

審査の結果の要旨

氏名 モンテサ クリスティン マリ カプリ

金属/セラミックス界面は工業的に様々な分野に応用されており、材料特性を決定づける重要な因子である。特に、金属アルミニウム(Al)/セラミックス界面はパワーエレクトロニクス分野で盛んに用いられており、過酷な環境下で安定して用いることのできる信頼性、耐久性が求められている。界面の信頼性、耐久性の向上には、界面構造を制御する指針を構築し、的確な材料設計を行うことが不可欠であるが、Al/セラミックス界面の界面構造に関しては未だ統一的な理解に乏しく、試行錯誤による界面形成が行われているのが現状である。そこで、本研究では Al/セラミックス界面の界面構造形成メカニズムの解明と界面構造を決定づける因子の抽出を目指して、実験・理論両面からのアプローチを駆使して研究を行った。特に実験では、高分解能透過型電子顕微鏡法(HRTEM)を用いた原子スケールからの界面構造解析、理論計算においては第一原理計算及び逆格子一致計算(CRLP)を行った。本論文は 5 章から構成されている。

第 1 章は緒言であり、これまでの Al/セラミックス界面に関する研究及び実用例について概説し、界面形成における微構造制御及びその解析の必要性と重要性について述べている。また、その中で、本研究の位置づけ、必要性、新規性、独創性などについて記述し、本研究の主目的について述べている。

第 2 章では、液相接合法によって作製した Al/サファイア界面、Al-Si/サファイア界面、Al/AlN 界面、Al-Si/AlN 界面に関して HRTEM による高分解能構造解析と TEM-EDS による組成分析、電子回折による界面方位解析を行った結果について述べている。その結果、今回用いた液相接合条件においては Al とセラミック基板に優先的な結晶方位関係は存在しないことが明らかとなった。また、液相法では界面部にステップ構造が形成されやすいことが明らかとなり、この構造は添加された Si が界面偏析することで大幅に抑制できることが明らかとなった。このような Si 偏析の傾向は第一原理計算による理論解析によっても示されており、本結果は微量な添加元素により界面構造の制御が可能であるこ

と示唆している。また Si はナノメートルサイズで析出する場合も存在し、その際には Si とセラミック基板には優先的な結晶方位関係があることを見出した。

第 3 章では、第 2 章とは異なる界面形成プロセスであるパルスレーザー堆積法により作製した Al/サファイア、Al/AlN、Si/サファイア、Si/AlN 界面に関して HRTEM による系統的な観察を行った結果を述べている。その結果、液相法とは異なり、本手法により作製された界面には優先的な結晶方位関係が存在することが明らかとなった。この結果は、界面形成プロセスに依存して原子レベルの界面構造は大きく変化し、真空堆積法により形成された Al/セラミック界面はエピタキシャルな方位関係を取りやすいことが明らかとなった。このように、異なるプロセスによる同一界面を系統的に調査することにより、界面構造のプロセス依存性を明確に抽出することに成功した。

第 4 章では、今回観察された Al/セラミック界面における優先結晶方位関係を理解するために、逆格子一致法 (CRLP) による系統的な解析を行った。CRLP 法は、Al とセラミック結晶の逆格子をコンピュータ上で再現し、各逆格子点に適切な体積を与えたのち、3 次元的に可能なすべての方位関係における逆格子球の重なり体積を計算し、重なり体積のトータル値によって界面の整合性を評価する手法である。本手法を用いて Al とセラミック結晶の整合性を評価した結果、本研究で観察された優先方位関係はいずれも結晶学的に極めて整合性の高い方位関係であることが明らかとなった。このように整合性が高い界面は構造的に安定な界面であることが予測されることから、プロセス制御により安定界面を形成できる可能性が示唆された。また、一方向からの観察では方位関係的に整合性が低いと予測された界面が、3 次元的に解析することによって高い整合性を有することが初めて明らかとなり、界面方位を 3 次元的に考えるアプローチの重要性が示された。

第 5 章は総括である。

このように本論文は、工業的に重要な Al/セラミック界面に対して実験・理論両面を用いて系統的な解析を行っており、プロセスの重要性、添加物効果の重要性、結晶方位関係の重要性に関して明確に説明することに成功している。また、これらの因子を制御する指針に関しても新たな知見を提案しており、科学的に得られた知見のみに留まることなく実際のデバイス開発への展開も見据えた研究内容として評価できる。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。