

センター研究成果発表会

平成 17 年 2 月 5 日 (土) 午前 10 時 ~ 正午
於：荒田記念館 (大阪大学接合科学研究所)

プログラム (全てポスター発表)

1. トルエン低圧燃焼によるフラレン及び PAH 生成過程の解明
高田敬士 (工学研究科機械物理工学専攻 M2)
2. ナノ・ミクロ多重多孔質層による伝熱促進
芝原正彦 (工学研究科原子分子イオン制御理工学センター)
3. ナノ構造物が界面エネルギー伝達へ与える影響 (分子動力学解析)
芝原正彦 (工学研究科原子分子イオン制御理工学センター)
4. MgO への多価元素添加による Mg 空孔形成に関する第一原理計算による研究
杉田一樹 (工学研究科特任研究員)
5. La(Ni, M)₅系合金の水素吸放出に伴う欠陥生成に対する第 3 元素添加効果
伊達亮介 (工学研究科マテリアル科学専攻 M1)
6. B2 型金属間化合物 CoTi 中の欠陥構造の第一原理計算による研究
領木直矢 (工学研究科マテリアル科学専攻 M1)
7. 非接触原子間力顕微鏡による超高真空中での劈開イオン結晶表面の観察
西竜治 (工学研究科原子分子イオン制御理工学センター)
8. 非接触原子間力顕微鏡を用いた交換型原子操作
杉本宜昭 (工学研究科電子工学専攻森田研究室 D2)
9. Si(111)上絶縁性 CaF₂ 薄膜表面の nc-AFM 原子分解能観察
清野宜秀 (工学研究科特任助手)

10. 2-ピリドン誘導体の固体状態におけるパッキング状態と蛍光特性の相関
森脇章太（工学研究科物質化学専攻 M2）

11. 簡略型合成法のためのインジウム触媒の開発
加藤洋史（工学研究科分子化学専攻 D1）

12. インジウム-ケイ素複合ルイス酸触媒によるアルコールの直接置換反応
斉藤隆博（工学研究科分子化学専攻 D1）

13. メチレン鎖の新規構築法
内藤吉孝（工学研究科分子化学専攻 D1）

14. 被覆共役ポリマーの合成とその分子デバイスへの応用
川島啓祐（工学研究科分子化学専攻 M2）

15. Ni-Fe および Ni-Fe/Mn-Ir 非対称リングドットにおける磁化回転方向の制御
佐々木勲（工学研究科マテリアル科学専攻 D1）

16. インバータープロセスプラズマ技術の開発とカーボンナノチューブ成膜への応用
川瀬智之（工学研究科マテリアル科学専攻 M1）

17. 有機ポリマー表面とラジカルビーム間相互作用のMDシミュレーション
山城昌志（工学研究科特任研究員）

18. 低速イオンビームを用いた金の結晶構造形成に対する運動量効果の研究
前田拓也（工学研究科生産科学専攻 M1）

19. スパッタ成膜による薄膜の形状および非晶質膜質の数値解析予測
田口雅文（日本板硝子（株）、工学研究科生産科学専攻社会人 D1）

20. SiO₂/SiOC 基盤と CF_x ビーム間の相互作用による表面変化、脱離物に関するシミュレーション
川瀬智人（工学研究科マテリアル科学専攻 M1）

トルエン低圧燃焼によるフラレン及び PAH 生成過程の解明

大阪大学大学院工学研究科原子分子イオン制御理工学センター 極限微小構造研究部門 超微小機械分野
高田敬士 入谷哲也 芝原正彦 香月正司

1. はじめに

燃焼反応で生成する多環芳香族炭化水素 (PAH) は、大気汚染の要因であるダイオキシンやすすの前駆物質であると考えられている。一方、低圧場での燃焼過程においては、巨大鎖状炭素クラスターであるフラレン類が生成されることが報告されている。フラレン類はさまざまな分野への応用が期待されており、燃焼合成法はフラレンの大量合成法として注目を集めている。我々は本研究を通じて、フラレンの効率的な燃焼合成法を確立することを第一の研究目標としている。また、そのような PAH やナノ粒子が生成される燃焼条件やそのメカニズムを解明することにより、通常の燃焼プロセスにおいては、人体に有害な PAH やナノ粒子を全く排出しない燃焼プロセスを考案することを第二の研究目標としている。本報告では、場の温度ならびに圧力をコントロールできる燃焼器を用いて、低圧場でトルエンを燃焼させ、場の圧力や火炎の当量比が PAH やフラレン類の生成に及ぼす影響、ならびにその分岐メカニズムについて調べた実験結果についておもに報告する。

2. 実験装置および方法

PAH ならびにフラレン類を含有するすすサンプルは、低圧容器内に設置したバーナで形成された火炎より発生したすすを回収することにより作成した。図 1 に装置の概略を示す。本実験では、燃料にはメタンおよびトルエンを用い、酸化剤には酸素をを使用した。本実験装置では低圧容器内のバーナ部分が 2 重構造になっている。バーナの外周部分ではメタンを燃料とする保炎および熱供給用の予混合火炎が形成され、バーナ中央部分ではトルエンおよびメタン酸素が混合された予混合火炎が形成される。低圧容器内で形成される火炎は、その当量比および圧力を自在に変化させることができる。燃焼排気は、最初に、焼結金属で構成されたフィルタを通ることによりすすを取り除き、次に液体窒素で冷却したコールドトラップによって腐食性ガスを取り除いた後、真空ポンプへと導かれる。フィルタによって収集されたすすのサンプルを回収し、2 種類の機器によって分析を行った。低分子量の PAH の分析にはガスクロマトグラフを使用し、高分子量のフラレン類の分析にはハイパフォーマンス液体クロマトグラフ (HPLC) を使用した。

3. 実験結果および考察

図 2 にトルエン流量のみを変化させた場合のフラレン収量の変化を示す。図からわかるように本実験条件では、中央火炎の当量比を増加させるほど、すなわちトルエン流量を増加させるほどフラレン収量が減少していくことがわかった。これは、場の温度が低下したためであると考えられる。次に、図 3 にすす中のフラレン収量が比較的多かった条件と比較的少なかった条件について、すす中の PAH の分析結果を示す。どちらの条件の場合にも anthracene および benzo[a]anthracene が大きな割合を占めていることがわかる。また、すす中のフラレン収率が比較的多かった実験条件 A では分子量の大きな PAH が多く検出されているのに対し、収率の少なかった実験条件 E では分子量の小さな PAH が

多く検出されていることがわかる。その要因として、トルエンへの熱供給が不足している可能性が考えられる。本実験ではいずれの場合も、PAH の分析では anthracene および benzo[a]anthracene が多く検出されているが、いずれも Richter らが提唱したスキームにおけるフラレンの反応経路からは外れる物質である。本報告では、さらに、流量、圧力、当量比などの種々の物理量がすすサンプル中のフラレン類および PAH の濃度に及ぼす影響について実験的に調べたので、報告する。最後に、本研究は国吉ニルソン氏 (大阪大) ならびに武原弘明氏 (フロンティアカーボン社) との共同研究であることを記し、謝意を表す。

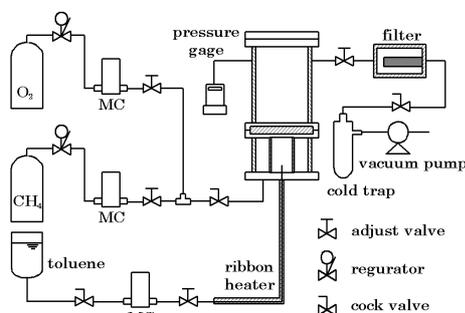


Fig. 1 Schematic drawing of experimental apparatus.

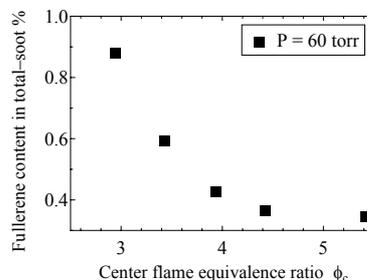


Fig. 2 Effects of Center flame equivalence ratio on Fullerenes content in total-soot.

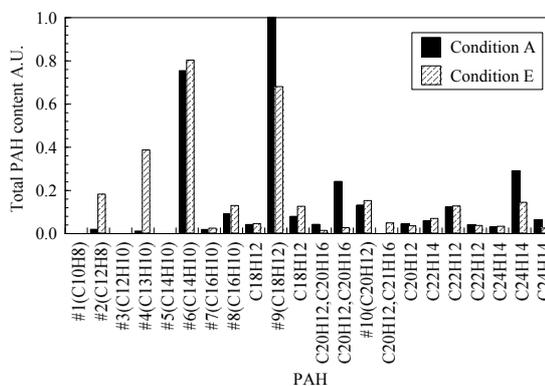


Fig. 3 Effects of Center flame equivalence ratio on PAH content.

