

## 様式 C-19

# 科学研究費補助金研究成果報告書

平成 21 年 5 月 21 日現在

研究種目： 基盤研究 (C)  
研究期間： 2005～2008  
課題番号： 17540299  
研究課題名 (和文) フェルミオン ボゾン相互作用を通じた量子コヒーレント過程による  
固体表面構造操作  
研究課題名 (英文) Structural manipulation of solid state surfaces with quantum  
coherent process of fermion-boson interaction  
研究代表者  
河合 伸 (KAWAI HIROSHI)  
九州大学・大学院理学研究院・准教授  
研究者番号： 60204674

研究成果の概要：走査トンネル顕微鏡 (STM) を使った固体表面の構造操作について、機構を理論的に明らかにした。特に、STM 探針から離れた表面原子操作について明らかにした。STM を使い半導体表面電子状態に注入された電子のコヒーレンス長について、フェルミオンである電子とボゾンである格子振動との相互作用を量子散乱機構としたコヒーレンス長の一般的表式を求め、ゲルマニウム表面でコヒーレンス長が長大になるバイアス電圧の存在を示した。

### 交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2005 年度	1,500,000	0	1,500,000
2006 年度	800,000	0	800,000
2007 年度	600,000	180,000	780,000
2008 年度	500,000	150,000	650,000
年度			
総計	3,400,000	330,000	3,730,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学

キーワード：固体表面、走査トンネル顕微鏡、構造操作、量子散乱、物性理論

### 1. 研究開始当初の背景

(1) 走査トンネル顕微鏡を使った金属表面の原子レベルの構造操作が行なわれていた。さらに、半導体表面の構造操作に関する実験も行なわれるようになった。シリコンとゲルマニウムの 001 表面は、最も基本となる半導体表面である。その基本構造は、ダイマー

が規則的に配列したものであり、その規則的構造は  $c(4 \times 2)$  構造と呼ばれる。2000 年ころから、低温で走査トンネル顕微鏡を使った構造操作がシリコンとゲルマニウムの 001 表面で行なわれるようになった。特に、80 K のゲルマニウムの 001 表面で、トンネル顕微鏡探針から離れた表面位置のダイマー規則構造の操作が報告された。その到達

距離は電子注入では 100nm 程度におよぶ。正孔注入では、数ナノメートルに制限されている。我々の研究で、その電子正孔非対象性は、表面電子構造の次元性の差異にあることを明らかにしていた。しかし、その到達距離を制限する機構については明らかでなかった。

## 2. 研究の目的

(1)フェルミオンである電子とボゾンである格子振動との相互作用を通じた量子コヒーレント過程によるトンネル顕微鏡探針から離れた位置での半導体表面構造操作の機構の解明

(2)半導体表面構造の低エネルギー電子励起による構造変化を電子-格子振動との相互作用を通じた量子散乱理論によりあきらかにする。

(3)走査トンネル顕微鏡観測が半導体表面構造の長距離構造に与える影響を解明する。

## 3. 研究の方法

(1)第一原理計算の結果に基づきダイマー系モデルポテンシャルを求め、その結果をもとに電子系-振動系の結合定数を求めた。

(2)量子散乱理論に基づくグリーン関数法により散乱確率を求めた。グリーン関数に重要な自己エネルギー補正は、バンド構造を簡略化して、複素積分法により解析的に求めた。

(3)散乱確率から古典的マクロな時間スケールでの遷移確率をもとめ、古典的スケールでのマスター方程式を数値的に求めた。時間分解モンテカルロシミュレーションを行なった。

