

アモルファス半導体の構造研究： 最近の進展

ブダペスト工科大学理論物理学科 Sandor Kugler
訳：岐阜大学工学部 嶋川晃一

§1 はじめに

凝縮材料の物理的、化学的性質を理解するためにその構造を知ることが最も重要である。アモルファス半導体が注目を浴びて20年以上、構造に関する多くの実験、理論が主題としてとり上げられてきた理由がここにある¹⁾。結晶の場合、構造決定というのは単位胞における原子の配列がわかれば、全体構造はその周期的な積み重ねで理解される。そのような周期性がない非結晶物質では、結晶で可能であるような回折実験を通した解析が通用しない。結晶学で成功したような構造を決める絶対的手法はないのである。

本解説では、共有結合するアモルファス半導体のうち、構造研究が盛んに行われてきたカーボン(a-C)、シリコン(a-Si)やゲルマニウム(a-Ge)における研究進展の様子、そして最新の研究状況を紹介したい。

カーボン原子はよく知られるように sp^3 (4 配位)、 sp^2 (3 配位) そして sp (2 配位) の結合形態をとることができる。 sp^3 結合の周期的積み重ねであるダイヤモンド結晶は 5.5 eV のバンドギャップをもつ絶縁体であり、 sp^2 結合のグラファイト結晶(層状)にはバンドギャップが存在せず、金属的性質をもつ。これに対して a-C はすべての結合形態をとることができ、構造はその作製方法とも絡んで大変複雑となるが、その基本構造は sp^2 と sp^3 の比によって決まるようである。a-Ge や a-Si はもっと単純でほぼ 4 配位の sp^3 から構成され、構造を考える上では 3 配位のダングリリング結合や 5 配位のフローティング結合の存在はあまり重要視されていない。これら a-Ge や a-Si は a-C に比べて

sp^3 以外の結合形態が含まれない“単純系”とみなされたせい、構造研究そのものは a-C に比べるとそれほど多くない。

§2 実験研究の概観

アモルファス半導体構造に関する実験は主として X 線、電子線、中性子線の回折研究によって進められてきた。このうち中性子を使った回折実験がアモルファス構造に迫る最も重要な手段である。これらの測定はそれぞれの手段によってある限られた領域 Q における構造因子 $S(Q)$ を与えてくれる。 $S(Q)$ のフーリエ変換によって原子の動径分布関数(radial distribution function; RDF)が求まる。ただし、RDF は実際の 3 次元空間の原子配列を 1 次元にしか表現できない(距離の大きさのみで方向の情報を含まないからである)。以下に a-C, a-Si, a-Ge において行われた回折実験結果のいくつかを紹介しよう。

アモルファス物質における、最初の有名な構造研究は a-C を用いた電子線回折実験で、日本のグループによって行われている²⁾。彼らは実験データをもとにして a-C がグラファイト状(sp^2)とダイヤモンド状(sp^3)の領域がランダムに分布する“微結晶”モデルを提案した。a-C における最初の中性子線回折実験は Mildner と Carpenter³⁾ によって行われ、約 5% の sp^3 構造が含まれていることを明らかにした。Li と Lannin⁴⁾ によるスパッタ法で作製した a-C の中性子線回折の結果はいくつかの理論で予測される RDF と一致しない。ダイヤモンド状カーボンを目指す vacuum-arc 法ではほぼ 100% の sp^3 構造から構成されるこ

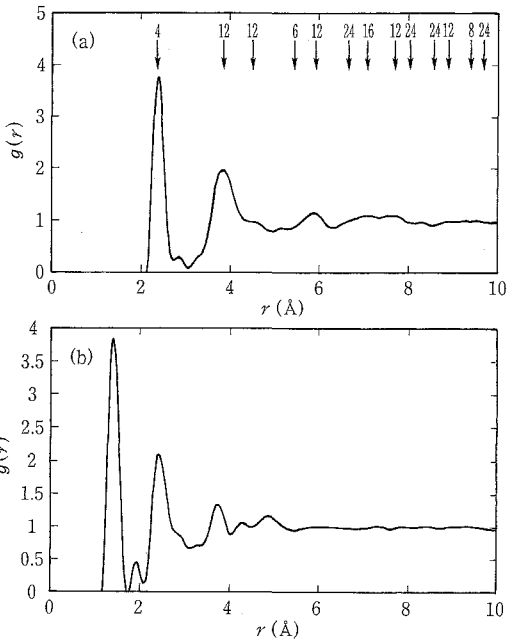
とが中性子線回折の実験から確かめられている⁵⁾。アーク放電で作製した a-C において、グルノーブルの D4 line を用いて、室温から低温の広い範囲で中性子線回折の実験が行われている。このサンプルはほとんど 100% の sp^2 からなるグラファイト構造であることがわかっている⁶⁾。最近ラザフォード研究所では、 sp^3 系 a-C で $S(Q)$ が $0-25 \text{ \AA}^{-1}$ の広いレンジで得られている⁷⁾。

