

平成18年 8月25日

氏名 野田 真史



21世紀 COE プログラム

拠点：大学院工学系研究科

応用化学専攻、化学システム工学専攻、  
化学生命工学専攻、マテリアル工学専攻

“化学を基盤とするヒューマンマテリアル創成”

平成18年度前期リサーチ・アシスタント報告書

ふりがな 氏名	のだ まさし 野田 真史	生年月日
所属機関名	東京大学大学院 工学系研究科 マテリアル工学専攻	
所在地	〒 113-8656 東京都文京区本郷7-3-1 電話 03-5841-1286	
学年	博士課程 2年	
研究題目	金吸着シリコン表面の構造と相転移に関する研究	
指導教員の所属・氏名	東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻 渡邊 聡	

## I 研究の成果 (1000字程度)

(図表も含めて分かりやすく記入のこと)

金吸着シリコン表面の構造はまだ十分に理解されていないという背景がある。その上、我々の Au・Si 吸着量変化を考慮に入れた計算では Au/Si(111)-(5×2)構造が安定ではないという結果を得た[1]。5×2 構造がステップ近傍で核生成するという実験報告を考えると、ステップの影響で 5×2 構造が安定になる可能性が考えられる。そこで、我々は第一原理計算を用いて Au/Si(111)平坦表面及び微斜面の安定構造を計算することにより、その可能性を検討した。この評価には Convex Hull を作製する手法を用いた[2]。

ステップの影響を調べる第一段階として、ステップで核生成が起きることを示すためにテラス及びステップにおける Au 吸着エネルギーを計算した。まず、テラスにおける Au 吸着エネルギーを考えるために、Si(111)平坦表面の安定構造として知られる 7×7 DAS(Dimer Adatom Stacking fault)構造の非積層欠陥層である 2×2 構造を表面平行方向にそれぞれ 2 倍にした 4×4 構造を基板として用い、Convex Hull を作製した。その結果、4×4 構造( $\theta_{Au}=0$  ML)と、4×4 構造の表面第 1 層の Si 原子を 1 つだけ Au 原子に置換した構造( $\theta_{Au}=0.063$  ML)が安定であることがわかった。これらの構造の表面エネルギー差は 0.37eV であり、この値はテラスの Au 吸着エネルギーに相当する。一方、ステップにおける Au 吸着エネルギーを評価するために、Au/Si(553)表面の Convex Hull を作製した。その結果、(a):テラスが 2×2 構造である構造( $\theta_{Au}=0$  ML)、(b):図 1 に示される Au 原子列上の Au 原子を一つ置きに Si 原子に置換した構造( $\theta_{Au}=0.116$  ML)、及び(c):図 1 に示される構造( $\theta_{Au}=0.231$  ML) [3] が安定であることがわかった。構造(a)と構造(b)の表面エネルギー差は -1.54eV、構造(a)と構造(c)では -1.30eV であった。これらの値はテラスの Au 吸着エネルギーよりも大きく、核生成はステップで起こりやすいことがわかる。そしてこの結果により、ステップの影響を計算によって明らかにした重要な成果が得られたといえる。

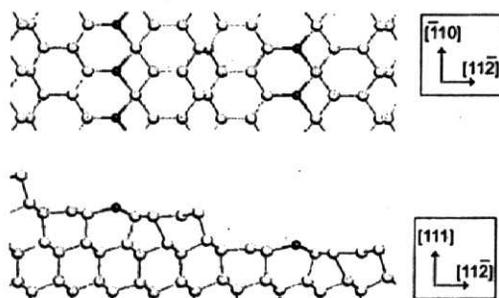


図 1. Au/Si(553)表面の安定構造。黒と灰色の原子はそれぞれ Au 原子、Si 原子を示す。

[1] 野田 真史 他、日本物理学会概要集 60 (2), 792 (2005).

[2] B. C. Han *et al.*, Phys. Rev. B, 72, 205409 (2005).

[3] S. Riikonen *et al.*, Nanotechnology 16, S218 (2005).

II 学術雑誌等に発表した論文（掲載を決定されたものを含む。）

共著の場合、申請者の役割を記載すること。

（著者、題名、掲載誌名、年月、巻号、頁を記入）

学術雑誌と学会等のプロシーディングなどを以下のように区別して記入すること。

- (1) 学術論文（査読あり）
- (2) 学会等のプロシーディング
- (3) その他（総説・本）

(1) 学術論文（査読あり）

[1] 野田 真史、渡邊 聡、“Tight-Binding Calculation of Current Distribution in a Porphin Connected to Two Semi-Infinite Wires”, Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 42, pp. L892, Aug. 2003.

共著者の渡邊は計算結果の考察を中心に助言を与え、実際のプログラム作成、計算、解析はすべて申請者が担当した。

[2] 鈴木 良治、野田 真史、多田 朋史、渡邊 聡、“Tight-Binding Analysis of Surface Electronic Conduction Measured with Micro-Multi-Point STM Probes”, Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 45, pp. 2136, Mar. 2006.

申請者は作成したプログラムを共著者の鈴木に与え、大幅に改良させた。さらに、申請者は共著者の鈴木に計算結果の考察を中心に助言を与えた。

(2) 学会等のプロシーディング

[3] 野田 真史、渡邊 聡、“Tight-Binding Calculation of Electrical Properties of a Single Molecule Connected to a Few Semi-Infinite Electrodes”, Trans. Mat. Res. Soc. Jpn. Vol. 29, pp. 3687, Dec. 2004.

