

# 先端追跡

## [R-153] RHEED 回折電子強度から結晶内電子波動場に向けて

X線回折や光電子回折のように主に一回散乱理論である運動学的回折理論で記述できる回折現象と異なり、電子線を用いる LEED や RHEED では、結晶内原子との強い相互作用のため、結晶内での多重散乱を考慮した動力学的回折理論に頼らざるを得ない。このことは例えば、X線回折と RHEED とから得られるロッキング曲線を比較すればわかるように、X線回折では規則正しくブラッグ反射ピークが現れるが、RHEED では一般に複雑なピークが現れ、必ずしもブラッグ反射位置に対応しない。しかしながら、動力学的電子回折理論の発展と計算機の高速化、そして多種実験データの蓄積に伴い、最近では、RHEED の実験ロッキング曲線を計算により、かなりよく再現できるようになり、表面構造解析手段としての実力を発揮し始めている<sup>1)</sup>。

ここで、問題になるのは、回折ピークの物理的起源である。この問題に対するアプローチとしては、実際に入射電子線によって形成される結晶内電子波動場の様子を垣間見る必要がある<sup>2)</sup>。このようなアプローチは、単にロッキング曲線の回折ピークの同定に留まらない。RHEED 実験中に試料表面から放出されるオージェ電子や特性 X 線強度の異常振る舞いの解釈に対しても重要であり、それを応用した表面構造解析の研究が最近成功を納めている<sup>3)</sup>。

従来の RHEED 研究である回折図形の観察やロッキング曲線の測定から、その副産物であるオージェ電子や特性 X 線の定量的解釈に向け、より多くの表面情報を得るために結晶内波動場に今後強い関心が寄せられてくるものと思われる。

## 文 献

- 1) T. Hanada, H. Daimon and S. Ino: Phys. Rev. B **51**, 13320 (1995).
- 2) Y. Horio and A. Ichimiya: Surf. Sci. **348**, 344 (1996).
- 3) T. Yamana, T. Hanada and S. Ino: Phys. Rev. Lett. **75**, 669 (1995).

(大同工業大学 堀尾吉巳)

## [R-154] 表面近傍量子井戸における光学特性

半導体量子井戸構造では、通常、半導体ヘテロ接合によるポテンシャル障壁を利用する。それに対し、量子井戸の片側を真空中で終端し、真空障壁によって量子閉じ込めを実現するいわゆる表面量子井戸構造が InP/GaInP 系の材料で作製されている<sup>1)</sup>。理想的な真空障壁はヘテロ材料によるポテンシャル障壁よりも遥かに高いため、強い量子閉じ込め効果が期待される。しかし、実際には、表面欠陥等に由来する表面準位などの影響を受けて、閉じ込め状態が弱まったり、量子井戸中のキャリアの寿命が短くなったりするなどの変化が生じる。逆に、このような変化を利用して、表面状態を調べようとする試みも報告されている<sup>2)</sup>。GaAs 量子井戸を非常に薄い AlGaAs 障壁で覆い、その厚さを変化させた時の量子井戸からのフォトルミネッセンスの挙動を調べると、表面状態を高感度かつ高エネルギー分解能で評価できる。これは、量子井戸中のキャリアの波動関数は、障壁が薄い時には表面までしみでてくるためであり、表面から約 10 nm 以内の量子井戸では、表面の影響を強く受けることが示されている。一方、InGaAs/GaAs 系の表面近傍量子井戸構造における励起子の挙動も調べられ、真空障壁界面での誘電率の大きな変化が、量子井戸中の励起子の結合エネルギーやボーア半径に顕著な変化を与えることが指摘されている<sup>3)</sup>。例えば、1s 励起子の結合エネルギーは、量子井戸が表面に近づくにつれて、1.5 倍ほどに増加することが示されている。

ここで紹介した手法は、表面状態自身を調べるプローブとして使えるのもであるとともに、表面近傍の何らかの構造に対する表面の影響を調べることができるものであり、感度・エネルギー分解能ともに優れている。近年、新しいデバイス構造として期待されている量子細線や量子箱などの量子ナノ構造では、これらの構造が表面に非常に近接している場合が多いが、本手法は、これら量子ナノ構造における光学特性の評価にも適用可能であろう。

## 文 献

- 1) R.M. Cohen, M. Kitamura and Z.M. Fang: Appl. Phys. Lett. **50**, 1675 (1987).
- 2) J.M. Moison, K. Elcess, F. Houzay, J.Y. Marzin, J.M. Grand, F. Barthe and M. Bensoussan: Phys. Rev. B **41**, 12945 (1990).
- 3) L.V. Kulik, V.D. Kulakovskii, M. Bayer, A. Forchel, N. A. Gippius and S.G. Tikhodeev: Phys. Rev. B **54**, R 2335 (1996).

