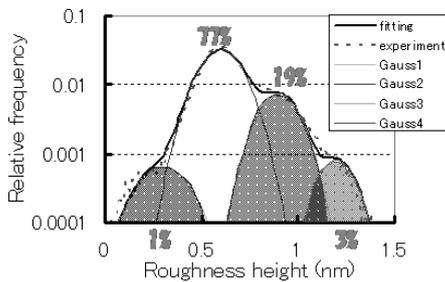


図 4(b) AFM 観察により高さデータ頻度分布。数値は、各原子層の占有率。

は、徐々に荒れていくようすが分かる。ラフネスは増大しつづけるはずもなく、やがて飽和する。飽和する膜厚は、ちょうど初期酸化領域の膜厚と同様の酸化条件依存性を示す。

#### (b) Si/SiO<sub>2</sub> 界面ラフネス

熱酸化によって形成された SiO<sub>2</sub> 膜を剥離すると、Si/SiO<sub>2</sub> 界面が露出し、熱酸化に伴う界面の形態変化を知ることができる。図 4(a) は、その一例の AFM 像であり、得られた図 4(b) に示す高さ座標解析から、少なくとも 4 原子層面が露出している。熱酸化前は、原子的に平坦なテラスであったことから、多原子層酸化で進行していることが分かる。シリコン酸化膜は優れた絶縁膜であるが、その絶縁性は、最弱点が代表する。つまり、工学上、多原子層酸化を無視することはできない。同様のデータから、

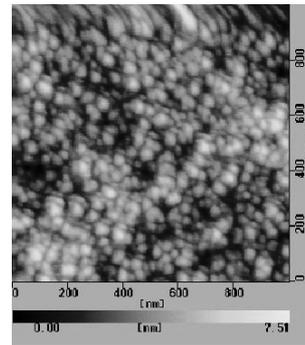


図 5(a) 高電界ストレス印加 SiO<sub>2</sub> のエッチング途中に現れる凹凸。

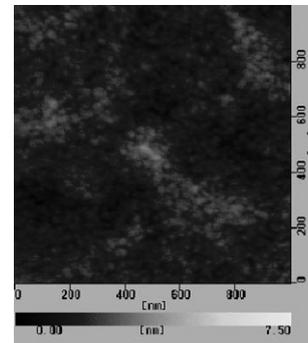


図 5(b) 高電界ストレス印加なしの場合。

シリコンの熱酸化は、概して原子層毎酸化であるが、厳密には多原子層酸化であることが明らかになった。

このようなラフネス発生は、もちろん、不均一な膜厚、膜質を示唆するものであり、さらに詳細な解析を進めることにより、種々のエレクトロニクスでの極薄絶縁膜の高信頼化につなげることが可能である。

### 2.3 SiO<sub>2</sub> 膜の劣化の二次元分布

SiO<sub>2</sub> 膜に高電界を印加し続けると、徐々に劣化し、最終的には局所的な熱破壊に至る。つまり、経時絶縁破壊が起こることが知られている。絶縁破壊は、局所的であるが、劣化の議論の多くは、平均的なものが多く、劣化の二次元分布を議論したものは

ほとんどない。当研究室では、劣化の二次元分布を視覚化することに成功し、図5のように、 $\text{SiO}_2$ 膜のエッチングの途中で、高電界印加に伴うラフネス成長を観察した。このような劣化の視覚化技術と、ラフネスの数値化を融合させることによって、劣化機構を解明し、高信頼化技術の方向付けを行うことができる。

#### 2.4 Cu アトミックチェーン

表面に、上記ステップ/テラス構造を有するシリコンウエハを、Cu イオンを含む溶液に浸漬すると、図6に示すように、原子ステップ端に沿って、Cu ナノワイヤを形成することができる。ステップ端が、テラスより化学的に活性であることに起因している。このナノワイヤは、原子一個の幅を有する、正にアトミックチェーンとなっている。

この現象は、Cu イオンがシリコン表面に吸着し汚染する機構と、同等のものである。

### 3. 原子レベルの構造制御

本文では、シリコン表面の原子的平坦なテラス表面と原子ステップを作成することに始まり、そのような表面を利用することにより、熱酸化をはじめとして諸現象を原子レベルの解像度で観察することができ、正にアトミックレベルの理解を深め、制御技術を高めるための大きなツールとすることができることを示した。

ナノサイズのトランジスタ等では、電気的特性のバラツキが議論されているが、当研究室では、上記のように、種々の原子ステップ/テラス構造等を利用して、特性ゆらぎが熱力学的な本質的要因によるか否かを見極めたり、より均一性・均質性の高い新

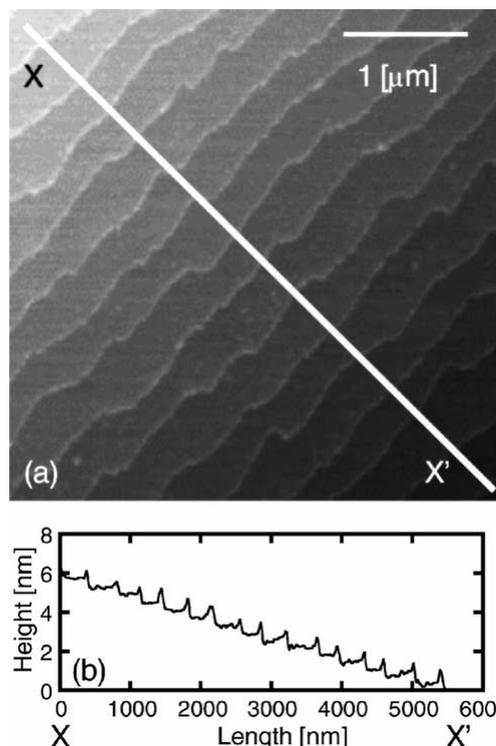


図6 原子ステップ端に沿って形成されたCuのアトミックチェーン。

しい製膜技術 (atomically-controlled technology)等の足がかりを見出すことを目指している。

科学英語一言メモ (10) : Because I love you  
-English Tips from Behind the Scenes-

山下 理恵

筑波大学 数理物質科学研究科

〒305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1

“Just because I love you.”

結婚記念日に妻に花束を贈るのが恒例という米国で、花を差し出す際に添える一言だそうだが、この because は

a) I bought the flowers because I love you.

愛しているから花を買いました、と花を買ったという行為 (主節) の原因・理由 (従属節) を導く従属接続詞である。これをもう一つの従属接続詞 since で

b) I bought the flowers since I love you.

とはいわない。理由を述べる because と since はどう違うのだろうか。参考書などでは because と since の使い分けを、because は聞き手の知らない新情報で強い理由、since は既知の理由と説明しているが、もう少し踏み込むと、理由が主節の内容を必然的にもたらす唯一直接的な原因 (=cause and effect) となり、その文の意味の中心となれるかどうかは because と since の別れ目となる。という訳で b) の since は、花束を買った唯一無二の直接的な理由である愛を強調するこの場面には使えないのである。

c) Since it's our wedding anniversary today, why don't we go out for a fancy dinner?

と、結婚記念日に印をつけたカレンダーを一緒に見ながら、今日は外でご馳走でも食べようかと算段する意味なら since となる。since が本来「～以来」という時間を表す副詞であるため、互いの共通認識である結婚記念日という事実から、時間・推測を経て、夕食を食べに行くという提案に至った、つまり記念日が提案の前にありきの「起点」=主な根拠、となる理由の場合に since が使われるのである。まさに since 節は「前置き」の前提で、文の焦点は提案となる。これを because に置き換えると記念日と夕食に出かける提案が直接必然的な因果関係となり

d) Because it's our wedding anniversary today, why don't we go out for a fancy dinner?

「記念日なのだから (当然) ご馳走を食べに行きましょう」と理由が強調される。because 節は冒頭のセリフの様に「ただ(Just)愛しているから」と副詞 just で強められるが、since 節は副詞で理由を強調することができない。

注意が必要なのは since に時間の意味があるため

d) Since we examined the properties of A, we have found that B.

のように、since 節の時制が過去形だと、A の特性を調べた後に B であることを発見したのか、それとも A の特性を調べたから B がわかったという理由を表すのか、どちらともとれる曖昧な文章となってしまう (Having examined the properties of A, we have found that B. と分詞構文に変えると理由であることがはっきりする)

e) Since graphene is practically transparent and a good conductor, it is suitable for producing transparent touch screens, light panels and maybe even solar cells.

グラフェンが透明な伝導体であること (自明の事実) はタッチスクリーンや太陽電池を作ることと唯一直接的因果関係にはなく、主な理由として、応用に向いている製品を述べる主節が焦点となる文には since がふさわしい (since 節は焦点になれない)。これを because に変えると、応用製品より理由のグラフェンの特性があらためて強調され、文の意味の中心が主節の主張から because 節 (従属節) の理由・因果関係自体に移ってしまう。このように because 節は従属節ながら since と異なり主節を差し置いて意味の主従逆転を起こすので、声のトーンが使える口語と違い、一番伝えたい情報 (焦点) を通常文尾に置いて語順でポイントを示す書き言葉では、強調すべき理由の because 節は文頭を避け、後ろに置くことが多くなる。

f) The palladium-catalyzed cross-coupling reaction is unique since/ because it is possible to carry out under mild conditions and with very high precision.

