



者

大学の研究者として

小野 倫也*

As a researcher in university

Key Words : Precision Science and Technology, researcher, computational Physics

1. はじめに

私は、平成13年3月に大阪大学大学院工学研究科精密科学専攻の博士後期課程を修了し、その年の4月より工学研究科附属超精密科学研究センターの助手として採用されました。今回、本コラムに投稿の機会をいただきましたので、この場をお借りいたしまして、私の学生時代の研究生生活の思い出と、最近思っていることについて書き綴っていきたくと思います。

2. 学生時代

今から7年前、学部4年次の研究室配属のときに、私は広瀬喜久治教授の担当される計算物理領域を選択しました。当時から精密科学専攻では、COEプロジェクトにおける精密科学の研究を効率よく進めるために、計算グループと実験グループで共同研究を行っています。

精密科学において現象解明の対象となっているのは、原子・電子レベルの挙動です。しかしながら、そのようなレベルの現象の本質を実験のみで明らかにし、理解することは難しいことです。また、理論物理学は、複雑な自然現象を理解するのに問題を極端に単純化するために、その現象に潜む本質的な部分を見落としてしまうことがあります。そこで、理論と実験の橋渡しの存在として、第一原理分子動力学シミュレーションによって理論と実験の対応をつけ、現象の本質を理解しようという研究分野が注目されています。広瀬研究室は、COEプロジェクトの中で、第一原理分子動力学シミュレーションを駆

使して原子・分子レベルの現象を解析・予測する役割を担っています。

量子力学を用いたこの研究分野では、密度汎関数理論を考案したW.Kohnや第一原理分子動力学シミュレーションソフト「Gaussian」を開発したJ.A.Popleが98年のノーベル化学賞を受賞するなど、近年脚光を浴びています。この第一原理分子動力学法は、量子力学が生まれた当時から存在していましたが、膨大な計算量を必要とするため、当時のコンピューターでは実行不可能でありました。そのため、これを簡略化する様々な方法が提案されてきました。これらの方法は、計算を簡略化するために実験から得られたパラメーターを用いるため、経験的手法と呼ばれています。これに対し第一原理計算法とは、いっさいの経験的パラメーターを用いずに膨大な計算を行うものであり、コンピューターの進歩とともに実現可能になりつつあります。第一原理電子状態計算の実現に伴い、従来までの経験的手法の不具合も報告されるようになり、原子・電子レベルの高精度な解析には、第一原理分子動力学法が不可欠であることが明らかになってきました。現在の第一原理分子動力学法に求められていることは、実際の実験環境により近いモデルを用いて、高精度かつ高速にシミュレーションを行うことができるアルゴリズムを開発することです。広瀬教授は、「実空間差分法」という計算に着目され、この方法を用いた新しい第一原理分子動力学計算手法を開発する研究テーマを私に与えてくださいました。もちろん、この計算手法は、第一原理分子動力学シミュレーションの分野ではほとんど使われていなかった計算手法でしたので、それから5年間、実空間差分法の理論の構築、プログラムの開発、実用試験を行いました。その結果、従来の計算手法では厳密な計算が困難であった表面モデルの計算や、表面垂直方向に電界がかかったモデルの計算が可能になりました。図1の例は、リチウム(001)表面から1個のリチウム吸着原子が電界蒸発する現象をシミュレートしたものです。この計算手法が確



*Tomoya ONO
1974年12月生
大阪大学大学院工学研究科精密科学
専攻博士後期課程修了
現在、大阪大学大学院工学研究科附
属超精密科学研究センター、助手、
工学博士、精密科学・計算物理
TEL 06-6879-7290
FAX “
E-Mail ono@upst.eng.osaka-u.
ac.jp

立し、プログラムが完成したのは私が大学院博士後期課程2年のときでした。この計算手法の開発に、最初から最後まで参加できたことも幸せに思います。

大学院生時代は、学会に参加したときに、他の大学や研究所の先生に自分の研究を知ってもらったりすると非常に嬉しく思いました。また、自分が投稿した論文が学会誌に掲載され、他の研究者からプリント送付の依頼が来たり、他の論文に引用されたりしたときに、非常に感激したことは忘れられません。

