2011 年 5 月の随想

名 取 晃 子

電気通信大学名誉教授 ☎ 182-8585 東京都調布市調布ヶ丘 1-5-1

(2011 年 5 月 24 日受付；2011 年 6 月 23 日掲載決定)

Essay of May in 2011

Akiko NATORI

Professor Emeritus, The University of Electro-Communications
Chofu-gaoka, Chofu, Tokyo 182-8585

(Received May 24, 2011 ; Accepted June 23, 2011)

The author writes memories in a long “over-doctoral” period, research subjects from semiconductor physics to surface physics, and thoughts on science and technology in 2011.

KEYWORDS : nuclear disaster, post doctor, surface electromigration, negative donor

1. は じ め に

今年はキュリー夫人ノーベル化学賞受賞 100 周年を記念した「世界化学年」に指定され、多くの事業が展開されている。キュリー夫人に因んだ特集記事の執筆を依頼されたとき、たまたま、キュリー夫人著「ピエル・キュリー伝」¹⁾とエーヴ・キュリー著「キュリー夫人伝」²⁾を読んで感動に浸っていたので、迂闊にもお引き受けしてしまった。

キュリー夫妻は放射性元素 Ra と放射能の研究で、ノーベル化学賞に先立つ 1905 年にノーベル物理学賞を受賞している。日本は今、東日本大震災によって引き起こされた福島第一原子力発電所事故の放射能に苦しめられ、原発事故に対処できる叡智と技術力が問われている。放射性元素の研究に打ち込んだキュリー夫人を記念した年に、皮肉な巡り合わせである。

一方、ポストドク制度に対する多くの問題点が、国内のみならず世界的な広がりを持って指摘されている³⁾。本稿では、私の歩んできた道に沿って、長かったオーバードクター時代、半導体物理学から表面物理学への変遷、科学技術に対する思いを述べさせて頂きたいと思う。少

しでも若い方の参考になれば幸いである。

2. オーバードクター時代

私が博士の学位を取得した 1972 年には、大学の助手ポストは飽和状態に達し公募は少なく、オーバードクター問題が顕在化していた。当時、日本では学位取得者で常勤職を持たない者をオーバードクターと呼び、経済的に支援する制度はなかった。そのような中、同窓の男性博士の多くは、ポストドクとして海外の大学、研究機関に武者修行に出かけて行った。雇用機会均等法もなく、男性と同じように働きたいと願う大卒女子学生の就職は、一般的に厳しかった。十分な自覚も決意もなく博士課程に進んでしまった私は、半ば必然的にオーバードクターの道を歩まざるを得なかった。

多くのオーバードクターと同様、私も非常勤講師として幾つかの大学で教えた。そして、それらの大学では常勤教員の数より非常勤講師の数が多いのに驚かされた。非常勤講師は、講義の時間にしか大学に行かない。これでは、学生の質問にも十分に答えられないし、親身に学生の相談にのることもできない。非常勤講師の制度は、大学にとっては経済的かも知れないが教育的ではないと痛感した。

オーバードクターは、大学や研究所で「客員」という

身分で研究をすることができた。私は、東京大学理学部物理学教室と物性研究所で、客員として好き勝手に研究させていただいた。半導体理論だったので、学術雑誌を読むことができてセミナーに参加することができれば良かった。経済的支援がない代わりに、研究にお金がかからないのが幸いし全くの自由が与えられた。自由の代償として、何を研究すべきか、どのように問題に対処すべきか、真剣に考えねばならなかった。助手公募に選ばれるためには、業績をあげるしか道がないと素直に信じていた。この間お世話になった、植村泰忠先生、上村洗先生、豊沢豊先生に、心から感謝している。narrow-gap 半導体の構造相転移、多谷半導体中のドナーが2個の電子を束縛した D^- イオンの研究では、阪大の川村肇先生、成田信一郎先生の実験グループにも議論していただき、大いに励みになると同時に嬉しかった。

オーバードクター時代は、心の片隅にハングリー精神を抱き世の中の矛盾を感じてはいたが、振り返れば楽しく充実したときだった。

3. 半導体から表面物理へ

9年間のオーバードクター、1年3か月の東京大学理学部物理学助手を経て、電気通信大学電子工学の助手に着任したのは37歳のときだった。赴任先の「半導体工学」研究室には、安永均教授、奥山直樹助手、金山清次技官が在籍しておられ、表面物理学、アモルファスカarbon薄膜、有機半導体薄膜の実験的研究に取り組んでいられた。3名とも酒好き、話好き、山好きで最初は驚かされたが、瞬く間にその生活習慣に馴染んでしまった。研究ではどのテーマにも余り馴染みがなかったが、新しい環境で新たなことを始めたい気持ちだけはあった。実験と理論のコラボレーションという意味で刺激もあり、恵まれていた。