ナノ・マイクロ多重多孔質層による伝熱促進

大阪大学大学院工学研究科原子分子イオン制御理工学センター 極限微小構造研究部門 超微小機械分野
芝原正彦 香月正司

1. はじめに

われわれは伝熱面に化学エッチングでナノ粒子多孔質層を形成すること (NPL 法) により, ナノ粒子層の無い場合に比べて約 1.8 倍大きな伝熱促進効果を得た. さらに, より薄いナノ・マイクロスケール粒子多孔質層を無電解メッキ法で形成し (FP 法), 流体による表面の汚れ効果を含めて伝熱特性を検討した. これら検討の結果, NPL 法の汚れに強い性質や, FP 法の伝熱性能が極めて良い性質を組み合わせた新しいナノ粒子多孔質層の作製方法 (NMPLS) を開発し, 従来と遜色ない伝熱促進効果を確認した. さらに, この方法を施工した伝熱面を用いて, 気体での伝熱促進性能実験を行い, 約 1.4 倍の伝熱促進効果を得た. 本報告では, これらのナノ・マイクロ多重多孔質層による伝熱促進に関する共同研究の成果として, NPL 法, FP 法, NMPLS 法の紹介, およびそれらの伝熱促進効果や熱交換特性について報告する.

2. ナノ・マイクロスケール多重多孔質層の形成

カーボン・ナノチューブ (直径 20~30nm, 長さ 5~15 μ m), 米国 Nanophase Technologies 製の酸化銅 (CuO) ナノ粒子 (平均径 16~32nm, 球形) およびアルミナ (Al₂O₃) ナノ粒子 (平均径 27~56nm, 球形) を混入させた酸あるいはアルカリで金属表面を化学的エッチング処理する表面処理方法を NPL (Nano-particle Porous Layer) 法と呼んでいる. さらに, 無電解メッキを用いて伝熱面にナノ・マイクロスケール粒子多孔質層を形成する方法を FP (Fine Precipitates) 法と呼んでいる. 伝熱促進効果を検討するための比較実験の結果から, これらナノ・マイクロスケール多重多孔質層界面は無垢の金属伝熱面に比べて約 1.6~2 倍程度の伝熱促進効果を有していることが分かった. また, 熱交換特性を調べるための 2m 長の並流平行平板型熱交換実験において, 二平行流路を仕切っている銅板 (厚さ 1.5mm) にナノ・マイクロスケール多重多孔質層を形成するか否かで, 最大 2.2 倍の熱交換率の差異がみられた. また, NPL 法は汚れに強い性質を持ち, FP 法は極めて良い伝熱性能を持つが汚れに弱い性質を持つことも判明し, この 2 つの方法を組み合わせた新しいナノ粒子多孔質層の作製方法を開発した. まず, 供試金属伝熱板表面から酸またはアルカリ水溶液で油膜を取り除き, FP 法で処理し, 薄いナノ粒子多孔質層を形成する. 次に, その多孔質層の上から NPL 法で再処理することによって, 図 1 に示す 3 層 (低層: 100nm 程度, 中間層: μ m オーダ, 上層: 50nm 以下) のナノ・マイクロ多重多孔質層が形成できた. 図 1 中の低層部分は, FP 法で形成した規則的な球状の結晶が析出している. 上層は NPL 法でエッチングしたものであり, この方法を NMPLS (Nano- and Micro-scale Porous Layered Structure) 法と名付けた.

3. 伝熱実験

NPL 法, FP 法および新たに開発した NMPLS 法による伝熱面を供試板とし, 図 2 の伝熱基礎実験装置による実験を繰り返し行った結果を図 3 に示す. NMPLS 法の伝熱面は従来の NPL 法や FP 法による伝熱性能と同等以上の伝熱促進効果を有することが分かった. 図 3 は多様な伝熱基板上に作製した多様なナノ

粒子を含むナノ粒子多孔質層を上記 3 種の方法で施工した場合の伝熱性能の比較結果を示したものである. いずれの場合についても, 施工前に比べて約 1.6~2 倍程度の高い伝熱促進効果を示しており, また含有するナノ粒子の熱物性には依存しない性質があることも分かる. 最後に, 本研究は功刀資彰氏 (京都大), 向勝己氏 (伊勢屋機械製作所) および佐竹信一氏 (東京理科大学) との共同研究であることを記し, 謝意を表する.

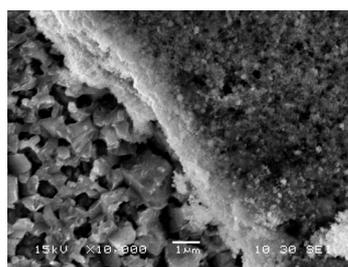


Fig. 1 Nano- and micro-scale porous layered structure.

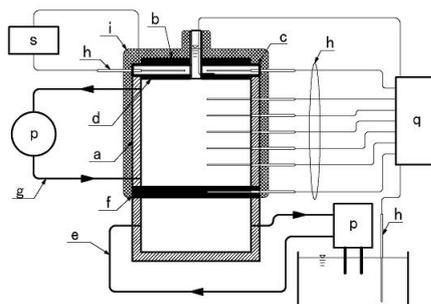


Fig. 2 Experimental apparatus for heat transfer test.

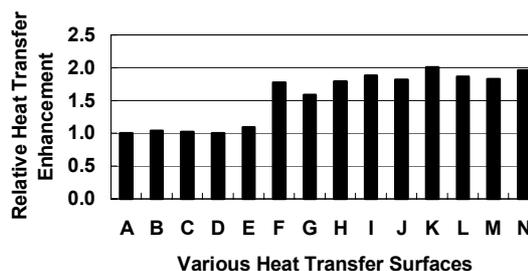


Fig. 3 Comparison of heat transfer performance with/without nano-particle porous layer on the surface. NOTATIONS: A: bare-copper, B: bare-brass, C: bare-aluminum, D: bare-SUS316, E: bare-oxygen-free copper, F: copper with copper oxide nano-porous layer by NPL-method, G: copper with carbon nano tube porous layer by NPL-method, H: copper with aluminum oxide nano-porous layer by NPL-method, I: brass with copper oxide nano-porous layer by NPL-method, J: aluminum with aluminum oxide nano-porous layer by NPL-method, K: copper with nano- and micro multi-layered porous structure by NMPLS-method, L: aluminum with nano- and micro multi-layered porous structure by NMPLS-method, M: SUS-316 with nano- and micro multi-layered porous structure by NMPLS-method, N: oxygen-free copper with copper oxide nano-porous layer by FP-method.

MgO への多価元素添加による Mg 空孔形成に関する第一原理計算による研究 First principles study of formation of Mg vacancy in MgO

大阪大学大学院工学研究科原子分子イオン制御理工学センター極限微小構造研究部門

杉田一樹, 水野正隆, 荒木秀樹, 白井泰治

【緒言】

金属酸化物は現在工業的に広く利用されており、微量元素添加によるキャリア導入、欠陥形成や格子の歪みにもなった電子状態の変化などが、さまざまな特性発現の起源となっている。2 価の酸化物である MgO に 3 価の Al をドーブすると絶縁性が保持される。この理由として MgO では Al 添加量の半分の Mg 空孔が形成され電気的中性を保つためであると推定されているが、Al 添加量と空孔量の関係を直接測定した例はない。そこで、本研究では第一原理計算を用いて MgO の微量添加領域における電荷補償機構を求め、その結果を陽電子寿命測定の結果と比較して、Al 添加量と Mg 空孔の形成量の関係を解明することを目的とする。

【計算方法】

平面波基底擬ポテンシャル法を用いて MgO 中の各欠陥の形成エネルギーや欠陥濃度を計算し、Al を 0~1000ppm 添加した時の電荷補償機構を求めた。その計算結果を陽電子寿命測定の結果と比較するため、DV-X α 法により電子密度を計算し陽電子寿命を計算した。各欠陥の陽電子寿命を求める際は平面波基底擬ポテンシャル法で得られた欠陥周辺の緩和構造を用いて計算した。

【計算結果】

欠陥濃度の計算の結果、MgO では Al を添加していない状態では主に $V_{Mg}^{2-} + V_O^{2+}$ で電荷補償が行われており、Al が添加されると Mg サイトに置換型で入り、 $2 Al_{Mg}^+ + V_{Mg}^{2-}$ で電荷補償が行われることが分かった。また雰囲気や温度が変化しても Al_{Mg}^+ や V_{Mg}^{2-} の濃度はほとんど変化しないという結果となった。

陽電子寿命を計算により求めると MgO 完全結晶は 130ps、 V_{Mg}^{2-} は 208ps となった。

ポスター発表ではこれらの計算結果と MgO-Al について行われた陽電子寿命測定の結果とを比較し、Al の添加量に対する Mg 空孔の形成量について考察する。

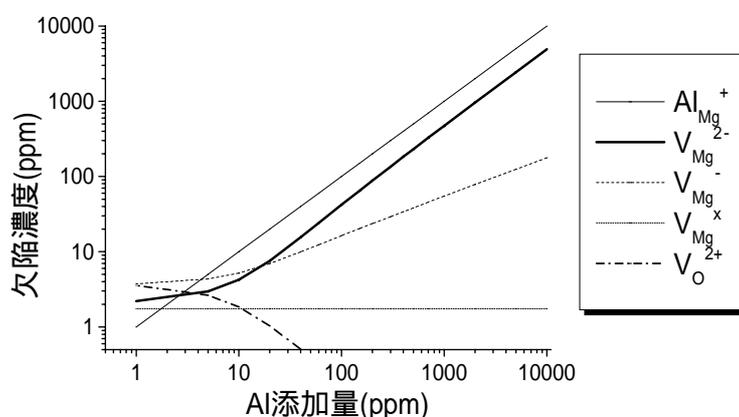


Fig. 計算により求められた、MgO に Al を添加した時の各欠陥の濃度変化(2000K 還元雰囲気)