(4)複合対称性をもつ系がゆらぐ環境のもとで成長する動的過程について、モンテカルロシミュレーションを用いて構造変化を調べた。

(5)メソスケールのランダムなヘテロ構造をもつ量子系の輸送現象について、有限温度グリーン関数法を用いてフェルミオン-ボゾ

ン相互作用によるコヒーレンスの温度変化を求めた。

## 4. 研究成果

(1) 走査トンネル電子顕微鏡により半導体面に注入された表面電子バンド伝播電子のコヒーレンス長を決定する新たな表式をもとめた。これは、従来知られている機構とは全く別の機構に世界初の表式である。金属表面では、電子正孔生成励起によりコヒーレンス長が制限されているが、半導体表面では、そのような励起は支配的ではない。本研究により、半導体表面では、コヒーレンス長を支配する素励起は、表面局在振動状態であることが明らかになった。さらに、Ge(001)表面では、特定のエネルギーでコヒーレンス長が巨大な長さになりうることを明らかにした。これによりGe(001)表面局在バンドには、大きな長さまで電子が伝播できる「エネルギーの窓」が存在しうることが明らかになった。エネルギーの窓は、表面バンドの折り畳みがある一次元的表面局在バンドで広く期待でき、電子注入位置から極めて遠い表面構造の操作の理論的基礎が確立した。得られた結果は、Ge(001)表面でのSTMによる定在波観測における減衰距離と半定量的に一致する。Ge(001)表面では、減衰長を支配しているのは、ダイマー局在振動の励起であることが明らかになった。(担当、河合、成清、吉本)

(2)第一原理計算に基づき、Ge(001)表面の種々のダイマー配列構造でのエネルギーの角度依存性をもとめた。この結果に基づき、Ge(001)表面ダイマー系のモデルポテンシャルを開発した。そのポテンシャルから電子系と振動系の結合エネルギーを求めることに成功した。これは、本研究全体の基礎となる重要な結果である。(担当、吉本、河合)

(3)Si(001)表面で観測される低速電子線照射による構造変換について、ダイマー局在振動のインコヒーレントラダークライミング過程に基き研究した。構造変換レートの温度依存性は、実験結果をよく再現する。振動励起は間欠的であり、実験で報告されている電子線電流の線形依存性を説明する。この研究結果により、ドーパント種依存性についても予想することができた。

(4) 低温Si(001)表面では、低速電子線照射によりダイマー配列の秩序構造が数百秒のオーダーで失われていく。これは、表面局在電子状態へ励起された電子による局在振動励起が原因であることを明らかにした。励起電子による、表面局在振動励起に関しては、多くの系で多くの研究がなされてきた。しかし、それらは、全て、調和振動近似のもとで理論研究されてきた。本研究では、低温Si(001)表面ダイマー系で調和近似を行なわないで、振動の固有エネルギー、固有振動状態を量子力学的に求めた。高エネルギー振動状態では、固有状態の調和振動状態へのコンポーネントは広く分布していることを明らかにした。これをもとに、一つの振動オペレーターによる離れたエネルギー準位への遷移が可能であることを明らかにした。これは、従来全く知られていない振動励起過程であり、シリコン以外の多くの表面系で実現する可能性を示した。(担当：河合)

(5) Ge(001)表面のダイマー列中のキルクの電子状態密度を第一原理計算で求め、キルクの空状態のエネルギーは、 $\Gamma$ バンドの底よりも高いことを明らかにした。これは、キルクがある条件下でSTMチップの直下に引き寄せられることを説明する可能性がある。(担当：吉本)

(6) 金属表面吸着系における自己組織化の機構の理解は固体表面構造操作の研究を目的としている本研究において重要なものである。吉本は実験グループとの共同研究により窒素吸着Cu(001)表面に見られる自己組織化構造が酸素との共吸着によって変化する様子を研究した。酸素原子が窒素原子の島に取り込まれていることが解り、理論的に予測される酸素原子の吸着による表面歪みの変化が実験的に得られた自己組織化構造の変化を説明することが解った。(担当：吉本)

(7) ランダムに量子ドットが分布する固体表面における電流の温度依存性を新しく提案した現象論的モデルに基づいて議論した。このモデルでは、フェルミオン-ボゾン相互作用から導かれる引力とクーロン斥力による電子間の量子多体効果を考慮している。ランダムさが小さい場合は、量子コヒーレント過程が支配的となり、電流は超伝導的ないし金属的な温度依存性を示す。ランダムさを大きくしていくと徐々にコヒーレンスが破壊され、絶

縁的となるクロスオーバーが見られた。これは、関連する実験を統一的に説明するはじめての理論的結果である。(担当：成清)

