

# 審査の結果の要旨

論文提出者氏名 梶川 裕矢

現代では、学問分野の細分化と科学者の専門化が進むことにより、科学に関する知識と情報の量が爆発的に増加している。その結果、学問領域全体を把握し、必要に応じて他の学問領域との融合を図ることにより、社会の要請に答えられる科学技術を生み出していくことが困難になりつつある。従って、既存のあるいは将来にわたって蓄積され続けていく膨大な知識と情報を構造化することによって、それらを利用しやすくするとともに科学技術の全体像を理解しやすくすることが重要であると考えられる。本論文は「**Structuring Knowledge in Materials Science: Case Studies in the Polycrystalline Film Deposition Processes** (材料科学における知識の構造化：多結晶薄膜堆積過程を例にとって)」と題し、材料科学の分野における知識と情報の構造化の方法論及び構造化の例、並びに構造化を補助するツールのあり方について述べたものであり、全体で5章より構成されている。

第1章は序章であり、知識と情報の爆発によって個々の科学者と社会全体がどのような危機に直面しているかが紹介され、それを回避するために知識と情報を構造化することの必要性と、本研究で構造化の手法と補助ツールを開発することの意義が述べられている。

第2章は、知識と情報を理解しやすい形に構造化する手法として、システムズアプローチが適切であり、これによって膨大で複雑な知識を単純化することができることと述べられている。システムズアプローチとは、まず初めに物事の因果関係や関連を式や論理でつなげた(複雑な)システムを作成し、次に、その中で重要な因子を抽出してシステムを単純化していく手法である。

第3章は、多結晶薄膜作製を例にとってシステムズアプローチの手法を用いた解析を行い、プロセス条件と薄膜の初期成長、特定面への配向、表面荒れとの関係を明らかにしている。薄膜の初期成長は、これまで様々な素過程を取り込んで解析、説明されてきたが、全ての素過程を考慮しなければならないケースは稀であり、大部分の製膜プロセスにおいては単純な製膜指標を用いることによって整理、理解することができる。製膜指標として重要なものは、アイランドの最大数密度のフラックス依存性、及び拡散長と欠陥距離の関係などである。また、薄膜が特定面へ配向する原因についても、これまで材料種と製膜方法の違いによって様々なモデルが唱えられてきたが、システムズアプローチの手法によって論理的に信頼できるモデルを取捨選択することにより、材料種や製膜方法によらずに特定面への配向を決める因子を明らかにできた。さらに、薄膜の表面荒れを引き起こす機構を2種類に分け、表面形状を分析することによって機構を特定できると述べている。一つは、定常性成長機構であり、基板

表面の異物等を中心に一定の成長速度比を伴って形成される。もう一つは、拡大性成長機構であり、成長と共に、凹凸の拡大速度が速くなる。前者の原因には結晶性、組成等が、後者の原因には、製膜種の濃度勾配等がある。これら3つの現象について解析を行った結果、この分野にシステムズアプローチの手法を適用することが有効であることを明確にした。

第4章は、知識を構造化していくためのツールに関して、一般的に検討されているものの長所と短所を紹介するとともに、それらを上回る機能を有したツールを提案し、そのプロトタイプを作成したことが述べられている。現在、知識を構造化していくためのツールとして自然言語学的情報処理やオントロジーを用いた検索手法などが研究されているが、それらはまだ十分な機能を持つと言えるものではない。特に、要素同士の因果関係が曖昧なまま残されているため情報処理上の大きな問題となっており、そこで、システムズアプローチによって情報の収集と解析を手助けするためのツールを作成中である。現在はプロトタイプの段階であるが、このツールが完成すれば、知識を構造化してその全貌を把握することが可能となり、新しい発見や発明につながると述べている。

第5章は、本論文のまとめと展望である。

以上の研究によって、知識を構造化するためにはシステムズアプローチという手法が有効であるという着想が生まれ、実際に多結晶薄膜の初期成長、特定面への配向、表面荒れを引き起こすプロセス要因を特定することに対して有効であることが示された。また、それらの原因は材料種や製膜方法によらずに共通なものあり、現象を単純化、統一化して理解、把握することが可能であることを示した。この手法は、材料科学の分野のみならず幅広い分野に適用することが可能であると考えられる。さらに、現状の情報処理ツールの問題点を整理し、システムズアプローチの手法によって知識を構造化するための新しいツールについての考え方をまとめ、そのプロトタイプを作成した。これらの結果は、化学システム工学の発展に大きく寄与するものである。よって本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。