La(Ni,M)₅系合金の水素吸放出に伴う格子欠陥生成に対する第3元素添加効果

大阪大学大学院工学研究科原子分子イオン制御理工学センター

伊達亮介, 水野正隆, 荒木秀樹, 白井泰治

【緒言】

LaNi₅系水素吸蔵合金は、水素化に伴い多量の空孔と転位が導入される事が報告されており、繰り返し吸蔵・放出特性等の水素化特性は、この水素化に伴う格子欠陥形成と大きく関係があると考えられている。LaNi₅系実用水素吸蔵合金は、La-Ni純二元系ではなく、複数の元素添加によって特性を改善して用いられているが、これら添加元素の種類と格子欠陥の関係は不明である。そこで本研究では、陽電子寿命法を用いて、LaNi_{5-x}M_x系水素吸蔵合金の、Ni置換元素M(=Al, Si, Mn, Fe, Co, Cu)の添加が水素化において導入される格子欠陥にどのような影響を与えているかを明らかにする事を目的としている。

【実験方法】

試料はLaNi₅、およびLaNi_{5-x}M_x (M=Al, Si, Mn, Fe, Co, Cu ; x=0.5, 1.0)を溶製し、950 でひずみ取り焼鈍を行った後、水素吸放出(室温、水素圧7MPa)させた。その後、100 から900 まで50 間隔で各15 分間ずつ等時焼鈍を行い、その過程での陽電子寿命変化を測定した。また、水素化前の各試料のVickers硬度測定、微粉化した水素化後の試料の粒度分布測定、PCT(圧力・組成・等温曲線)サイクル特性を併せて測定し、元素添加による試料の機械的性質の変化と、格子欠陥形成や水素化特性との関係を調べた。

【結果】

FigはLaNi₅の293KにおけるPCT曲線および陽電子寿命同時その場測定の結果である。今回測定した全ての試料で、同様に水素化に伴い平均陽電子寿命値が大きく上昇し、格子欠陥が導入された事が分かった。多成分解析の結果、LaNi₅の場合水素化によって転位の形成と共に、10⁻²~10⁻³オーダーの非常に高濃度の空孔が形成された事が分かった。また他の試料でも同様に空孔形成が確認された。等時焼鈍過程の陽電子寿命変化からは、AlやSiを添加した場合、水素化後の格子欠陥量が少なくなるという結果が得られた。またVickers硬度測定の結果や粒度分布測定の結果と照らし合わせたところ、元素添加によって硬度が上昇した試料では水素化後の格子欠陥量は少なく、平均粒径が小さくなるという傾向が得られた。これは試料の水素化に伴う格子ひずみを緩和する機構の変化によるもので、硬度が上昇するほど転位運動によるひずみ緩和が困難になり、亀裂発生による微粉化傾向が強まるものと考えられる。

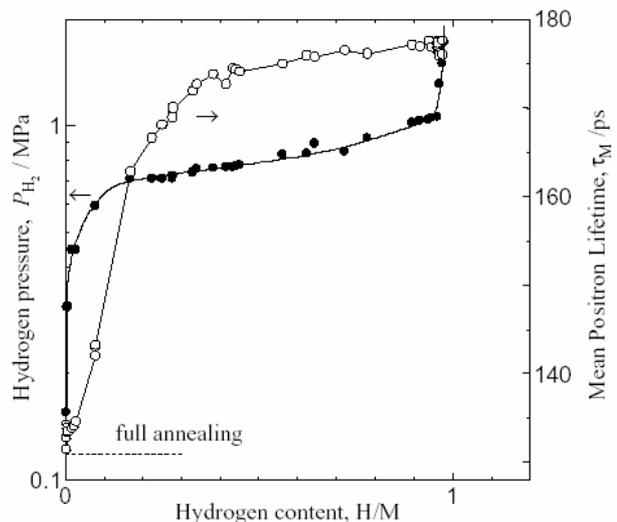


Fig. LaNi₅の293KにおけるPCT曲線および陽電子寿命同時その場測定の結果

B2 型金属間化合物 CoTi 中の欠陥構造の第一原理計算による研究

First principles study of defect structure in B2 intermetallic compound CoTi

大阪大学大学院工学研究科マテリアル科学専攻

領木直矢、 阪大工 水野正隆、 荒木秀樹、 白井泰治

【緒言】

B2 型金属間化合物 CoTi は融点が高く、高温まで規則構造を保つことから、耐熱合金として注目されている。しかし原子の移動を伴う諸現象において重要な格子欠陥についての報告は数少ない。本研究では CoTi 中に導入される可能性のある種々の格子欠陥について第一原理計算を行い、陽電子寿命測定等の結果との比較を交えて、CoTi 中で化学量論組成からのずれや温度の上昇に伴い生成する格子欠陥のより詳細な解釈を試みた。

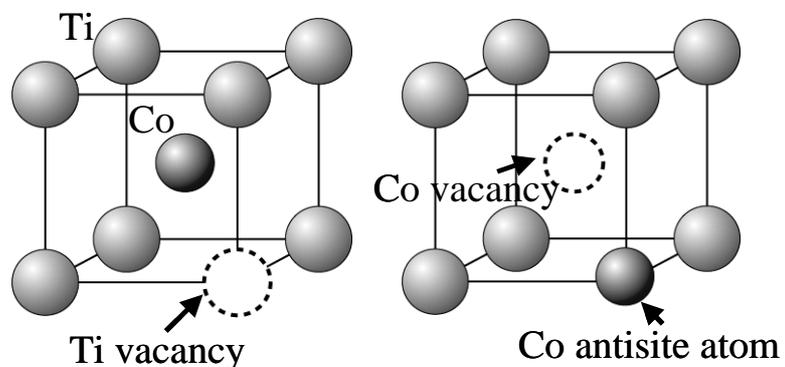
【計算手法】

CoTi 中に導入される可能性のある種々の格子欠陥を含むクラスターモデルを作成し、DV-X 分子軌道法を用いてそれぞれの電子状態を計算し、得られた電子状態から陽電子寿命を求めて実験結果との比較を行った。次に種々の格子欠陥を含むスーパーセルを作成し、平面波基底擬ポテンシャル法に基づく計算プログラム VASP を用いて各欠陥種の形成エネルギーと、点欠陥の間の結合エネルギーを計算して空孔の形成と移動に関する考察を行った。

【計算結果と考察】

陽電子寿命の計算値と実験値とを比較した結果、Co が過剰な組成の CoTi 中で組成のずれは Co 原子が Ti のサイトに置換することによって補われると考えられる。また Co が過剰な組成では高温から急冷した試料と炉冷を行った試料とで陽電子寿命が大きく異なるのは熱平衡時に存在していた Ti 空孔が急冷によって凍結されたためであると解釈されていたが、この急冷試料の陽電子寿命値が Ti 空孔よりも Co 空孔の陽電子寿命の計算値に近いことから、Co が過剰な組成にも関わらず急冷により凍結されたのは Co 空孔であるという可能性が示唆された。この点について、各欠陥種の形成エネルギー等を計算して安定性を比較した結果、Co が過剰な組成において Ti 空孔は第一近接にある Co 原子と位置を交換して Co 空孔 - Co 不正原子

ペア構造を形成するほうが安定であるということがわかった。また、Co が過剰になるほど Co 空孔と Co 不正原子間の結合エネルギーが増加するという結果が得られ、これが原因で Co の組成が増えるほど空孔の移動度が減少すると考えられる。



図： Ti 空孔と Co 空孔 - Co 不正原子ペア構造のモデル

Observation of cleaved ionic crystal surfaces by noncontact atomic force microscope in ultra-high vacuum

R. Nishi^{1,2}, D. Miyagawa¹, H. Etoh¹, Y. Seino², I. Yi², S. Morita^{1,2}

1 - Department of Electronic Engineering, Graduate School of Engineering,
Osaka University, Suita, Osaka 565-0871, Japan

2 - Frontier Research Center, Graduate School of Engineering,
Osaka University, Suita, Osaka 565-0871, Japan

We investigated several alkali halide surfaces (NaF, LiF, KBr, etc) and alkaline earth fluoride surfaces (CaF₂, etc) using noncontact atomic force microscopy (nc-AFM). These surfaces are important for the substrate of atomic manipulation and atomic devices in the future study. Firstly, these surfaces were observed by large-amplitude dynamic force microscopy [1]. In this paper, we obtained clear atomic resolution images such as NaF(100) and LiF(100) surfaces shown in Fig.1. These samples were prepared by cleavage in air and were introduced to vacuum within 30 minutes. The samples were heated for charge neutralization and removing organic contamination.

We will compare imaging mechanisms among these alkali halide and alkaline earth fluoride surfaces in nc-AFM study and will find the most suitable substrate for the atomic manipulation study.

