

平成 21 年 0 4 月 0 2 日現在

研究種目： 基盤研究 (B)
 研究期間： 2006～2008
 課題番号： 18360020
 研究課題名 (和文) 表面量子状態制御による人工原子・分子の構築
 研究課題名 (英文) Quantization of surface electrons and their applications
 to construction of artificial atoms and molecules
 研究代表者
 平山 博之 (HIRAYAMA HIROYUKI)
 東京工業大学・大学院総合理工学研究科・教授
 研究者番号： 60271582

研究成果の概要：

本研究では、STM 探針を用いた Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 表面へのナノサイズ閉曲線の書き込み、および Ag(111) 超薄膜表面に核形成したナノ島への表面電子状態の量子閉じ込めにおいて、閉じ込め構造のサイズ・形状を変化させることで原子・分子様な任意の離散的電子状態を人工的に制御形で実現できることを検証した。また任意のサイズ・形状の閉じ込め構造に対する量子状態の数値計算ツールの開発した。さらに形状がナノサイズレベルの場合には、量子構造は室温においても観測できること、および閉じ込めポテンシャルを評価する際の S 波近似の適用限界を明らかにし、さらにこれを超える S+P+D 波近似での評価方法を開発した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	8,400,000	2,520,000	10,920,000
2007年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2008年度	1,400,000	420,000	1,820,000
年度			
年度			
総計	11,100,000	3,330,000	14,430,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目： 応用物理学・工学基礎、 薄膜・表面界面物性

キーワード： 量子閉じ込め、2次元電子系、表面、走査トンネル顕微鏡、数値計算

1. 研究開始当初の背景

これまで表面科学の分野では、通常金属 (normal metal) 表面上に局在する 2 次元表面状態電子に対し、この表面上で走査トンネル顕微鏡の探針を用いて原子を 1 つ 1 つ極低温で並べて人工的に原子の囲い (quantum corral) を作った場合、表面電子はこの囲いの中に閉じ込められ、量子化されることが報

告されていた。しかしながら従来の報告の中で、表面 2 次元電子の閉じ込め形状を自由に制御できる原子囲いや原子の STM 探針による配列を用いた方法では、閉じ込め図形を構成する原子は極低温以外では表面を熱拡散してしまい壊れてしまう。このため、室温において安定な量子構造を人工的に構築することは非常に困難であった。

2. 研究の目的

本研究の目的は、(1)室温まで構造安定な表面2次元量子閉じ込め構造を構築すること、(2)作成した任意のサイズ・形状の表面2次元閉じ込め構造中の電子状態を予測する数値計算ツールを開発すること、(3)実際に作成した2次元量子構造中の電子状態を、その波動関数の自乗振幅の空間分布をSTMをベースとしたdI/dV像により観測し、電子状態が(2)で開発したツールにより予め予測できるエンジニアリングの可能性、および閉じ込め構造サイズを小さくした場合には離散的量子準位間隔が十分大きくなり、室温においても量子構造が保たれることを実験的に検証すること、(4)さらに(2)の数値計算では取り入れていない閉じ込め構造境界における散乱ポテンシャルを正しく評価することである。

3. 研究の方法

目的(1)の室温まで安定な表面2次元量子構造の構築に対しては、今回は主に Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 表面における STM 探針を用いたナノサイズの閉曲線構造の描画を用いた。Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 表面は、Si(111)清浄表面に1原子層の Ag を吸着させた際にできる表面であり、この表面には2次元自由電子的な分散関係を持つ表面電子状態が存在することが知られている。しかしこの2次元自由電子状態は表面最上層の Ag 吸着構造によってもたらされているため、STM 探針によって表面原子を引き抜いてしまうと、その部分で表面2次元電子構造は破壊される。このため、STM 探針で $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 構造を破壊した閉曲線構造を描けば、 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 構造表面上の2次元電子は閉曲線中に閉じ込められることが期待される。この方法で重要なのは、STM 探針を用いば任意のサイズ・形状の閉曲線を描画できるため、エンジニアリングとしての展開が期待されることである。しかもこの構造を定義する閉曲線は表面第1層に埋め込まれた欠陥から構成される曲線のため、構造は室温以上の温度においても安定であることが期待される。