この文も since, because どちらも使えるが、because を選ぶとクロスカップリング反応がユニークな理由が、化学的に穏やかな条件下、高い精度で行えるということだけに限定・強調される (since なら他の理由もあり得る) 逆に

g) We are only interested in the resistance of the coil because we want to use it as a standard resistance in the temperature range 10 °C to 20 °C.

と、それ以外にはなり得ない (誰も知らない) 理由を新たに披露し因果関係を述べる文には because しか使えない。



山下 理恵 (やました りえ)

お茶の水女子大学文教育学部卒。主に、物質材料科学・工学系の英文校閲・翻訳に従事。

訳書「いかにして実験をおこなうか」(丸善)

「第 38 回 薄膜・表面物理セミナー」開催報告

産業技術総合研究所 佐藤信太郎

薄膜・表面物理分科会主催の第 38 回薄膜・表面物理セミナー「薄膜，界面制御から見た二次電池技術」が，2010 年 8 月 23 日に産業技術総合研究所・臨海副都心センターにて開催された。リチウムイオン電池を中心とする二次電池は，携帯機器や自動車のスターターの電源として我々の生活に不可欠なものになっており，また最近では電気自動車や自然エネルギー利用のための電源としても注目を集めている。本セミナーでは，二次電池について理解を深めるために，7 名の第一線で活躍する大学・企業の研究者・技術者に，基礎から最新の応用，さらに分析技術に至るまでご講演頂いた。

今回の参加登録者数は 30 名，講演数は 7 件であった。宣伝・募集期間が短く，参加者が集まらないのではとの懸念があったが，なんとか目標人数は確保できた。

講演内容は，二次電池技術の基礎，電極材料技術，車載用電池への応用，ポスト Li イオン電池の開発状況，さらには電池評価手法まで多岐にわたり，たいへん興味深いものであった。以下に各講演内容について簡単にまとめる。

午前中は 2 件の講演があり，大学の先生に基礎的なことを中心にお話し頂いた。まず首都大学東京の金村先生には「二次電池技術の現状と展望」というタイトルで，現在商用化されているリチウムイオン電池の技術についてわかりやすく紹介頂いた。さらに，将来の新たな応用のため改善すべき点や，開発が進む新規電極材料に関しても

ご説明頂いた。次いで群馬大の鳶島先生に「次世代リチウム電池用電極・電解液材料の研究開発」というテーマでご講演頂いた。標題のテーマに加えて電池の信頼性についてのお話もあり，たいへん興味深かった。午後はまず日産自動車の堀江氏に，「環境車両用高性能リチウムイオン電池システムの研究開発」というタイトルで，電気自動車用の二次電池の開発について基礎からご説明頂いた。東芝の高見氏には，「チタン酸リチウム負極を用いた高出力二次電池「SCiBTM」の開発」というテーマで，電極材料を工夫したハイブリッド自動車用の電池についてご紹介頂いた。三洋電機の花房氏には，太陽電池と二次電池を組み合わせたシステムによる低炭素社会への取り組みについて，「大容量 Li イオン電池で実現するスマートエナジーシステム」というタイトルで，様々な実例を元にご説明頂いた。次いで産総研の周氏に，「ポストリチウム電池の開発」というタイトルで，リチウム—空気電池やリチウム—銅二次電池などの新規電池について紹介頂いた。東レリサーチセンターの藤田氏には「電池技術における評価手法の現状と課題」というテーマで，電極分析手法や問題点について概説頂いた。

いずれの講演もたいへんわかりやすく，また活発な議論も展開され，手前みそながら有意義なセミナーとなったのでは，と感じている。この場を借りて，セミナー開催にご協力いただいた多くの方々に感謝させて頂きたい。

## 第 15 回 電子デバイスにおける原子輸送・応力問題研究会 開催報告 (旧 LSI 配線における原子輸送・応力問題研究会)

研究会実行委員 産総研 ナノ電子デバイス研究センター  
小川真一

「LSI 配線における原子輸送・応力問題研究会」は、15 回目を迎える今年度から取り扱う対象を LSI 配線から電子デバイス全体に範囲を広げ、「電子デバイスにおける原子輸送・応力問題研究会」と名称を変更した。

今年度の研究会は、2010 年 7 月 22、23 日の 2 日間、横浜市鴨居のジャーマンインダストリーパーク内ジャーマンホールにおいて、企業、大学、公的研究機関から 35 名の参加を得て開催された。LSI 配線以外の電子デバイス新分野として今回は高速相変化記録材料技術が報告され、5 人のチュートリアル講演者を含む 17 人の講演者が登壇しいずれも発表時間 25 分～50 分に対し質疑応答が 10 分～20 分程度続き、聴講者との活発な質疑応答が行われた。質疑応答が長く活発なことはこの研究会の大きな特徴であり、アンケートでも「発表、質疑応答から学ぶことが多く、大変有意義である」、との声が多かった。

発表内容を以下の表に示す。

内容	発表機関	発表内容	
新分野	パナソニック	構造解析から見た実用高速相変化記録材料	
配線	カーボン材料	富士通、東北大、産総研	光電子制御プラズマCVD 法で成膜したネットワークナノグラファイト配線の特性
	TSV	富士通、東大、大日本印刷	ウエハーレベル3 次元積層と低温TSV プロセス技術
		関西大学	無電解めっき形成バリア・シード層を用いた高アスペクト比TSV 形成
	配線・コンタクト	東芝	モンテカルロシミュレーションを用いた微細金属配線の電気抵抗率上
		パナソニック	32nm プロセス以細に向けた低抵抗W コンタクトプロセス
	信頼性	京大	バリア形成 -Cu の拡散をどのように止めるか-
		ルネサス、京大、立命館、神鋼	Cu-Ti 合金を用いた自己形成バリア技術
		東京エレクトロン、Novellus、IBM	Low Resistance Wiring and 2Xnm Void Free Fill with CVD Ruthenium Liner and DirectSeed™ Copper
		ルネサス	Cu/low-k 配線のエレクトロマイグレーションにおけるジュール発熱の影響
		ルネサス	配線間TDDB の真性および欠陥性寿命予測
		評価	筑波大、STARC、産総研
	富士通研		Cu/low-k 配線におけるCu 凝集へのフッ素系残渣物の影
東レリサーチセンター	透過型電子線トモグラフィ法を用いたCu 配線評価方法の動向		
米国富士通研究所	積層構造とパッケージ材料の機械的整合性		
実装	ルネサス	Low-k 積層構造とパッケージ材料の機械的整合性	
	関連国際会議報告	産総研	Stress Workshop 2010 Review @ Dresden & Stranded Passenger Club

研究会後には、同センターのカフェテリアを借用した懇親会を行った。研究会での講演に関する深い議論が続き、また参加者同士の親交を深める場となった。懇親会の最後には参加者全員で食器洗いなど撤収作業を行い、手作り感に満ちた研究会、懇親会となった。

2011 年度は、本研究会の親関係にある国際会議、International Workshop on Stress-induced Phenomena in Metallization (通称 Stress Workshop) を 2011 年 11 月 7 日 (月)～9 日 (水) に京都で開催する予定であり (本研究会は開催せず)、2012 年には本年同様に国内研究会を 7 月に開催予定である。

## グリーンエレクトロニクスのための機能性多層ウェハー技術

薄膜・表面物理分科会

産業技術総合研究所 山崎聡

省エネルギー・低炭素社会実現に向けたバックキャスト（超長期エネルギー予測 [www.meti.go.jp/committee/materials/downloadfiles/g50809a04j.pdf](http://www.meti.go.jp/committee/materials/downloadfiles/g50809a04j.pdf)）では、石油などの化石燃料を採掘しガソリンを燃やして自動車を動かすなど化石燃料をそのままエネルギー源とする時代から、太陽電池などの再生可能エネルギー利用によって得られた電力を電気自動車などの電力として利用する社会への転換が不可避であることが示されている。電力をマネージするエレクトロニクスが高度に発達したグリーンエレクトロニクスの2030年、2050年のあるべき姿を考えると、個々の研究課題からの発想では見えてこない重点化すべき技術開発要素が明らかになってくる。この観点からウェハーの問題を考えると、シリコンでさえ高品質ウェハーの大量確保の問題があり、またSiCやGaN、ダイヤモンドではさらに大きな問題が横たわっている。本シンポジウムではこれらの問題を明確化し、多くの研究者のこの問題解決への参加を期待する意味で、第一線の研究者による最新の研究開発の現状を紹介していただいた。約80名程度の参加者であった。