(8) 固体表面は複合対称性を持った系であり、その動的過程の理解は、本研究にとって重要である。同様に、細胞分化系は複合対称性を持っており、その動的過程を理解することは、本研究に大きく貢献する。また、幹細胞からの細胞分化の研究は、最近医療実用への道が拓かれつつあり注目を集めている。このような観点から発生過程を経て幹細胞が分化する様子をイジング型の細胞間相互作用モデルを提案し、モンテカルロシミュレーションを行うことにより詳細に調べた。そこでは細胞分裂を繰り返すことにより系は積層し、固体表面と類似の現象が起こっている。細胞の適応度(ポテンシャル)が時間発展する様子(エビジェネティック・ランドスケープ)を物理モデルに基づいて初めて構成した。(担当：成清)

(9) 不純物がドーピングされた半導体の量子輸送現象の基礎的理解は、本研究にとって重要である。半導体に不純物をドーピングしてランダムネスをコントロールした系における量子輸送現象の研究は長い歴史をもつ。その金属絶縁体転移は、アンダーソン転移ないしモット転移として興味をひきつけている。特に、金属絶縁体転移における臨界指数の標準理論からの逸脱は未解決問題として残された最後のものである。この指数問題に、我々は、銅酸化物の高温超電導体などの強相関電子系において、我々が提唱した遍歴局在双対性の観点からアプローチした。標準理論においては、電子状態のうち、遍歴(コヒーレント)成分しか考慮されておらず、局在(インコヒーレント)成分を取り込んだ理論化はこれまでになされていなかった。標準理論からは導かれない臨界指数は、インコヒーレントな成分のクラスター分布を特徴づけるものであることを示した。本研究により、臨界指数の標準理論からの逸脱は、局在(インコヒーレント)成分の寄与によるものであることが明らかにされた。(担当：成清)

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9件)

M. Nakagawa and O. Narikiyo,  
"Epigenetic Landscape of Interacting  
Cells: A Model Simulation for  
Developmental Process", (2009)  
arXiv:0901.0180, 査読無

Hiroshi Kawai, Yoshihide Yoshimoto,  
Osamu Narikiyo, Yosuke Hanawa,  
Akimasa Imamura, "Model potential  
of dimer system and coherence length  
of electron injected by scanning  
tunneling microscope on Ge(001)  
surface", Surface Science Vol 602 No. 18  
(2008) pp. 3010-3017. 査読有

— Hiroshi Kawai, Osamu Narikiyo and  
Kensuke Matsufuji, "Structural Phase  
Transition between  $c(4 \times 2)$  and  $p(2 \times 2)$   
Structures on Si(001) Surface under  
Observation by Scanning Tunneling  
Microscopy", Journal of Physical  
Society of Japan, Vol. 76, No. 3 (2007)  
034602, 査読有

— Y. Takagi, K. Nakatsuji, Y. Yoshimoto,  
and F. Komori, "Superstructure  
manipulation on a clean Ge(001)  
surface by carrier injection using an  
STM", Physical. Review. B 75, (2007)  
115304 査読有

— K. Yagyu, K. Nakatsuji, Y. Yoshimoto,  
S. Tsuneyuki, and F. Komori,  
"Nanopattern formation on Cu(001)  
surface coadsorbed with nitrogen and  
oxygen", Surface. Science. Vol. 601, No.  
21, (2007) pp. 4837-4842 査読有

— O. Narikiyo, "Note on the exponent  
puzzle of the Anderson-Mott  
transition",  
(2007) arXiv:cond-mat/0703823 査読無

— Hiroshi Kawai, Osamu Narikiyo and  
Yuuki Oota, "Structural fluctuation of  
dimers on Ge(001) surface near  
transition temperature", Surface  
Science, Vol 600 No. 9 (2006) pp.  
1758-1762, 査読有

O. Narikiyo,  
"Superconductor-Metal-Insulator  
Crossover in Disordered Thin Films"  
Journal of the Physical Society of Japan  
Vol. 75, No. 9, (2006) 95002 査読有