またこれに加えて本研究では、2段階成長法により成長した Ag(111)超薄膜表面に発生するナノサイズの Ag 島中への表面電子の量子閉じ込めも対象とした。

目的(2)で述べた任意サイズ・形状の2次元表面電子閉じ込め構造中の電子状態の予測については、どのような境界形状にも対応できる有限要素法をベースに2次元シュレディンガー方程式を数値的に解くソルバーを開発することで対応した。

目的(3)については Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag

表面に実際に STM 探針を用いて閉曲線を描画し、その中の電子定在波を“室温で”STMを用いた dI/dV 像として実空間観察すること、および得られた像を(2)で開発した数値計算ツールの計算結果と比較検討することで実行した。

目的(4)については、Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 表面の原子欠陥周辺に発生する電子定在波の室温観察結果を、円筒対象場における電子散乱問題に関する S 波近似の適用範囲を明らかにしながら解析すること、および S 波近似の適用範囲外での評価を可能にする S+P+D 波近似の定式化と応用を実践することにより実行した。

4. 研究成果

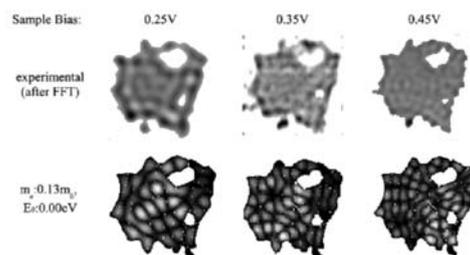


図1. Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 表面上に STM 探針で描画した2次元人工量子構造中の電子定在波の室温における dI/dV 像 (上段)、および数値計算した電子状態密度分布 (下段)。電子のエネルギーは左から 0.25eV, 0.35eV, 0.45eV。

図1に Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 表面上に STM 探針による表面原子引き抜きにより描画したサイズ 20nm の閉曲線中に閉じ込められた2次元表面電子の波動関数の自乗振幅を STM における dI/dV 像観察によって観察した結果、および描画した閉じ込め構造中の2次元電子状態における電子密度の空間分布を、表面状態のバンド分散関係を考慮した上で数値計算した結果を示す。図から明らかなように、閉じ込め構造中には dI/dV 像において、閉じ込められた電子が量子化されたことによる電子定在波パターンが明瞭に観測されている。ここでこれらの dI/dV 像は室温で観測されており、これは 20nm 程度の非常に小さな閉じ込め構造中では、量子化された電子状態間のエネルギー間隔が室温における熱揺らぎに打ち勝つ程度に大きいことを意味している。

また、本研究で開発した数値計算コードによって得られた各エネルギーでの電子密度の空間分布は実験結果と対応するものであり、これは数値計算により予め任意サイズ・形状の表面2次元電子閉じ込め構造中の電

子状態を予測可能であることを示している。

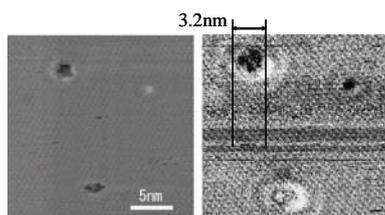


図2 Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 表面上の原子欠陥のSTM像(左)と、そのdI/dV像(右)

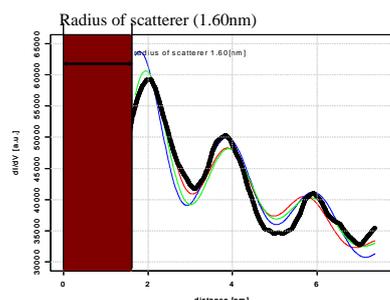


図3 図2の左上の欠陥の周りの電子定在波のクロスセクション(黒)と数値計算結果(カラー)

Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 表面上の原子欠陥のSTM像、およびその周囲に立つ電子定在波パターンのdI/dV像を図2の左、右にそれぞれ示す。図から明らかのように、電子定在波は欠陥を中心にその周りに同心円状に立っている。このためこのシステムにおいて欠陥による電子の散乱(=閉じ込め)ポテンシャルの大きさは、この系を2次元円筒座標系で解析すればよい。しかし今回我々は、従来採用されているS波近似の元でこの系を解析する場合、その妥当性は観測している電子のエネルギーや欠陥のサイズに対して極めて限られた領域にだけ成り立つことを数値的に明らかにした。そしてS波近似の正当性が成り立たないような、図2の欠陥の場合に、S波近似をさらに精密化したS+P+D波近似が適用可能であり、これを適用すると図3のように実験結果をよく再現でき、かつ正しく散乱(=閉じ込め)ポテンシャルを評価できることが明らかになった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 8件)

①H.Hirayama, “Growth of atomically flat ultra-thin Ag films on Si surfaces”

Surface Science (印刷中) 査読有

②S.Minamoto & H.Hirayama, “Scattering Potential Evaluation with S+P+D Wave Expansion of a Vacancy Complex on a Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag Surface”
Materials Science & Engineering B (印刷中) 査読有

③T.Sekiguchi & H.Hirayama, “An STM study of Ge heteroepitaxial Growth on Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B Surfaces”
Surface Science 602, pp.3279-3283(2008)
査読有

④M.Miyazaki & H.Hirayama, “Thickness- and Deposition Temperature-dependent Morphological Change in Electric Growth of Ultra-thin Ag Films on Si(111) Substrates”
Surface Science 602, pp.276-282(2008)
査読有

⑤S.Minamoto, T.Ishiduka & H.Hirayama “Electron Confinement in a STM-lithographed Nanoscale Domain on an Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag Surface at Room Temperature”
Surface Science 602, pp.470-474(2008)
査読有

⑥S.Minamoto, Y.Ogawa, Y.Sano & H.Hirayama, “Scattering of the S1-surface state electron by an isolated adatom at Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag surface”
Physica E 40, pp.324-327(2007)
査読有

⑦T.Furuhashi, Y.Ohshima, H.Hirayama “Barrier Height Imaging of Si(111) 3×1 -Ag reconstructed surfaces” Applied Surface Science 253, pp.651-654(2006) 査読有

⑧ H.Hirayama & M.Watai, “Two-photon Resonance in Optical Second Harmonic Generation From Quantum Well States in Ultra-thin Ag Films grown on Si(111) Surfaces”
Surface Science 600, pp.3825-3829(2006)
査読有

[学会発表] (計 20件)

①澤敬一、青木悠樹、平山博之； 「Agナノ薄膜上のstep端および転位近傍における表面中の膜厚依存性」

第 56 回応用物理学関係連合講演会
2009.3.30、筑波大学

②澤敬一、青木悠樹、平山博之；「Si(111) 基板上における Ag(111)薄膜の表面準位に対する膜厚・転位・量子閉じ込めの影響」日本物理学会第 64 回年次大会 30pRD-4, 2009.3.30、立教大学

③H.Hirayama; "Nanostructures and their electronic states at surfaces", New Zealand-Tokyo Institute of Technology Seminar on Nanotechnology, 大岡山, January 30, 2009

④H.Hirayama; "Quantum confinements at surfaces" Tokyo Tech-Tsinghua University Joint Symposium, 田町, November 19, 2008

⑤澤敬一、青木悠樹、平山博之；「Si(111)7x7 基板上の Ag ナノ薄膜表面における電子定在波の Ag 膜厚依存性」；第 29 回表面科学講演大会 2C28, 2008.11. 15、早稲田大学