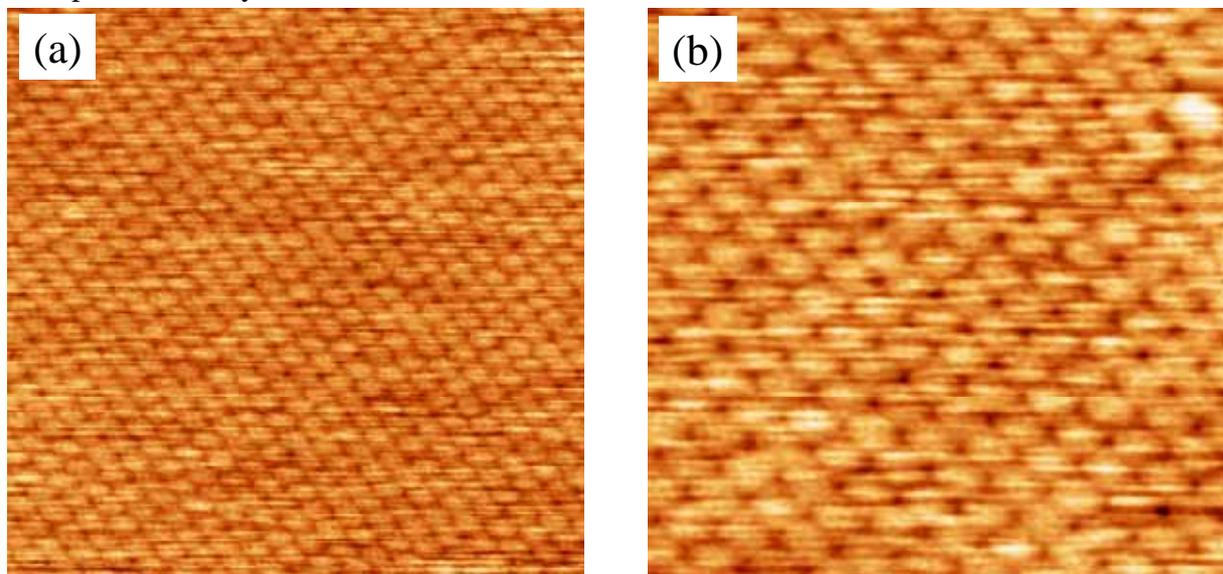


Fig.1. Nc-AFM images of alkali halide surfaces; (a)NaF(100) 76 × 76 nm, (b)LiF(100) 38 × 38 nm

[1] M. Bammerlin, R. Lüthi, E. Meyer, A. Baratoff, J. Lü, M. Guggisberg, C. Loppacher, C. Gerber, H.-J. Güntherodt, Appl. Phys. A 66 (1998) S293-294.

非接触原子間力顕微鏡を用いた交換型原子操作

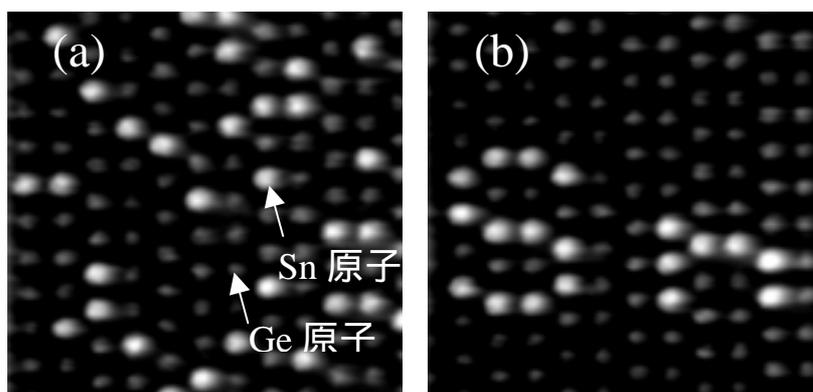
(阪大工*、阪大 FRC**) 杉本 宜昭*、阿部 真之*、Oscar Custance**、森田 清三*,**

1990 年 Eigler らが STM を用いた単原子操作に成功して以来、これまで原子操作に関する様々な研究が行われてきた。原子操作は大きく分けて垂直原子操作と水平原子操作に分けられ、特に水平原子操作は、金属表面上に吸着した分子や金属原子を用いて原子一つ一つからナノ構造(字や絵やパターン)を形成するのに用いられてきた。しかしこれまでの水平原子操作の多くは、原子操作の対象である原子の拡散，解離を避けるため極低温環境下でなされており、室温環境下でナノ構造が形成できるほど制御よく水平原子操作が行われた例はない。室温環境下で制御よく水平原子操作を行うことができれば、ボトムアップテクノロジーの分野で非常に意義があると考えられる。

今回、我々は非接触原子間力顕微鏡 (NC-AFM) を用いた新しい原子操作の手法である ‘交換型原子操作’ を発見し、室温環境下で安定なナノ構造を形成することに成功した。‘交換型原子操作’ とは、表面原子に探針を近づけ走査することで表面に埋め込まれた異種原子の位置を直接入れ替える方法である。実験には図 1 (a) に示すように Ge(111)-c(2×8) 表面の Ge アトムの一部が Sn 原子に置換した Sn,Ge 原子混在系を用いた。明るく画像化されているのが Sn 原子で暗く画像化されているのが Ge 原子である。この試料は Ge(111)-c(2×8) 表面上に少量の Sn 原子を蒸着してアニールすることによって得られる。Sn 原子の位置と Ge 原子の位置の交換 (交換型原子操作) を制御よく繰り返し行うことによって、図 1 (b) に示すような世界で初めての ‘原子埋め込み文字’ (ここでは ‘Sn’ という文字) を作成した。以上の実験は全て室温環境下で行われており、原子埋め込み文字は室温で安定である。(Y. Sugimoto, et al. Nature Materials, vol. 4, issue 2 (2005).)

本研究では Sn と Ge という共有結合性の元素を用いた点でも意義が大きい。我々が作成した原子埋め込み構造を構成する原子は共有結合力で互いに強く結ばれており、だからこそ室温環境下で安定に存在できる。結合が強いこのような原子を巧みに操る方法が ‘交換型原子操作’ であるといえる。またこの研究は AFM を用いた初めての単原子レベルからのナノ構造の作成であるが、このことは NC-AFM のすぐれた可能性を示したのみならず、STM では原理的に不可能である絶縁体表面上でのナノデバイスの作成へとつながると考えられる。

図 1 室温環境下で安定な ‘原子埋め込み文字’ の作成



Atom-resolved nc-AFM Observation on $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ surface

Y. Seino, M. Kuwata, M. Abe, S. Morita

Department of Electronic Engineering, Graduate School of Engineering,
Osaka University,
2-1 Yamada-oka, Suita, Osaka 565-0871, Japan

It has been recently reported that the noncontact atomic force microscopy (nc-AFM) has been achieved the atomic resolution to observe the surface of cleaved ionic crystals and ionic thin film deposited on clean Cu and Si surfaces. The imaging mechanism of these surfaces was thought to be different from that of active semiconductor surfaces which were characterized by the short-range chemical covalent bonding interaction force between a tip and the sample surface. nc-AFM simulation and the experiments of (111) cleaved CaF_2 surface have shown that the apparent contrast patterns obtained with a polar tip strongly depend on the tip terminated by the ion and three sub-lattices of anions and cations by the short-range attractive electrostatic interaction force.

In this work, the nc-AFM was applied at room temperature with the aim of clarifying the details of structure of this surface on atomic scale. With regard to $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$, it has been reported that nc-AFM with positive terminated tip succeeded in achieving the atomic resolution images[1]. We, however, obtained the atomically resolved nc-AFM images with both positive and negative terminated tip. In these experiments, cantilever was excited with a constant amplitude (C. A.). Figure 1 shows the (a)(b) nc-AFM images and (c) the ideal model of $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ surface. When the tip was approaching to the surface at the first time, we were not able to obtain any image with the clear atomic resolution. After the tip was deliberately touched to the surface, however, we have been able to obtain the atomically resolved images such as Figs.1(a) the case of positive-ion terminating tip and (b) the case of negative-ion terminating. CaF_2 molecules or their clusters were thought to be attached to the tip apex in the act of contacting, and this process is believed to be playing the important role in making a clear imaging, for example, in the apparent contrast patterns.

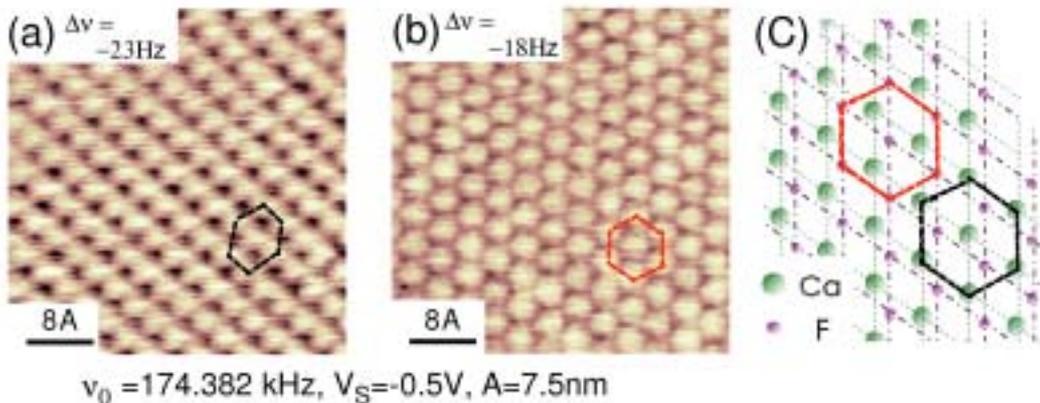


Figure 1: (a)(b) nc-AFM images and (c) an ideal model of $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ surface. ν_0 , V_S , A and $\Delta\nu$ are corresponding to the resonant frequency of a cantilever, bias voltage between the tip and the sample and the oscillation amplitude, and frequency shift of the cantilever, respectively.

