論文審査の結果の要旨

氏名　川原一晃

本論文は、銀(111)面上に成長させたシリセンの構造を決定した成果を報告している。論文は以下の四章で構成されている。第一章は、研究の背景と位置づけを述べている。第二章以降は結果及び考察である。第二章、代数的整数論を応用した 2 次元格子整合理論、第三章、Ag(111)単結晶上のシリセンの構造となっている。第四章では研究成果について総括している。以下で各章の特徴について詳しく述べる。

第一章では、新奇ディラック電子系候補である Si の 2 次元ハニカム格子(シリセン)について理論的に予測されている物性及び銀(111)面上のシリセンの先行研究について述べている。本論文の主題は銀上に形成したシリセンの構造を実験的に明らかにすることである。銀上のシリセンの走査トンネル顕微鏡(STM)による像は個々の Si 原子が見えないので、その構造は論文によりその結論が異なる。また、銀上のシリセンの電子状態についても理論的に予測されているようにディラック電子系であるとの主張とそうではないとの主張がある。この矛盾を解消するためにも構造決定が必要であることを述べている。また、銀上のシリセンの成長条件についても不明な点があることも述べている。

第二章では、代数的整数論を使い 2 つの 2 次元格子の整合を数学的に議論し、シリセンの構造モデルを構築するアルゴリズムを導出している。銀上のシリセンの STM 像は個々の原子が見えず周期性のみが確認できるため、周期性の情報から構造モデルを構築する方法を構築するのが第二章の目的である。2 次元格子を複素平面上で考えることで、2 つの 2 次元格子の整合を、代数的整数論を用いて議論することができ、ベクトルを用いた解析より深い結果が得られることを示している。2 つの 2 次元格子を重ねてできる超構造の対称性は代数体の不変量であるイデアル類群により決まることを明らかにしている。また、応用例として実験的にある周期性が観測されたときその構造モデルを構築するアルゴリズムを導出している。この方法では、可能性のあるすべてのモデルをピックアップできているか、数学的に不適当なモデルを含んでいないかといった従来のモデル構築法の問題点を解決できる。

第三章ではシリセンを銀(111)上に形成し、その構造について報告している。様々な条件で Si を蒸着し、低速電子回折(LEED)及び STM を用いた観察により、シリセンの成長条件を詳細に探索している。LEED の解析から銀上のシリセンの構造は成長条件に強く依存し、4x4, √13x√13, 4/√3x4/√3 などの複数の構造をとることを明らかにした。また、STM 像から 4x4, √13x√13 が単層構造なのに対し、4/√3x4/√3 は多層構造であることも示した。これらの結果を基に第二章で構築したアルゴリズムを用いて構造モデルを提案している。さらに、STM と全反射高速陽電子回折を用いて銀上のシリセンが特徴

的な成長様式をとることも明らかにした。単層構造は 2 次元的に成長し、基板を覆い尽くすのに対し、多層構造は島状に成長し、基板を覆い尽くさないことを示した。このように銀上のシリセンは単層以下と多層のときでその成長様式が大きく変化することを明らかにした。

単層構造(4x4 相)について、アルゴリズムで構築した構造モデルを基に、LEED を用いた詳細な構造解析を行った。回折スポット強度を入射電子エネルギーの関数としてプロットした I-V 曲線を動力学理論で解析し、シリセンの詳細な構造を明らかにしている。4x4 相は Si のハニカム格子であることを実験的に明らかにした。基板銀原子が大きく変位していることも示した。LEED の結果は STM 観察や第一原理計算と矛盾なく対応することを示した。銀上のシリセンの電子状態についても考察している。銀原子の変位はシリセンと銀基板との相互作用を意味しており、銀上のシリセンはディラック電子系ではないという主張を強く後押しするものである。

多層構造(4/√3x4/√3 相)についても LEED I-V 曲線を用いた構造解析を行った。ハニカム格子を積層した構造やハニカム格子をベースとするモデルはいずれも実験データを再現しなかった。一方、既知の物質である、Si(111)上の銀-√3x√3 再構成は実験データを良く再現した。この結果は、多層構造はハニカム格子が積層したものではなく、既知の物質であることを示している。また、STM 観察結果や、電子エネルギー損失分光の結果もこの結果を後押しする。以上の結果から多層構造は Si(111)上の銀-√3x√3 再構成と同一であると結論している。

第四章では、これらの結果の総括および今後の展望について述べている。

論文提出者は、本論文に記載された研究の主たる実施者として寄与した。従って、博士(科学)の学位を授与できると認める。

以上１９９０字