a-Si の構造研究の初期では、a-Ge における中性子線回折から得られる RDF を⁸⁾ Si の結合長でスケールし直して議論されたことがある。その後、電子線回折実験が a-Si について行われ、その後ようやく中性子線回折の実験、ならびに理論構造との比較が行われた⁹⁻¹⁴⁾。本稿では特に a-Si と a-C の構造を中心にして議論したい。最初に a-Si における中性子線回折の実験から得られた RDF を第 1 図 (a) に示す。矢印は c-Si が示すべき RDF での原子位置であり、4, 12 などの数値はその位置での原子数である。RDF の 1 番目の

ピークと 2 番目のピークの位置は対応する結晶のそれと同じであるが、ピーク幅はひろがっている。3 番目のピークは消失するが、“肩”のような構造は残っている。第 1 番目のピークの幅より、結合の長さは結晶のそれと比較して 1% 程度ゆらいであり、2 番目のピーク幅は結合角が 10% 程度ゆらいでいることがわかっている。3 番目にピークが現れないのは 2 面角 (dihedral angle) がある特別な値を持っていないこと、すなわち中(長)距離秩序がないことを示す。これらの知識は常識として定着している。次に、アーク放電蒸着法で作製した a-C の中性子線回折から求めた RDF を第 1 図 (b) に示す。a-C は先にも述べたように a-Si と異なり、対応する結晶構造がグラファイトからダイヤモンドまで存在するので、第 1 図 (a) で示したような対応する結晶の原子位置を図中に書きこむことができない。

§3 理論研究の概観

ここ 20 年の主題はアモルファス半導体における現実的な構造をコンピュータシミュレーションによって得るところにあった。いくつかのコンピュータモデルはそれぞれ異なるやり方で作られており、以下のような二つのアプローチに分類されよう。一つはモンテカルロ (MC) 法であり、他は分子動力学 (MD) 法である。伝統的なモンテカルロ法は、ボンドの長さや角度を変えることによってネットワークの局所エネルギーが最小になるように仕組まれているが、次のように、原子間相互作用のポテンシャルを知る必要がある： i) 実験に一致するように自由パラメータとして経験的なポテンシャル (第 1 近接か、せいぜいで第 2 近接相互作用を考慮する) を選ぶか、他は、ii) 強結合近似 (tight-binding), Hartree-Fock 法、あるいは密度汎関数法などの量子論的アプローチで得られるポテンシャルを取り込む方法がとられる。一方、MD 法はニュートンの運動方程式を非常に短い時間間隔で随時解いていく方法である。この場合も MC 法と同様に経験的な相互作用ポテンシャルが必要となる。これらの方法を以下でもう少し詳しく述べてみよう。



第 1 図
(a) a-Si の中性子線回折実験から得られた同径分布関数 (RDF). [文献 12) より].
(b) a-C の中性子線回折実験から得られた同径分布関数 (RDF). [文献 6) より]

3.1 モンテカルロ法

Si を例にとる. sp^3 4 配位構造が連続的にランダムにつながる, いわゆる Continuous random network (CRN) 構造を作り出すために, Wooten ら¹⁵⁾によって経験的 Keating ポテンシャルが導入された (WWW モデル). ポテンシャル関数は

$$V = \frac{3}{16} \frac{\alpha}{d^2} \sum (r_{ij}^2 - d^2)^2 + \frac{3}{8} \frac{\beta}{d^2} \sum \left(r_{ij} r_{ik} + \frac{d^2}{3} \right), \quad (1)$$

ここで, α は bond-stretching 係数, β は bond-bending 係数であり, d は平衡ボンド長 (Si では $d=2.35 \text{ \AA}$, Ge では $d=2.46 \text{ \AA}$) である¹⁶⁾. α と β は結晶では測定できるパラメータであり, 小さな歪みのもとではほぼ定数として扱えることが知られている.