[1] A. Klust et al.: Phys. Rev. B 69 (2004) 035404.

2-ピリドン誘導体の固体状態におけるパッキング状態と蛍光特性の相関

Correlation between Molecular Packing of 2-Pyridone Derivatives in the Solid State and Their Fluorescence Properties

森脇章太 (M2) · 南方聖司 · 小松満男

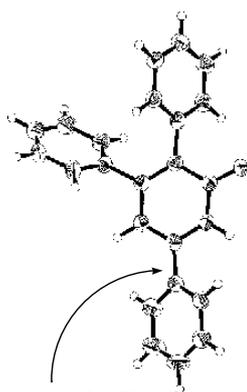
分子集積技術分野 (物質化学専攻 7403, minakata@chem.eng.osaka-u.ac.jp)

我々は既に、6-アリール-3,4-ジフェニル- α -ピロン誘導体が、溶液状態では全く蛍光を示さないのに対して、固体状態では強い蛍光を発することを見出しており、その発光機構に固体状態における分子間のパッキング相互作用が関与していることを明らかにしている¹⁾。一方、ピロンのアザアナログであるピリドン骨格は、酸素と窒素の電気陰性度の違いから電子求引性がピロン誘導体よりも弱いと考えられ、ピロンとは異なった蛍光特性を示すと考えられる。そこで本研究では種々のトリアリール置換型 2-ピリドン誘導体を合成し、その蛍光特性に関する研究を行った。

合成したピリドン誘導体はピロンと同様に溶液状態では蛍光を示さず、固体状態で強い蛍光を発した。また、発光波長はピロン誘導体より短波長側にシフトし、青色の蛍光を示した。さらに、N 上の置換基によって蛍光強度が変化し、中でも N-メチル体は青色蛍光プローブであるピレンと比較すると若干強い蛍光強度を有していた (Figure 1)。 蛍光挙動と構造の相関を調べるため X 線結晶構造解析を行ったところ、6 位のアリール基とピリドン骨のねじれ角が対応するピロン誘導体よりも大きいことが判明し (Figure 2)、このことが蛍光波長の

変化に影響を及ぼしていると考えている。また、6 位のベンゼン環のパラ位の置換基によって蛍光強度が変化し、ク

Figure 2. ORTEP drawing of 3,4,6-triphenyl-2-pyridone



torsion angle : 34.5°
bigger than that of pyrene (25.9°)

ロ口基やブロモ基などのハロゲン基を導入すると強い蛍光を発した。中でも、6 位のベンゼン環のパラ位にブロモ基を有する N-メチルピリドン誘導体は最も強い蛍光を示し、ピレンと比較すると約 8 倍の蛍光強度を有していた (Figure 3)。そこで、このピリドン誘導体を発光層として用いた有機 EL 素子を作成したところ、駆動電圧に課題があるものの実用に耐えうる輝度を有しており、ピリドン誘導体が EL 発光層として利用できる可能性を見出した。

1) Hirano, K.; Minakata, S.; Komatsu, M. *J. Phys. Chem. A* **2002**, *106*, 4868.

Figure 1. Fluorescence spectra of pyridones, pyrene and pyrene in the powdered form (pyrene: excited at 356 nm, the others: excited at 336 nm)

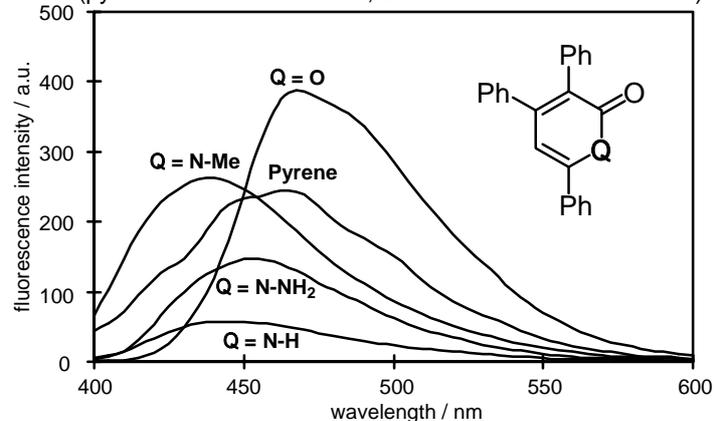
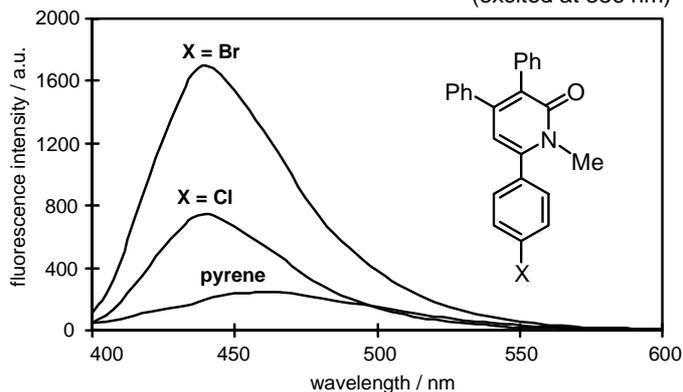


Figure 3. Fluorescence spectra of halogen-substituted pyridones in the powdered form (excited at 336 nm)



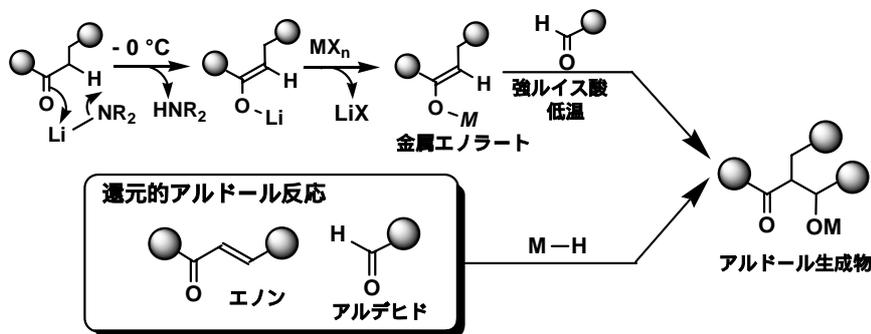
簡略型合成法のためのインジウム触媒の開発

Development of Indium Catalyst for Simplified Synthetic Method

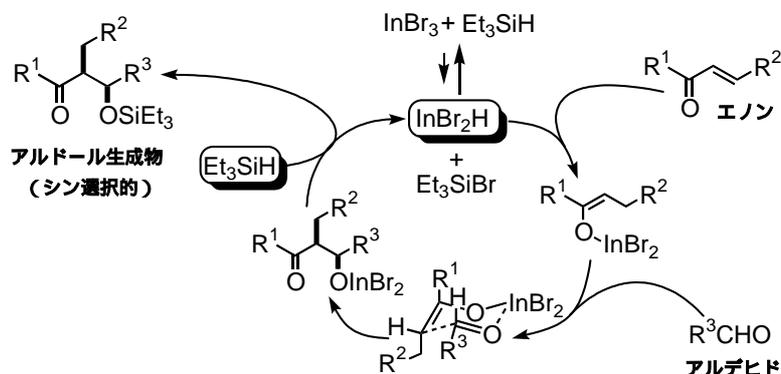
加藤洋史 (D1) 芝田育也、馬場章夫

分子集積技術分野 (分子化学専攻 3414, shibata@chem.eng.osaka-u.ac.jp)

医薬品、有機材料の合成のためには炭素-炭素結合形成は最も重要な反応のひとつであり、交差アルドール反応はその有力な手法である、しかしながら、立体や官能基選択性の制御、すなわち思いどおりに結合形成させるためには多段階で煩雑な操作を必要とする。これらの多段階反応は、単離操作を含めると多大なエネルギー、手間が必要となる。これに対してアルデヒドの存在下、エノン(不飽和ケトン)を選択的に共役還元できれば、金属エノラートが系中で直接生成することになり、煩雑な単離操作がなくなるばかりでなく反応条件の設定が単一となりエネルギーの大きい節約となる。



還元的アルドール反応を達成することのできる反応剤はわずかにあるが、いずれも汎用性に乏しく高い選択性とは言えないのが現状である。インジウム化合物は同族のアルミニウムやホウ素に比べると合成反応への利用は大きく遅れていた。還元剤として期待できるインジウムトリヒドリドの存在が古くから知られていたが、その反応性の低さから合成化学的な試みはほとんどなされていない。我々は安定な金属ヒドリドとハロゲン化インジウムの金属交換法により、インジウムヒドリドが発生することを見いだした。還元的アルドール反応へ適応の検討の結果、10mol%の臭化インジウム触媒を用いて、トリエチルシラン(Et_3SiH)を水素源として成功することができた。臭化インジウムが触媒として機能する様子を下図に示す。