産総研山崎が上記のような本シンポジウムの開催目的の説明を行った後、産総研大橋は、来るべきグリーンエレクトロニクスの重要性を指摘し、省エネルギー分をネガワットの発電（創エネルギー）として捉える概念がヨーロッパを中心に広まっていること、日本における取組が遅れており、今後、グリーンエレクトロニクスへの取り組みを強化すべきであることを指摘した。また、ユビキタスなグリーンエレクトロニクスの普及にはウェハーの問題が非常に大きいこと、このウェハーにおける半導体としての表面・界面の制御が重要であることを指摘した。

コバレントシリコンの鹿島は、シリコンパワーデバイスを広く普及するためには、MCZ法（Magnetic field applied Czochralski法）による大口径シリコン基板作製の高度化が必要不可欠であること、NTD（Neutron Transmutation Doping）法によるドーピング技術の高度化と施設整備が重要であることを指摘した。名工大江川は、シリコン上GaN成長の最前線を報告し、4インチの成長が可能であり、総膜厚9  $\mu\text{m}$  において耐圧1813 Vを得たことを紹介し、エピ層の厚膜化と光学顕微鏡で観察できる1  $\mu\text{m}$  程度のピットをなくす事が課題であることを指摘した。九工大松本は、パワーICの多機能化に適したウェハー直接貼り合わせ技術の現状を紹介し、異種材料デバイス等の混載も可能であり、プロセスがシンプルであることから今後の発展が期待されることを報告した。産総研西澤は、SiC エピ成長技術に関して、最近の研究開発動向、技術課題などを、特にエピタキシャル装置の観点でまとめ、装置工学としての取り組みが必要であることを指摘した。神戸製鋼横田はシリコン上ダイヤモンド基板開発についての報告があり、粒径200ミクロンを有する(100)基板の高配向ダイヤモンド成長がシリコン上で可能であることを紹介し、口径拡大は6インチまで比較的容易であることを指摘した。

応用電子物性分科会／薄膜・表面物理分科会合同企画

「ここまで来ているダイヤモンド電子デバイスー結晶成長からデバイス応用までー」

6. 薄膜・表面 物材機構 小出 康夫

本シンポジウム「ここまで来ているダイヤモンド電子デバイスー結晶成長からデバイス応用までー」は、応用電子物性分科会と薄膜・表面物理分科会の合同企画として開催され、ダイヤモンドエレクトロニクスに着目するシンポジウムとして応用物理学会では10年以上ぶりの開催となった。本シンポジウムでは、現時点のダイヤモンドの結晶成長・基板技術から電子デバイス技術までを幅広く議論することが目的とされた。

はじめとして物材機構の小出により、シンポジウム開催経緯とダイヤモンドの物性的特徴、光電子デバイスおよび包括的なまとめが述べられた。1982年にダイヤモンドの薄膜成長が成功されて以来28年が経過し、高品質単結晶薄膜成長法の確立、p型およびn型伝導制御法の確立、ダイヤモンド表面並びに金属及び絶縁体／ダイヤモンド界面の理解等を通して、ダイヤモンドを半導体として光電子デバイスに展開する基盤技術は着実に進歩したことが述べられた。続いて、産総研開発ベンチャーである(株)イーディーピーの藤森は、ダイヤモンド単結晶基板作製の歴史をまとめるとともに基板供給メーカーの現状をまとめた。現時点では、標準市販単結晶基板として、10mm角程度が手に入り、将来的には半導体グレードで2インチ基板開発を目指すことが述べられた。青山学院大／AGDマテリアル(株)の澤邊は、イリジウム基板上のダイヤモンドヘテロエピタキシャル成長基板の現状をまとめた。現状ではMgO単結晶基板上にイリジウム膜を介したダイヤモンド膜基板で1インチサイズが標準品であることが述べられた。将来的にはサファイヤ基板上に同様の結晶性のものができることが述べられ、ウェハサイズの大型化(4インチ)に期待がもたれる。ダイヤモンド光電子デバイスの工業化においては、基板技術は極めて重要であり、単結晶基板で今後3年以内に1インチ基板、ヘテロエピ基板で3年以内に2インチ基板が市販される見通しである。

早大の関口は、ダイヤモンド低損失電力デバイスの可能性をまとめ、低炭素社会構築と電気エネルギー損失低減のために、次世代インバータの開発が重要であり、その電力用トランジスタをダイヤモンドで実現することを目指すことを述べた。現実には、SiCに較べて損失5分の1以下を達成できる見込みであることが言及された。産総研の鹿田は、まずウェハ技術として、カーボンイオン注入、追成長、および電気分解リフトオフ法を組み合わせたダイレクトウェハ技術とウェハ間接接合を用いたモザイク基板成長によって大型化が可能であることを述べ、2012年に2インチウェハ、2017年に4インチウェハを目指す計画であることを報告した。また、Ru(ルテニウム)高耐圧ショットキーダイオードにおいて250℃、35万時間動作の安定性を実証し、パワースwitchング速度が10ナノ秒程度であることを示した。産総研の牧野は、低オン抵抗と高耐圧を同時に満足させるデバイスとして、ショットキーpn接合ダイ

オードを提案し、オン抵抗  $0.03 \text{ m}\Omega/\text{cm}^2$ 、逆方向耐圧  $3 \text{ MV/cm}$ 、スイッチング速度  $10$  ナノ秒を実証した。ダイヤモンドの特徴を生かした新しい試みであり、今後の進展が期待される。物材機構の小泉は、 $n$  層から  $p$  層への電子注入と水素終端  $p$  型表面の負性電子親和力性を利用して効率よく電子放出させる、 $p-n$  接合電子放出ダイオードの開発状況についてまとめた。現時点で放出効率が  $1 \sim 2\%$  が達成されていることが述べられた。NTTの嘉数は、高周波領域で動作するパワーデバイスとして、ダイヤモンドを応用することを目指しており、現状における高周波 FET として  $2.1 \text{ W/mm}$  レベルの GHz パワー動作が可能であることを報告した。また、ダイヤモンドに特有な水素終端  $p$  型伝導チャネルの形成機構として、種々気相分子種の中で、 $\text{N}_2$ 、 $\text{O}_2$  雰囲気によるアニール処理が正孔濃度を最大  $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  まで増加させ、更にデバイス性能を向上させることを述べた。ダイヤモンド水素終端表面における表面伝導層の形成機構は世界的な論争段階であり、機構解明を通して新たな電子デバイス設計につながることも期待される。

最後にまとめとして、産総研の山崎は、新しい物性物理を生み出す可能性のあるダイヤモンド半導体は、探索段階ではあるが光電子デバイス開発を目指す上で、非常に魅力的な材料であると結論した。シンポジウムが行われた教室は  $150$  名程度の収容人員であったが、およそ  $80\%$  が埋めつくされており、 $120$  名の聴衆とともに、非常に盛会なシンポジウムであった。

(1945字)

応用物理学会 薄膜・表面物理分科会主催・特別研究会  
Symposium on Surface and Nano Science 2011 (SSNS'11)

「表面・ナノ科学シンポジウム 2011」

日時：2011年1月19日（水）～22日（土）

場所：岩手県雫石市 雫石プリンスホテル

詳細はホームページ：<http://mswebs.naist.jp/LABs/daimon/SSNS11/index-e.html>

共催：日中韓フォーサイトプログラム（日本学術振興会）

協賛：日本物理学会（交渉中）、日本表面科学会（交渉中）

#### 参加者ならびに講演募集

本シンポジウムは1999年より表面物理シンポジウム(SSP)として開始された後、毎年開催され、2007年に表面・ナノ科学シンポジウム(SSNS)と名称を変更して、さらに広いスコープを持つシンポジウムとして継続して開催されています。その間、2001年にはヨーロッパの表面科学シンポジウム(3S)を招致して合同で開催した経験もある国際シンポジウムです。今年度も応用物理学会・薄膜・表面物理分科会特別研究会として『表面・ナノ科学シンポジウム2011(SSNS'11)』を下記の要領にて開催することとなりました。表面・ナノ科学の分野は進歩が早く、また現象の理解には広範な分野にわたっての知識が必要とされるため、たえずさまざまな表面・ナノ科学分野の研究者と最新の情報を交換する必要に迫られています。本シンポジウムは人数を限り、合宿スタイルによって表面・ナノ科学全般についての緊密な討論を通じて表面・ナノ科学の新しい展開へと繋げ、多くの実りある成果が期待されます。前回までのシンポジウムにおいても、非常にレベルの高い講演と熱心な討論が、昼夜に渡って繰り広げられ、非常に充実した会となり、参加者からも密度の濃い議論ができたこと好評をいただいています。関心をお持ちの方々の御参加をお待ちしております。尚今回も国際シンポジウムとして開催致しますので、使用言語は英語と致します。