Metropolis MC algorithm が用いられ¹⁷⁾, 周期的境界条件のもとで 216 個の原子を含むスーパーセルが構築されている. ネットワークには 6 員環に加えて 5, 7 員環が含まれる. 現段階ではこの WWW モデルが最良であると考えられている. WWW によって得られた a-Ge, a-Si の相関関数 (RDF における) $\rho(r)$ は実験との一致が非常に良い¹⁵⁾. sp^3 構造で積み上げられる構造は 4 面体角 109.47° を中心として角度偏差 10.9° , ボンド長の偏差 2.7% となる. シリコンとカーボンの類似性からダイヤモンド状 a-C の構造や電子状態 (DOS)^{18,19)}, 水素化アモルファスシリコン (a-Si:H) の構造も WWW モデルを使って類推され, Si-Si や Si-H に関する理論的な相関関数は実験と良く一致することが知られている²⁰⁾. この他, Hartree-Fock 法によってポテンシャルを割り出した a-Si の構造研究もある²¹⁾.

3.2 逆モンテカルロ法

最近, 逆モンテカルロ法 (Reverse Monte Carlo; RMC) という新しい方法がアモルファス物質を対象として考案されている²²⁾. これは回折実験の解析に便利だけでなく, 同時に構造を作り出すことができるので, とっても便利な方法であろう. 大きな特徴は MC 法で必要であった原子間ポテンシャルを前もって知る必要がないことである.

以下に基本的アルゴリズムを紹介する:

- i) 最初に通常の平行座標 (直交座標) にセットした構造から出発する. この構造の RDF と構造因子 $S(Q)$ を計算する. これらと実験で得られている RDF と $S(Q)$ の “差” を計算する.
- ii) 原子位置をランダムに動かして (モンテカルロステップ), 新しい構造を作る. この構造の RDF と構造因子 $S(Q)$ を計算し, 再び実験で得られている RDF と $S(Q)$ の “差” を計算する.
- iii) もし計算された “差” が前のそれより小さければ, この構造を出発点にする. この過程を, “差” が最小に収束するまで繰り返し行う.

RMC 法は実験から得られる RDF と $S(Q)$ を比較しながら物質の 3 次元構造を作り出すただひとつの方法であると思われる. 計算速度を速め, もっと現実的な構造を得るために, ある拘束条件を設ける. たとえば, 配位数 (a-Si の場合 4 配位) をチェックし, この拘束条件が満たされていない場合, アルゴリズム ii) から再出発する. この他, ボンド長に最小の長さの制限を加えることにより, とんでもない構造を作り出すことが避けられる. ボンド角も重要な拘束条件であるが, たとえば a-Si において, 4 面体角をなんとにしても 109.5° にする必要がない. 不規則系物質では原理的に 60° から 180° まで許されるからである.

前に述べたように, RDF は実験から得られる $S(Q)$ のフーリエ変換により得られるが, Q の範囲に制限があるため RDF の第一ピークの前に prepeak が出現する場合がある. フーリエ変換による “人工” 的なものか, “本当” のピークであるか注意深い取り扱いが必要とされている.

本方法では実験で出くわすような Q の範囲の制限が取り除かれるので, 前述の不確かさがなくなり, RMC 法は割と現実的な RDF を提供してくれる. 実際, RMC 法は a-Si¹⁴⁾, a-Ge や a-C の大きな構造を作り出すのに応用されている²³⁾. たとえば, 1728 個の Si 原子に対して, 一切の拘束条件なしで, 4 面体角である 109.5° に角度分布の強いピークと 60° や 180° 周辺にもピークが現れる¹⁴⁾. これは従来考えられている 4 面体 CRN 構造と喧嘩になりそうである. これらは MD 法による結果ともあわせて §4 で再度議論する.

3.3 分子動力学法

N 粒子系のニュートンの運動方程式(N 元連立微分方程式)を与えられる相互作用ポテンシャルのもとで、フェムト秒スケールの短い時間間隔で解き、その時刻での原子位置などを決めていく方法を分子動力学(Molecular Dynamics; MD)法と呼ぶ。これまで数百から数千個の原子系の取り扱いがなされている。積分はVerletアルゴリズム²⁴⁾が通常良く用いられ、時間ごとの位置は次のように与えられる。

$$r(t+dt) = 2r(t) - r(t-dt) + r''(t)(dt)^2 + O[(dt)^4]. \quad (2)$$

MC法と同様に、実験に一致するように自由パラメータとして経験的なポテンシャルか、あるいは量子論的アプローチで得られるポテンシャルが選択される。経験的ポテンシャルとしてはMorseやLennard-Jonesの2体ポテンシャル(距離だけの関数)があるが、共有結合のようなボンドに強い方向性があるような系では、うまくいかない(角度を含む3体ポテンシャルが少なくとも必要となる)。ダイヤモンド状共有結合半導体に対しては、すでに述べたKeatingポテンシャル¹⁶⁾やStillinger-Weberポテンシャル²⁵⁾、長距離レンジの非結合軌道相互作用もとり入れたLifson-Warshel²⁶⁾によるポテンシャルが試されている。 Tersoffポテンシャル²⁷⁾は経験的ポテンシャルとしては最良のものであろう。KerliesとTersoff²⁸⁾、Isimaruら²⁹⁾はSi構造のシミュレーションでこのポテンシャルの有用性を示している。このポテンシャルはC, Si, Geを含む多元系にも拡張できる。

