



アラカルト

若手研究者・技術者へのメッセージ-20

計算尺とコンピューター

Slide Rule and Computer

吉田豊信

Toyonobu Yoshida

(独) 物質・材料研究機構 フェロー

東京大学 名誉教授

日本学術会議 会員



1 はじめに

私が大学に入学したのは45年ほど前になるが、当時入学した理科系の学生はみな計算尺を買わされ、ケースに入れ持ち歩いていた。長さ300mm、幅50mmの立派な計算尺で、使いこなせれば、ほぼあらゆる関数計算が瞬時に行われ、数値を読み取れる便利な道具であったように思う。この、思うというのは、実は、その高度な使い方を誰からも教えてもらった記憶がないからであり、講義中に使用した記憶も殆どない。理由は、大学紛争に火が着きかけたころ入学したので、入学してしばらくすると講義をボイコットしたクラス討論が主となり、その後夏休み明けからしばらくして1年近い全学ストに突入したからである。(記録によれば7ヶ月のようだが、私の中では約1年が実感である。) その間、何をしていたか記憶は定かではないが、先日NHKで偶々映し出されていた所謂安田講堂攻防戦の正にその実況中継を下宿のTVで呆然として見ていたことは色々な場面で想いだす。しかし、最も強烈に覚えているのはその半年後の夏の暑い夜、偶々訪ねてきた友人とエアコンの無い我が下宿でウイスキーを飲みながらTVに見入っていた情景である。丁度、アポロの月面着陸の実況中継が予定されていた日で、夜中から今か今かと待ち続け、朝方、宇宙飛行士が月面を飛び跳ねている様子が映し出され、その感動とともに、何故か何度も乾杯をした。明らかに世界が変わりつつある事を実感した。ただ、宇宙開発の開始というよりは達成との印象が強く、今以て宇宙開発に興味を抱く学生が多い事を些か不思議に思う。iPS細胞作製成功のニュースで受けた感覚とは明らかに違っていた。

スト解除後、混乱状態の中で開始された講義で覚えているのは、理系では、何故か常に極限や無限ばかりを扱う数学、剛体の力学を例としたHamiltonian中心の物理、ムーアの物理化学と分類学のような有機化学ぐらいであり、それほどの印象はあまり無い。しかし、文系の講義では英語とドイツ語

が強烈であった。特に、英語はJoyceのかなり厚いペーパーバックを使い、にもかかわらず、毎講義では1~2行しか取り上げず、その社会背景、歴史を90分間展開すると言ったものであり、他の一つはShakespeareの原文によるベニスの商人やテンペストで、英語の古文を学んだ。興味を持たたか否かは別として、これが大学の講義かと妙に納得した記憶がある。他方、ドイツ語では発音や冠詞変化などの導入講義と、訳本でさえチンプンカンプンなのに原本では辞書の引き方訓練用としか思えないカフカの短編を使った講義の2コマで、今思うと学生への反撃?であった可能性もある。要するに、駒場では、私には所謂「教育」を受けた実感があまりない。

その後、留年も考えたが、何故か単位数も進級下限をギリギリ満たし親戚の勧めもあって冶金学科に進学した。そこでの教育は、後に教官としてカリキュラムを検討をするようになって初めてわかった事ではあるが、紛争前には2年半をかけて実施されていた講義や実験内容を数割削減し、ほぼ1年余で卒論研究も含め実施されたものであったようである。それでも、幾つかの学科をグループとした数値計算に関する新たな講義が開始され、ドリルのようなFORTRAN IVの自習用冊子を皆が持ち歩き始めたシーンが目に見え、この不思議な演算のための言語の意味を理解するまでにはしばらくの時間を要したが、何か新しい時代に入って行くような感じを受けた。これをB.C.を紀元前では無く Before Computerとして、A.C.をAfter Computerの略とすれば、A.C.時代への突入である。私の故郷近くの敦賀の原子力発電所で1号機の営業運転が開始されたのもこの頃である。設計に一部計算機の使用もあったとは思いますが、明らかに、主として計算尺で生まれたB.C.原子炉である。余談だが、原子炉の主要基礎を成したエンリコ・フェルミは、計算尺の達人であったそうである。

事の尽に、大学院修士時代(1972~1974)での生活を振り返ってみる。紛争の影響が尾をひいていたからか、あまり出席せずにレポート提出で単位が取れる講義が殆どで、学部生