参加締切：2010年11月24日（水） 定員50名になり次第締切ります。

参加申し込み：講演題目、氏名、所属、住所、電話番号、Fax番号、E-mailアドレスを御連絡ください。

参加登録費：62,000円（宿泊費等を含む：宿泊費・懇親会費等42,000円 3泊6食）2人部屋の場合。

1室1名の場合：登録費は80,000円（内宿泊費等は60,000円）となります。

1室3名の場合：登録費は56,000円となります。但し3名でお申し込み下さい。

登録費の振込は2010年12月1日（水）までをお願い致します。

登録費振込先：銀行名：三菱東京UFJ銀行 近鉄学園前支店（店番号458）

口座番号：0021869

口座名義：SSNS 代表者 大門寛（エスエヌエヌエス ダイヒョウシャ）

ダイモン ヒロシ)

アブストラクト〈英語〉: A4 1頁〈講演題目, 氏名, 所属, 連絡先, 本文〉

アブストラクト締切: 2010年12月1日(水)

参加申し込み方法: ホームページからお申し込みください。

参加の取り消しと参加登録費の返却: 2010年12月29日(水)以降に参加取り消しをされた場合には参加登録費(宿泊費は除く)の返却はできませんのでご承知おき下さい。

【問い合わせ先】

大門寛 奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科

〒630-0192 奈良県生駒市高山町 8916-5

Tel: 0743-72-6020 E-mail: [daimon@ms.naist.jp](mailto:daimon@ms.naist.jp)

長谷川修司 東京大学理学部物理学科

〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1

Tel: 03-5841-4167

E-mail: [shuji@surface.phys.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:shuji@surface.phys.s.u-tokyo.ac.jp)

【海外からの招待講演者(予定)】

M. Altman Hong Kong University of Science and Technology

E. Bauer Arizona State University

M. Scheffler Fritz Haber Institute

W-D. Schneider University of Lausanne

G. Thornton University of London

P. Varga T.U. Wien

『表面・ナノ科学シンポジウム2011』世話人

青野正和 物材機構

一宮彪彦 日本女子大

岩見基弘 岡山大

大島忠平 早大

尾浦憲治郎 阪大

河野省三 東北大

越川孝範 大阪電通大

大門 寛 奈良先端大

武田 さくら 奈良先端大

中原 仁 名大

長谷川修司 東大

長谷川 剛 物材機構

[雫石プリンスホテル前泊・延泊のご案内]

シンポジウム前後に前泊・延泊を希望される方は以下のところに御連絡ください。その場合『表面・ナノ科学 2011』に参加する旨を告げて下さい。2名以上でお誘い合わせの上お申し込みください。1名だと非常に割高になります。また1名で申し込まれる場合、料金を2 - 3人部屋と同じにする場合には、他のツアー客と同室になります。直接ホテルに連絡されても、会議用料金にはなりません。

(株) プリンスホテル 西日本セールスセンター

〒541-0056 大阪府大阪市中央区久太郎町 3-6-8 御堂筋ダイワビル 10F

担当：築場武美

Tel: 06 - 6252 - 2288 Fax: 06-6252-2588

申込締切：2010年11月24日(水)

## 2nd Call for Papers

# IWDTF-11

## 2011 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ELECTRON DEVICES

### — SCIENCE AND TECHNOLOGY —

January 20-21, 2011, Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan

Sponsored by  
The Japan Society of Applied Physics



Technically Cosponsored by  
IEEE Electron Devices Society



### SCOPE:

The 2011 International Workshop on “Dielectric Thin Films for Future Electron Devices: Science and Technology” (IWDTF-11) will be held at Tokyo Institute of Technology, Meguro-ku, Tokyo, Japan, on January 20-21, 2011. The IWDTF started in 1999, based on a domestic annual workshop on ultrathin silicon dioxide films. In succession to the second (IWDTF-04, Tokyo), the third (IWDTF-06, Kawasaki) and the fourth (IWDTF-08, Tokyo) workshops, the IWDTF-11 will focus on the science and technologies of dielectric films for electron devices, such as ultrathin SiO<sub>2</sub>, SiON, high-k dielectrics, and ferroelectric films. The topics on other technologies involved in the advanced gate stacks, which include metal gate electrodes and high-mobility channel materials, will also be discussed. The IWDTF will provide a great opportunity for information exchange and discussions at forefront of the researches on future electron devices. The papers on both experimental and theoretical studies, for the deep understanding of the properties of dielectric films and their interfaces, are welcomed. The workshop will consist of invited and contributed talks, and poster presentations. Selected topics of current interests will be reviewed by several invited talks.

Papers are solicited in, but not limited to, the following area:

- Ultrathin silicon dioxide, oxynitride and oxide-nitride composite dielectrics
- High-k dielectrics and Metal electrodes
- Mobility enhancement technology (including nanowires, nanotubes/grapheme and 3D devices)
- Memory applications (including ferroelectric, resistive RAM, Flash memory)
- Growth and related process of dielectric films
- Electrical characterization of dielectrics
- Gate dielectric wearout and reliability (including RTN)
- Characterization and control of gate dielectric/Semiconductor (Si, SiC, Ge, SiGe etc) interface
- Surface preparation and cleaning issues for dielectrics
- Dielectric reliability related to process integration
- Theoretical approaches to dielectrics/semiconductor structure
- Surface passivation technology (including application to photovoltaics and organic thin film devices)

### Keynote and Invited Speakers:

*Keynote* Hiroyuki Matsunami (JST Innovation Plaza, Kyoto, Japan)

"Technological challenges in SiC MOS devices"

Gennadi Bersuker (SEMATEC, USA)

"Changing paradigm for advanced gate stack evaluation: Reliability modeling at atomic structure level"

*Invited* Tsuneya Ando (Tokyo Inst. of Tech., Japan)

"------(Title is unfixed)-----"

Guo-Qiang Lo (Inst. of Microelectronics, Singapore)

"------(Title is unfixed)-----"

Lars-Ake Ragnarsson (IMEC, Belgium)

"On the origin of mobility reduction in ultrathin EOT HK/MG CMOS devices: Impact from gate-stack and device architecture"

## Workshop Language:

The official language of the workshop is English.

## Submission of Papers:

Paper acceptance is based on the submitted abstracts. The work must be original and unpublished. The prospective authors are requested to submit abstract(s) (in a WORD or PDF file), two pages in length, including all figures and tables, by **September 25, 2010** to the workshop website at <http://home.hiroshima-u.ac.jp/iwdtf/>.

The detailed information about the format are provided at the workshop website. All contributors will be requested to give either an oral presentation conforming to 20 minutes format or poster presentation. Please note that no submission by Fax will be accepted.

## Submission of Full-Papers to the Special Issue of JJAP:

Authors of papers accepted in IWDTF-11 are encouraged to submit the original and significant part of the papers to the Special Issue of the Japanese Journal of Applied Physics (JJAP), which will be published in October 2011. Please refer to the IWDTF-11 website for the detailed information. Please note that the manuscript will be published after the usual review process in JJAP. The special issue is not just proceedings of IWDTF-11.

## Registration Fee

	Pre Registration	On-site Registration	Banquet
Regular (member*)	JPY25,000	JPY30,000	JPY4,000
Regular (non member)	JPY30,000	JPY35,000	
Student	JPY10,000		

\* Member of Japan Society of Applied Physics or IEEE EDS.

## Organizing Committee

Chairperson: S. Miyazaki (Nagoya Univ.)

Co-chair person: S. Takagi (Univ. of Tokyo)

Members: C. Kaneta (Fujitsu Labs.), Y. Ohji (Selete), A. Tachibana (Kyoto Univ.), A. Toriumi (Univ. of Tokyo), Y. Tsunashima (Toshiba), J. Ueda (SIRIJ), K. Yamabe (Univ. of Tsukuba), K. Yamada (Waseda Univ.), S. Zaima (Nagoya Univ.)

## Steering Committee

Chairperson: H. Watanabe (Osaka Univ.)

Vice Chairperson: K. Tsutsui (Tokyo Tech.)

Members: T. Chikyo (NIMS), T. Endoh (Tohoku Univ.), R. Hasunuma (Univ. of Tsukuba), K. Kakushima (Tokyo Tech.), K. Kita (Univ. of Tokyo), D. Matsushita (Toshiba), N. Miyata (AIST), O. Nakatsuka (Nagoya Univ.), T. Nakayama (Chiba Univ.), Y. Nara (Fujitsu Micro), S. Ohmi (Tokyo Tech.), A. Sakai (Osaka Univ.), T. Watanabe (Waseda Univ.), J. Yugami (Renesas Electronics)

## Program Committee

Chairperson: K. Torii (Hitachi)

Vice Chairpersons: K. Shiraiishi (Univ. of Tsukuba) and T. Nabatame (NIMS)

Members: Y. Akasaka (Tokyo Electron), K. Eriguchi (Kyoto Univ.), K. Hirose (ISAS), S. Horii (Hitachi Kokusai Electric), K. Iwamoto (Rohm), H. Kageshima (NTT), Y. Kamakura (Osaka Univ.), K. Kobayashi (Tokai Univ.), H. Kondo (Nagoya Univ.), B. H. Lee (GIST), S. J. Lee (NUS), T. Matsuki (Renesas Electronics), S. Migita (AIST), K. Muraoka (Toshiba), A. Nishiyama (Toshiba), M. Niwa (Panasonic), H. Nohira (Tokyo City Univ.), S. Okada (Univ. of Tsukuba), K. Sasakawa (KOBELCO), A. Sawa (AIST), Y. Sugita (Fujitsu), Y. Takakuwa (Tohoku Univ.), A. Teramoto (Tohoku Univ.), E. Tokumitsu (Tokyo Tech.), S. Tsujikawa (Sony), H. Umeda (Renesas Electronics), Y. Uraoka (NAIST), W. Wang (ICAC), R. Yamada (Hitachi), T. Yamamoto (Toray)