北大で開催された物理学会で、「表面物理」分科に初めて出席した。RHEED, TEM 等略語が多い発表内容の多くはチンプンカンプンで、物理学会初参加の修士時代を懐かしく思い出した。安永先生は、皆が余りやっていない研究をしようと考えられていた。研究室に導入されたばかりの走査型オージェ電子顕微鏡 (SAM) を用いて、半導体表面での金属原子拡散の研究を試みようとしていた。私は、表面拡散の計算機シミュレーションから新たな研究をスタートすることにした。

そのうちに、Si 表面の In 超薄膜パッチの表面拡散の実験で、超薄膜パッチの広がり方が Si 基板の直流通電方向に依存することがわかってきた⁴⁾ (Fig. 1 参照)。さらに、Ag 超薄膜では In 超薄膜とは全く異なる広がり方をすることもわかってきた (Fig. 2 参照)。何故そうな

Fig. 1. Auger line profiles of In overlayers on Si(111) 7×7 obtained intermittently by scanning in a direction parallel to the current⁴⁾. The indicated time denotes the total period of the application of the dc current.

Fig. 2. Time evolution of Auger Peak Height (APH) profile for identical 3.4 ML Ag deposits on Si(111) 7×7 during the application of dc currents of 20, 50, 100 and 200 mA.⁴⁾

るのが、わからない。計算機シミュレーションの出番だ。Si 表面の In 超薄膜と Ag 超薄膜では、薄膜成長モードが異なっている。成長モードの相違は、表面エネルギー、界面エネルギーの相違により生じ、原子間相互作用の違いに起因する。原子位置を格子点上に制限する格子ガスモデルを用い、金属原子に直流通電が及ぼす力と

Fig. 3. Time evolution of the line analysis of the film thickness at a constant time interval for 2ML deposits (a broken line), without dc current force (a) and with dc current force (b).⁴⁾

原子間相互作用を考慮した、時間依存モンテカルロシミュレーションを行った。院生の太田君が「でたー」と叫びながら計算機室から飛び出してきた。Si 表面上の In 超薄膜パッチの直流通電による原子移動（表面エレクトロマイグレーション）の実験結果を、定性的に再現できた瞬間だった（Fig. 3 参照）。Ag 超薄膜パッチの直流通電による異なった挙動も、成長モードの相違により理解することができた（Fig. 4 参照）。シミュレーション結果を検討することで、超薄膜パッチ構造の変化機構、薄膜パッチの広がり速度の決定因子がわかってきて⁴⁾、面白かった。

同じ頃、Si(100) 清浄表面で、ダイマー方向が異なる 1×2 表面再構成ドメインと 2×1 表面再構成ドメインの割合が、Si 基板直流通電方向に依存して変わることが、反射電子顕微鏡 (REM) の実験で明らかにされていた。表面吸着 Si 原子の直流通電によるドリフト流と、 1×2 表面再構成ドメインの拡散係数の異方性を考慮した、BCF (Burton, Cabrera, Frank) 理論を用いて、ドメイン構造変化機構が提案されていた。しかし、劣勢ドメイン幅が何によって決まっているのかは明らかにされていなかった。 1×2 ドメインと 2×1 ドメインはステップによって仕切られていて、ステップ間には反発相互作用が働く。この相互作用をどうやって BCF 理論に取り込めば良いかがわからなかった。ステップ端原子の化学ポテンシャルを通して考慮すれば良いと気付いたときは嬉しかった。早速、Si(100) 微斜面の各ドメインの吸着原子のフラックスを、ステップ間相互作用を考慮した BCF 理論で計算し、ステップ位置の時間変化を連立微分方程式

Fig. 4. Snapshots for a 2ML deposit in a layer mode (a), the former stage (b) and the latter stage (c) for a 1.5 ML deposit in an island mode.⁴⁾ Two bars represent the range of a window of the initial deposition.