活の反動からか修士論文研究テーマに関する論文を每日一編必ず下宿で読み、大学では装置の作製・改良と実験を中心とした生活を日課としていたように思う。そのころ、関数計算用・電子計算尺と宣伝された現在の小型電卓のプロトタイプが10万円程度で市販され、研究室で購入しその便利さに魅せられ個人的にも購入した。計算精度は計算尺の能力をはるかに超え、特に最高64ステップのプログラムを書き込むことが可能で、世界が変わり始めていることを実感した。

要するに、学部から修士時代は、ある種の混沌から秩序状態への移行期に身を置き、科学技術分野では計算尺からコンピュータへの移行期、即ち、B.C.からA.C.への過渡期に身を置いた事になる。かといって、計算尺の凄さを体験した訳でもなく、混沌の中でもがいた訳でもない。大局的に見れば、流れに身を任せたととも言えるが、悪く言えば根無し草、良く言えば何事にも偏見無く挑戦出来る世代、世に言う団塊の世代の一人である。言葉を変えて言えば、われわれ世代は、それ以前、あるいは以降の世代に比べ、混沌とした大学の混乱期中であまりまともな学部教育を受けず、アナログ時代からデジタル時代に変化するその揺籃期かつ高度経済成長の終焉期に学生時代を過ごしたことになり、団塊世代の種々の特

徴はまさにこの時代背景から生まれている気がする。両者を体得した凄いやつもいれば、不十分な教育のおかげで？自我流をつらぬかざるを得なかった者もいる。さて私は？

2 我が研究履歴

Table.1は大学院時代から職員をへて昨年退職するまでに私が関わった研究テーマを分類した表である。大別すれば、(1) 熱プラズマプロセッシングによる超微粒子作製と薄膜・コーティングへの展開 (左側5列) と、(2) 低圧プラズマプロセッシングによる薄膜堆積 (右側3列) とに分けられる。この表に研究室で苦楽を共にした教職員と毎年10人程度の大学院生やポスドク、5~6人の卒論生を重ねれば、より詳細が見えるが紙面の都合上割愛し、ここでは本誌の読者層に鑑み、(1)について特に超高温蒸気の凝縮過程の観点から紹介させて頂く事とする。

2.1 超高温蒸気の凝縮過程の学術的背景

物質を蒸発させ得られる気体を蒸気と呼び、この蒸気を基板等に付着させることを蒸着と呼ぶ。さて、高温蒸気を何ら

Table1 Chronology of the Research Topics

Year	Appointment	TPCVD(UFP)	TPCVD(film)	TPPVD(UFP)	TPPVD(film)	Spraying	Sputtering	LPCVT&Basic	LPCCVD
1972	M1			Fe(UFP)					
1973									
1974	D1(Int.Round)								
1975									
1976				TiN(UFP)					
1977	Res.Associate								
1978		TiN(UFP)		Nb-Al(UFP)					
1979				Nb-Si(UFP)					
1980		Si ₃ N ₄ (UFP)						B-H ₂	
1981				V-Al(UFP)				Si-N ₂	Basic
1982	Lecturer	SiC(UFP)		V-Si(UFP)				B-H ₂ -N ₂	
1983							Ag-Cu		
1984	Ass. Professor		Diamond				Ag-Si		
1985						Ti	BN		
1986									B ₂ H ₆ -N ₂ -H ₂
1987					YBCO(Film)	Al ₂ O ₃			
1988		SiC+Si ₃ N ₄				ZrO ₂			
1989	Professor		SiC			Simulation	cBN		
1990			BN			SOFC			
1991			Si ₃ N ₄						
1992				C60					
1993									cBN
1994									
1995									
1996									
1997									
1998					SiC (Film)				
1999			Si(Film)			Simulation			
2000						In situ Measure.			Dia.
2001						TBC			
2002									
2003					TBC				
2004									
2005									
2006									
2007					sensor	porous coat.			
2008									
2009				LiB					
2010									
2011									
2012									
2013	Retire								