インジウム-ケイ素複合ルイス酸触媒によるアルコールの直接置換反応

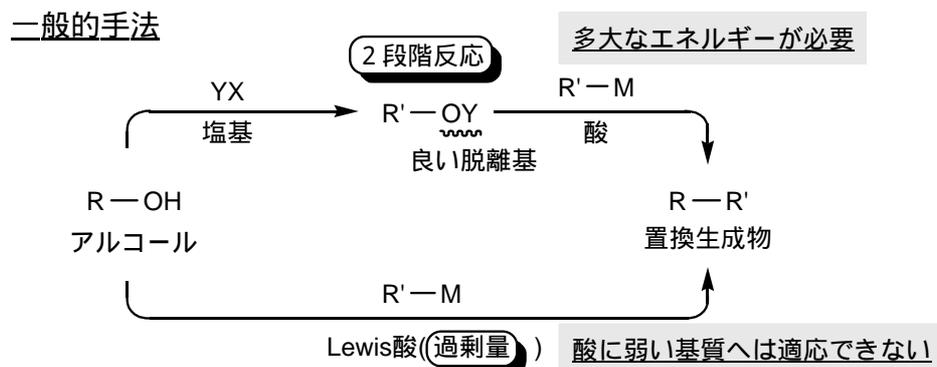
Indium-Silicon Combined Lewis Acid Catalyzed Direct Allylation of Alcohols

齋藤隆博 (D1) 安田 誠、馬場章夫

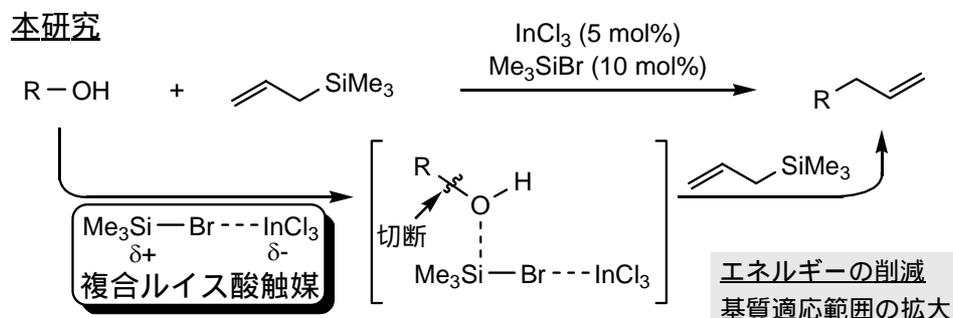
新機能分子創製化学分野 (分子化学専攻 3414, baba@chem.eng.osaka-u.ac.jp)

燃料、プラスチック、繊維、洗剤など、化学製品といわれるものの大半は有機化合物であり、私たちの生活に大きな恩恵を与えているが、同時に環境問題も引き起こしてきた。より環境にやさしく、安全に製品を作り出す方法(新規反応)が求められている。

アルコールは有機合成において私たちが最も出会う化合物群の一つであり、そのOH基の置換反応は極めて重要である。アルコールの直接置換反応はOH基の低い脱離能と活性なプロトンの影響のため非常に困難である。一般的にOH基の置換はOH基を他の良い脱離基に変換してから求核剤と反応させる2段階法、または、過剰量のルイス酸を用いる方法で行う必要がある。基質の適応範囲の拡大とエネルギーの削減のため、触媒量の酸存在下における直接置換反応が求められている。



今回アルコールの直接アリル化反応を触媒量の塩化インジウムとプロモトリメチルシランを用いることで達成した。この反応は InCl_3 と Me_3SiBr を組み合わせて用いることで初めて反応が進行する。プロモシランのBrがInへ配位し、ケイ素上のルイス酸性が増大する複合ルイス酸として働いている。複合ルイス酸はアルコールのOHと作用することでC-O結合の開裂を促進し、そこへアリル化剤が攻撃することでアリル化生成物が得られる。



メチレン鎖の新規構築法

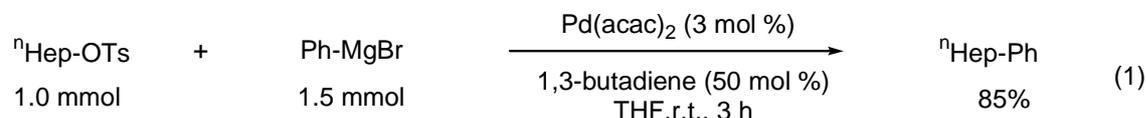
New Methodology for Construction of Methylene Chain

内藤吉孝 (D 1), 寺尾 潤, 神戸宣明

新機能分子創製化学分野 (分子化学専攻 7389, ynaitoh@chem.eng.osaka-u.ac.jp)

ニッケルおよびパラジウム触媒存在下、有機ハロゲン化合物と種々の有機金属試薬とのクロスカップリング反応は、炭素-炭素結合を生成する有用な方法として有機合成反応に広く利用されている。一般に、これらの反応は有機ハライドの0価遷移金属に対する酸化的付加、続くトランスメタル化、還元的脱離を経て進行する。ごく最近までこのようなクロスカップリング反応において、基質としてアルキルハライドを用いることは困難とされてきた。その理由はアルキルハライドの遷移金属への酸化的付加が遅く、また生成するアルキル金属錯体からの水素脱離が速いためである。

当研究室では、1,3-ブタジエンを添加剤に用いることでニッケル触媒存在下、アルキルハライドと Grignard 試薬とのクロスカップリング反応が効率よく進行することを見出している。¹⁻³ 従来のクロスカップリング反応においては、触媒として Pd を用いると対応する Ni の系に比べより高い選択性が現れる報告がされた例が多いことから、我々はこの反応系において Ni のかわりに Pd を用いることができないかと考え種々検討をおこなった。その結果、触媒量の Pd(acac)₂ 存在下、1,3-ブタジエンを添加剤として用いることにより温和な条件下でアルキルトシラート及びプロミド類と Grignard 試薬とのクロスカップリング反応が効率よく進行することを見出した (式 1)。



本反応は一級、二級アルキル Grignard 試薬を用いた場合にも効率よく進行し、対応するカップリング体が良好な収率で得られた。同様の条件下、NiCl₂ を用い反応を行ったところ、一級アルキル Grignard 試薬を用いた場合には、カップリング生成物より高収率で得られたが、二級アルキル Grignard 試薬を用いた場合には、Pd 触媒を用いた場合の方が反応は効率よく進行した。この反応系において sp²C-Br と sp²C-Cl はまったく影響を受けない。次にアリール Grignard 試薬のアリール上の置換基の電子的効果について検討したところ、反応速度は *p*-Cl-C₆H₄-MgBr > PhMgBr > *p*-MeO-C₆H₄-MgBr の順となり電子吸引性置換基のものほど速いことが明らかとなった。これは本反応系において還元的脱離の段階かアート錯体の形成の安定化の段階が反応に影響を与えていると示唆される。

1. Terao, J.; Watanabe, H.; Ikumi, A.; Kuniyasu, H.; Kambe, N. *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 4222.
2. Terao, J.; Ikumi, A.; Kuniyasu, H.; Kambe, N. *J. Am. Chem. Soc.* **2003**, *125*, 5646.
3. Terao, J.; Todo, H.; Watanabe, H.; Ikumi, A.; Kambe, N. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2004**, *43*, 6180.

被覆共役ポリマーの合成とその分子デバイスへの応用

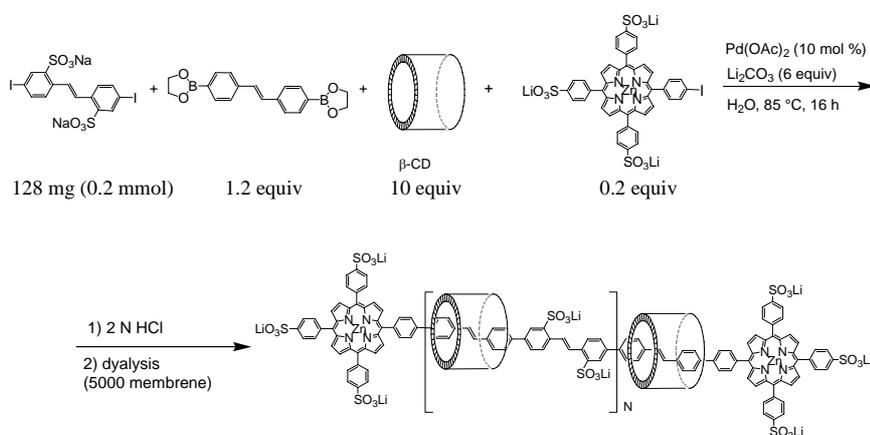
Synthesis of Insulated Molecular Wires and their Applications to Molecular Devices

川島啓祐 (M2), 寺尾 潤, 神戸宣明

新機能分子創製化学分野 (分子化学専攻 7389, kawashima@chem.eng.osaka-u.ac.jp)