経験的ポテンシャルを用いる上述の方法には原子間ポテンシャルを決める“電子状態”が考慮されていない。密度汎関数理論(Density Functional Theory; DFT)を用いた電子状態の計算がMDの各時刻ごとにできれば好都合である。ところが、DFTは多大の計算時間を必要とするため、そのようなことは望めそうもない。CarとParrinello³⁰⁾は基底電子状態から直接に原子間ポテンシャルを計算する方法を編み出し、DFTをMDに繰り込むことに成功した。この方法は第一原理

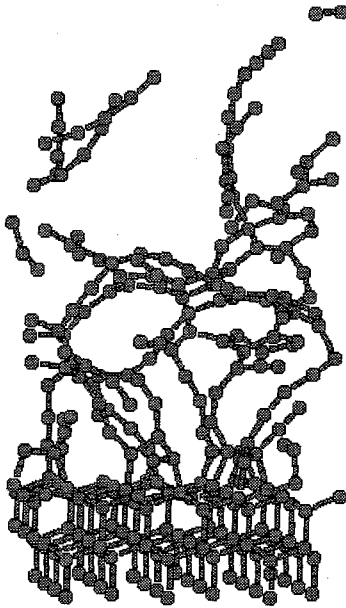
(あるいはab initio) MD法と呼ばれ、構造と電子状態の情報を同時に手に入れることができるようになった。計算速度の制限から、まだ100個程度の原子数しか扱えないが、a-Si³¹⁾、a-Si:H^{32,33)}、a-C^{34,35)}、a-C:Hや4面体結合a-C(ta-C)^{36,37)}に应用されている。a-S:HではSi-Hのまわりの構造が議論されるようになった^{32,33)}。

結晶成長を含むような動力学を扱うときにはもっと多量の原子が必要となる。そこで考案されたのが強結合(tight-binding)モデルを組み合わせたMDである(TBMD)。この方法で数百個の原子の扱いが可能となり、ここ10年の間、盛んに研究が行われ、a-C系^{38,39)}やa-Si⁴⁰⁾、さらにフラレン⁴¹⁾に適用されている。

§4 最近の研究から

これまで述べてきたMD法は液相から凝縮相へのシミュレーションに適用されてきた(1秒あたり 10^{-16} Kelvinの急冷)。アモルファス半導体の多くは気相から作製されるので、気相→凝縮相のシミュレーションが興味深い。筆者らはこのような目的でa-Cやa-Siに対してTBMD法を試みた⁴²⁻⁴⁵⁾。原子流はランダムな速度と方向で(111)面Si基板に向けられ、基板の温度は原子流の速度でスケールされた温度に固定される。ニュートン方程式の積分はVerletアルゴリズム²⁴⁾によってフェムト秒ごとに行った。

実際の気相成長が1秒あたり 10^{12} 原子数/cm²であることを考えてみよう。これは1原子あたりの占める面積が1秒に 10^{-12} cm²であるのと等価である。一方、われわれがシミュレーションできる基板表面積はわずか 10^{-12} cm²である。このことは現実の成長に計算機シミュレーションを合わせようとするには1秒にわずか1個の原子しか扱ってはいけないことになる。これは計算時間を考えるととても不可能である(フェムト秒単位でニュートン方程式を解くことを想起してほしい; 計算機シミュレーションは超高速成長を扱っていることになる)。しかし、われわれのシミュレーションでは、凝縮過程で次の原子がやってくる前に原子位置の緩和を起すことができるので、実