か的手段で冷却すると、ある条件が満たされれば、その過程において蒸気は凝縮を開始するという事実があり、多様な自然現象と対応する。これらのうち、空間中での凝縮開始は均質核生成論で、また物体表面での凝縮開始は不均質核生成論で表記される。但し、机上で表記はされるが、事実との対比において必要とされるパラメータに関しては、その如何わしさ・不自然さに疑念を持つ人も多いのではないかと想像する。「超高温蒸気の凝縮過程」は正に学術的には核生成論との対応である。しかし、私の研究歴に当てはめると、当初プラズマは超高温蒸気生成のための道具であったが、高度な凝縮過程制御にはプラズマの制御が前提となる為、プラズマ発生・制御も研究対象とせざるを得ず、結果として核生成論は凝縮過程の大枠を理解し、より高度な制御法を展開するために導入したというのが実情である。

さて、1万K程度のプラズマフレーム中に気体、液体、固体を吹き込んで超高温蒸気を生成させるには、気体に関しては容易であるが、液体や固体に関しては当然ながら完全に蒸発させる必要がある。プラズマ内での滞留時間が無限であれば如何なるサイズの液体や固体の蒸発も可能であるが、有限の滞留時間での蒸発には粒子サイズの上限が存在する。この蒸発能はプラズマ組成にも依存するが、大気圧フレーム内での滞留時間が1msでは数 μm 、10msでは数10 μm が目安であり、投入量が多ければ条件はより厳しくなる。何れにしろ、条件が適当であれば超高温蒸気の生成に問題はないが、適用目的によっては経済的側面から制約される事が多々ある事を認めざるを得ない。

2.2 ナノ粒子(超微粒子)作製からエビ膜堆積への展開

雰囲気へ噴き出されたプラズマフレームの外周部では当然ながら温度勾配が存在し、均質核生成及び残存蒸気の吸収による成長とその後の衝突合体プロセスにより10～100nm程度の粒子が生成する。この手法による合金や化合物のナノ粒子作製の解説を“鉄と鋼 68 (1982) 1498-1502”に書かせて頂いたのは30年も前になるが、製造コストが使用目的に見合う事が困難な場合が多く、一部を除いて産業的に意味ある程度までには発展してはいない。

他方、プラズマプロセスで作製されるナノ粒子は、生成過程では高温であるため、この粒子を高温のまま適度な温度基板に積層させると焼結作用を伴って多孔質の膜を堆積する事が可能である。当然ながら成長し過ぎた大きな粒子の混入は膜質劣化につながるため、フレームの高速化と安定化を計りフレーム-基板界面のみでの粒子成長を意図し、ある程度の減圧環境で堆積することが望ましい。例えばガスセンサーを目的としたナノ粒子積層膜では多孔性、膜厚、電極配置等をプラズマ条件によって最適化する事により、法規制ホルムアルデ

ヒド濃度以下のその場検出を可能とすることも可能である。

2.3 クラスタ堆積とクラスタ検出への道

これらの実験事実からも、ナノ粒子の成長に至る前段階、即ち、クラスタ生成域が存在する事は明白であるが、空間内に存在するクラスタを直接検出する試みは放射光によるその場計測の報告が一件あるのみで他の手法による直接的その場計測はごく最近まで成されてこなかった。我々は、傍証的事実によってある程度証明されたものと確信していたが、近年、種々のレベルでのクラスタ論議が多様な分野で個々に成されるようになり、事の重要性をより強くアピールしておく必要を感じるようになった。理由の一つに「訳の分からない事にはクラスタを絡ませる。」「クラスタが挙げられたら気をつけろ。」と、40年も以前から言われて来た歴史がある。

2.3.1 数値シミュレーション

そこでまず連続体モデルからの知見を得るため、境界層内での核生成成長の数値計算を検討し、動力学的な衝突支配のモデルにより、境界層内でサイズ分布を有するクラスタ生成の表記を可能とした。ただ、2000年当時の計算機能力ではサイズの原子数が数十個程度までのクラスタ生成の表記が収束限界であった。そのため、濃度の高い状態での結果は求められなかったが、プロセスとの関連を明示するため、熱泳動項の影響を調べた結果、3000 K/mmにも及ぶ温度勾配下では、クラスタの堆積効率は平均的には2倍、局所的には約10倍程度向上する可能性のある事が示され、実験結果との傾向の一致をみた。

