

論文審査の結果の要旨

氏名 富松 宏太

本論文は、走査トンネル顕微鏡（STM）を用いて、伝導電子の散乱とそれによって励起される原子振動・構造変化との関係について、今までに無い精緻さでかつ原子レベルで解明した研究である。これらの研究成果は、固体物性の中心課題である電子散乱・原子振動の素過程に対して明瞭な描像を与え、加えて、ナノメータスケール構造体を利用するデバイス等の基礎研究として重要な知見を与えるもので、きわめて貴重な成果といえる。

本論文は7つの章から構成されている。第1章では本研究の背景と関連するこれまでの研究を概観し、その中から生まれた問題意識および本研究の目的が述べられている。第2章では、本研究の実験手法と試料について述べられている。第3章以下で本研究の結果および考察が述べられている。まず第3章では、試料となるゲルマニウム(001)面上に異種原子（シリコンおよび錫原子）を吸着させたときに形成される不純物傾斜ダイマーと呼ばれる構造を、巧妙な方法で曖昧さなしに決定した結果が述べられている。第4章では、STM電流注入によって傾斜ダイマーを振動励起させるのに必要な電子エネルギーを測定し、電子散乱と原子振動励起の関係を明らかにした結果を詳述している。第5章では、STM探針からホールを試料に注入した場合に励起される原子振動について調べられ、そのメカニズムが明らかにされている。第6章では、不純物ダイマーによる電子散乱を電子定在波として観察し、散乱ポテンシャルの詳細を明らかにした結果が述べられている。第7章において本論文で明らかにされた結果、その意義、および今後の研究の展望をまとめている。

STMの発明以来、それによる原子配列の詳細な観察・解析が可能となった。さらに、STMは観察手段としてだけでなく、原子配列構造を人為的に操作するツールとしても使用されるようになった。とくに、STM探針から試料に注入されるトンネル電流によって原子振動が励起され、それによって構造変化を誘起したり準安定構造を作りだせることがわかつってきた。本研究で使用された試料 Ge(001)結晶表面

では、Ge 原子 2 個がペアとなった傾斜ダイマーと呼ばれる単位が最表面上に整列し、その傾きを STM 探針から電流またはホールを注入することによって人為的に反転できることを利用し、結晶最表面を流れる電流とその散乱によって引き起こされる原子の振動・構造変化をあいまいさ無く対応付けることに成功した。その結果、特別な物質系とはいえ、電子散乱と原子振動現象の素過程の詳細が明らかになった。本研究は、再現性のよい良く規定された試料表面の作成技術および STM 実験技術の向上によるところがおおきく、そのような最先端の実験技術を駆使して行われた。

本研究の成果は大きく分けて 4 つある。

(1) 不純物傾斜ダイマーの構造決定：

Ge(001) 表面上に極微量の Si または Sn を蒸着すると、Ge と Si、または Ge と Sn 原子がペアを作り、傾斜した不純物ダイマーが形成されることを明らかにした。その不純物ダイマーの傾斜方向を、STM 電流注入によって変化させることで原子種を同定できた。ダイマーの傾斜方向は STM 電流注入によって制御性よく可逆的に反転できることも示した。

(2) 電子注入による傾斜ダイマーの振動励起の解明

Ge-Ge ダイマーのほかに、上述の Ge-Si、Ge-Sn ダイマーの傾斜方向を STM バイアス電圧を変えて反転させることによって、反転するのに必要な電子エネルギーを測定することができた。それは第 1 原理理論によって計算された反転時のエネルギー障壁の値と相関がないことが明らかとなった。他方、ダイマーの傾斜方向の反転の際に生じる位相欠陥（シンク）のエネルギー状態を計算した結果、それが測定された電子エネルギーとよく相関した。このことから、注入された電子がシンク電子状態に一時的にトラップされ、それが脱励起する際にダイマーの振動が励起されてダイマーの傾斜が反転するという共鳴散乱過程を提案した。このモデルは、今まで明らかにされていなかったダイマー反転のメカニズムを素過程まで立ち戻って理解する重要な知見といえる。

(3) ホール注入による傾斜ダイマーの振動励起の解明

特定のダイマーの直上に STM 探針を固定してホールを注入しながら

ら、トンネル電流の時間依存性を測定してダイマーの傾斜反転の頻度を実時間で測定した。その結果、ダイマー反転が多電子による複数段階励起ではなく、1電子過程で励起されることが明らかとなった。また、ダイマーのバックボンドと呼ばれる原子結合状態にホールを注入することによってダイマー反転が引き起こされることも見出した。

(4) 不純物ダイマーによる電子散乱ポテンシャルの解明

不純物ダイマー近傍に形成される電子定在波を微分コンダクタンス像として観察し、その位相シフトを実験的に求めることによって、不純物ダイマーが作る散乱ポテンシャルの高さおよび符号（引力ポテンシャルか斥力ポテンシャルか）を実験的に決める成功した。また、たった一個のダイマーの傾斜方向を反転させることによって表面電子の伝導をさえぎったりさえぎらなかったりすることができることも示した。これは、傾斜ダイマーが電子伝導に対して原子レベルのスイッチとしてはたらくことを意味しており、ナノ電子デバイスへの応用が期待できる新規な現象である。

以上のように、論文提出者は、STM探針から注入された電子の散乱と、それによって励起される原子振動の関係を素過程にまで踏み込んで理解することに成功した。このような原子レベルの電子散乱と原子振動・構造変化の関係を解明した研究は、今までの構造物性には無い新しい局面を切り開いたもので、その独創性が認められたため、博士（理学）の学位論文として十分の内容をもつものと認定し、審査員全員で合格と判定した。なお、本論文は、共同研究者らとの共同研究であるが、論文提出者が主体となって実験の遂行や結果の解析を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。