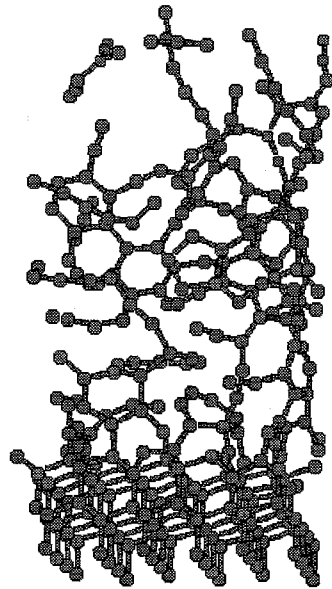
第2図

MDシミュレーション法で作られたa-Cの構造。運動エネルギーは6.5 eVで120個のカーボン原子を扱い、0.5 fs間隔で5-10 psまで計算した。“鎖状構造”が多い。

際の成長とそなにかげ離れた結果にならないはずである⁴⁵⁾。

a-Cのシミュレーションの様子をカーボン原子の二つの異なる運動エネルギーについて紹介しよう。ひとつは6.5 eVの運動エネルギーで120個のカーボン原子を扱った。0.5 fs間隔で5-10 psまで計算した。TBMDはDFT-MDより計算時間で圧倒的に優れているが、HPワークステーションで1ヶ月の時間を要する。最終結果を第2図に示す。他は13 eV(現実に近い)で120個の原子を扱う。結果は第3図のようになる。計算されたRDFは実験で得られたものと良く一致する。第2図の構造は“鎖状構造”が多いが、第3図の構造では sp^2 , sp^3 をもっと多く含む“環状構造”となる。これは気相におけるカーボン原子の運動エネルギーが大きいほど、ダイヤモンド構造をとり易いことを示している。

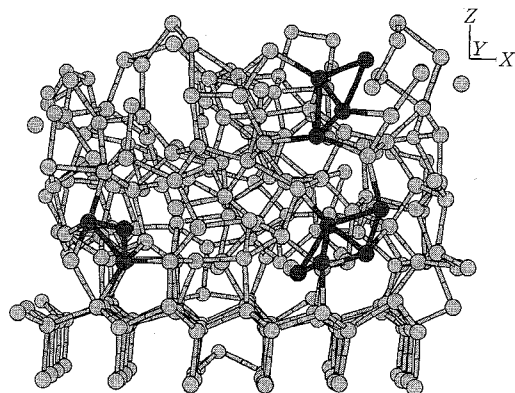
a-Siについても同様に気相からの成長シミュレーションを行った。ここで、(111)面シリコン基板の原子数を72個、1 eVの運動エネルギーをもつSi原子249個を扱った。ここで、基板端面で必



第3図

MDシミュレーション法で作られたa-Cの構造。運動エネルギーは13 eVで120個のカーボン原子を扱い、0.5 fs間隔で5-10 psまで計算した。 sp^2 , sp^3 をもっと多く含む“環状構造”となる。

然的に生じる欠陥の効果を避けるため、X-Y面内では周期的境界条件を使っている⁴²⁻⁴⁴⁾。驚くべきことにネットワークに、第4図に示すような3員環や4員環が多量に含まれることであり、27個の原子が5配位(フローティングボンドと呼

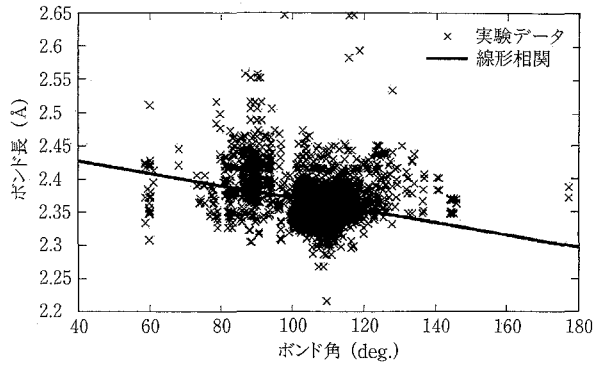


第4図

MDシミュレーション法で作られたa-Siの構造。ここで、(111)面シリコン基板の原子数を72個、1 eVの運動エネルギーをもつSi原子249個を扱った。3員環や4員環が多量に含まれる。