## Important Dates

**Abstract Deadline: September 25, 2010**  
**Notification of Acceptance: November 5, 2010**  
**Workshop: January 20-21, 2011** ゲートスタック研究会(1/22-23)

## Further Information:

Please visit the following workshop website: <http://home.hiroshima-u.ac.jp/iwdtf/>

\*\*\*\*\*  
ゲートスタック研究会 (第 16 回) **IWDTF-11 と連続開催**  
2011 年 1 月 22-23 日 東京工業大学 (大岡山キャンパス) <http://home.hiroshima-u.ac.jp/oxide/>



応用物理学会 薄膜・表面物理分科会・シリコンテクノロジー分科会共催特別研究会  
「ゲートスタック研究会 —材料・プロセス・評価の物理—」(第16回)  
(旧「極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性」研究会)

協賛: 日本物理学会, 日本化学会, 日本金属学会, 日本表面科学会, 電子情報通信学会, 電気学会, 触媒学会,  
日本真空協会, 電気化学会, 表面技術協会, 日本顕微鏡学会, 日本セラミックス協会, 精密工学会 (依頼中)

半導体デバイスにおいて、ゲートスタックの高性能化は最も重要な研究課題の一つです。ゲート絶縁膜では、原子層レベルで膜厚や構造を制御した高品質な極薄酸化膜の開発や、トランジスタの高性能化と超低消費電力化を可能にする高誘電率ゲート絶縁膜の研究・開発が進められています。また歪シリコン基板やプロセス歪を利用した高移動度トランジスタや、メタルゲート電極の検討も活発に行なわれています。本研究会は、2004年まで9回にわたって開催されてきた「極薄シリコン酸化膜の形成・評価・信頼性」研究会の scope を広げて2005年から新たにスタートしたものであり、産・独・学の第一線の研究者が基礎から応用までを理論と実験の両面から議論し、本分野の発展に貢献することを目的としています。国内外からの招待講演者のほかに、一般の口頭発表とポスター発表を広く募集して開催します。

1. 日時: 2011年1月21日(金)~23日(日)
2. 場所: 東京工業大学 大岡山キャンパス西9号館; 東京都目黒区大岡山 2-12-1
3. 交通: 東急 大岡山駅(大井町線/目黒線)徒歩1分
4. セッショントピックスおよび招待講演者(敬称略):

<p>(1) 基調講演(IWDTF-2011と合同開催)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・松波 弘之(JST 京都) 「Technological challenges in SiC MOS devices」</li> <li>・G. Bersuker(SEMATEC) 「Changing paradigm for advanced gate stack evaluation: Reliability modeling at atomic structure level」</li> </ul> <p>(2) 高誘電率ゲート絶縁膜</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・細井 卓治(大阪大学) 「High-k/Metal ゲートスタックにおける酸素空孔形成要因と実効仕事関数変調機構」</li> </ul> <p>(3) 信頼性・ゆらぎ</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・江利口 浩二(京都大学) 「物理的プラズマダメージによる MOSFET オフリーク電流とそのバラツキの増大モデル」</li> <li>・由上 二郎(ルネサスエレクトロニクス) 「“ゲートファースト”メタルゲート/high-k CMOS プロセスの展望」</li> </ul>	<p>(4) 形成・評価・基礎物性</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・小野 倫也(大阪大学) 「第一原理計算による Si 及び Ge MOS 界面原子構造とリーク電流特性の予測」</li> <li>・池田 稔(富士通研究所) 「結晶 HfO<sub>2</sub> 中の酸素欠陥準位の高精度バンド計算法による理論計算」</li> </ul> <p>(5) 高移動度化技術・新構造ゲートスタック</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・西村 知紀(東京大学) 「high-k/Ge MOSFET における移動度特性の向上」</li> </ul> <p>(6) 新分野</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・築谷 隆夫(東京大学) 「フレキシブルトランジスタとメモリのための極薄ゲート絶縁膜技術」</li> </ul> <p>(7) メモリ技術</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・竹内 健(東京大学) 「強誘電体 FET を用いた低電力 NAND フラッシュメモリ・SRAM 技術」</li> </ul>
---	---

5. 参加費および懇親会費(消費税込): 参加費(含資料代): 薄膜及び Si テクノロジー分科会会員 3,000 円、応用物理学会・協賛学協会員 4,000 円、一般 6,000 円、学生 2,000 円 但し薄膜及び Si テクノロジー分科会賛助会社の方は分科会会員扱い、応用物理学会賛助会社の方は応用物理学協会会員扱いとします。懇親会費: 4,000 円(IWDTF-2011 と合同開催のため、IWDTF-2011 で申し込んだ方は不要)。
6. 定員: 200 名 (参加申込と同時に参加費および懇親会費をお振込み下さい。満員になり次第締切ります。)
7. 申込手続および締切:
  - 一般講演申込(口頭発表またはポスター発表)、締切: 2010年10月30日(土)  
申込先: <http://home.hiroshima-u.ac.jp/oxide/>  
上記 Web site の指示に従って、発表題目、発表者氏名(共著者名含む)および連絡先(住所、TEL、FAX、e-mail)を日本語・英語併記し、発表概要を和文 1000 文字以内または英文 500 ワード以内にとまとめて、入力して下さい。また、口頭あるいはポスター発表のご希望には、必ずしも添えない場合があることを予めご承知お下さい。
  - 参加申込(上記 Web site にてお申込下さい。)、締切: 2010年12月15日(水) (1)参加者名 (2)性別 (3)連絡先(住所、TEL、FAX、e-mail) (4)参加費種別(会員の方は会員番号)・金額 (5)参加費振込予定日を明記してください。  
費用は、参加費・懇親会費を同時にまとめて下記口座に参加者名でお振り込み下さい。  
参加費等の振込先: 三井住友銀行 本店営業部(本店も可) 普通預金 9474715 (社)応用物理学会 薄膜・表面物理分科会((シャ)オウヨウブツリガッカイ ハクマク・ヒョウメンブツリブンカカイ)  
振込み完了後必ず、web から配信された受付番号を、応用物理学会 担当: 伊丹文子(e-mail: [divisions@jsap.or.jp](mailto:divisions@jsap.or.jp))まで送信してください。  
なお、申込後の取り消しや不参加の場合、参加費等の払い戻しは致しません。また、請求書の発行は致しません。
8. 予稿原稿締切: 2010年12月15日(水)、4頁(A4)以内(図表およびアブストラクトを含む)、本文は日本語または英語、アブストラクトと図表およびその説明は英語として下さい。上記研究会 Web site の指示に従って、pdf ファイルで送信して下さい。尚、発表申し込み時に登録した発表題目や共著者名等を変更される場合は、必ず Web site の指示に従って、再入力をお願いいたします。
9. その他: 発表言語は日本語または英語、発表用の図(OHP、ポスター)は英語
10. 運営体制: 運営委員: 金田千穂子(富士通研: 委員長)、宮崎誠一(名大)、浦岡行治(奈良先端大)、立花明知(京大)、大路 譲(Selete)、山部紀久夫(筑波大)、財満鎮明(名大)、鳥海明(東大)、山田啓作(早大)、高木信一(東大)、綱島祥隆(東芝)  
実行・プログラム委員: 鳥居和功(日立: 実行委員長)、生田目俊秀(物材機構: プログラム委員長)、太田裕之(産総研: 副プログラム委員長)、井上真雄(ルネサスエレクトロニクス)、岩本邦彦(ローム)、梅田浩司(ルネサスエレクトロニクス)、遠藤哲郎(東北大)、岡田健治(パナソニック)、角嶋邦之(東工大)、影島博之(NTT)、鎌倉良成(阪大)、喜多浩之(東大)、近藤博基(名大)、白石賢二(筑波大)、杉田義博(富士通)、田井香織(ソニーセミコン)、武田さくら(奈良先端科学大)、知京豊裕(物材機構)、寺本章伸(東北大)、中山隆史(千葉大)、野平博司(東京都市大)、蓮沼隆(筑波大)、松下大介(東芝)、三谷祐一郎(東芝)、村岡浩一(東芝)、山元隆志(東レリサーチセンター)、渡邊孝信(早大)、渡部平司(阪大)  
諮問委員: 服部健雄(東北大)、安田幸夫(東北大)
11. 問合わせ先: 生田目俊秀(物材機構) Fax: 029-860-4838、E-mail: [NABATAME.Toshihide@nims.go.jp](mailto:NABATAME.Toshihide@nims.go.jp)
12. ホームページ: <http://home.hiroshima-u.ac.jp/oxide/>  
\* 予稿集への広告掲載を募集します(5万円/A4白黒1ページ)。お問い合わせは、生田目俊秀(物材機構、[NABATAME.Toshihide@nims.go.jp](mailto:NABATAME.Toshihide@nims.go.jp))、もしくは応物事務局伊丹まで。