共役ポリマーは2000年のノーベル化学賞の対象として広く認識されると共に、既に基礎的な研究から実用化段階に入ってきている。この導電性ポリマーはドーピングを施すことで金属に匹敵する高い導電率を有することが知られており、金属に比べて軽くしなやかであり、加工性も優れ、さらに原材料コストも安いことから、次世代の電子デバイスとして期待されている。しかしながら、共役ポリマーは一般に有機溶剤に対して不溶であり、また、分子の構造上、空気酸化を受けやすく、熱や光に対しても不安定である。我々は、共役ポリマーの安定性及び溶解性の向上を目指し、共役ポリマーを絶縁物質で被覆した被覆共役ポリマーの合成を目的とし研究を行っている。

下図に示す様に、最近我々は水中で疎水性モノマーと環状化合物との自己組織化により疎水性モノマーを環状化合物内部に入り込ませた後、遷移金属触媒を用いた親水性のモノマーとの共重合反応を行い、立体的に大きな導電性分子を用いて両末端をキャップすることにより分子被覆共役ポリマーの合成に成功した。この被覆共役ポリマーの溶液中とフィルム状態における吸収、蛍光波長の最大値および蛍光量子収率を測定したところ、注目すべきことに被覆されたポリマーの蛍光量子収率は被覆されていないものに比べ溶液状態では2倍以上の値を示し、フィルム状態では4倍以上の高い値を示した。このことは、共役鎖部分を被覆することにより励起されたエネルギーが溶媒分子や他の分子との衝突や相互作用により損失することなく、高い効率で蛍光エネルギーに変換されたためと考えられる。



Ni-Fe および Ni-Fe/Mn-Ir 非対称リングドットにおける磁化回転方向の制御

佐々木勲^{1,*}, 中谷亮一^{2,3}, 吉田哲郎¹, 大滝啓一¹, 遠藤恭^{1,3}, 川村良雄¹, 山本雅彦^{1,3},
長永隆志⁴, 綾 淳⁴, 黒岩丈晴⁴, Sadeh Beysen⁴, 小林浩⁴

1. 大阪大学工学研究科 マテリアル科学専攻 (〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1)
2. 大阪大学工学研究科 附属原子分子イオン制御理工学センター
3. 大阪大学工学研究科 フロンティア研究機構
4. 三菱電機株式会社 先端技術総合研究所 (〒661-8661 兵庫県尼崎市塚口本町 8-1-1)

将来の情報メモリ素子として有力な磁性ランダムアクセスメモリ(Magnetic Random Access Memory, MRAM)の記録密度向上には、メモリセルを高密度に配列させる必要がある。しかしながら、メモリセルを高密度に配列することに関しては、隣接するメモリセルからの漏洩磁場により、メモリセルに情報を書き込むために必要な磁場にばらつきが生じるという問題が考えられる。この漏洩磁場の影響を解決するために注目を集めているのが、リング型の構造を有するメモリセルである。リング型のメモリセルにおいては、外部への磁束の漏れが無いので高密度な配列が可能となる。

リング型ドットの磁化自由層においては、磁化の時計回り・反時計回りを情報の“0”と“1”に対応させる。時計回り・反時計回りの磁場は膜面垂直方向に電流を流すことにより発生できる。しかし、磁性メモリ材料としては、絶縁層を含む多層膜構造の適用が考えられており、絶縁層を含むために、膜面垂直方向に高い密度の電流を流すことはできない。したがって、膜面内の磁場により、磁化の回転方向を制御できるリング型ドットの構造を考案する必要がある。膜面内の磁場で磁化の回転方向を制御するために我々が考案したのが、リング外周の一部を直線化した、非対称な形状を有するリング型ドットである。Ni-Fe 非対称リングドットの研究により、膜面内の磁場で磁化の回転方向を制御できることが明らかとなった。一方、磁性メモリセルを構成するためには、磁化の回転方向の固定された磁化固定層も必要である。Ni-Fe/Mn-Ir 非対称リングドットの研究により、磁場の印加方向に関わらず磁化の回転方向が固定されていることが明らかとなった。上述のように我々のグループでは、非対称なリング型構造を利用することにより、MRAM を構成する磁化自由層・磁化固定層の確立に成功した。

* e-mail: isao.sasaki@mat.eng.osaka-u.ac.jp

インバータープロセスプラズマ技術の開発と カーボンナノチューブ成膜への応用

川瀬智之（工学研究科マテリアル科学専攻 M1）、杉本敏司

インバータープロセスプラズマは、表面改質・薄膜堆積等への応用を目的として本センターでその発生法が開発されたプラズマである[1,2]。その特徴は、インバーター電源(低/中周波の半導体式電源)の矩形波出力を、直接電極に印加してパルスプラズマを連続的に発生させる点にある。そのため、波形を介したプラズマの生成制御が可能となり、電極としてたとえば平行平板電極を用いれば比較的容易に大面積プラズマを発生させることができる。その応用の一つとして、同装置に基板ステージおよびヒーターを設置することにより、カーボンナノチューブ(CNT)成膜が可能となっている(図1~2)。これまでに、この成膜装置を用いて、プラズマ気相成長(PCVD)法により、 CH_4 ガス・ H_2 ガス雰囲気、Ni・SUS・Fe基板にCNTを成膜することに成功している[3,4]。

本発表会では、インバータープロセスプラズマならびにCNT成膜法について説明し、現在行っている研究(雰囲気・基板・温度・放電パラメーター等の成膜条件と生成物との関連を調べる実験)について報告する。

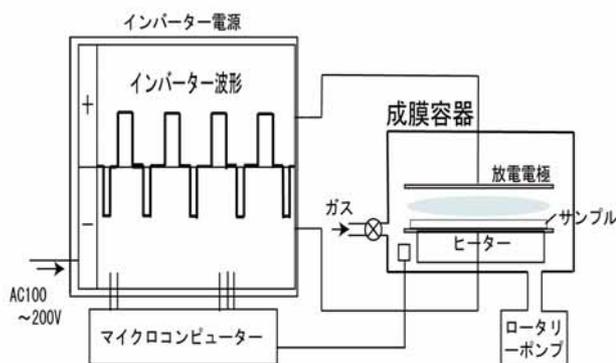


図1 インバータープラズマ装置模式図



図2 インバータープラズマ装置外観

- [1] S.Sugimoto *et al.*: Proc. ICPP96, Vol.2, 1826. [2] S.Sugimoto *et al.*: Surf.Coat.Technol. 136(2001)65. [3]特開 2003-137521 [4] 第 51 応物連合講演会 予稿集 No.2, p.1034 (2004 春)

MD simulations for surface interaction between radical beams and organic polymer surface

有機ポリマー表面とラジカルビーム間相互作用のMDシミュレーション

山城昌志, 山田英明*, 浜口智志

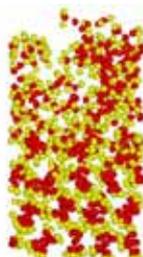
大阪大学大学院工学研究科原子分子イオン制御理工学センター, 〒565-0871 大阪府吹田市山田丘2-1

*産業技術総合研究所ダイヤモンド研究センター, 〒563-8577 大阪府池田市緑丘 1-8-31

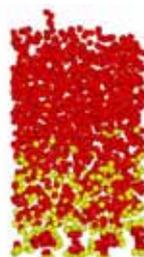
有機低誘電率基板として、poly(1,4-phenylene)を採用しスパッタリング特性の基板温度依存性を調べた。入射ラジカルとしてC原子、CH分子、CH₄分子を選び、基板温度は450[K]の場合と600[K]の場合との2つについて計算した。粒子入射後の表面の様子とスパッタリングイールドのネットの値の振舞は、定性的に室温の場合[1]と変わらない。



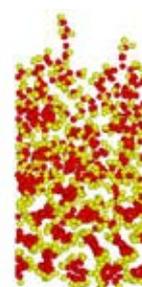
C 入射 (50eV) 450[K]
dose量 $22.7 \times 10^{15}/\text{cm}^2$



CH₄ 入射 (50eV) 450[K]
dose量 $24.4 \times 10^{15}/\text{cm}^2$



C 入射 (50eV) 600[K]
dose量 $20.6 \times 10^{15}/\text{cm}^2$



CH₄ 入射 (50eV) 600[K]
dose量 $24.5 \times 10^{15}/\text{cm}^2$



炭素



水素

粒子の入射によって基板から生じるエッチング生成物についても室温の場合と比べて大きな変化は無い。多少、CやHの数が大きなクラスターが生じている事が分かったが、統計的に無視できるようなものかも知れず、今後同様の計算を行い更に検証する必要がある。有機膜基板の温度にエッチング生成物が強く依存し、それが異方性エッチングに重要な条件となっている事が実験的に示されている[2]事からも、生じるラジカルを正確に見極める事は重要であると思われる。

今後、同様の計算を複数行い統計的な誤差を除去する事でこれまでの結果の妥当性を確認する事が重要である。また、今回の計算には熱的なプロセスによって基板から粒子が取れていく事は考慮されていないので、これをシミュレーションに組み込む事もより現実性を高めるために必要である。