第5図

Si-Si-Si フラグメントにおける
ボンド長と角度の相関。
ケンブリッジ構造データベース
(CSD)を利用した。



ばれる)や4個が6配位になる。この結果は、これまで考えられてきたSi構造モデルと相容れない。

アモルファス構造の成長過程では共有結合する原子はなるべく“自然”の形態をとろうとするだろう。自然に許される形態とは一体何であろうか。たとえば、アモルファスSiネットワークに埋め込まれた局所構造を探ると、意味のある情報がとり出せるかも知れない。そこでケンブリッジ構造データベース(CSD)⁴⁶⁾を利用して体系的な分析を試みた⁴⁷⁾。CSDはX線、中性子線の回折実験から得られる結晶構造に関する世界最大のものであろう。われわれはSi-Si-Siフラグメントに含まれる構造情報(ボンド長と角度の相関)を第5図のように整理してみた。ここで3578個がプロットされている。ボンド長が2.21~2.64 Å, ボンド角が58.6~145.8°の間に分布し、平均のボンド長が2.37 Å, ボンド角が106.33°である。大多数がボンド長2.35 Å, ボンド角109.47°のまわりにあるが、75~96°のまわりにも特徴的な分布がある。この角度はほとんど平面な4角形構造からもたらされる。さらに、数は3%とと少ないが、60°周辺にも構造がありそうである。これは3角形からくるだろう。これらは3員環や4員環がネットワーク中に存在し得ることを示唆している。先にも述べたが、これまでのSiに対するほとんどのモデルではこのような構造が示唆されたことはない。ボンド角が大きくなるとボンド長が短くなるような弱い相関もありそうである。これらの結果は蒸着したSiの中性子線回折の解析結果とも似ており⁴⁴⁾、大変興味深い。

同様に、合計数は120個で少ないが、Si-Si-Hについても整理した。統計的な意味に危うさはあるが、Si-Siのボンド長は2.3~2.48 Åの間に分布し、平均値は2.39 Åである。これは水素結合のない場合に比べて幾分長いようである。

§5 むすび

X線や中性子線の回折実験だけでアモルファス構造を割り出すことが不可能で、それゆえ、理論的にアモルファス構造を作り出し、再びRDFなどの実験結果と比較検討することが求められてきた。理論で構築した構造の良し悪しを知る最も単純な方法はRDFの比較であろう。MC法での理論と実験の違いは第1, 2番目のピークに関してはほとんどない。あるとすれば3番目以降である。これとは逆に、RMC法は実験で得られるRDFに最も近い構造を作り出す方法である。一方、MD法は構造の凝縮過程などの動力学を知るのに有用である。ごく最近、経路積分モンテカルロ法(Path Integral Monte Carlo; PIMC)と呼ばれる方法もa-Siの構築のために提案されている⁴⁸⁾。この方法は与えられた温度におけるSi原子の分配関数をファイマンの経路積分を使って計算し、MC法に取り入れている(MC法には相互作用ポテンシャルの情報が必要)。得られるRDFは実験と良く一致する。

a-SiのTBMDシミュレーションで報告された、5配位(6配位も!)Siの指摘も興味深い(主な配位数はもちろん4であるが)。通常のCRNモデルではこのような“欠陥”まで導入されない。さ

らに、3員環や4員環がa-Siのネットワーク中に存在し得ることが示された。これらは従来の構造モデルでは考えられたこともないが、詳細なケンブリッジ構造データベースとも矛盾しないことを指摘した。中性子線回折実験、MDシミュレーション、ケンブリッジ構造データベースの3つの独立な証拠があることに注目して欲しい。

なお、ここで述べたいいくつかのシミュレーションはアモルファス半導体(水素化シリコンやカルコゲナイドガラス)に見られる光誘起欠陥の生成⁴⁹⁾の様子を知る上でも有用と思われる。特に、価電子帯が孤立電子対によって構成されるカルコゲナイドガラスにおいて、価電子の励起(結合軌道の励起ではない!)がなぜ欠陥の生成に結びつくのか謎は解けていない。

本稿をまとめるにあたり、議論していただいたK. Morigaki, K. Shimakawa, I. Laszlo, K. Kohary, Z. Varallyay各氏に感謝したい。また、V. HarmatにはCSDからデータを引き出していたいただいた。この研究はOKTAの援助(T029813, T032193), AKAの援助(98-302, 2)とハンガリー、日本の政府間科学技術協力プロジェクト(S & T JAP-21/98)の援助を受けている。

