

先端追跡

[R-169] エピタキシャル成長の原子レベル観察とシミュレーション

分子線エピタキシー (MBE) による成長が原子・分子のレベルでどのように起こっているかを見るのに、走査トンネル顕微鏡 (STM) などが使われている。STM の「その場」観察は、実際には成長を停止し、急冷などの後に行われており、多くの場合、本当の意味での「その場」観察にはなっていない²⁾。これに対して“in vivo” STM 観察では通常の MBE 成長に比べ成長温度は低く、成長速度は遅いが、まさに「その場」観察になっている³⁾。この場合は原子・分子の大きさまで見えていない点の問題である。最近の「原子追跡」(atom tracking) STM は、表面での原子の動きを探針で追って行くもので、原子の表面拡散に対して重要な情報を与えてくれている⁴⁾。

しかし、原子 1 個ずつを追跡しながら成長過程を解析するには、多くの原子を扱うことのできるモンテ・カルロ・シミュレーションは有力である^{5, 6)}。一表面中の原子数も 100×100 から最大 1000×1000 程度が可能になっており、現実的な大きさでのシミュレーションができる。これまでシミュレーションは実験結果を再現するという補助的な役割が多かった。しかし、最近になってシミュレーションによって新たな現象を予想し⁷⁾、その結果が後から実験で確かめられる⁸⁾例が報告されている。シミュレーションは単なる補助手段ではなく、積極的に現象を予想したり、成長の制御にまで使えるようになってきた。

文 献

- 1) Y.-W. Mo, D.E. Savage, B.S. Swartzentruber and M.G. Lagally: *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1020 (1990).
- 2) J. Sudjono, M.D. Johnson, C.W. Snyder, M.B. Elowitz and B.G. Orr: *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2811 (1992).
- 3) B. Voigtländer and A. Zimmer: *Appl. Phys. Lett.* **63**, 3055 (1993).
- 4) B.S. Swartzentruber: *Phys. Rev. Lett.* **76**, 459 (1996).
- 5) S. Clarke, M.R. Wilby and D.D. Vvedensky: *Surf. Sci.* **255**, 91 (1991).
- 6) T. Kawamura: *Prog. Surf. Sci.* **44**, 67 (1993).
- 7) T. Kawamura and M.R. Wilby: *Surf. Sci.* **283**, 360 (1993).
- 8) B. Voigtländer, T. Weber, P. Smilauer and D.E. Wolf: *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2164 (1997).

(山梨大 川村隆明)

[R-170] 非伝導体へのめっきプロセス“ダイレクトプレーティング”の開発とそのメカニズム

非伝導体へのめっきは、1940 年代に、外部電源を用いずに還元剤により触媒活性な表面に金属皮膜を析出させる方法として無電解めっきが見出されたことに始まる。1960 年代になるとプリント配線板の表裏の導体を基板の穴を通じて導通させる目的でのスルーホールめっきとして、穴壁の絶縁物の導電化を図る銅の無電解めっきが適用され、技術開発が行われてきた。しかし近年、還元剤として添加されるホルマリンや浴の安定化のためのキレート剤が環境問題の観点から使用規制が必要になった。このような状況の中で、無電解めっきを用いずに直接電気銅メッキを行ういわゆる“ダイレクトプレーティング”法が 1980 年代半ばに開発され、普及し始めた。この方法では非伝導体表面をパラジウムコロイド、カーボン微粒子、伝導性ポリマーなどで被覆し、その後電解めっきを行う。このダイレクトプレーティングのメカニズムについて、最近パラジウム触媒を用いた方法について幾つかの論文が発表された。

Weng ら¹⁾は実験とシミュレーションを用いてめっきの進行を“stepwise propagation mechanism through the seed cluster”で説明した。すなわち、不導体表面に分散吸着しているパラジウム粒子のクラスターが種核(分散した微小電極)として働き、めっきの水平方向の進行速度を高めるといものである。これに対し Bladon ら²⁾は、電解めっきの前に基板を硫化物溶液に浸漬するとめっき速度を 100 倍以上高めることができるメカニズムとして、基板全面が硫化パラジウムで覆われ伝導性が改善されるためとする“stepwise propagation with continuous conduction”を提出した。しかしこのメカニズムは、伝導性ポリマー上のめっき速度が硫化パラジウム膜上よりはるかに遅いにもかかわらず、ポリマー膜の電気伝導性は後者より 2 桁も大きいことを説明できない。Yang ら³⁾は硫黄が表面で架橋配位子として働き硫化パラジウム上で銅の還元を促進する役割を果たすと考えた。

ダイレクトプレーティングの水平方向の均一な進行とその速度をさらに高めるために、パラジウムコロイドの活性化時に銅イオンを添加する方法が行われている。これは上記のメカニズムでは説明できず、新たなメカニズムの提案が待たれる。

文 献

- 1) D. Weng et al.: *J. Electrochem. Soc.* **142**, 2598 (1995).
 - 2) J.J. Bladon et al.: *J. Electrochem. Soc.* **143**, 1206 (1996).
 - 3) C.H. Yang et al.: *J. Electrochem. Soc.* **143**, 3521 (1996).
- (早大理工総合研 小野幸子)