

局所高電界場における極限物理現象の可視化観測と制御 研究代表者 藤田博之（東京大学生産技術研究所・教授）

本研究の目的は、数 nm から 100nm 級のナノ構造や空間を直接見ながら、そこに電圧を加え極めて大きな電界を生じた時に、分子、原子、電子などがどう振る舞いをするかを観測することである。特にマイクロマシンの技術を用いて、ナノ構造の形状を精密に作り、nm の精度で動きを自在に制御する点に特徴がある。このため、(1) マイクロマシン応用ナノ領域探査ツール、(2) 位相差検出による超高分解能顕微法、(3) 第一原理に基づく理論計算の 3 つの柱で研究を進めている。これまでに下記のような成果を挙げ、最終目標に向かって着実に進行中である。

マイクロマシン班：ナノ冷電子銃の電界電子放出

シリコンチップの微細加工技術を用いて、これまでに真空トンネル電流を制御するチップ、太さわずか 50~100nm で先端曲率が 10nm 程度の 2 本のプローブをハシのように開閉できるチップなどを作ってきた。今回は、鋭い針先端に集中する高電界により、電子を真空中に放出させる、冷陰極電子銃を作り、電子顕微鏡中で観察しながら、電子放出実験を行った。この時、図 1 に示すような 2 つの鋭い針（先端曲率 10nm 程度）が作る 100nm 程度のギャップに 100V を印加したところ、6mA という極めて大きな電流を得た。この値は通常の冷陰極で得られる値の数十倍である。電圧印加を継続したところ、シリコンの針の上に薄く成膜した金の原子層がナノ粒子となって針上を移動する現象が見られた（図 2 [a]、[b]）。更には、強い電界と電子衝突による温度上昇のためと思われるが、針先が突然破壊した（図 2 [c]）。これに伴い、電流値が 6mA から 1mA に急減した。今後、実験を継続して更にデータ収集を行うと共に、理論班は電界計算と電子放出理論を組み合わせた解析を行い、また、可視化班は、電界分布や電流分布の可視化観測に取り組む予定である。

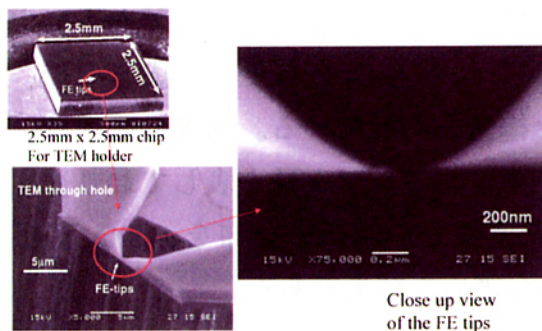


図 1 ナノ冷電子銃チップと針先拡大写真（左図）

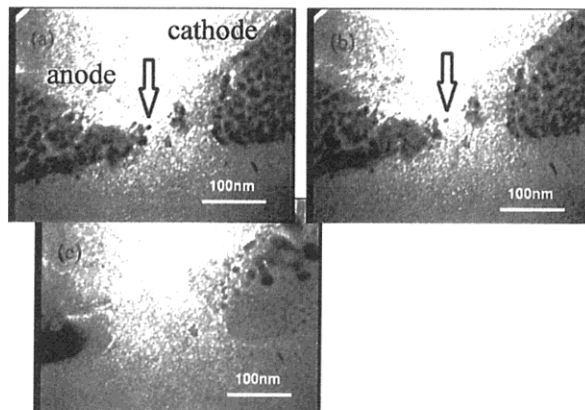


図2 ナノ冷電子銃先端における金粒子の移動 [(a), (b)] と破壊後の先端 [(c)]。
 印加電圧 100V。電子電流は破壊前 6mA であったが、破壊後 1mA に減少した。

可視化班：透過型位相シフトレーザ干渉顕微鏡

可視化グループでは、微小領域の諸物理情報を電子線とレーザを用いて可視化するための装置および技術の研究を推進している。今回、透過型位相シフトレーザ干渉顕微鏡という新しいタイプの顕微鏡を開発したので、その概要と応用計測の結果を報告する。

図3は、本顕微鏡の模式図である。試料は光路の片側に置かれ、これにレーザ光を照射する。試料を透過した物体光と試料のない側を通った参照光は、対物レンズと拡大レンズで計 300 倍に拡大され、観察面上の CCD カメラに像を結ぶ。このとき、物体光と参照光はバイプリズムによって光軸側に引き寄せられ、観察面上で重なり合って干渉画像を形成する。バイプリズムを、干渉縞がその間隔の $1/M$ ($M: 3$ 以上の正数) ずつシフトするように上 (または下) 方向に微動しながら、 M 枚の干渉画像を計算機に取り込み、位相シフト法と呼ばれる方法に従って計算することにより、試料を透過したレーザ光の位相変化が高精度に求められる。この位相変化の分布は、試料内部の屈折率分布を反映したものであるので、簡単な計算により屈折率分布に換算することができる。

図4は、光導波路を非破壊状態で上方から計測した結果である。中央縦の黒い帯が導波路 ($\text{SiO}_2 + 1\% \text{TiO}_2$) で、これを SiO_2 基板上に形成した後、左右両側および上面をクラッド層で覆った構造を有している。画像の濃淡は、導波路と直交する方向に透過したレーザ光の位相のシフト量を表しており、図4下のプロファイルは、図中矢印で示した直線上の屈折率分布を、 SiO_2 基板の屈折率 1.4571 を基準として位相変化量から求めた結果である。

これまで、サブミクロン領域の屈折率分布を高精度に計測することが不可能であったため、この計測技術は光デバイスの計測に必須となる可能性が高い。現在、科学技術振興事業団の独創的研究成果共同育成事業に採択され、製品化のためのプロトタイプの開発が進められている。なお、光導波路試料は日立電線（株）よりご提供いただいた。

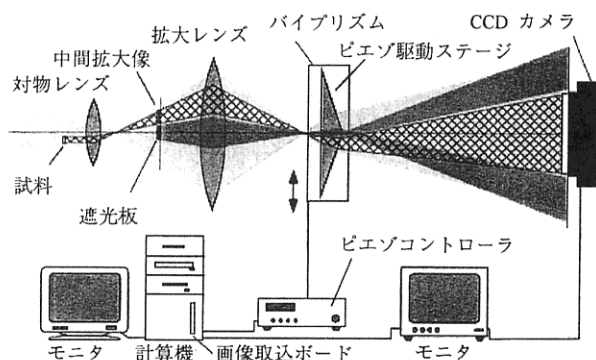


図3 透過型位相シフトレーザ干渉顕微鏡

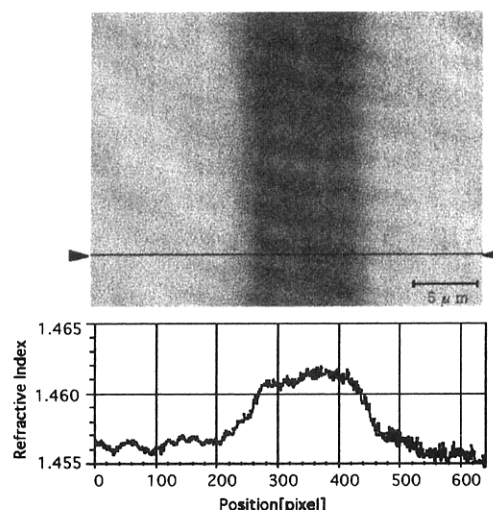


図4 光導波路の屈折率分布

理論班：電子放出現象の理論解析の新手法

局所高電界場中の物理現象の多くは非平衡量子現象であるため、バンド計算に代表される通常的手法によって理論・数値解析することは難しい。そこで我々は、まず新しい方法論や計算プログラムの開発から取り組んだ。その結果、ミクロなレベルでの原子・電子の振舞いを信頼性高く予測できる「密度汎関数法」という方法論の枠組みの中で、次のような新しい方法論・プログラムの開発に成功した。(1) 半無限電極法：電極内部と表面との間の電子の移動も考慮しながら、定常電流下での電子の状態を自己無撞着に計算する方法論である。既に同様の方法の提案はあるが、本手法は信頼性を損なわずにより簡明なアルゴリズムを実現した。(2) 空間分割法：複数個の物体からなる系について、物体間に電流が流れない場合の電子状態を密度汎関数法に基づいて計算する方法である。通常の方法ではこのような場合に非現実的な電荷移動が起きて誤った答が出ることが知られているのに対し、本手法では、各物体の電荷量を一定に保ちつつ電界分布や電子状態を自己無撞着に計算することによって問題を解決した。(3) 時間依存法：電子状態や電流が定常状態に落ち着く前、

過渡的な時間変化を追跡する計算法である。方法論は既に提案されていたものだが、アルゴリズムに独自の工夫を織り込んで計算プログラムを開発した。

これらを用いて電界電子放出現象を解析したところ、単純化したモデルでの考察に基づく従来の常識を覆す結果がいくつか得られた。まず鋭い突起構造をもつアルミニウム表面（図5）からの電界電子放出では、突起先端が同じように単原子で終端されていても、突起の大きさが違うと電子放出特性が大きく異なることを見出した。放出される電子のエネルギー分布を図6に示すが、突起サイズが大きい場合には2つのピークがあるのに対し、小さい場合にはピークが一つしかないことがわかる。これまでの電子放出源の研究開発では、先端が単原子であるかどうかには注意が払われていたものの、突起サイズは全く注目されていなかった。

次に、図7に示すグラファイトシート(グラフェン)端からの電界電子放出を調べた結果、10V/nmの電界を印加した場合の放出電流密度が表1のように得られた。この表から、グラフェン端に水素が吸着すると放出電流が大きく減少することがわかるが、計算では水素吸着によって仕事関数も減少することがわかった。この結果は、仕事関数の小さい方が放出電流が大きい、という従来の常識に反するものであり、電界放出が物質の仕事関数の値以上に表面局所電子状態に大きく左右される事を示している。

電界放出現象以外についても、従来扱えなかった問題を理論解析できるようになった。例えばカーボンナノチューブからの電界蒸発現象の反応経路を明らかにし、その活性化エネルギー障壁の値をはじめで見積もることができた他、原子サイズの細線の両端に電位差を与えた場合の電位(ポテンシャル)変化がマクロな細線の場合と全く異なる複雑なものであることを明らかにすることができた。

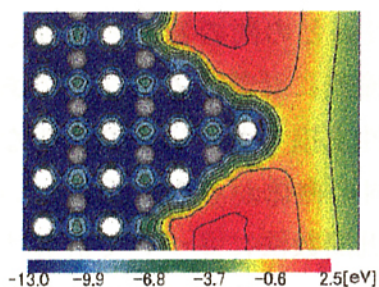


図5 14原子から成る突起構造をもつ表面のモデルと電界印加時のポテンシャル。白丸は面内の原子、灰色丸は面外の原子を示す。

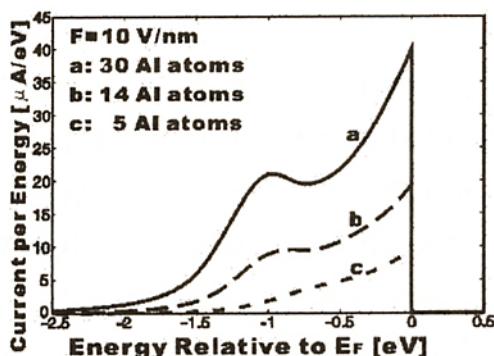
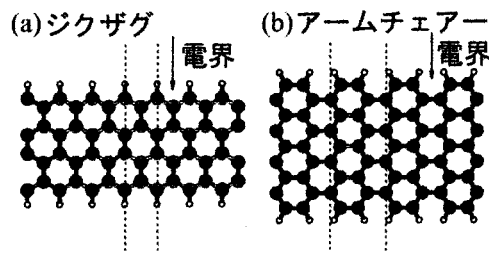


図6 アルミニウム表面から電界放出される電子のエネルギー分布の突起サイズによる変化



端構造	清浄端	水素終端
ジグザグ	0.369	0.137
アームチェアー	0.320	0.144

表1 グラフェン端からの電界放出電流

(μ A/nm)

図7 水素終端グラフェンの構造と計算
での電界印加方向

参考文献

- (1) G.Hashiguchi, K.Kakushima, J.Endo, Y.Wada, H.Mimura, K.Yokoo, and H.Fujita, "Emission Characteristics and In-Situ TEM Observation of Si Lateral Field Emitters", Proceedings of the 14th International Vacuum Microelectronics Conference, p.237, August 2001, USA.
- (2) 吹野岳生、原隆文、橋口原：マイクロマシーニング技術による熱型アクチュエーター一体型マイクログリッパーの作製とその動作特性、第6回知能メカトロニクスワークショップ, p.235, 2001.
- (3) 遠藤潤二、和田恭雄、藤田博之、陳軍：「電子干渉計測によるナノ構造と電界分布の可視化の試み」、電学論E、120巻6号、平成12年6月、285-291
- (4) J. Endo, J. Chen, D. Kobayashi, Y. Wada and H. Fujita : "A new type of transmission laser microscope using phase-shifting technique and its application to measurement of optical waveguides", Applied Optics 投稿中
- (5) Y. Gohda, Y. Nakamura, K. Watanabe and S. Watanabe, "Self-consistent density functional calculation of field emission currents from metals," Physical Review Letters, Vol. 85, No. 8 (2000) pp. 1750-1753.
- (6) N. Nakaoka, T. Tada, S. Watanabe, H. Fujita and K. Watanabe, "Partitioned Real-Space Density Functional Calculations of Bielectrode Systems under Bias Voltage and Electric Field," Physical Review Letters Vol. 86, No.3 (2001) pp. 540-543.
- (7) Y. Gohda and S. Watanabe, "Total Energy Distribution of Field-Emitted Electrons from Al(100) Surface with Single-Atom Terminated Protrusion", Physical Review Letters Vol. 87, No.17 (2001) pp. 1776011-1776014.