(東大先端研 高橋琢二)

## [R-155] カーボンナノチューブの多彩な特性

最近カーボンナノチューブの研究がますます盛んになっている。特に単一層のカーボンナノチューブが効率よくできるようになり、その特性を調べた報告が多い。ここでは、単一層カーボンナノチューブの電気伝導と水素ガスを高密度に凝集すること、また多層チューブで高い剛性が測定されたことなど、カーボンナノチューブの多彩な特性を紹介する。

カーボンナノチューブは以前から量子細線として期待されていたが、単一層でない場合にはその巻き方によって電気伝導特性が変化し、局所的な特徴を示すことがわかってきた。一方単一層の場合には、構造の高い対称性と剛性から、波動関数がナノチューブ全体に広がっていると理論的に予測された。最近、これを実験的に調べた結果が報告された<sup>1)</sup>。Si/SiO<sub>2</sub>基板上に1次元的なPt電極を平行に2本並べ、その電極間(140 nm)に単一層カーボンナノチューブを乗せて調べたところ、その電子状態は量子力学的にコヒーレントであり、量子細線として働いていることがわかった。

また、カーボンナノチューブは究極の毛細管でもあり、毛細管現象で液体を吸い上げることができる。単一層ナノチューブでは、更に水素ガスを高密度にまで吸い上げることが確認され<sup>2)</sup>、電池材料としても期待される。

さらにカーボンナノチューブは剛性の強い材料としても注目されている。電子顕微鏡の中でカーボンナノチューブを振動させてその動きを観察し、剛性を見積もったところ、テラパスカルの高いヤング率を持つ硬い材料であることが実験的に示され<sup>3)</sup>、また理論的にもテラパスカルの張力に耐えうることが示された<sup>4)</sup>。

この他にも、閉じた多層カーボンナノチューブ探針表面の電子状態を調べた報告<sup>5)</sup>など、カーボンナノチューブに関する論文が多くなっている。

## 文 献

- 1) S.J. Tans, M.H. Devoret, H. Dai, A. Thess, R.E. Smally, L.J. Geerligs and C. Dekker: *Nature* **386**, 474 (1997).
- 2) A.C. Dillon, K.M. Jones, T.A. Bekkedahl, C.H. Kiang, D. S. Bethune and M.J. Heben: *Nature* **386**, 377 (1997).
- 3) M.M.J. Treacy, T.W. Ebbesen and J.M. Gibson: *Nature* **381**, 678 (1996).
- 4) B.I. Yakobson, C.J. Brabec and J. Bernholc: *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2511 (1996).
- 5) D.L. Carroll, P. Redlich and P.M. Ajayan, J.C. Charlier, X. Blase, A. De Vita and R. Car: *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2811 (1997).

(アトムテクノロジー研究体 渡辺美代子)

## [R-156] 金属表面上のベンゼンの吸着状態

金属表面上の有機分子の吸着は触媒反応の機構解明の上で重要な研究課題であり、これまでに膨大な研究成果が報告されている。ベンゼンの金属表面への吸着は初期に UC Berkeley の Somorjai のグループにより精力的に研究された。しかし、彼らの解析 (LEED) では、ベンゼン環の C-C ボンドが 0.133 nm と 0.181 nm に変形するとしており、これは予想よりも遥かに大きな変形であった。また、HREELS, ARUPS を用いた解析では、ベンゼン分子は殆ど歪んでいない結果になっており、これらの結果とは一致していなかった。この不一致の原因は LEED の解析法にあり、当時 (1980 年代後半) のコンピューター能力では、基板の金属原子のベンゼン分子吸着による変位を考慮できるほど大きな計算ができなかったことにある。最近になり過去に報告した実験データをテンソル LEED 法により再計算を行い、ベンゼン環は変形しているものの、その程度は、それほど大きなものではない (0.150 nm と 0.137 nm) ことを明らかにしている<sup>1)</sup>。従来の研究では LEED の解析の容易さから、長距離の周期性を出すため、CO, NO などの分子との共吸着による実験がなされてきたが、最近より詳細に確実な吸着状態を明らかにするため、ベンゼンのみの吸着実験が報告されている<sup>2-4)</sup>。これらのなかで、Ni, Ru 表面への吸着では、ベンゼン分子の形状に明らかな違いが認められている。すなわち、Ni 表面上吸着ではベンゼン分子にバックリングがなく、Ni の表面原子がバックリングしているのに対して、Ru では逆に、ベンゼン分子がバックリングし、“クラウンライク”に変形し、Ru 表面原子には殆どバックリングは認められない。この原因を Ni (3d<sup>8</sup>) と Ru (4d<sup>6</sup>) の電子状態の違いによる、ベンゼン  $\pi$  電子の移動度の差であるとしている。このような基礎的研究は触媒現象を解析する上で興味ある情報を与えるが、なお実用触媒との乖離がしばしば指摘される。表面研究者側からの実用触媒へのアプローチがやや少ないように感じられる。より積極的な取り組みと、“役に立つ”研究成果を期待したい。

## 文 献

- 1) A. Barbieri, M.A. Van Hove and G.A. Somorjai: *Surf. Sci.* **306**, 261 (1994).
- 2) G. Held, M.P. Bessent, S. Titmuss and D.A. King: *J. Chem. Phys.* **105**, 11305 (1996).
- 3) C. Stellwag, G. Held and D. Menzel: *Surf. Sci.* **325**, L 379 (1995).
- 4) O. Schaff, et al.: *Surf. Sci.* **348**, 89 (1996).

(東ソー 樋口眞次)