2011年(平成23年)春季 第58回応用物理学関係連合講演会シンポジウム  
薄膜・表面物理分科会企画「産業利用に向けた放射光を使った最先端測定技術」

内容：素子の高性能化のために、素子の微細化および新しい高機能材料の使用が進んでいる。そのため、その表面、界面の制御、および、評価は非常に重大になってきている。放射光は、近年、新しい評価手法や技術が開発され、薄膜、埋もれた界面の微小領域高精度分析、評価が可能になってきている。本シンポジウムでは、産業利用に向けた放射光を使った最先端測定技術を紹介する。

主催： 2011年春季 第58回 応用物理学関係連合講演会

日時： 2011年3月24日(木) 13:30

場所： 神奈川工科大学

(神奈川県厚木市下荻野 1030)

プログラム：

1. 「イントロダクトリートーク」

大門寛 (奈良先端大)

2. 「立命館大学 SR センターの測定技術の現状と産業利用」

太田俊明 (立命館大 SR センター)

3. 「産業利用における放射光最先端測定技術の動向」

川村朋晃 (日亜化学工業)

4. 「放射光 XAFS による二次電池材料の状態解析」

野中敬正 (豊田中央研究所)

5. 「軟 X 線吸収磁気円二色性測定による応用磁性材料の磁気評価」

中村哲也 (JASRI/SPring-8)

6. 「マイクロ・クイック X 線反射率法による表面・埋もれた界面の計測」

桜井健次 (物質・材料研)

7. 「高エネルギー光電子分光による薄膜・界面の評価」

小林啓介 (Spring-8)

8. 「硬 X 線光電子分光法を利用した in-situ 分極測定による酸化物系レジスタンスメモリーのスイッチング過程の観察」

山口 周 (東大工)

問合せ先：大阪大学・産業科学研究所：前橋兼三

TEL：06-6879-8412 FAX：06-6879-8412

E-mail：maehashi@sanken.osaka-u.ac.jp

応用物理学会 薄膜・表面物理分科会

第 38 期 第 6 回、第 39 期 第 1 回 幹事会議事抄録

日時： 平成 22 年 3 月 18 日(木) 12:00~13:30

場所： 場所：東海大学湘南キャンパス 14 号館 1F 14-106

〒259-1292 神奈川県平塚市北金目四丁目 1-1

電話: 0463-50-2532 大会本部直通

参加者 (37 名) : 大西洋 荻野俊郎 喜多浩之 佐々木正洋 佐藤信太郎 津田穰 目良裕  
寺地徳之 徳本洋志 土佐正弘 長谷川剛 本間芳和 中村芳明 宮田典幸 村岡浩一  
三宅晃司 山部紀久夫 渡邊孝信 渡部平司 飯島善時 市川昌和 小川真一 河原敏男  
住友弘二 曾根逸人 高桑雄二 田中悟 田部道晴 中原仁 中村雅一 福井孝志 星陽一  
前橋兼三 宮崎誠一 安江常夫 山崎聡 吉村雅満

委任状 (22 名) : 岩崎裕 魚住清彦 尾浦憲治郎 影島博之 神谷利夫 財満鎮明 坂間弘  
須藤孝一 大門寛 田中啓一 中嶋健 橋詰富博 平山博之 古川貴司 一宮彪彦 大泊巖  
木村健二 越川孝範 重川秀実 鈴木真理子 内藤正路 森田清三

回答なし (5 名) 岡田正道 笹川薫 小高秀文 河津璋 重里有三

配布資料 :

- (1) 第 38 期 第 6 回、第 39 期 第 1 回 幹事会次第
- (2) 第 38 期第 5 回幹事会議事抄録 (案)
- (3) 平成 21 年度薄膜・表面分科会事業報告
- (4) 平成 21 年度薄膜・表面分科会収支決算概略表
- (5) 第 38-39-40 期幹事名簿
- (6) 第 39 期常任幹事名簿
- (7) 平成 22 年度薄膜・表面分科会事業計画
- (8) 平成 22 年度薄膜・表面分科会収支予算概略表
- (9) 顧問の新設に関する内規の変更案
- (10) HRDP-5 収支予算書及び決算書
- (11) 第 11 回「イオンビームによる表面・界面解析」特別研究会のご案内
- (12) 第 15 回ゲートスタック研究会最終決算書
- (13) 平成 22 年度 秋季応用物理学会分科会主催シンポジウム企画案
- (14) 第 14 回 LSI 配線における原子輸送・応力問題研究会最終決算書
- (15) 第 15 回 電子デバイスにおける原子輸送・応力問題研究会 (旧: LSI 配線)
- (16) IWDTF2008 収支報告書
- (17) IWDTF-11 1<sup>st</sup> call for Papers 案
- (18) 第 39 回薄膜・表面物理基礎講座企画案

議事要旨 :

- (1) 前回議事抄録案の確認を行い承認した。(資料 2)
- (2) 河原庶務幹事より平成 21 年度薄膜・表面分科会事業報告があり承認した。(資料 3)
- (3) 渡邊会計幹事より平成 21 年度薄膜・表面分科会決算報告があり承認した。本会の公益法人化に伴う国際会議受け入れ金の返還等の説明に対し、津田幹事より国際会議の将来的な運営に関する提言があり、本間幹事長から本会も含めた議論の継続の意向の旨が述べられた。(資料 4)
- (4) 本間幹事長より顧問の新設に関する内規の変更の提案があり承認した。これを受けて、平

成 22 年度からの顧問として、津田穰氏、徳本洋志氏、魚住清彦氏、尾浦憲治郎氏の 4 名の推薦があり、これを承認した。(資料 9)

- (5) 山崎新幹事長より第 39 期の常任幹事の紹介が行われた。(資料 5, 6)
- (6) 中原庶務幹事より平成 22 年度の事業計画が説明され、年度表記(H21→H22)の修正を行うことで承認された。(資料 7)
- (7) 小川会計幹事より平成 22 年度の予算計画が説明され、これを承認した。なお、会費収入やセミナー等の収入は H21 年度実績をベースに計算しており、このままでは実質的には 110 万円程度の赤字(繰越金の取り崩し)となるため、セミナーなどの参加者を増やすことで収支改善したい旨が述べられた。また、貸借対応表の作成に関する質問があり、H22 年度版はこれから作成するとの説明がなされた。(資料 8)
- (8) 小川会計幹事より第 38 回セミナーに関して、概ね半数の講師を確定し、詳細を後日案内することが報告された。
- (9) 渡邊企画幹事より第 39 回基礎講座に関して、早稲田大学において 11 月に 2 日で開催すること、参加費を 1 日単位にして、企業参加者が参加しやすい環境を整えたいことが報告され、承認された。付帯意見として、講師と参加者のインフォーマルなディスカッションタイムを設けてはどうかとの意見が出され、検討することとした。(資料 18)
- (10) 渡部企画幹事より秋期の分科会主催シンポジウムはグリーンエレクトロニクスと多層ウェハー技術を軸として進める旨が説明され、次回常任幹事会で詳細を決定することで承認された。(資料 13)
- (11) 小川会計幹事より LSI 配線研究会を電子デバイスにおける原子輸送・応力問題研究会にタイトル変更して横浜において 7 月 22 日、23 日の 2 日間で開催することが報告された。(資料 14, 15)

安江幹事より前回イオンビーム研究会の決算報告(収支 0)と次回開催予定(12 月 3 日、4 日の 2 日間、於名城大学)が報告された。(資料 10, 11)

渡邊企画幹事より第 15 回ゲートスタック研究会の決算報告(約 23 万円の黒字)が報告された。(資料 12)

同じく渡邊企画幹事より前回 IWDTF の決算報告(約 150 万円の黒字)と、次回 IWDTF とゲートスタック研究会を連動して来年 1 月に開催予定である旨が報告された。(資料 16, 17)

- (12) 山崎幹事長より、応物特別号について提案を募集中である旨が報告された。

以上

## 応用物理学会 薄膜・表面物理分科会 第 39 期 第 2 回 幹事会議事抄録

日時: 平成 22 年 9 月 15 日(水) 12:00 ~ 12:40

場所: 場所: 長崎大学 教育学部 2F 23 番教室  
〒852-8521 長崎県長崎市文教町 1-14

参加者(28名+顧問1名): 市川 昌和、小川 真一、河津 璋、河原 敏男、住友 弘二、  
曾根 逸人、高桑 雄二、中原 仁、中村 雅一、福井 孝志、星 陽一、前橋 兼三、  
宮崎 誠一、安江 常夫、山崎 聡、荻野 俊郎、影島 博之、財満 鎮明、  
佐藤 信太郎、大門 寛、中村 芳明、長谷川 剛、平山 博之、宮田 典幸、  
村岡 浩一、山部 紀久夫、渡邊 孝信、渡部 平司、魚住 清彦(顧問)

