

# 先端追跡

## [R-1] 2次元プラズモンの存在確認

固体表面に吸着し、炭化水素は適当な温度で分解し、グラファイトを形成することがよく知られている<sup>1)</sup>。またニッケル金属中に溶融している炭素不純物が、適当な温度で表面に析出し、グラファイト膜が表面を覆うことも報告されている<sup>2)</sup>。これらのグラファイトの成長を温度と反応時間で制御し、1原子の厚さのグラファイト膜を形成させ、その特異な物性が調べられている。固体上に成長した単原子層のグラファイトは下地によってそのフォノン構造を大きく変える<sup>3)</sup>。特に下地とグラファイト層間の化学結合が強いと、炭素間の結合が著しく弱まる。その変化は原子間距離の変化を伴い、変化量はグラファイト・インターカレーション化合物の場合の変化量の数倍となる。表面を覆っている安定で一般的な膜の電子状態は下地によって空間的な変調を受けている様子がSTM像によって観察されており<sup>4)</sup>、このエネルギーバンド構造の様子が解明されつつある<sup>5)</sup>。

ごく最近、この単原子層グラファイト内に強く局在する2次元プラズモンの存在が、その特徴的な分散関係(波数の平方根に比例する)の観測から確認された<sup>6)</sup>。この分散関係は多くの理論家によって古くから予測されており<sup>7)</sup>、数十nmのやや厚めの物質系では観測されている一方、1nmを切る原子レベルの厚さの物質系で2次元プラズモンの特徴的な分散関係が確認されたのはこれが最初である。単原子層グラファイトは最近注目を集めている新しいカーボン低次元系に属しており、今後さらに面白い物性の発見が期待できそうである。

## 文 献

- 1) R. Uyeda: *Progress in Materials Science* **35**, 1 (1991).
- 2) E. Eizenberg and J.M. Blakely: *Surface Sci.* **82**, 228 (1979).
- 3) 相沢 俊: *表面科学* **11**, 398 (1990).
- 4) 大島忠平, 井藤浩志, 市ノ川竹男: *固体物理* **26**, 131 (1987).

- 5) 長島礼人, 奴賀謙治ほか: *表面科学* **13**, 43 (1992).
- 6) A. Nagashima, K. Nuka et al.: *Solid State Communi* **83**, 581 (1992)
- 7) F. Stern: *Phys. Rev. Lett.* **18**, 546 (1967).

(早大理工 大島忠平)

## [R-2] 0.75 インチ平方の C 60 単結晶薄膜の作製

1985年に星間塵から発見されたC60(フラーレン)<sup>1,2)</sup>は、1990年にはガス中蒸発法で大量に作製できるようになり<sup>3)</sup>、世界的に精力的な研究が進められている<sup>4)</sup>。現在では、その籠型構造の中に金属原子を内包させたものの研究が盛んであり、いくつかの成功例が報告されるようになってきている<sup>5,6)</sup>。しかしC60そのものの構造と物性を探索研究するためには、精製された試料による単結晶の作製とその構造評価が必須である。薄膜状態でのC60の結晶化には、Si, GaAs, MoS<sub>2</sub>, グラファイトを始めとした結晶表面でのエピタキシャル成長の研究があるが、雲母基板を用いた場合、0.75×0.75 inch<sup>2</sup>の基板上全面に単結晶薄膜が得られたということである<sup>7)</sup>。方法は簡便で、10<sup>-5</sup> Torrの真空で、100~250℃に保った雲母のへき開面に0.25 Å/sの蒸着速度で、150~500 Åの膜厚に蒸着する。得られた膜は、電子線回折および高分解能電子顕微鏡観察によって評価され、面心立方格子( $a=14.2 \text{ \AA}$ )の(111)面が発達した膜で、1/3{422}の指数で表わされる積層欠陥と〈112〉方向の面欠陥を含んでいることが明らかとなった。基板温度が200℃の場合、結晶成長と核発生の条件が最適になるようで、結晶領域が最も広がった。このように、基板と試料分子との精緻な分子間相互作用の制御によって結晶性の高い薄膜、新しい成長様式の解析が可能になると考えられる。

## 文 献

- 1) H. W. Kroto, J. R. Heath and S. C. O'Brien: *Nature* **318**, 162 (1985).
- 2) H. W. Kroto: *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **31**, 111 (1992). (C60分子の発見の歴史の自叙伝)
- 3) W. Krätschmer, L. D. Lamd, K. Fostiropoulos and D. R. Huffman: *Nature* **34**(7), 354 (1990).
- 4) 「サッカーボール分子C60」特集: *化学* **46**(12), 818-888 (1991).
- 5) 篠原久典: *化学* **47**(4), 248 (1992).
- 6) Special Issue on Buckminsterfullerenes: *Acc. Chem. Res.* **25**, 98-175 (1992).
- 7) W. Krakow, N. M. Rivera, R. A. Roy, R. S. Ruoff and J. J. Cuomo: *J. Mater. Res.* **7**, 784 (1992).