[1] Yamada and Hamaguchi, J. Appl. Phys. **96**,6147(2004)[2] H. Nagai, et al., J. Appl. Phys. **94**, 1362 (2003)

低速イオンビームを用いた金の構造形成に対する運動量効果の研究

前田拓也、滝澤敏文、木内正人*、福田武司、吉村智、浜口智志

大阪大学大学院 工学研究科附属 原子分子イオン制御理工学センター プラズマ粒子制御研究部門

*独立行政法人産業技術総合研究所 環境化学技術研究部門 生活環境技術連携研究体

低エネルギーイオンビーム蒸着法は質量分離されたイオンを高真空中に引き出して基板上に堆積させる薄膜形成技術であり、高純度かつ単色のビームを用いて成膜出来る点が特長である。しかし低エネルギーイオンビーム蒸着における薄膜形成プロセスには未解明な点が残されており、薄膜の結晶配向性を決定する機構もその一つである。

本研究では低エネルギーイオンビーム蒸着の薄膜構造形成プロセスにおいて、薄膜の結晶配向性に対するイオン運動量の影響を解明することを目的とした。

照射エネルギーと基板に対する照射角を変化させてAu⁺イオンビームをSi(100)基板上に照射し、薄膜を形成する実験を行った。

- ・ 試料 A：照射エネルギー 100eV, 基板法線に対する照射角の傾き 10°
- ・ 試料 B：照射エネルギー 100eV, 基板法線に対する照射角の傾き 30°
- ・ 試料 C：照射エネルギー 50eV, 基板法線に対する照射角の傾き 10°
- ・ 試料 D：イオンビームを照射しない未処理の Si(100)基板

上記4つの試料を作成し試料をX線回折(2θ法、極点図法、ロッキングカーブ法)で解析した。

ロッキングカーブ法による解析の結果、傾きが小さい試料Aにおいては照射角の影響が不明瞭だったが、照射角の傾き30°の試料BにおいてAu(220)面がイオン照射方向に沿って成長していることを確認した。(図2)

本研究の結果は特定の結晶面がイオン照射方向に沿って成長する可能性を示唆し、イオン運動量の制御が薄膜の構造の制御に繋がることを示した。

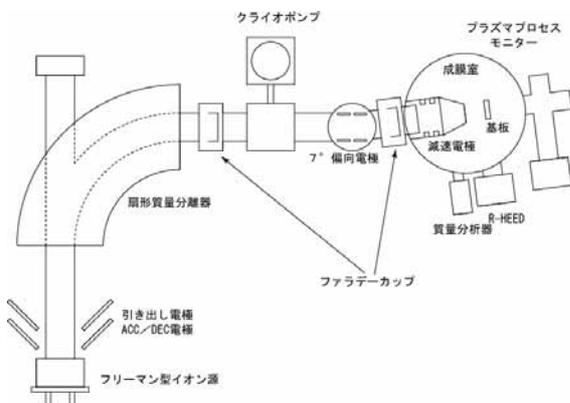


図1. 極低エネルギーイオンビーム蒸着装置

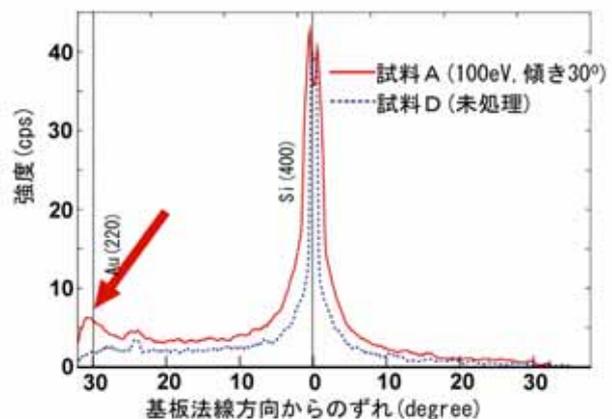


図2. Au(200)面のロッキングカーブ

スパッタ成膜による薄膜の形状および非晶質膜質の数値解析予測

Prediction of the shapes and qualities of the sputter deposition thin films

日本板硝子(株) 1, 阪大院工 2 田口 雅文 1,2, 浜口 智志 2

Nippon Sheet Glass Co. 1, Osaka Univ. 2, Taguchi Masafumi 1, Hamaguchi Satoshi 2

masafumitaguchi@mail.nsg.co.jp

1. 背景

マグネトロンスパッタリング現象を利用したプロセスとして、微細形状の制御や、光学多層薄膜作成の開発が行われている。本研究では、形状や膜質の予測に利用できるように数値計算をこれらに適用した。光学部品である回折格子の表面処理プロセスでは、反射率を上げるため金属膜や誘電体膜をスパッタ成膜することが行われる。このとき、ターゲットを複数箇所に設置すると、成膜によって形状が初期から大きく変化し、初期と異なる光学特性を得られる可能性がある。この際、数値計算で上記の形状を予測することができれば、どのような光学特性が得られるか予測可能になる。

本研究では、表面形状の時間変化について Shock Tracking 法を、上記スパッタ工程に適用し、実験結果を精度よく再現できることを確認した。

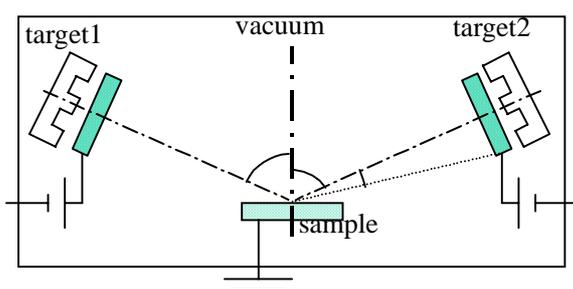


図 1. マグネトロンスパッタ成膜装置概略図

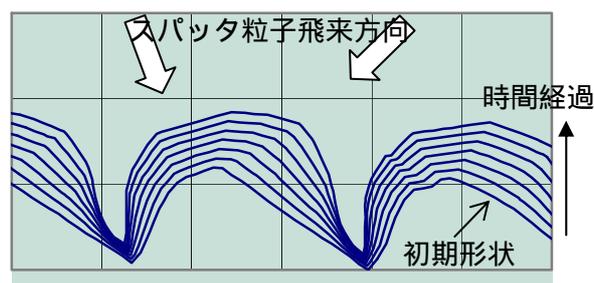


図 2. 形状変化計算結果

一方、反応性スパッタ成膜は、誘電体薄膜の光学多層膜フィルタ作成などに幅広く利用されている。光学多層膜で使用される SiO₂ 膜は、バンドパスフィルター製造プロセスなど高精度な制御が必要な場合、膜質が光学特性に大きな影響を与える。本研究では、MD(分子動力学)法を用いて、反応性スパッタによる SiO₂ 非晶質薄膜を Stillinger-Weber ポテンシャルでモデル化し、エネルギー・入射角の膜質への影響について調べ、また薄膜成膜時、薄膜のアニーリング計算処理方法によって、どのような影響を受けるか調べたので、その結果を報告する。

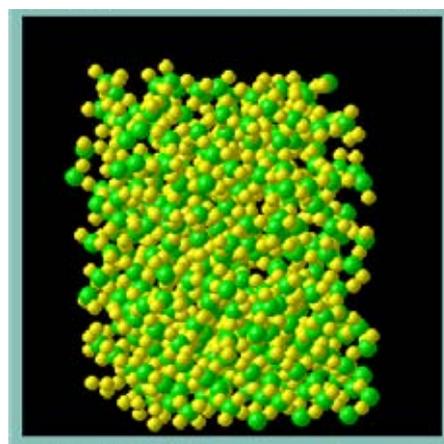


図 3. SiO₂ 成膜 MD 計算結果

SiO₂/SiOC基盤とCF_xビーム間の相互作用による 表面変化、脱離物に関するシミュレーション

大阪大学大学院工学研究科
原子分子イオン制御理工学センター
川瀬智人、辰巳哲也、浜口智志、

近年、集積回路の発展とともにその縮小化が盛んに行われている。それに伴いプロセスの微細化や多層化の進展は従来以上にその速度を増している。我々は、数十ナノメートルの超微細化工がプラズマで安定に行えるために、分子動力学(MD)シミュレーションを用いてプラズマと表面の相互作用や、表面反応を調べる。

本研究では、SiO₂、SiOCHのように酸素の含有率の変化によってエッチングレートがどう変化するか分子動力学シミュレーションを用いて調べる。また照射粒子のC/F比の変化についても同様にシミュレーションを行い、その挙動について考察する。

共有結合における原子間の相互作用ポテンシャルモデルは古典力学に基づいている。このモデルは比較的高いエネルギーの照射(10¹~10³eV)における化学反応を含む量子力学をシミュレートできる。また、複数の元素を含んだ複雑な系でも簡単に拡張することができる。

我々はSi/O/C/F系のモデルを用いて、SiO₂基盤にCF_xを照射するシミュレーションを行う。これらからC/F比によるエッチングイールド、脱離物の変化を解析する。また、基盤のOの含有率を変化させるためにSiOC基盤(原子比Si:O:C=2:3:2)でも同様なシミュレーションを行う。以上の結果からOの含有率の変化によるエッチングイールド、脱離物の変化を解析する。