委任状(27名): 飯島 善時、一宮 彪彦、木村 健二、越川 孝範、重川 秀実、重里 有三、  
鈴木 真理子、田中 悟、田部 道晴、内藤 正路、森田 清三、吉村 雅満、  
岡田 正道、大西 洋、神谷 利夫、喜多 浩之、坂間 弘、佐々木 正洋、須藤 孝一、  
田中 啓一、寺地 徳之、土佐 正弘、中嶋 健、橋詰 富博、古川 貴司、三宅 晃司、  
目良 裕

欠席(4名): 大泊 巖、小高 秀文、笹川 薫、本間 芳和

### 配布資料

- (1) 第 39 期第 2 回幹事会議事予定
- (2) 第 38 期第 6 回、第 39 期第 1 回幹事会議事録(案)
- (3) 第 16 回ゲートスタック研究会案内
- (4) IWDTF-11 2nd Call for Papers
- (5) 薄膜・表面物理分科会第 40・41 期幹事候補者募集
- (6) 平成 23 年春季 応用物理学会シンポジウム企画案
- (7) 第 15 回 電子デバイスにおける原子輸送・応力問題研究会 開催報告
- (8) 走査プローブ顕微鏡 24
- (9) 第 11 回「イオンビームによる表面・界面解析」特別研究会

### 議事要旨

- (1) 前回議事抄録案の確認を行い承認した。(資料 2)
- (2) 渡邊幹事より第 39 回薄膜・表面物理基礎講座の進捗状況報告があった。この中で、前回幹事会で提案されたディスカッションタイムの設定について、講師スケジュールの関係で明示的な時間は割いていないが、運用面で講師への質問を出しやすい環境を整える方針であることが説明された。
- (3) 大門企画幹事より平成 23 年度春季応用物理学会におけるシンポジウム案(資料 6)の提示があり、基本路線は承認された。なお、講師が Spring-8 関係者だけで構成されている点の指摘があった。
- (4) 前回幹事会で承認した顧問の新設に関わる分科会内規の変更に際して、分科会規定の変更を要する旨の指摘が学会本部よりあり、この変更案(「幹事会が必要と認められた時は副幹事長(2名以内)【他】をおくことができる。」と【他】を追加)が 7 月理

事会で承認されたことが、山崎幹事長より報告された。また、これを受けて前回承認された内規が正式に効力を持つようになったことが説明された。

- (5) 前回の内規改正では、顧問幹事の任期について明示されていなかったが、学会本部より任期を明記した方がよいとの指摘があり、第28項に「顧問の任期は1年とし、幹事会の承認により、再任も可とする。」との文言を追加することが承認された。
- (6) 第40・41期の幹事候補募集について、資料5の案内がNews Letter No.139に掲載されたことが山崎幹事長より報告された。また、若手幹事を増やすための推薦を積極的に行って欲しいとの依頼があった。
- (7) 電子デバイスにおける原子輸送・応力問題研究会が7月に横浜で開催されたことが、小川企画幹事より報告された(資料7)。会計報告は次回に行われる予定である。なお、来年度は国内研究会の代わりに国際ワークショップとして開催することが報告された。
- (8) 本年度の走査プローブ顕微鏡研究会が資料8に示したように12月に熱川で開催されることが、中原庶務幹事より報告された。
- (9) 渡辺企画幹事より、今年度ゲートスタック研究会(資料3)およびIWDTF-11(資料4)が来年1月に同時開催となることが報告された。
- (10) 本年度のイオンビームによる表面・界面解析特別研究会(資料9)が12月に名城大学において開催されることが、木村幹事の代理である鈴木基史氏より報告された。
- (11) 大門企画幹事より本年度の表面ナノ科学シンポジウムが来年1月に雫石で行われることが報告された。なお、昨年度シンポジウムの収支は本分科会からの支出を行うことなく完了したことが口頭で説明されたが、資料準備の不手際があったため、正式報告は次回行うこととした。
- (12) ACSIN 国際会議について、本分科会における責任担当者が明確でないことが明らかとなり、準備基金管理委員会の委員長(分科会副幹事長)がその責を負うのではないかとの指摘があった。
- (13) News Letter No.139 が現在印刷・発送中であることが、中原庶務幹事より報告された。
- (14) 第38回薄膜・表面物理セミナーの実施報告が山崎幹事長より行われた。正式な会計報告は次回行う予定であるが、ぎりぎり黒字会計であったことが口頭で説明された。

以上

## 応用物理学会 薄膜・表面物理分科会 第 39 期 第 2 回 常任幹事会議事抄録

日時: 平成 22 年 6 月 19 日(土) 15:00-17:00

場所: 産総研秋葉原事業所 11001 室

〒101-0021 東京都千代田区外神田1-18-13 秋葉原ダイビル 11F

電話: 03-5298-4721(代表)

参加者 (10 名): 山崎聡 (産総研・エネルギー技術研究部門)、山部 紀久夫 (筑波大・理工)、  
中原仁 (名大・院工)、前橋兼三 (大阪大・産研)、喜多浩之 (東京大・院工)、  
鈴木真理子 (東芝・研究開発センター)、寺地徳之 (物質・材料研究機構)、  
曾根逸人 (群馬大・院工)、佐藤信太郎 (富士通)、大門寛 (奈良先端大・物質創成)

委任状 (4 名): 小川真一 (半導体先端テクノロジーズ)、小高秀文 (旭硝子・中央研究所)、  
影島博之 (NTT・物性科学基礎研)、渡部平司 (大阪大・院工)

(以上 敬称略)

### 配布資料 (番号は資料番号)

- (1) 第39期第2回常任幹事会議事予定
- (2) 第39期第1回常任幹事会議事録(案)
- (3) 平成22年度薄膜表面分科会行事予定表
- (4) News Letter No.139 目次案
- (5) 薄膜表面物理分科会内規改定案
- (6) 応用電子物性分科会研究会案内
- (7) 過去の応用物理学会でのシンポジウム
- (8) 第 38 回薄膜・表面物理セミナーチラシ

### 報告および協議

- (1) 前回議事抄録案の確認を行い承認した(資料 2)。
- (2) 第 39 回薄膜・表面物理セミナーの企画方針に関して議論を行い、ナノ計測・ナノ加工関連という素案が山部副幹事長、曾根企画幹事から示された。また、半導体基板の原子レベル表面加工や、ナノホール・ナノギャップを用いた有機計測、難加工材料のナノ加工・計測なども提案された。加工を主眼とするか、計測を主眼とするか、方針を整理し、次回常任幹事会までに素案をまとめることとなった。
- (3) 第 39 回薄膜・表面物理基礎講座に関して、前回示した企画案を元にほぼ予定どおり進めていることが報告された。また、チラシ原稿は No.139 の News Letter にも掲載するため、原稿締切日程を確認した。
- (4) 平成 23 年春季学会におけるシンポジウム企画案に関して(資料(7))、放射光を用いた計測(XAFS, XPS, ナノサイズ放射光など)をテーマに進めることが大門企画幹事、前橋庶務幹事より提案され、承認された。次回幹事会(長崎大学)までに講師陣等を具体化して企画案として提示することとなった。
- (5) News Letter No.139 に関して(資料(4))、巻頭言は山崎幹事長、研究室紹介は大門企画幹事に依頼することとした。また、セミナー等の開催報告に関して、各担当者を確認した。No.140 に、薄膜・表面物理分科会主催のシンポジウムに加えて、応電のシンポジウム開催報告も掲載することを確認した。

- (6) 第 38 回薄膜・表面物理セミナーに関して、資料 8 のチラシの内容で開催することが佐藤企画幹事より報告された。開会挨拶は山崎幹事長とし、当日の人員手配、座長の選定を早急に行うこととなった。
- (7) 事務局の伊丹様が今年度で退職されること、後任の上村様に業務の引継が行われつつあることが山崎幹事長より報告された。
- (8) 顧問の新設に関して、応物の分科会規定が 7 月 2 日の理事会で承認される予定であることが、山崎幹事長より報告された。この承認を受けて、薄膜・表面物理分科会の内規(資料(5))を正式に変更することとなる。
- (9) 資料(6)の応用電子物性分科会の研究会案内を会員に配信する件について承認し、メールリストで送付することとした。
- (10) 応用物理学会時に開催するスクールの公募案内が来ていることが、山崎幹事長より報告された。来年春のスクールは 8/31、秋は 1/14 が締切である。前々回は「次世代ディスプレイエレクトロニクス技術」、「有機太陽電池」、前回は「MEMS」、「CMD」がテーマであった。
- (11) 次回常任幹事会について、行事予定に書かれている 8 月常任幹事会は 9 月幹事会と近いために開催しないこととし、第 3 回は 10 月 16 日開催とすることとした。