共著者の渡邊は計算結果の考察を中心に助言を与え、実際のプログラム作成、計算、解析はすべて申請者が担当した。

[4] 野田 真史、Chris Fischer、門平 卓也、Gerbrand Ceder、渡邊 聡、“First-Principles Calculation for Stable Structures in the System of Au/Si(111)”, 4th UT2 (Tokyo-Toronto) Graduate Student Workshop Proceedings on Nanoscale Materials Structure, Design and Processing, pp. 13, May, 2005.

共著者らは計算結果の考察を中心に助言を与え、実際の計算、解析はすべて申請者が担当した。

[5] 野田 真史、Chris Fischer、門平 卓也、Gerbrand Ceder、渡邊 聡、“First-Principle Calculation of Stable Structures in the System of Au/Si(111)”, The 1st UT-SNU-TU Student Workshop, pp. 112, Nov. 2005.

共著者らは計算結果の考察を中心に助言を与え、実際の計算、解析はすべて申請者が担当した。

III 学会において申請者が口頭発表もしくはポスター発表した論文

(共同研究者(全員の氏名), 題名, 発表した学会名, 場所, 年月を記載)

国内学会および国際学会を区別して記入のこと

<国内学会>

- [1] 野田 真史、渡邊 聡、“強束縛法による 3 電極間分子の電流分布計算”、JPS (日本物理学会)、東北大学川内キャンパス、2003 年 3 月 28 日。ポスター。
- [2] 野田 真史、渡邊 聡、“強結合法による 3 電極間分子の電流分布計算 II”、JPS、岡山大学、2003 年 9 月 20 日。ポスター。
- [3] 野田 真史、渡邊 聡、“強結合法による 3 電極間ポルフィリン分子の電子輸送計算”、第 5 回分子スケールエレクトロニクス研究会、分子科学研究所、2004 年 4 月 9 日。ポスター。
- [4] 野田 真史、渡邊 聡、“3 電極間ポルフィリン分子の電気輸送解析”、東京大学 COE (化学・材料系) 合同シンポジウム、東京大学弥生講堂、2004 年 6 月 25 日。ポスター。
- [5] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“第一原理計算による Au/Si(111) 表面の安定構造評価”、JPS、同志社大学京田辺キャンパス、2005 年 9 月 22 日。口頭。
- [6] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“第一原理計算による Au/Si(111) 微斜面の安定構造評価”、JPS、千葉大学西千葉キャンパス、2006 年 9 月 25 日。ポスター。

<国際学会>

- [7] 野田 真史、渡邊 聡、“Tight-Binding Calculation of Current Distribution in a Porphyrin Connected to a Few Electrodes”, M&BE2, GAKUSHI KAIKAN, Mar. 6, 2003. ポスター。
- [8] 野田 真史、渡邊 聡、“Tight-Binding Calculation of Electrical Properties of a Single Molecule Connected to a Few Semi-Infinite Electrodes”, IUMRS-ICAM 2003, Pacifico Yokohama, Conference Center, Oct. 10, 2003. ポスター。【*Young Scientist Awards* 受賞】
- [9] 野田 真史、渡邊 聡、“Tight-Binding Analysis of Current Distribution in a Porphin Molecule Connected to a Few Electrodes” ACSIN-7, Nara-Ken New Public Hall, Nov. 19, 2003. ポスター。
- [10] 野田 真史、渡邊 聡、“Tight-Binding Analysis of Electron Transport in Porphyrin Molecules Connected to a Few Electrodes”, APS March Meeting, Palais des Congres de Montreal (Montreal, Canada), Mar. 24, 2004. 口頭。
- [11] 野田 真史、渡邊 聡、“Tight-Binding Calculation of Electron Transport in Porphyrin Molecules Connected to a Few Electrodes”, IVC-16/ICSS-12/NANO-8/AIV-17, Film Festival Palace and Casino Palace (Venice, Italy), Jun. 30, 2004. 口頭。
- [12] 野田 真史、渡邊 聡、“Tight-Binding Analysis of Electron Transport in Porphyrin Molecules Connected to a Few Electrodes”, 3rd UT2 Student Workshop, Univ. of Tokyo, Aug. 2, 2004. 口頭。
- [13] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“First-Principles Calculation for Stable Structures in the System of Au/Si(111)”, 4th UT2 Student Workshop, Univ. of Toronto (Toronto, Canada), May 30, 2005. 口頭。
- [14] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“First-Principles Calculation of Stable Structures in the System of Au/Si(111)”, 3rd International Symposium on Frontier of Nanochemistry and Nanomaterials, Takeda Hall, Univ. of Tokyo, Oct. 3, 2005. ポスター。
- [15] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“First-Principles Calculation of Stable Structures in the System of Au/Si(111)”, The 1st UT-SNU-TU Student Workshop, Sanjo Conference Hall, Univ. of Tokyo, Nov. 11, 2005. 口頭。
- [16] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“First-Principles Study of Stable Structures of Au/Si(111) Surfaces”, ISSS-4, Omiya Sonic City, Nov. 16, 2005. 口頭。
- [17] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“Energetic Instability of Au/Si(111)-(5x2) Structures by First Principles Calculation”, ECOSS24, Universite Paris V, Sep. 4, 2006. 口頭。