

平成19年 2月20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年度後期リサーチ・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 3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)

Au/Si(111)表面は盛んに研究されてきたが、その安定構造についてコンセンサスが得られていない。さらに我々は以前の計算において、安定なモデルとして提唱された 5×2 構造[2,3]は Au 吸着量変化まで含めて考察すると不安定である上に[1]STM 像を再現しないことを明らかにした。この結果は、新たな 5×2 構造を探索する必要性を示唆するが、ステップからの 5×2 構造の成長を示す実験報告を考慮すると、ステップが 5×2 構造を安定化する可能性も考えられる。そのために 5×2 構造や他の Au 吸着量を持つ構造を微斜面上に形成させた場合について第一原理計算を行い、この可能性を検討した。

まず 7×7 DAS 構造のモデルとしての 2×2 構造と、 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造として有力視されている CHCT(Conjugated Honeycomb Chained Trimer)構造[4]、 5×2 構造モデルとして有力視されている E 構造[2]および N 構造[3]、Si を吸着した E^+ 構造、 N^+ 構造をそれぞれ Si(775)表面に形成させた場合について表面エネルギーを計算した。その結果、Au 吸着量増加の際に現れる構造は 2×2 構造と CHCT 構造であり、E、 E^+ 、N、 N^+ 構造はそれぞれ Si(111) 1×1 セル当たり 150, 165, 109, 135 meV 程度安定ではないことがわかった。さらに、 E^+ 構造及び N^+ 構造が Si(775)表面上に形成されている系における constant height mode STM 像のシミュレーション結果を図1に示す。これらの像は実験でよく用いられる constant current mode による像とは異なる可能性があるが、定性的な議論は行えるといえる。図1の点線で囲まれた部分で示されるように E^+ 構造では非対称に分布した輝点が、 N^+ 構造では円形でない輝点が現れている。しかし、実験における平坦表面の STM 像は対称に配置された円形の輝点を示すため、ステップの影響では平坦表面の STM 像を説明できない。以上の結果を考慮すると、これまでに提案されているモデルがステップで安定化される可能性は低く、新たな 5×2 構造を探索する必要があるといえる。

[1] 野田 真史 他、日本物理学会概要集、60 (2), 792 (2005). [2] S. C. Erwin, Phys. Rev. Lett. 91, 206101 (2003). [3] S. Riikonen *et al.*, Nanotechnology, 16, S218 (2005). [4] Y. G. Ding *et al.*, Surf. Sci. 275, L691 (1992).

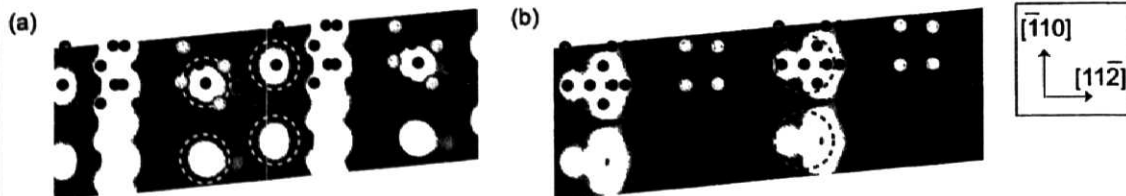


図1：計算によって得られた(a) E^+ 構造、(b) N^+ 構造の STM 像。上部の白、及び灰色の球はそれぞれ Au 原子、Si 原子を示す。

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、“強束縛法による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、“強束縛法による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。
- [7] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“Si(775)表面上に形成されたAu/Si(111)5×2構造の安定性評価”、JPS、鹿児島大学郡元キャンパス、2007年3月20日。ポスター。

<国際学会>

- [8] 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。
- [9] 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】
- [10] 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。
- [11] 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。
- [12] 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。
- [13] 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。
- [14] 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。
- [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)”、3rd International Symposium on Frontier of Nanochemistry and Nanomaterials, Takeda Hall, Univ. of Tokyo, Oct. 3, 2005. ポスター。
- [16] 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。
- [17] 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。
- [18] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“Energetic Instability of Au/Si(111)-(5×2) Structures by First Principles Calculation”、ECOSS24, Universite Paris V, Sep. 4, 2006. 口頭。
- [19] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“First-Principles Investigation on the Au/Si(111)-(5×2) Structure”、ISSP10, Kashiwa Campus, Univ. of Tokyo, Oct. 12, 2006. ポスター。
- [20] 野田 真史、C. Fischer、門平 卓也、G. Ceder、渡邊 聡、“Density Functional Study on Energetic Instability of the 5×2 structure on Au/Si(111) and Au/Si(775) surfaces”、APS, Colorado Convention Center, Mar. 6, 2007. 口頭。