以上

## 「ニュースレター」投稿規定

ニュースレターは、応用物理学会薄膜・表面物理分科会が原則として年3~4回発行する学会誌で、薄膜・表面物理に関する原著論文、解説、分科会活動の要約、及びその他の記事を掲載する。尚、当分の間、分科会常任幹事会がニュースレター編集委員会を兼ねるものとする。

### 1 記事の種類とその刷り上がりの長さ

- 1.1 研究：薄膜・表面物理に関するオリジナルな内容を含む研究論文。従来の「論文」の型にとらわれず、装置、手法、問題点などに関して有益な情報を含むものを取りあげる。図、表を含めて刷り上がり10ページ以内を原則とする。
- 1.2 解説：一般性のあるテーマについて、専門分野以外の読者にも分かり易いことを考慮して解説したもの。図、表を含めて刷り上がり6ページ以内を原則とする
- 1.3 ノート：実験、理論のアイデア、コツなど論文では表に出ないような有益な情報。
- 1.4 寄書：薄膜・表面物理、及び、分科会活動に関する見解や意見。
- 1.5 談話室：分科会会員の意見交換、相互理解のための広い範囲の記事。
- 1.6 掲示板：分科会の行事予定、活動報告など。

### 2 投稿者の資格

投稿者は、分科会会員でなければならない。著者が複数の場合はその中の一人は必ず分科会会員でなければならない。但し、編集委員会が認めた場合はこの限りではない。

### 3 執筆要領

- 3.1 原稿の順序は、表題、著者氏名、所属機関とその住所、アブストラクト、本文、引用文献、著者紹介(20×25 mm<sup>2</sup>の写真付)とする。表題、著者氏名、所属機関とその住所は、その英文表記をE-mailアドレスとともに、第1ページの脚注として記す。
- 3.2 原稿は、ワードプロセッサを用いて作成した電子ファイル(PDF, MS-word)での提出を原則とする。印刷した原稿(カメラレディ原稿)でも受け付ける。
- 3.3 原稿は、A4用紙の上下に25mm、左右に20mmの余白を取り作成する。
- 3.4 原稿の書き方は「応用物理」執筆要項に準ずる。薄膜・表面物理分科会 web ページに掲載のテンプレートを参照のこと。  
[http://annex.jsap.or.jp/tfspd/activity/guide\\_author.html](http://annex.jsap.or.jp/tfspd/activity/guide_author.html)

### 4 原稿の閲読及び校正

- 4.1 投稿された全ての原稿は、閲読の後掲載の可否を編集委員会で決定する。閲読の結果、原稿の修正を求めることができる。
- 4.2 著者校正は、著者が希望した場合に初稿のみについて行う。
- 4.3 投稿者は、原稿の控えを手元に保存すること。提出された原稿、フロッピーディスクは原則として返却しない。

### 5 投稿料及び原稿料

投稿料は無料とする。編集委員会から依頼した原稿に対する原稿料は支払わない。

### 6 投稿の手続き

投稿者は、連絡先、原稿の種類を示したカバーレターを添え、原稿一部を下記に送付する。  
〒102-0073 東京都千代田区九段北 1-12-3 井門九段北ビル  
応用物理学会 薄膜・表面物理分科会ニュースレター編集委員会

### 7 著作権、転載の許可

本ニュースレターに掲載された記事の著作権は分科会に所属する。

## 薄膜・表面物理分科会

### 常任幹事名簿 (第 39 期:2010.4.1-2011.3.31)

担 当	氏 名(所属)	E-mail/Phone/Fax	*39-40 期
幹事長	山崎 聡 (産総研・エネルギー技術研究部門)	s-yamasaki@aist.go.jp	
副幹事長	山部 紀久夫 (筑波大・数理物質科学研究科)	yamabe@esys.tsukuba.ac.jp	*
庶務幹事	中原 仁(名大・院工)	nakahara@nagoya-u.jp	
	前橋 兼三(大阪大・産研)	maehashi@sanken.osaka-u.ac.jp	*
会計幹事	小川真一 (半導体先端テクノロジーズ)	shin29_ogawa@ybb.ne.jp	
	喜多 浩之(東京大・院工)	kita@adam.t.u-tokyo.ac.jp	*
編集幹事	鈴木真理子 (東芝・研究開発センター)	mariko.suzuki@toshiba.co.jp	
	寺地 徳之(物質・材料研究機構)	TERAJI.Tokuyuki@nims.go.jp	*
企画幹事	小高秀文(旭硝子・中央研究所)	hidefumi-odaka@agc.co.jp	
	佐藤信太郎(富士通)	sato.shintaro@jp.fujitsu.com	
	渡部平司(大阪大・院工)	watanabe@mls.eng.osaka-u.ac.jp	(広報)
	影島 博之(NTT・物性基礎研)	kages@will.brl.ntt.co.jp	*
	大門 寛(奈良先端大・物質創成)	daimon@ms.naist.jp	*
	曾根 逸人(群馬大・院工)	sone@el.gunma-u.ac.jp	*(広報)
事務局	伊丹 文子(応用物理学会)	divisions@jsap.or.jp 03-3238-1043 / 03-3221-6245	

## 会員数, 賛助会社名

会員数 2010年8月25日現在

A 会員: 53 名

B 会員: 695 名

計 748 名

### 賛助会社名

アジレント・テクノロジー(株)	(株)アルパック	オミクロン ナノテクノロジー ジャパン(株)
オリンパス(株)	北野精機(株)	(株)神戸製鋼所
(株)コベルコ科研	サイバネットシステム(株)	(有)テク
(株)東芝 研究開発センター	東洋製罐(株) 開発本部	巴工業(株)
日本カニゼン(株)	日本電子(株)	(株)日本レーザー
(株)日立製作所 中央研究所	(株)富士通研究所 ナノテクノロジー研究センター	三菱マテリアル(株) 総合研究所
(株)明電舎 総合研究所	(株)ユニソク	

20 社 23 口

薄膜・表面物理分科会では、  
 夏季セミナー (6月)  
 基礎講座 (旧土曜講座, 11月)  
 特別研究会 (最近では, ゲートスタック, 表面・ナノ科学シンポジウム,  
 LSI 配線, ICSPM, イオンビーム研究会)  
 などを開催しています。これらの会で取り上げるべきテーマについてのご意見や,  
 具体的な企画案を企画担当常任幹事までお寄せ下さい。  
 過去の会におけるテキスト等の残部がありますので, ご入用の方は, 事務局  
 (伊丹) までお問い合わせ下さい。会の一覧などの詳細は, ホームページをご覧  
 ください。(<http://annex.jsap.or.jp/tfspd/>)  
 当分科会発行の「News Letter」を会員の方々の一層のお役に立てるべく, 企業  
 広告を掲載することにいたしました。詳細は編集担当幹事または事務局 (伊丹・  
 上村) までお問い合わせ下さい。

## 編集後記

先号を発刊してからあっという間に3ヶ月が経ち、今年ももうすぐ終わりになってしまいました。皆様の今年の研究成果はいかがでしたでしょうか？今号も事務局の伊丹さん、上村さん、ご寄稿下さいました方々、会員の方々、幹事会、常任幹事会の方々に多大なご協力をいただきまして何とか発行までこぎつける事ができました。今後ともご協力をよろしくお願いいたします。

今号では、早稲田大学の川原田先生より「薄膜・表面分科会とカーボン系薄膜」というタイトルで巻頭言をいただきました。研究論文としましては、11月25日、26日の2日間にわたって早稲田大学西早稲田キャンパスで開催された薄膜・表面物理基礎講座「いまさら訊けない 太陽電池のための薄膜形成・分析技術」のご講演から3件の論文を掲載させていただきました。最新技術情報には九州大学大学院工学研究院の本岡先生の「ガラス基板上薄膜 Si 結晶成長過程の分子動力学シミュレーション」を掲載させていただきました。談話室では、本年度当会の副幹事長に就任されました筑波大学数理物質科学研究科の山部紀久夫先生に、研究室を紹介していただきました。また、連載記事としてご好評をいただいております「科学英語一言メモ」では「because」と「since」の違いについてご解説いただきました。

News Letter をさらに充実した内容にし、会員の皆様の研究や交流により役立つよう、ご意見、ご投稿をお待ちしております。学会誌とちがい、会員の皆様に身近な情報誌としての役割を果たそうと思っていますので、皆様からの積極的な投稿をお待ちしています。今後とも、ご支援・ご協力をお願いいたします。

編集担当常任幹事 鈴木 真理子 記

応用物理学会 薄膜・表面物理分科会

NEWS LETTER No.140

(無断転載を禁ず)

発行日 2010年12月14日

発行 社団法人 応用物理学会

編集 社団法人 応用物理学会 薄膜・表面物理分科会

〒102-0073 東京都千代田区九段北 1-12-3 井門九段北ビル

E-mail divisions@jsap.or.jp

ホームページ <http://annex.jsap.or.jp/tfspd/>

幹事長 山崎 聡 (産業技術総合研究所)

編集担当幹事 鈴木 真理子 (東芝)

寺地 徳之 (物質・材料研究機構)