の数値解から求めた⁵⁾。Si(100) 微斜面のドメイン構造の時間変化を計算し、劣勢ドメイン幅がステップ間反発相互作用とドリフト流の異方性で決まっていることを明らかにすることができた。一方、Si(111) 清浄表面上のステップ構造も直流通電方向と温度に依存して、規則的ステップ構造か、ステップ束構造に変化することが、REM、走査型電子顕微鏡 (SEM) の実験で明らかにされつつあった⁶⁾。こちらは直流通電方向だけではなく、温度にも依存してステップ構造が何度も変化する手強い問題で、未だ完全な決着には至っていないと思う。

1990 年、量子力学を勉強したいという学生が卒研に現れ、3 年後には博士課程に進学したいと言い出した。一緒に藤永茂著「分子軌道法」⁷⁾の輪講を行い、非制限ハートレーフォック法について学んだ。異方的量子ドットの多電子状態の計算に適用し⁸⁾、藤戸君の学位論文⁹⁾になった。異方的量子ドットは、細長い 1 次元量子ドット、平たい 2 次元量子ドット、球対称の 3 次元量子ドットを対象にでき、多電子状態の次元性による相違を調べることができた。藤戸君がきっかけになり、電子状態計算が研究レポーターに復活した。「量子モンテカルロ法」という方法があることを雑誌で知り、何に

Fig. 5. The binding energies (a thick solid line) of a negative donor for P (a) and Li (b) impurities in Si, as a function of stress-induced valley-splitting, with experimental values (solid circles).¹¹⁾ Calculated results by other authors are also shown by thin lines. The open and solid arrow heads indicate the calculated binding energy at zero stress and in the high stress limit, respectively.

乱数を用いるのか興味を持った。引用されていた、Hammond et al. 著の “Monte Carlo Methods in *Ab Initio* Quantum Chemistry”¹⁰⁾ という本を、早速、学生と一緒に輪講した。時間依存シュレディンガー方程式は、時間を虚数に変えると生成消滅を伴う拡散方程式に帰着する。さらに、波動関数分布に加重をかける「インポートランス・サンプリング」を適用することにより、ドリフト流があるときの拡散方程式に変形される。多数のランダムウォーカーを用いて拡散方程式の数値解を求める量子モンテカルロ法のアルゴリズムは、表面エレクトロマイグレーションで用いた時間依存モンテカルロシミュレーションのアルゴリズムと多くの類似性を持ち、親しみを感じると共に虚数時間を用いる斬新なアイデアに驚かされた。量子モンテカルロ法は、原理的には電子相関効果を厳密に取り扱うことができる。多谷半導体中の D^- イオンの問題に院生の千葉君と共に再トライし、成田先生からの長年の宿題に一定の答えを出すことができた¹¹⁾ (Fig. 5 参照)。

2001 年には研究室に中村淳博士が着任し、密度汎関数第一原理計算が研究レパートリーに加わった。Payne のレビュー¹²⁾ を輪講教材に用い、全体の計算スキームを院生と共に学んだ。計算対象は、電子状態に留まらず応答関数へと進んでいった。スラブ状の試料に対して、電界印加下の密度汎関数第一原理計算を行い、局所誘電率

Fig. 6. (color online). In-plane distribution of the static dielectric constant in the vicinity of an oxygen vacancy for (0001) plane of β -quartz (a) and for (001) plane of tetragonal HfO_2 (b).¹³⁾

の計算を行った。涌井君が博士論文で¹³⁾、酸化膜中の欠陥が局所誘電率に与える影響を調べた。 SiO_2 と HfO_2 結晶中の酸素欠損近傍の局所誘電率の面内分布に、共有結合性かイオン結合性かの相違に起因した違いが表れて興味深かった (Fig. 6 参照)。中村淳准教授の興味はどんどんエスカレートし、学生がわかっていくのがわかるまいがお構いなしに難しい分野へと突進してゆく。遂には、密度汎関数第一原理計算を用いた線形、非線形誘電率の計算に向かい、Resta のレビュー¹⁴⁾ や Vanderbilt の難解な論文¹⁵⁾ を次々に輪講で勉強させられた。しかし、学生時代を思い出しながらの式の導出作業は頭の体操にもなり、楽しかった。

多くの学生と共に学び、悩み、考えた 29 年間の教員生活は、長いようで過ぎてみれば意外に短かった。

4. 科学技術について思うこと

ピエル・キュリーはノーベル物理学賞受賞記念講演で、「人間は自然の秘密を知って善用することができるほど成熟しているのだろうか」と、疑問を投げかけている¹⁾。福島第一原発事故では、原子核反応を完全に制御できるほどには成熟していないことを痛感させられた。事故に対する東京電力、政府の対応を見て不安とどこかしさを感じると同時に、適切に対処できる人材にも技術にも乏しいことも痛感させられた。このような時こそ、専門家によるわかりやすい科学的な説明と的確な予

測と事故処理対策の提案が必要であることも痛感させられた。日本の技術分野は、産業に直結した狭い分野に余りにも偏り過ぎているように思える。産業に直結してなくても、放射性物質除去のような、何かのときに必要な基本技術はたくさん有る。原発事故に対処するためには、基礎から実学に至る幅広い技術と見識が必要とされている。科学技術立国を標榜するならば、基礎から応用に至る幅広い分野の研究と人材育成が欠かせない。また、科学技術に対して国民の幅広い理解と支持を得るためには、専門家が説明責任を果たすことも欠かせない。

一方、Nature³⁾によれば、ポストドク数の増加により、現在はアカデミック・ポジションに就くポストドクは一部に限られている。しかし、ポストドクの専門分野と社会のニーズがマッチしていないため、企業への就職も難しいという。日本のポストドクの状況¹⁶⁾にも、あてはまると思われる。他方、日本経済の復興には科学技術は欠かせない。それを担うのは理系の人材である。理系ポストドクは本来、有用な人材である。一方では、理系離れが進んでいる。理系の仕事の多くが、努力の割には経済的に恵まれないからだろう。このような状況で理系ポストドクが生かされないのは、社会的な損失である。社会を変えるのは難しい。ならば、自分を変えてみたらどうだろうか。狭い専門領域に捉われず、今迄の経験を生かしてもっと幅広い領域に興味を持って学んでみよう。そうすれば視野も広がり、社会のニーズとも合致した、自分を生かす職場を見出すことができるのではないだろうか。

5. む す び

定年前に購入した、「物理学天才列伝」¹⁷⁾上下巻を興味深く読んだ。天才達の仕事を通して改めて物理学を概観することができて、物理学は面白いと思った。私の研究生活を振り返れば、物理学のすそ野を気ままに散策して雲間に現れる峰々の姿を楽しむことができたかと思う。

お付き合い頂いた多くの方々に心より感謝したい。

日本は今、戦後最大の難局に直面している。閉塞感を破って活力ある社会に変えるためには、一人ひとりが力を発揮することができなければならない。若い方々の存分な活躍を祈りつつ、筆をおきたい。

文 献

- 1) マリー・キュリー (渡辺 慧訳): “ピエル・キュリー伝” (白水社, 1959).
- 2) エーヴ・キュリー (河野万里子訳): “キュリー夫人伝” (白水社, 2006).
- 3) Nature editorial: Nature **472**, 259 (2011).
- 4) H. Yasunaga and A. Natori: Surf. Sci. Rep. **15**, 205 (1992).
- 5) A. Natori, H. Fujimura and H. Yasunaga: Jpn. J. Appl. Phys. **31**, 1164 (1992).
- 6) K. Yagi, H. Minoda and M. Gegawa: Surf. Sci. Rep. **43**, 45 (2001).
- 7) 藤永 茂: “分子軌道法” (岩波書店, 1980).
- 8) M. Fujito, A. Natori and H. Yasunaga: Phys. Rev. B **53**, 9952 (1996).
- 9) 藤戸正道: 電気通信大学電気通信学研究科博士論文 (1996).
- 10) B.L. Hammond, J.W.A. Lester and P.J. Reynolds: “Monte Carlo Methods in *Ab Initio* Quantum Chemistry” (World Scientific, Singapore, 1994).
- 11) T. Chiba, J. Nakamura and A. Natori: Phys. Rev. **82**, 195201 (2010).
- 12) M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan, T.A. Arias and J.D. Joannopoulos: Rev. Mod. Phys. **64**, 1045 (1992).
- 13) 涌井貞一: 電気通信大学大学院電気通信学研究科博士論文 (2010).
- 14) R. Resta: Rev. Mod. Phys. **66**, 899 (1994).
- 15) R.D. King-Smith and D. Vanderbilt: Phys. Rev. B **47**, 1651 (1993).
- 16) シリーズ「“ポストドク”問題」その1～その21: 日本物理学会誌 **62**, 193 (2007) ～**65**, 44 (2010).
- 17) ウイリアム・H・クロッパ (水谷 淳訳): “物理学天才列伝” 上下巻 (講談社, 2009).