

専攻	総合エネルギー工学	学籍番号		指導教官氏名	
申請者氏名	内田裕久				

論 文 要 旨

論文題目	走査トンネル顕微鏡による原子操作とそれを応用したSi表面の研究
------	---------------------------------

(要旨 1,200 字以内)

走査トンネル顕微鏡 (STM) を使って、Si(111)7×7表面における原子 1 個単位の操作、原子操作の実時間検出、原子の引き抜きを利用したSi表面の結合状態、そして STMの探針からSi表面への水素原子の局所的な供給について研究を行った。

STMの探針と試料の間に電圧パルスを加えることによって、Si原子を 1 個単位でSi(111)7×7表面から引き抜くことができた。また、-6Vの電圧パルスを印加した場合、引き抜かれたSi原子の約20%が再びSi表面に供給された。供給された原子が 1 個の場合、その多くはSi(111)7×7表面のレストアトムの真上に供給され、そしてこの供給されたSi原子を移動させることが可能である。このような、基本的な原子操作を用いて、Si(111)7×7表面から原子を 1 個ずつ引き抜くことによる原子スケールのパターンの作製、表面へ供給したSi原子の再除去、そして欠陥の修復を行った。

原子操作を検出するため、現在、電圧パルス印加前後でSTMを使って表面を観察しているが、この方法は時間がかかってしまうという欠点がある。そこで、ピエゾ素子に加えられているフィードバック電圧、もしくはトンネル電流の変化から原子操作を検出する方法を試みた。この方法では、原子操作の80%を検出することができた。この実験から、原子操作は、電圧パルスの立ち上がり時とパルス終了後に起こる割合が多いことが明らかになった。前者は、電圧パルスの立ち上がり時に電界のオーバーシュートが生じることが原因である。しかし、後者の電圧パルス終了後の原子の供給は、時間の指数関数に比例して減少しており、準安定状態になった原子が探針から供給されると考えられるが、その詳細な機構はまだ明らかではない。

原子の引き抜きを利用し、結晶学的に異なる位置にある原子の引き抜き確率を求め、その確率の比からそれらの原子の間の結合エネルギーの差を求める方法を考案した。STMにおいて、Si原子は電界蒸発によって引き抜かれると考えられ、この方法は電界蒸発の理論を応用したものである。実験結果から、Si(111)7×7表面のセンター位置のSi原子は、コーナー位置のSi原子より引き抜かれやすく、その確率の比は約1.6であることが分かった。開発した結合エネルギーの差を見積もる方法を用いると、引き抜き確率の比から、センター位置のSi原子はコーナー位置のSi原子より結合エネルギーが約0.01 eV小さいと見積もることができた。

次に、この結合エネルギーの差を求める方法をSi(111)7×7表面の欠陥（空孔）周辺のSi原子に適用した。空孔周辺ではSi原子は引き抜かれやすくなっており、特に同じ半単位胞にある空孔に接する2個のSi原子は引き抜かれやすい。ここで開発した方法を使うと、これらのSi原子は結合エネルギーが約0.04 e V小さくなっていると見積もることができる。

この欠陥（空孔）を含むSi(111)7×7表面を、STMで試料バイアス電圧の極性を変えて観察することによって、空孔周辺のSi原子の電子状態が変化していることが分かった。この表面を正の試料バイアス電圧で観察すると、空孔周辺のSi原子には明るさの違いがほとんど見られない。しかし、負の試料バイアス電圧で観察すると、空孔周辺のSi原子が顕著に明るくなっている。極性によって明るさに違いが現れることから、これは原子の高さが変化しているのではなく、電子状態が変化しているためであると考えられる。コーナー位置のSi原子が空孔である場合、同じ半単位胞内の空孔に接する2個のSi原子の電子状態は、約60%が対称（明るくなる）に変化する。しかし、センター位置のSi原子が空孔の場合、同じ単位胞内のSi原子の電子状態は、約80%が左右非対称（左または右側が明るくなると、反対側は暗くなる）に変化していることが分かった。空孔周辺の非対称な電子状態は、原子構造の対称性を下げて電子の縮退をとり、エネルギーが低くなるJahn-Teller効果によって生じている可能性がある。

STMの探針からSi表面に異種原子を供給する方法を試みた。Pt探針に水素ガスを解離吸着させ、STM像観察時より高い電圧を加えると、探針に吸着している水素原子は電界蒸発して試料表面のSi原子に吸着する。この実験では、水素ガス雰囲気中、そして水素ガスにさらしたPt探針を使って真空中で行っても、試料表面へ水素原子を供給することができた。しかし、水素ガスにさらしたPt探針を真空中で使った場合、探針への水素原子の補給源がないため、実験を続けると水素原子を表面に供給できなくなった。同様の実験をAuおよびAg探針を用いて行ったが、探針から試料表面に水素原子を供給することはできなかった。これは、AuおよびAg表面が水素ガスを解離吸着しないためであると考えられる。また、W探針を使用した場合、水素雰囲気中でトンネル電流が不安定になり、STM像の観察を続けることができなかった。これは、W探針と水素が反応して絶縁物層が形成されたためであると考えられる。