(緋高研 八瀬清志)

### [R-3] 表面理論も力づくの計算の時代へ

計算機の発達に伴って、適合パラメータなしに第一原理から表面の構造や電子状態を計算する *ab initio* 計算が広く行われるようになってきている。これまでのこの種の計算の対象は単位胞の大きさが比較的小さい表面に限られており、つい数年前までは、多数の原子を含む巨大な単位胞を有する Si(111)  $7 \times 7$  表面は、さながらマッターホルンのごとく *ab initio* 計算の雲の上にそびえる存在であると思われていた。ところが近年の計算機の能力は、このポピュラーな表面に対する計算をも可能にするところまで達している。最近 Cambridge の Payne のグループおよび MIT の Joannopoulos のグループによって、並列処理計算機を用いた Si(111)  $7 \times 7$  表面の *ab initio* 計算の結果が報告されている<sup>1,2)</sup>。Cambridge はエネルギー計算、MIT は分子動力学、という相違はあるが、エネルギー計算の手法は両者まったく同じであり、どちらも実効原子数 700 個程度のスーパーセルに対して、電子状態の第一原理計算を繰返して行う、という膨大な計算となっている。Cambridge グループの計算機は 64 プロセッサの並列処理計算機 Meiko i860 Computing Surface であり、MIT グループは 16,384 個ものプロセッサを備えた Thinking Machines 社の CM-2 を使用している。後者の場合、600 メガフロップの実効処理速度で、計算に数百時間を要している。これらの計算で得られた構造や電子状態そのものに関しては特に目新しい結果は含まれておらず、2つの論文はいわば並列処理計算のデモンストレーションであるが、計算物理の威力をまざまざと見せつける報告となっている。計算機によって、実験をするよりも早く表面科学の問題が解かれてしまうような日も、そう遠くないのかもしれない。

### 文 献

- 1) I. Stich, M.C. Payne, R.D. King-Smith, J.S. Lin and L.J. Clarke: Phys. Rev. Lett. 68, 1351 (1992).

- 2) K.D. Brommer, M. Needels, B.E. Larson and J.D. Joannopoulos: Phys. Rev. Lett. 68, 1355 (1992).

(東芝 酒井 明)

### [R-4] 1次か2次か? ——Si(111) $7 \times 7 \longleftrightarrow 1 \times 1$ 相転移

表面では2次元性ゆえに3次元バルク結晶より多様な構造相転移が期待でき、興味深い研究テーマとなっている。850°C 付近で起こる Si(111) 清浄表面上の  $7 \times 7 \longleftrightarrow 1 \times 1$  構造の可逆的な相転移は、Lander (1964) の発見以来、電子回折、反射電子顕微鏡、原子散乱、走査トンネル顕微鏡<sup>1)</sup>などで研究されてきたが、1次相転移か2次相転移か、いまだに決着していない。最近の報告<sup>2)</sup>では、相転移近傍での反射高速電子回折の  $7 \times 7$  超格子スポット強度とその半値幅の変化を測定している。強度の変化は2次相転移の徴候(連続的な変化)を示すが、これは表面の歪場に起因しており、2次相転移を意味するものではないと推論している。さらに、相転移中にスポットの半値幅が変化しないことを根拠に1次相転移を主張している。しかし、スポット半値幅の定量的な議論は難しく、「2次相転移派」を「改心」させるのに十分なデータとはいいがたい。スポットプロファイルのより詳しい測定と解析が必要であろう。あるいは、相転移でのヒステリシスが観測できれば、この論争に終止符が打たれるのだが——。

### 文 献

- 1) S. Kitamura, T. Sato and M. Iwatsuki: Nature 351, 215 (1991).
- 2) J. Chevrier, L.T. Vinh and A. Cruz: Surf. Sci. 268, L261 (1992).

(東大理 長谷川 修司)