

令和 3 年 5 月 28 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K18990

研究課題名(和文)シリコン量子コンピュータ実現に向けたリン原子の配列

研究課題名(英文)Arrangement of P atoms toward realization of Si quantum computer

研究代表者

杉本 宜昭 (Sugimoto, Yoshiaki)

東京大学・大学院新領域創成科学研究科・准教授

研究者番号：00432518

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,800,000円

研究成果の概要(和文)：シリコン中にリン原子を配列させた構造を基本とするシリコン量子コンピュータを実現させるためには、シリコン表面にリン原子を導入して、元素同定した上で原子操作する技術が必要である。シリコン表面にリン原子を埋め込んだ試料を作成して、原子間力顕微鏡で観察したところ、探針の状態によっては埋め込まれたリン原子が識別できることがわかった。シリコン原子とリン原子の上で、探針との化学結合力の精密測定を行って原子間力顕微鏡の像のパターンを考察した。さらに、様々なシリコン表面を作成して、原子レベルの構造解析を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

シリコンは現在の半導体技術の中核を担う重要な物質である。シリコンにドーパントなど異種元素を導入して様々な機能を発現させることができる。微細加工技術により素子のサイズが原子レベルに到達しているため、シリコン表面に埋め込まれた異種元素を同定する技術は、重要な評価技術となっていくと予想される。また、単結晶以外のシリコンの表面構造も低次元性を活かしたデバイスへ展開できる可能性がある。原子間力顕微鏡による原子レベルの高分解能観察と元素識別の機能自体も様々な用途に波及していくと考えられる。

研究成果の概要(英文)：In order to realize a silicon quantum computer based on a structure with phosphorus atoms arranged in silicon, it is necessary to introduce phosphorus atoms into the silicon surface, and then manipulate the atoms chemically identified. We prepared samples with embedded phosphorus atoms on the silicon surface and observed them with an atomic force microscope. It was found that the embedded phosphorus atoms could be identified using some tips. The pattern of the atomic force microscope image was discussed by making precise measurements of the chemical bonding force between the probe and the silicon atoms and on the phosphorus atoms. In addition, a variety of silicon surfaces were prepared and the structures were determined with atomic level.

研究分野：表面科学

キーワード：走査プローブ顕微鏡

1. 研究開始当初の背景

量子コンピュータとは、古典的コンピュータで使われる 0,1 のどちらかしかとりえないビットに変わって、0,1 の重ね合わせを取りうる量子ビットを用いたコンピュータである。量子コンピュータが実現すると、これまでの古典的コンピュータでは不可能であった超高速並列計算が可能になり、今の情報化社会が根本から覆される程の革命が起こる。量子コンピュータとしては、これまでいくつもの量子系が提案されてきたが、Kane によって提案されたシリコン量子コンピュータがこれまでのシリコン微細加工の技術を活かすことができ、量子ビットの大規模集積化に適している注目を集めてきた。シリコン量子コンピュータは核スピンを持たないシリコン基板を用意し、その中に核スピン $I=1/2$ をもつリン原子を埋め込んで 20nm 程度で等間隔に配列する。1 つひとつのリン原子の核スピンの量子ビットになり、それぞれの核スピンの量子演算や読み出しはリン原子のドナー準位の電子との相互作用を介して行う。シリコン量子コンピュータの形状は、これまでのコンピュータと非常によく似ており、量子ビットの初期化、演算、読み出しをすべてシリコン内で実現するので画期的な構想である。しかしながら Kane 自身が論文の中で述べているように、シリコン量子コンピュータ実現の鍵はどのようにシリコン基板中に 1 つひとつのリン原子を原子レベルの正確さで配列するかである。さらに、核スピンをもつ不純物元素が量子状態を破壊することも最近明らかになってきた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、リン原子とその他の不純物原子を識別し、リン原子のみを原子レベルの精密さでシリコン基板中に配列させる技術を開発することである。原子レベルの精密さでリン原子を配列させることは、今の半導体プロセスでは不可能である。そこで、原子間力顕微鏡 (AFM) を用いて研究を行う。電気伝導度が低い基板を用いる必要性が出てくるが、絶縁体も観察することができる AFM の利点が活かされる。

3. 研究の方法

基板として、市販のシリコン基板を用いる。この基板にリン原子を吸着させて、加熱することによって、表面のシリコン原子がリン原子にランダムに置換した表面を作成する。加熱したインジウムリン基板をリン原子の放出源として、そのような表面を作成する。次に、超高真空中で動作する AFM によって、表面のリン原子と不純物原子を元素識別する。この表面は活性な表面であるので、AFM による化学結合エネルギー測定によって、表面のリン原子とその他の不純物原子とを元素識別できる。次に原子操作によって、表面のリン原子とシリコン原子の配置を組み換える。