極最近、粒子間のポテンシャルのみを仮定したMDシミュレーションにより核生成表記が可能か否かを検討した。先ず、ある空間に適当な数のSi粒子を入れ温度を上げ、粒子の速度分布がMB分布になって居ることを確認した後、空間温度を下げていった場合に何が起きるかを調べた。明らかに均質核生成によるクラスタ成長が確認され、このクラスタの内部状態も温度の関数として表記可能となった。また、これらのクラスタをSi表面と接触させた場合の変形挙動も興味ある挙動を示し、実験事実との対応も検討した。

2.3.2 X線小角散乱によるその場計測

ある空間内の数nm以下の粒子の存在を明確にするには、レーザよりX線の散乱がより直接的と考え、境界層内へのX線平行入射によるその場計測を計画した。実験室でのその場小角散乱計測に自信があった訳ではないが、導入当初の予備実験での散乱実験で境界層内に何らかの散乱体が存在する事は確認し得ていたため、ある程度の期待はしていたが測定は

困難を極めた。報告としては、前記放射光を利用したスズ生成の小角散乱その場計測例が1件あるのみだったので、X線の強度が低すぎるのかクラスターの数密度が小さすぎるのか種々の原因を考えたが、結果的には共同研究者の2D高感度イメージセンサーの導入によりX線小角散乱ピークを観測し得た。解析の結果、数ナノメートルの散乱体が確かに境界層内に分布をもって存在し、粒子表面の剛柔性によってエピタキシャル成長との定性的対応も齟齬無く説明可能であることを確認した。

高温クラスター堆積の利点は、クラスターが基板に付着し、接触固定化される際に吐き出されるエネルギーをクラスター内部で自己吸収可能であるため、原理的に原子・分子での堆積よりも付着確率が高いことである。また、このクラスターが基板上で二次元エピ核として有効に作用する場合には高速エピ堆積に寄与する。極最近、MDシミュレーションによってこのような主張がより具体的に示され、実際にSiの大面積高速エピへと展開しつつある。実に、これに近い提案から実測まで15年余を要したが、ある意味での満足感はある。これらの研究成果が材料工学における多様な気相堆積分野の将来展開に寄与することを願っている。

3 我が研究歴の裏面史

上記は、我が研究歴の本流の表向きの一部の紹介である。しかし、実際には以下に示す裏面史がある。

さて、超微粒子の研究を修士から始めたのは1970年当時のある雑誌に超微粒子の特集が組まれており、その種々の形態に興味をそそられた事が第一であるが、評価の殆どは電子顕微鏡写真の形態分類が主で、理論的に予想される物性の実験的評価は稀であった。理由は、当時採用されていたガス中蒸発法という作製法では数十mgの試料作製が限界で、粉末のX線評価でさえ困難な状況にあったからである。そこで、高周波プラズマを適用すれば少なくともグラム単位の量を得ることができる可能性があり、未知の分野を切り開けると確信した。調査の結果、塩化ガスを原料とするTiO₂やSiO₂の超微粒子プラズマ合成の報告はあったが、当時の冶金学科ではガスを原料とするプロセスは想定外であり、自ずと粉末を原料とするプロセスを考えた。これが、博士論文研究の主テーマである。当時、本手法は世界的にも例がなく、博士1年の秋、ピレネー山中で開かれた国際円卓会議に出席し、修士論文研究を基にした鉄の超微粒子作製について発表し、熱プラズマの高名な研究者からも高く評価された。理由は、彼らの多くが機械工学に属した熱移動の専門家であり、後にわかった事であるが、ミサイルやロケットの再突入時のプラズマ-表面相

相互作用を研究していた人達が主であり、丁度その頃から、彼らも材料プロセスへの応用展開を模索していた時期であったからである。言わば、熱プラズマプロセッシングが新領域として展開し始めた頃である。そのため、この会議には、新進気鋭の30代の若手研究者から既に著名であった50歳前後の若手教授陣が主として出席しており、学生であった私を歓待してくれた。出席者の何人かとは今もって付き合いが継続しており、善し悪しは別にして、この会議への参加が私の研究人生の出発点となった。

しかし、博士論文研究に値する純金属の超微粒子作製は容易ではなく、特に、その要件と成る完全密閉容器内での高周波プラズマの発生には新たな電気絶縁や冷却法の開発が必要で、ようやく石英細管のコイルに導線を数十本挿入した高周波コイルを作り、希ガス内での蒸発実験ができるまでに2年を要した。その間、実験のみで学位を取るのには夢のまた夢と思い、並行して高周波プラズマ内での鉄粉の溶融・蒸発シミュレーションを開始した。自我流ながら粒子内部の温度分布と溶融と蒸発の二つの界面の移動境界値問題を解く3000ステップ程度のプログラムを組んだ。現在では数秒もかからないかもしれないが、当時の最新鋭機HITAC8700でも1~2時間の計算が必要だったので、毎朝3000枚のパンチングしたカードを専用ケースに入れ大型計算機センターに向かいカードリーダーに読み込ませ、夕方プリントされた結果を取りに行く毎日で、まともな結果が出始めたのは博士3年の春であった。不思議な事に、この計算論文(J. Appl. Phys., 48 (1977) 2252-2260)は現在でも時に引用される。

助手から助教授時代はこのプロセスを実用化すべく、プラズマのシミュレーション、新規プラズマ発生法の開発、プラズマ分光等、を展開するとともに多様な超微粒子作製を精力的に展開した。しかし、研究が進捗し製造量がある程度以上になると、回収時に粉末の飛散が多く、健康上の問題となる可能性が危ぶまれダクト等を完備したが、それでも特殊なマスク使用が必須となり、グローブボックス内での作業が主ならざるを得なかった。そのため、当然ながら研究進展速度も低下せざるを得なかったが、教員としては何よりも学生の将来健康を危惧するようになった。それと前後して、超微粒子のプラズマ焼結実験から通常は焼結しない物質でもプラズマ-表面相互作用により表面のみが瞬時に焼結することを見いだしていた。この事実を連続化すれば膜堆積が可能であり、超微粒子の回収や圧粉整形過程が省け、健康への危惧の念も消滅すると考え、研究テーマの全てを超微粒子関連からコーティング関連に順次移行した。装置的には、超微粒子回収部を基板ホルダーに変更すれば良く、これがクラスター堆積の始まりである。

平成元年教授となり、クラスター堆積による実際に機能

を示すコーティングへの適用をめざし、YBCO超伝導膜、SOFC高温固体燃料電池の一体形成、TBC熱遮蔽コーティング、超高感度半導体センサー、太陽電池用単結晶Si膜、等への展開をはかった。一研究室で展開するには適用分野を広げ過ぎた感もあるが、博士課程の学生は独立して研究展開すべき、とのある意味では「材料の研究は個人から展開すべき」と共通する考え方に基づいているが、他方、研究費の裏付けが有った事も要因の一つである。ただし、最近の傾向では優れたグループ間の共同研究により画期的研究成果が生まれている事も事実であり、研究成果と教育成果の間に齟齬が無ければ望ましい研究形態ではあるが、一般には共同研究は成果優先にならざるを得ない場合が多々あるような気がする。「研究者の能力・成果は博士論文を越えない。」とも言う。何れにしろ、博士課程の学生にとってどちらの研究形態が良いのかは、これらの研究を経験して旅立った学生が、将来にわたって多様な分野で活躍しているか否かにかかっている。人材育成こそ、大学の使命の優先順位第一位である事は世の東西を問わず真理である。

4 おわりに

以上、私の大学入学から退職までを研究歴を通して概観し

てみた。自己評価的には(A)評価は頂けそうだが(S)評価には今一步不足していると自覚している。やはり、己の基礎教育の欠落は決定的で、助手から助教授時代位までは土曜の半ドンを利用した輪講などで学生とともにかなり勉強したつもりではあるが、時に学生から自我流の解釈の間違いの指摘を受け、ある種の快感とともにその限界を認識せざるを得ないことも幾度か経験した。土曜の半ドン復活、大賛成である。

さて、現在、学術会議では学部教育の参照基準なるものを策定しつつある。そこでは基礎重視の視点を貫いている。学ぶべき事の多様性や量を考えれば修士まではこの基礎重視の視点を貫くべき時代にあると感じる。

なお、本稿では、参考文献等は1、2を除き明示しなかったが、最近の各種データベースは完備しており、例えば、私の科学研究費に基づく1986年以降の研究履歴の詳細は下記URIに各研究の成果報告書とともにまとめられている。

<<http://kaken.nii.ac.jp/d/r/00111477.ja.html>>

最後に、高温蒸気に関する私の推薦書を挙げておく。

“The characterization of high-temperature vapors.” Ed. by John L. Margrave. Wiley, 1967

(2014年2月2日受付)