⑥ K.Sawa,Y.Aoki,H.Hirayama; "Surface Electron Scattering at Dislocations on Atomically Flat Thin Ag Films" 4th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia (VASSCAA-4), 松江, 29B11, October 29, 2008

⑦宮崎優、平山博之；「Si(111)表面上に electronic growth した Ag 超薄膜の臨界膜厚制御」_日本物理学会第 63 回年次大会 21aXB-9, 2008.09.21@岩手大学

⑧関口津加、平山博之；「Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B 表面上の Ge エピタキシャル成長の STM 観察」_日本物理学会第 63 回年次大会 20pXA-2, 2008.09.20@岩手大学

⑨澤敬一、青木悠樹、平山博之；「Si(111)7x7 基板上の Ag ナノ薄膜表面における電子の定在波観察」第 6 回応用物理学学術講演会, 5a-L-9/II, 2008.09.05@中部大学

⑩源聡、平山博之；「Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag 表面上の空孔島における室温での散乱ポテンシャルの解析」第 6 回応用物理学学術講演会 5a-L-10/II, 2008.09.05@中部大学

⑪ H.Hirayama,M.Miyazaki; "Controlling the Magic Thickness in Electronic Growth of Atomically Flat Ag Films on Si(111) Substrates",2008 International Conference on Nanoscience+Technology (ICN+T2008),

Keystone,CO.U.S.A, NM2-WeA4, July 23,2008

⑫S.Minamoto, H.Hirayama; "Partial wave approximation of scattering of the S1-surface state electron by an isolated adatom at Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag surface at room temperature" STAC2-STSI1, Makuhari, May 31,2008

⑬宮崎優、平山博之；「Si(111)7x7 水素吸着表面上における Ag 超薄膜成長」第 55 回応用物理学関係連合講演会 28a-Q-3, 2008.03.28@日本大学理工学部 船橋キャンパス

⑭ M.Miyazaki & H.Hirayama; " A competition between quantum effect and kinetic processes in Ag thin film growth on Si(111)7x7 substrates" 9th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces, and Nanostructures (ACSIN9), Tokyo, Nov.11-15,2007

⑮平山博之；「Ag 超薄膜の Electronic Growth における歪と電子系エネルギーの競合」東北大学電気通信研究所協同プロジェクト研究会, 2007.10.26@松島

⑯宮崎優、平山博之；「Si(111)表面上 Ag 超薄膜の electric growth における量子効果とカイネティクスの競合」日本物理学会第 62 回年次大会 21-XJ-2, 2007.09.21@北海道大学

⑰佐野宣紀、小川百合香、平山博之；「低温蒸着および室温アニールによる超平坦 Ag エピタキシャル膜形成の STM 観察」第 6 回応用物理学関係連合講演会 29p-SL-21, 2007.03.21@青山学院大学相模原キャンパス

⑱ S.Minamoto,T.Ishiduka,H.Hirayama; "Energy resolution for standing wave confined into Two-Dimensional Artificial Nano-Strcutures at Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag Surfaces at room temperature" nanoPHYS'07, Ookayama, Tokyo, Jan.24,2007

⑲Y.Ogawa,Y.Sano,S.Minamoto, H.Hirayama; "Electron Scattering by Isolated adatoms at Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag Surfaces", nanoPHYS'07, Ookayama, Tokyo, Jan.24,2007

⑳ H.Hirayama; "Quantum Confinements

at Ag/Si(111) Surfaces"
SSNS'07, Appi, Jan.25,2007

〔図書〕（計 1 件）

① H.Hirayama, "Size Control of Nano-structures by Quantum Confinement"
Chapter 3-1 in "Nano-Materials Research Toward Applications"
ed. H.Hosono & Y.Mishima (2006) Elsevier Science Publisher

6. 研究組織

(1) 研究代表者

平山 博之 (HIRAYAMA HIROYUKI)
東京工業大学・大学院総合理工学研究科
・教授
研究者番号： 60271582

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし