

「極限環境状態における現象」  
平成9年度採択研究代表者

藤田 博之

(東京大学生産技術研究所 教授)

## 「局所高電界場における極限物理現象の可視化観測と制御」

### 1. 研究実施の概要

真空トンネルギャップ中には、原子サイズの局所領域に大きな電界・電流・電磁場・電子相互作用が集中し、様々な動的原子・電子過程、励起・緩和過程、局所化学過程が発現する。本研究は、電界 $10^7\text{V/cm}$ 、電流密度 $10^8\text{A/cm}^2$ 、という極限的状況下における単一原子・分子の振舞いを可視化観察し、その物理特性の解明や制御を行うことが目的である。これを達成するため、大きく分けて3つの柱を建てて研究を進めている。まずマイクロマシングループでは、半導体マイクロマシン技術により高性能・高機能の1チップマイクロマシンSTMを実現した。わずか0.5mm角程度の大きさのデバイスで、トンネルギャップを0.1nmの精度で調節可能である。今後さらに改良を進め、原子オーダの現象や電界を制御するナノツールの実現を目指す。第2の可視化グループでは超高分解能電子顕微鏡を製作し、単一原子の可視化を目指す。電子銃から出る位相のそろった電子ビームを2つに分け、一方は試料(トンネルギャップ)を通し、もう一方は参照ビームとしてそのまま進行させる。両者の電子波の干渉測定により試料を通過した電子ビームの位相の変化を検出し画像を得る。装置が完成したので、今後は電子ビームをマイクロSTMのトンネルギャップ中に通すことにより、ギャップ中の原子・分子の位置や電界分布を可視化する手法を確立する予定である。第3の理論解析グループでは、局在する高電界場中での原子や分子の振る舞いや、固体からの冷電子放出機構を第一原理に基づく理論により解析する。従来法に比べ、簡易なアルゴリズムを考案した。最終的には、実験と理論解析の結果を対比することで、STMにおけるトンネル現象の精密で実証的な描像を確立し、局所高電界場における極限物理現象を原子レベルで理解することをめざしている。

### 2. 研究実施内容

#### 1. マイクロマシン研究グループ

マイクロマシングループでは、次の三つの成果を得た。これについて特許を出願すると同時に、学会で発表し、論文にまとめて投稿した。

- (1) シリコンマイクロマシニング加工を利用し、ナノワイヤを作る技術確立した。ナノ領域計測のためのプローブはナノメートルオーダーの寸法を持つことが必須である。また、先端が鋭利に尖っている必要がある。しかもその構造が明確に決定でき、また多数のプローブを同時に再現性良く形成できなければならない。数十nmの厚みの単結晶シリコン膜に、結晶異方性エッチングと局所酸化（LOCOS）を巧みに用いて、底辺と高さが数十nmの二等辺三角形の断面をもつシリコンナノワイヤを安定に作製できる。
- (2) ナノメートル単位の探針を持つマイクロマシンSTMの製法として、ドライエッチングのみを用いる方法、シリコンナノワイヤーとドライエッチングを用いる方法の二つの方法確立した。
- (3) シリコンナノワイヤ技術を応用して、互いに90度の角度をなす2本のプローブ（ツインプローブ）を製作した。プローブの微小動作のために、振動等の影響を受けにくい頑丈な熱駆動のアクチュエータをツインプローブと一体化し、高分解能の透過型電子顕微鏡で観察しながら駆動することが出来た。図1にその電子顕微鏡写真を示した。このプローブの太さは100nm程度で、その先端はわずか数百nmしか離れていないため、これを用いて、量子細線などナノメートル領域の構造物性や、長い鎖状分子の性質を明らかにすることが期待できる。

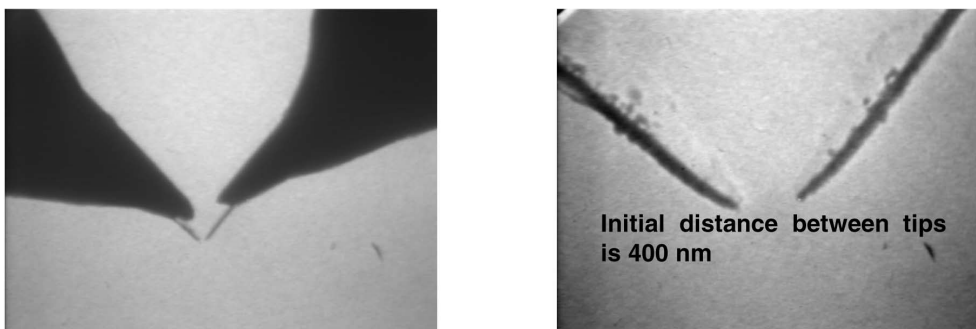


図1 マイクロアクチュエータと一体化したツインナノプローブの電子顕微鏡写真

## 2. 可視化研究グループ

可視化グループでは、電子波を用いた干渉計測により極微領域における電界分布と原子構造を計測すること、およびレーザ干渉を用いて新たな計測手法を追求することを目的として研究を進めている。昨年度はこの一環として、下記の具体的なテーマで研究を推進した。

位相解析型高真空超高分解能電子顕微鏡の開発

μ-S T M用電顕試料ホルダの開発

位相解析アルゴリズムの開発と計測精度向上の基礎実験

レーザ干渉計による高精度位相分布計測

## リアルタイム観察システムの予備実験

### $\mu$ -STM、針状試料の電場と微細構造の観察

位相解析型高真空超高分解能電子顕微鏡は、2年度にまたがって開発を進めてきたものであるが、平成12年2月に設置・調整を完了し、目標とした分解能、干渉性および真空度を達成した。 $\mu$ -STM用電顕試料ホルダも、技術的な困難をほぼクリアした。

位相解析顕微鏡法アルゴリズムについては、必要度の高い計算・処理機能の開発を完了するとともに、目的に十分な計算精度を達成した。これと並行して実際の計測における制御およびデータ処理を研究するため、レーザ干渉計を用いた位相計測実験を進め、光導波路内の屈折率分布を可視化することができた。また、計測精度の大幅な向上を可能にする改良型干渉計測装置を考案し、実際の計測に応用すると共に特許を出願した。これらの実験結果を学会で発表し、論文にまとめて投稿した。液晶素子を用いて、リアルタイム観察システムを構成し、外部磁場印加による磁性体薄膜内の磁壁の動的な観察実験を行った。一方、マイクロマシングループで製作したツインナノプローブ試料について、マイクロマシングループと協力して構造・アクチュエータ動作の電子顕微鏡観察を遂行した。

### 3. 理論計算グループ

理論計算グループでは、次の成果を得た。

- (1) 局所高電界場中での電子状態を計算で信頼性高く予測するためには、通常の電子状態計算法とは異なる計算方法を工夫することが不可欠である。我々は、この目的のために既に提案されていた方法より簡明でかつ同等の信頼性が期待できる新たな方法論を開発した。新たに開発した方法をジェリウム模型で表した単純金属表面からの電界電子放出に適用した結果、実験で実現しうる程度の高電界場によって電子放出に対するエネルギー障壁がフェルミ準位を下回る可能性があることを明らかにした。また、実験解析によく利用される従来理論（ファウラー・ノルドハイム理論およびその改良版）が低電界では定性的に妥当であることを確認すると共に、定量性と高電界での振舞いに問題があることを明確に示した。

局所高電界場中における表面原子の挙動を理解するための予備検討として、電界ゼロの状態での表面原子挙動の理論計算による検討を続けている。本年度は特にシリコン表面上の吸着銀原子の振舞いを検討した。従来もっとも安定とされていたHoneycomb-chained-triangle模型より安定な構造模型がごく最近提案されたが、我々はこの新しい構造がエネルギー的により安定であることを第一原理計算によって確かめた。これにより、室温でのHCT構造がどのようなものか、という新たな疑問が生じるが、この点を明らかにすべく第一原理計算とモ

ンテカル口法を組み合わせた計算を進めている。

- (2) 空間分割密度汎関数法によりナノスケール系の電界を解析した。本研究の目的は、任意の形状をした二つ以上のマイクロな電極が、強電界下あるいは大きな電位差でつながっているときの、電子状態、ポテンシャル、電界分布、各電極の化学ポテンシャルを、新しく開発した方法を使って決定することである。ここで、電界下または電位差を伴う複数の電極の電子状態を従来の密度汎関数法(DFT)により求めると、基底状態のみを探しだすというDFTの性質から、非物理解を与えてしまう。その困難を克服するために、我々は空間を各電極ごとに分割し、しかも各空間の状態をセルフコンシステントに決定する"空間分割密度汎関数法"を新しく開発するのに成功した。マイクロマシングループで実現するピラミッド型形状の対向電極を想定し、その材質を、( i ) 量子ジェリウム、( ii ) 古典電極、( iii ) シリコンクラスター (Si<sub>5</sub>) とした場合の解析をおこなった。従来のDFTでは得られなかった正確な電界分布、化学ポテンシャルを計算できた。その結果、ピラミッド頂点付近の電界集中は量子系に比べ古典系で顕著であることがわかった。また、クラスターでは原子構造を反映した電界分布が得られた。以後は実験班との連携を密にし、計算内容をより具体化する予定である。

### 3 . 主な研究成果の発表 ( 論文発表 )

H. Kawakatsu, H. Toshiyoshi, D. Saya, H. Fujita, "A Silicon based nanometric oscillator for scanning force microscopy operating in the 100 MHz range," Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 38(1999), Part 1, No. 6B, pp. 3962-3965

H. Toshiyoshi, D. Kobayashi, M. Mita, G. Hashiguchi, H. Fujita, J. Endo, Y. Wada, "A Digital-to-Analog Converter of Displacement by Integrated Micromechanism," Jpn. J. Appl. Phys. Vol.38(1999) Part 1, No. 6B, 30 June 1999, p. 3962.

H. Toshiyoshi, M. Goto, M. Mita, H. Fujita, D. Kobayashi, G. Hashiguchi, J. Endo, Y. Wada, "Fabrication of Micromechanical Tunneling Probes and Actuators on a Silicon Chip," Japanese J. Appl. Phys. vol. 38, Part 1, No. 12B (Special Issue on Microprocesses & Nanotechnology), Dec. 1999, p.7185-7189.

年吉洋, 小林大, 三田信, 橋口原, 藤田博之, 遠藤潤二, 和田恭雄, 「シリコンマイクロマシニングによるステップアクチュエータ」, 生産研究(東京大学生産技術研究所発行), 第51巻8号, 平成11年8月, p. 647

S. Heike, T. Hashizume, Y. Wada, "Correlation between tip-apex shape and surface modification by scanning tunneling microscopy," Journal of Applied Physics, Vol. 86, No. 8, pp. 4220-4224, October 15, 1999.

Y. Wada, "Proposal of atom/molecule switching devices," J. Vac. Sci. Technol., A 17(4),

pp. 1399-1405, Jul/Aug, 1999.

Y. Wada, D. Kobayashi, H. Fujita, "Micromachine Scanning Tunneling Microscope Research in Japan," Sensor Update, Vol. 6, Part 1, pp. 41-58, 1999.

三田信, 三田吉郎, 年吉洋, 藤田博之, 「遅延マスク法によるシリコンの3次元バルクマイクロ構造」, 電気学会E部門誌, 5月号, pp. 310

M. Mita, Y. Mita, H. Toshiyoshi, T. Oba, H. Fujita, "Multi-height HARMS by planer photolithography on initial surface," Microsystem Technolages, 1999.

K. Tada, K. Watanabe, "Ab initio study of carbon nanotubes in electric fields," Jpn. J. Appl. Phys. 39 (2000) 268.

I. Nakajima, T. Kawai, K. Watanabe, "First-principles determination of potential barriers for field emissions from atomic-scale structures," Surf. Sci. 433-435 (1999) 868.

遠藤潤二, 和田恭雄, 藤田博之, 陳軍, 「電子干渉計測によるナノ構造と電界分布の可視化の試み」, 電気学会論文誌(E)平成12年6月号掲載決定, (平成11年12月7日受理、平成12年2月4日再受理)