4. 研究成果

(1) シリコン表面におけるリン原子の観察と元素識別

シリコン表面にリン原子を導入して、AFM 観察することに成功した。個々のリン原子を可視化して、シリコン原子とリン原子とを区別することができた。探針先端の状態によって、AFM 像におけるリン原子のコントラストが様々に変わることが判明した。また、シリコン原子とリン原子が区別できない探針の状態が存在することも判明した。シリコン製の探針と表面原子との相互作用が、針先端の化学状態によって、質的に変化していると考えられる。そこで、2 原子間に働く化学結合エネルギーの計測を行った。その結果、シリコン原子とリン原子の化学結合エネルギーの距離依存性のカーブが似通っていることがわかった。化学結合エネルギーが似通っているために、探針先端の化学状態によって AFM のコントラストが変わることが理解できる。シリコン原子より価電子が 1 つ少ないアルミニウム原子においては、イオン性の効果も含めて明確な化学結合エネルギーの差が検出されたので、リン原子の結果は意外な結果であった。

よく規定された探針先端を準備する必要があることがわかったので、まず針先端の単一の原子の元素が同定できるか検討した。表面の個々の原子の元素同定は、電気陰性度が異なるものも含めて化学結合エネルギーの計測によって可能であることを実証していたが、今回既知の表面原子の上で化学結合エネルギーを計測することによって、探針先端の元素同定を行った。得られた化学結合エネルギーのデータ群はポーリングの化学結合論で説明できるものであり、探針先端の単一原子が同定できることが示された。今後、さらに化学状態も制御した探針を用いて、リン原子の電荷状態にも着目した元素識別法を開発する必要がある。

(2) リン原子配列に適したシリコン表面の探索

リン原子の配列に適したシリコン表面を模索するために、シリコン原子が八ニカム構造で配列するシリセンの作成と構造解析を行った。シリセンはシリコン単結晶の表面とは異なる結合角をとるので、導入したリン原子の化学状態も異なると期待できる。Ag 基板にシリコンを蒸着することによって、単層のシリセンを作製した。先行研究で報告されていた様々な相を AFM で観察することができた。構造が解明されている 4×4 相や $R13 \times R13$ に加えて、八ニカム構造をもつことすら未知であった相を AFM による高分解能観察することができた。八ニカム構造が明瞭に可視化されて、構造を同定することができた。また、シリコンを多く蒸着した場合においては、最表面に Ag 原子が配列した別の構造ができることが実空間で示された。一方、シリコンの蒸着量が少ない場合においては、報告されていない構造が観察された。一次元構造を持つユニークな構造で、第一原理計算の結果を組み合わせ、構造を同定することができた。シリコン原子を構成元素とする様々な表面やナノ構造が開拓できたので、今後、異種元素を導入して、元素同定、原子操作の研究を行っていく。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Onoda Jo, Miyazaki Hiroki, Sugimoto Yoshiaki	4. 巻 20
2. 論文標題 Chemical Identification of the Foremost Tip Atom in Atomic Force Microscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 2000 ~ 2004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.9b05280	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Onoda Jo, Feng Lingyu, Yabuoshi Keisuke, Sugimoto Yoshiaki	4. 巻 3
2. 論文標題 Less-ordered structures of silicene on Ag(111) surface revealed by atomic force microscopy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 104002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.3.104002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yabuoshi Keisuke, Sugimoto Yoshiaki	4. 巻 58
2. 論文標題 Evidence for honeycomb-chained trimer structure of multilayer silicene on Ag(111) with noncontact atomic force microscopy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 020903 ~ 020903
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/aaf4b5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Feng Lingyu, Yabuoshi Keisuke, Sugimoto Yoshiaki, Onoda Jo, Fukuda Masahiro, Ozaki Taisuke	4. 巻 98
2. 論文標題 Structural identification of silicene on the Ag(111) surface by atomic force microscopy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195311 1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.195311	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計38件（うち招待講演 8件 / うち国際学会 11件）