現在は、私が開発した新アルゴリズムを、各種加工現象を始めとする様々な固体表面現象や化学反応、ナノストラクチャーの機能予測に適用することにより、未知の表面現象の解明と応用技術の開発に貢献できることを目指して、研究を進めています。

3. 助手に採用されて

平成14年に、超精密科学研究センターの助手として採用していただきました。それと同時に、精密科学専攻・広瀬研究室から、超精密科学研究センター・遠藤研究室に移りました。超精密科学研究センターは、製造プロセスに利用する物理・化学現象を原子・電子論的立場から深く思考し、それを極限まで利用する「原子論的生産技術」の開発を目的とセンターで、ちょうど私が採用された年に開設されました。当然のことですが、それまでは自分の研究のことだけを考えていればよかったですのですが、教官という立場では、研究室で行われている他の研究にも積極的に参加していく必要があります。また、指導する学生の数が大学院生の時と比べると増えます。さらに私の場合、新設されたセンターに着任したこと、計算機シミュレーションのテーマ中心の広瀬研究室から実

験系のテーマが大半を占める遠藤研究室に移ったこともあって最初は戸惑いもありました。しかし、最近では研究会などを通じて、自分の研究に対する視野の広がりを感じられるようになりました。

大学で研究する利点は、多くの学生と一緒に仕事ができる点です。成果が出たときには、共に喜びを分かち合うことが出来ます。また、学部4年に入って来た学生が、大学院に進学すると我々と研究の議論が出来るように成長していき、そして卒業して社会に出て行く様子を見ているとうれしく思い、教育の醍醐味をほんの少し味わえるようになった気がします。

私が、助手として勤めて2年が経とうとしています。超精密科学研究センターは、基礎科学や先端技術の研究開発から要請される、既存の生産技術では到底作り得ない“物”を作製するために、他大学や他研究機関との連携・協力を積極的に進め、大学の研究成果をいち早く社会に還元する役割を期待されています。私自身研究者としてはまだまだ未熟ですが、期待に応えられる働きをしたいと思っています。

4. おわりに

以上、非常にまとまりの悪い文章ですが、私の学生時代の思い出と最近思っていることについて述べていただきました。最後になりましたが、学部4年の時からご指導・ご鞭撻いただいている大学院工学研究科・精密科学専攻の広瀬喜久治教授をはじめ、精密科学専攻、超精密科学研究センターの諸先生方にご場をお借りして御礼申し上げます。また、本コラムへの投稿を勧めてくださった大阪大学大学院工学研究科・精密科学専攻の芳井熊安教授に感謝いたします。

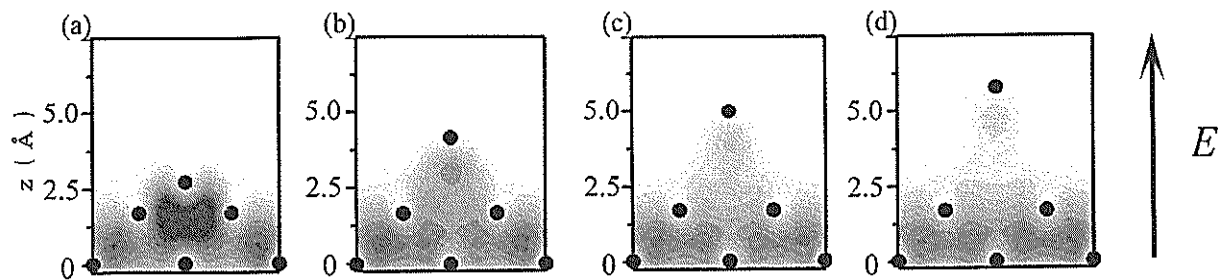


図1 実空間差分法に基づく第一原理分子動力学シミュレーションを用いて、リチウム(001)表面から1個のリチウム吸着原子が電界蒸発する現象をシミュレートした例。図はリチウム(110)断面における価電子の電荷密度分布を示したものである。(a)初期状態 (b)30fs後 (c)38fs後 (d)46fs後 (1fsは 10^{-15} 秒) 黒丸はリチウム原子、色の濃い部分は電荷密度分布が高い所である。電界の効果により吸着していたリチウム原子は価電子を失い、1個の陽イオンとして蒸発していく様子が分かる。