Y. Takagi, Y. Yoshimoto, K. Nakatsuji and  
F. Komori, "Nonlocal Manipulation of  
Dimer Motion at Ge(001) Clean Surface  
via Hot Carriers in Surface States",  
Journal of the Physical Society of Japan,  
vol 74, No. 12, (2005) pp. 3143-3146 査読  
有

[学会発表](計 12件)

榎崎将、河合伸、電子励起された Si(001)  
表面ダイマー系局在振動の flipping 運動への  
転換、日本物理学会第 64 回年次大会  
2009年3月29日、立教大学(東京都)

河合伸、低速電子線照射による Si(001)表  
面構造変換、第4回励起ナノプロセス研究会、  
2008年11月22日、フォルテワジマ  
(和歌山市)

森嶋大輔、河合伸、低速電子線による低温  
Si(001)表面振動励起と回折強度時間依存性、  
日本物理学会第 63 回年次大会  
2008年3月24日、近畿大学(東大阪市)

森嶋大輔、河合伸、低速電子線による  
Si(001)表面ダイマー系の振動励起、日本物理  
学会2007年春季大会、2007年3月2  
0日、鹿児島大学(鹿児島市)

河合伸、Theoretical Study of Dynamical  
Structure Transformation on  
Semiconductor Surface Excited by  
Tunneling Electrons、日本物理学会2007  
年春季大会、2007年3月19日、鹿児島  
大学(鹿児島市)

河合伸、成清修、大電流 STM 観測下での Ge(001)表面ダイマー系実効温度、日本物理学会 2006 年秋季大会、2006 年 9 月 26 日、千葉大学(千葉市)

塙洋祐、吉本芳英、河合伸、成清修、Ge(001)表面での微分コンダクタンススペクトルに於ける、温度効果の理論的研究、日本物理学会第 61 年次大会、2006 年 3 月 30 日、愛媛大学(松山市)

Hiroshi Kawai, Osamu Narikiyo and Kensuke Matsufuji, Structural phase transition between  $c(4 \times 2)$  and  $p(2 \times 2)$  structures on Si(001) surface under observation of STM, The University of Tokyo International Symposium 2006, Nanoscience at Surfaces ISSP-10 2006 年 9 月 12 日、東京大学(柏市)

高木 康多、吉本 芳英、中辻 寛、小森 文夫、Ge(001)表面のトンネルキャリアー注入による非局所構造変化、日本物理学会 2006 年 秋期大会、2006 年 9 月 25 日、千葉大学(千葉市)

高木 康多、吉本 芳英、中辻 寛、小森 文夫、Ge(001)表面のトンネルキャリアー注入による構造変化 II、日本物理学会第 61 回年次大会、2006 年 3 月 27 日、愛媛大(松山市)

F. Komori, Y. Takagi, Y. Yoshimoto, and K. Nakatsuji, Non-local bond-angle manipulation by injected tunneling carriers on clean Ge(001) surface, International Symposium on Surface Science and Nanotechnology 4, Saitama, Japan, 14-17 November, 2005

高木康多、吉本芳英、中辻寛、小森文夫、境界移動で観測した Ge(001)表面状態伝導の解析、日本物理学会 2005 年 秋期大会 2005 年 9 月 22 日、同志社大学(京田辺市)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

河合 伸 (KAWAI HIROSHI)  
九州大学・大学院理学研究院・准教授  
研究者番号：60204674

### (2) 研究分担者

成清 修 (NARIKIYO OSAMU)  
九州大学・大学院理学研究院・准教授  
研究者番号：60252631  
(2005 年～2007 年)

吉本 芳英 (YOSHIMOTO YOSHIHIDE)  
東京大学・物性研究所・助教  
研究者番号：80332584  
(2005 年～2007 年)

### (3) 連携研究者

成清 修 (NARIKIYO OSAMU)  
九州大学・大学院理学研究院・准教授  
研究者番号：60252631  
(2008 年)

吉本 芳英 (YOSHIMOTO YOSHIHIDE)  
東京大学・物性研究所・助教  
研究者番号：80332584  
(2008 年)