1. 発表者名 小野田穰, 馮凌瑜, 藪押慶佑, 杉本宜昭
2. 発表標題 原子間力顕微鏡によるシリセンT相の高分解能観察
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 馮凌瑜, 小野田穰, 藪押慶佑, 杉本宜昭
2. 発表標題 原子間力顕微鏡を用いたAg(111)上シリセンのT相の構造解析
3. 学会等名 第67回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 Y. Sugimoto
2. 発表標題 Determination of adsorption structures of small molecules using atomic force microscopy
3. 学会等名 The 4th international symposium on "Elucidation of Property of Next Generation Functional Materials and Surface/Interface" (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 Y. Sugimoto
2. 発表標題 Imaging and force spectroscopy of individual atoms/molecules using atomic force microscopy
3. 学会等名 The 81st Okazaki Conference, Forefront of Measurement Technologies for Surface Chemistry and Physics in Real-Space, k-Space, and Real-Time (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 馮凌瑜, 藪押慶祐, 小野田穰, 杉本宜昭
2. 発表標題 原子間力顕微鏡を用いたAg(111)上のシリセンTフェーズの構造解析
3. 学会等名 2019年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 杉本宜昭
2. 発表標題 原子間力顕微鏡による単原子分子計測と操作
3. 学会等名 日本顕微鏡学会走査プローブ顕微鏡分科会技術セミナー・研究会(招待講演)
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 L. Feng, J. Onoda, K. Yabuoshi, and Y. Sugimoto
2. 発表標題 Structural Identification for T phase of Silicene on Ag(111) by High-resolution AFM Imaging
3. 学会等名 22th International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy (nc-AFM 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 杉本宜昭
2. 発表標題 原子間力顕微鏡による単原子分子計測と操作
3. 学会等名 科学技術交流財団 第4回「ポストグラフェン材料のデバイス開発研究会」(招待講演)
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 杉本宜昭
2. 発表標題 原子間力顕微鏡を用いた単原子分子の計測・制御技術の開発
3. 学会等名 日本顕微鏡学会 第75回学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2019年～2020年

1. 発表者名 藪押慶祐, 杉本宜昭
2. 発表標題 原子間力顕微鏡を用いたAg(111)表面上の多層シリセンの構造解析
3. 学会等名 第66回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 杉本宜昭
2. 発表標題 原子間力顕微鏡を用いた単原子の計測と操作
3. 学会等名 第29回科学技術交流フォーラム「最先端計測分析技術の開発と高度解析技術の進化」（招待講演）
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 馮凌瑜, 藪押慶祐, 小野田穰, 福田将大, 尾崎泰助, 杉本宜昭
2. 発表標題 原子間力顕微鏡を用いたAg(111)上のシリセン(R13×R13)R13.9°相の構造解析
3. 学会等名 2018年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 藪押慶祐, 杉本宜昭
2. 発表標題 Ag(111)表面上に形成したSi ベース二次元物質のAFM 観察
3. 学会等名 2018年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 K. Yabuoshi and Y. Sugimoto
2. 発表標題 Characterization of Silicene $4/3 \times 4/3$ Phase on Ag(111) Surface with Atomic Force Microscope
3. 学会等名 14th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-14) in conjunction with 26th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM26) (国際学会)
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 L. Feng, K. Yabuoshi, J. Onoda, M. Fukuda, T. Ozaki and Y. Sugimoto
2. 発表標題 High-resolution Imaging of Silicene (13×13)R13.9° Structure on Ag(111) by Atomic Force Microscopy
3. 学会等名 14th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-14) in conjunction with 26th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM26) (国際学会)
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 J. Onoda, L. Feng, K. Yabuoshi, M. Fukuda, T. Ozaki and Y. Sugimoto
2. 発表標題 High Resolution AFM Observation of Silicene on Ag(111) by Active Imaging
3. 学会等名 14th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-14) in conjunction with 26th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM26) (国際学会)
4. 発表年 2018年～2019年

1. 発表者名 藪押慶祐, 馮凌瑜, 小野田穰, 福田将大, 尾崎泰助, 杉本宜昭
2. 発表標題 Ag(111)表面上シリセン 13x 13 R13.9°相の構造決定
3. 学会等名 第79回応用物理学会 秋季学術講演会
4. 発表年 2018年~2019年

1. 発表者名 馮凌瑜, 藪押慶祐, 小野田穰, 杉本宜昭, 福田将大, 尾崎泰助
2. 発表標題 Ag(111)表面上のシリセンの高分解能AFMイメージング
3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会
4. 発表年 2018年~2019年

1. 発表者名 Y. Sugimoto
2. 発表標題 High resolution imaging of water molecules by non-contact atomic force microscopy
3. 学会等名 SPSTM-7 & LTSPM-1 International Conference 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年~2019年

1. 発表者名 Y. Sugimoto
2. 発表標題 AFM imaging of water molecules on metal
3. 学会等名 The 3rd International Symposium on "Recent Trends in the Elucidation and Function Discovery of Next Generation Functional Materials of Surface / Interface Properties (招待講演)
4. 発表年 2018年~2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

研究室HP
<http://www.afm.k.u-tokyo.ac.jp/>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------