〔参考文献〕

- 1) K. Morigaki: *Physics of Amorphous Semiconductors* (World Scientific & Imperial College Press, London, 1999).
- 2) J. Kakinoki, K. Katada, T. Hanawa, and T. Ino: *Acta Cryst.* **13** (1960) 171.
- 3) D. F. R. Mildner and J. M. Carpenter: *J. Non-Cryst. Solids* **47** (1982) 381.
- 4) F. Li and J. S. Lannin: *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990) 1905.
- 5) P. H. Gaskell, A. Saeed, P. Chieux, and D. R. Mckenzie: *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991) 1286.
- 6) S. Kugler, K. Shimakawa, T. Watanabe, K. Hayashi, I. Laszlo, and R. Bellissent: *J. Non-Cryst. Solids* **164-166** (1993) 831.
- 7) K. W. R. Gilkes, P. H. Gaskell, and J. Robertson: *Phys. Rev.* **B51** (1995) 12303.
- 8) J. H. Etherington, A. C. Wright, J. T. Wenzel, J. C. Dore, J. H., Clarke, and R. N. Sinclair: *J. Non-Cryst. Solids* **48** (1982) 265.
- 9) S. C. Moss and J. F. Graczyk: *Proc. 10th Int. Conf. Physics of Semiconductors*, edited by S. P. Keller, J. C. Hensel, and F. Stern (USAEC, 1979) p. 658.
- 10) A. Barna, P. B. Barna, G. Randoczi, L. Toth, and P. Thomas: *phys. stat. sol. (a)* **41** (1977) 81.
- 11) J. Fortner and J. S. Lannin: *Phys. Rev.* **B39** (1989) 5527.
- 12) S. Kugler, G. Molnar, G. Peto, E. Zsoldos, L. Rosta, A. Menelle, and R. Bellissent: *Phys. Rev.* **B40** (1989) 8030.
- 13) A. Di Cicco, A. Bianconi, C. Coluzza, P. Rudolf, P. La garde, A. M. Flank, and A. Marcelli: *J. Non-Cryst. Solids* **116** (1990) 27.
- 14) S. Kugler, L. Pusztai, L. Rosta, P. Chieux, and R. Bellissent: *Phys. Rev.* **B48** (1993) 7685.
- 15) F. Wooten, K. Winer, and D. Weaire: *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985) 1392.
- 16) P. N. Keating: *Phys. Rev.* **145** (1966) 637.
- 17) N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N., Resenbluth, A. H. Teller, and E. Teller: *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 1087.
- 18) S. Kugler and G. Naray-Szabo: *Jpn. J. Appl. Phys.* **7A**, **30** (1991) L1149.
- 19) D. A. Drabold, P. A. Fedders, and P. Stumm: *Phys. Rev.* **B49** (1994) 16415.
- 20) N. Mousseau and L. J. Lewis: *Phys. Rev.* **B41** (1990) 3702.
- 21) G. Toth and G. Naray-Szabo: *J. Chem. Phys.* **100** (1994) 3742.
- 22) R. L. McGreevy and L. Pusztai: *Molec. Sim.* **1** (1988) 369.
- 23) O. Gereben and L. Pusztai: *Phys. Rev.* **B50** (1994) 14136.
- 24) L. Verlet: *Phys. Rev.* **159** (1967) 98.
- 25) F. Stillinger and T. Weber: *Phys. Rev.* **B31** (1985) 5262.
- 26) A. Warshel and S. Lifson: *J. Chem. Phys.* **53** (1970) 582.
- 27) J. Tersoff: *Phys. Rev.* **B37** (1988) 6991; *ibid* **B38** (1988); *ibid* **B39** (1989) 5566.
- 28) P. C. Keriles and J. Tersoff: *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 562.
- 29) M. Ishimaru, S. Munetoh, and T. Motooka: *Phys. Rev.* **B56** (1997) 151.
- 30) R. Car and M. Parrinello: *Phys. Rev. Lett.* **55** (1985) 2471.
- 31) I. Stich, R. Car, and M. Parrinello: *Phys. Rev.* **B44** (1991) 11092.
- 32) F. Buda, G. L. Chiarotti, R. Car, and M. Parrinello: *Phys. Rev.* **B44** (1991) 5908.
- 33) F. Yonezawa, S. Sakamoto, and M. Hori: *J. Non-Cryst. Solids* **137 & 138** (1991) 135.
- 34) G. Galli, R. M. Martin, R. Car, and M. Parrinello: *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 555.
- 35) U. Stephan, Th. Frauenheim, P. Plaudeck, and G. Jungnickel: *Phys. Rev.* **B50** (1994) 1489.
- 36) S. Iarloni, G. Galli, O. Martini: *Phys. Rev.* **B49** (1994) 7060.
- 37) N. A. Marks, D. R. Mckenzie, B. A. Pailthorpe, M. Berasconi, and M. Parrinello: *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 768.
- 38) C. H. Xu, C. Z. Wang, C. T. Chan, and K. M. Ho, J. Phys. **C4** (1992) 6047.
- 39) C. Z. Wang, K. M. Ho, and C. T. Chan: *Phys. Rev. Lett.* **70** (1993) 611.
- 40) I. Kwon, R. Biswas, C. Z. Wang, K. M. Ho, and C. M. Soukoulis: *Phys. Rev.* **B49** (1994) 7242.
- 41) I. Laszlo: *Europhysics. Lett.* **44** (1998) 741.
- 42) S. Kugler, K. Kohary, and I. Laszlo: *Proc. N2M Workshop, Grenoble, France 1998* (AIP Proceedings No. 479) p. 64.

43) S. Kugler, I. Laszlo, K. Kohary, and K. Shimakawa: Functional Materials 6 (1999) 459.
 44) K. Kohary and S. Kugler: J. Non-Cryst. Solids 266-269 (2000) 746.
 45) K. Kohary, S. Kugler, and Laszlo: J. Non-Cryst. Solids 227-230 (1998) 594.
 46) H. Allen, O. Kennard, and R. Taylor: Acc. Chem. Res. 16 (1983) 146.

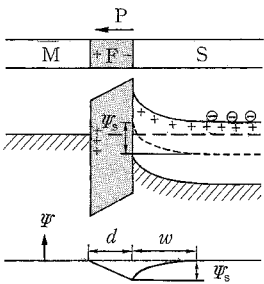
47) S. Kugler and Z. Varallyay: in preparation
 48) C. H. Herrero: J. Phys. C: Condensed Matter 12 (2000) 265.
 49) K. Shimakawa, A. Kolobov, and S. R. Elliott: Adv. Phys. 44 (1995) 475.

お詫びと訂正

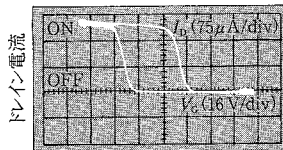
前号 No. 9 <誘電体物理の新しい展開> 特集号の“強誘電体薄膜の電子デバイス応用” (奥山雅則) の第 1 図中で文字が脱落している箇所がありました。大変申し訳なくお詫びいたします。ここに正しい図を載せて訂正させていただきます。

No. 9, p. 119 (725) 第 1 図(中央の図の枠内の文字が脱落していました)

(A) MFS FET (§3-1-3)



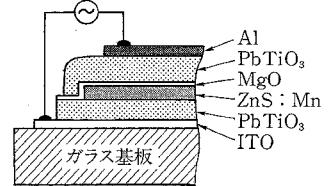
不揮発メモリ
 低い電圧駆動
 高速・高集積化可能



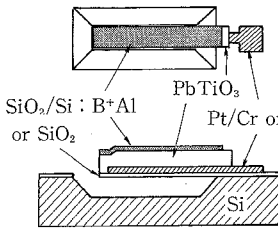
ゲート電圧

(B) AC EL (§3-2)

低い電圧
 多色化, 長寿命
 大面積化

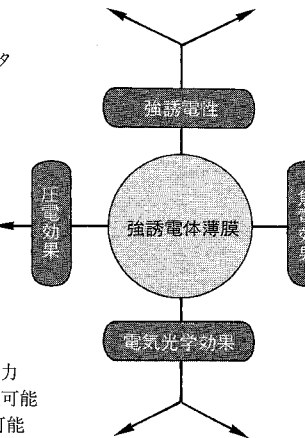


(C) マイクロ超音波センサー/アクチュエータ (§3-3)

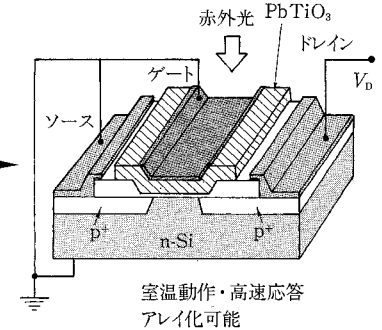


低消費電力
 広帯域化可能
 アレイ化可能

分極履歴現象 誘電率大

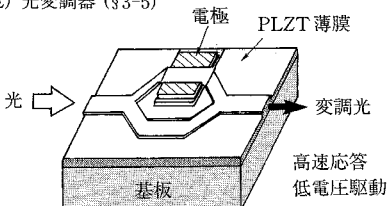


(D) IR-OPFET (§3-4)



室温動作・高速応答
 アレイ化可能

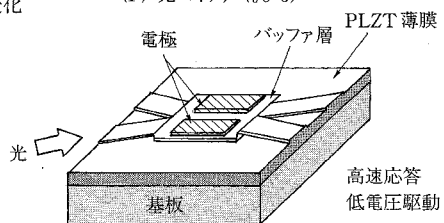
(E) 光変調器 (§3-5)



高速応答
 低電圧駆動

電場による屈折率変化

(F) 光スイッチ (§3-5)



高速応答
 低電圧駆動