

課題番号	GR046
------	-------

**先端研究助成基金助成金(最先端・次世代研究開発支援プログラム)
実施状況報告書(平成24年度)**

本様式の内容は一般に公表されます

研究課題名	窒化物半導体との融合を目指したエピタキシャル二ホウ化物薄膜の表面・界面研究
研究機関・ 部局・職名	北陸先端科学技術大学院大学・マテリアルサイエンス研究科・准教授
氏名	高村 由起子(山田由起子)

1. 当該年度の研究目的

本年度は、二ホウ化物薄膜上における窒化物半導体の核生成過程に着目し、得られた高品質 ZrB₂ 薄膜上に窒化物半導体薄膜の成長を行い、表面構造及び界面構造の詳細な観察と、その構造の第一原理計算による考察を試み、高品質窒化物半導体薄膜成長のための指導原理を得ることを目的とする。また、本研究課題では、窒化物半導体薄膜の欠陥の低減に大きく寄与すると考えられる二ホウ化物薄膜表面の選択的窒化による不活性化を利用した窒化物半導体結晶の横方向成長の実現を目指しており、このプロセスのキーとなる二ホウ化物薄膜表面上に形成される不活性極薄グラファイト状窒化物層と、付加元素による核生成サイト形成の詳細を明らかにしたい。

2. 研究の実施状況

窒化物成長温度(800-1000℃)において、二ホウ化物表面上で何が起きているのかを明らかにすることを目的として、高温における走査トンネル顕微鏡(STM)、非接触原子間力顕微鏡(AFM)による高分解能観察が可能な超高真空走査プローブ顕微鏡を新規に導入した。オージェ電子分光が可能な低速電子線回折システムも同装置内に設置し、構造だけでなく組成や結合状態も明らかにすることができる。この新しい装置を用いた高温における原子分解能観察が STM と AFM の両方で達成された。今後有用な情報が多く得られることを期待できる。

二ホウ化物薄膜表面の窒化によりエピタキシャルに形成される不活性な六方晶窒化ホウ素層についての第一原理電子状態計算を試みた。格子不整合な組み合わせなので大規模な計算が必要であった。この結果をもとに、今後、付加元素、特にアルミニウムによる二ホウ化物上の窒化ホウ素の不安定化のメカニズムに迫る。

新しい試みとして熱応力による GaN 層のクラック発生を防止する目的で、GaN と ZrB₂ の双方と熱膨張係数の整合性に優れるゲルマニウム(Ge)ウェハーを基板とした ZrB₂ 薄膜の成長を試みた。ZrB₂ の Ge への濡れ性は良好で、成長条件を最適化することで単結晶 ZrB₂(0001)配向膜を得ることに成功した。X 線回折を用いてこの薄膜の構造解析を行った結果、シリコンウェハーを基板とした ZrB₂ 薄膜で生成したような異配向結晶は認められなかった。現在、この良好な配向性の原因となっている界面構造を透過電子顕微鏡観察により明らかにしつつある。

3. 研究発表等

<p>雑誌論文 計4件</p>	<p>(掲載済み一査読有り) 計1件</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Experimental evidence for epitaxial silicene on diboride thin films, A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, Physical Review Letters 108, 245501 (2012). http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.245501 <p>(掲載済み一査読無し) 計2件</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Buckling induced π-band gap opening in epitaxial silicene, Rainer Friedlein, Antoine Fleurence, and <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, Photon Factory News 30, 15-18 (2012). http://pfwww.kek.jp/publications/pfnews/30_3/saikin2.pdf 2. Buckling-induced direct π-band gap opening in epitaxial silicene, R. Friedlein, A. Fleurence, T. Ozaki, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, ISSP Activity Report 2011, 47-48 (2012). http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/highlight/2011/fried1_en.html <p>(未掲載) 計1件</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 「シリセン:ケイ素で出来たグラフェン?」、<u>高村(山田)由起子</u>、アントワーン・フロランス、ライナー・フリードライン、尾崎泰助、日本物理学会誌第68巻 305-308 (2013)
<p>会議発表 計12件</p>	<p>専門家向け 計11件</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. シリセンの合成と構造・電子状態評価, <u>高村(山田)由起子</u>, 2013年第60回応用物理学会春季学術講演会, 神奈川工科大学, 2013.03.28 2. Electronic properties of epitaxial silicene: a LT-STM/STS study, A. Fleurence, C.-C. Lee, T. Ozaki, <u>Y. Yamada-Takamura</u>, Y. Yoshida, and Y. Hasegawa, American Physical Society March Meeting 2013, Baltimore, U.S.A., 2013.03.20 3. A planar-like silicene on ZrB₂(0001) surface revealed by a first-principles study, C.-C. Lee, <u>Y. Yamada-Takamura</u>, and T. Ozaki, American Physical Society March Meeting 2013, Baltimore, U.S.A., 2013.03.20 4. Experimental Realization of Silicene - Si-version Graphene -, <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, 7th Japanese-French Frontiers of Science Symposium (JFFoS2012), Shiga, Japan, 2013.01.25-27 5. LT-STM/STS Investigation of the Electronic Properties of Epitaxial Silicene, A. Fleurence, Y. Yoshida, C.-C. Lee, T. Ozaki, Y. Hasegawa, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, 40th Conference on the Physics & Chemistry of Surfaces & Interfaces (PCSI-40), Waikoloa, U.S.A., 2013.01.20 6. エピタキシャルシリセン-Si版グラフェン-の構造と電子状態, <u>高村(山田)由起子</u>, 第32回表面科学学術講演会, 東北大学片平キャンパス, 2012.11.22 7. A simple formula to unfold first-principles band structures with a non-orthogonal basis set, Chi-Cheng Lee, Taisuke Ozaki, Antoine Fleurence, and <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, 15th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-15), Taipei, Taiwan, 2012.11.05 8. Epitaxial Growth of Zirconium Diboride Thin Film on Ge(111) Wafer, C. Hubault, A. Baba, A. Fleurence, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, American Vacuum Society 59th International Symposium and Exhibition, Tampa, U.S.A., 2012.10.31 9. Epitaxial silicene: 2D silicon with π electronic bands, A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, Y. Wang, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, International Conference on Nanoscience + Technology (ICN+T2012), Paris, France, 2012.07.23 10. Epitaxial silicene on ZrB₂ buffer layer: Structure and electronic properties, A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, Y. Wang, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, European Materials Research Society 2012 Spring Meeting, Strasbourg, France, 2012.05.15 11. Structural and Electronic Properties of Epitaxial Silicene, <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, The 39th International Conference on Metallurgical Coatings and Thin Films (ICMCTF2012), San Diego, U.S.A., 2012.04.23 <p>一般向け 計1件</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. シリセン-Si製のグラフェン?-:最薄Siシート研究の現状と可能性, <u>高村(山田)由起子</u>, JAISTシンポジウム2012, 秋葉原, 2012.11.16

様式19 別紙1

図書 計0件	
産業財産権 出願・取得状 況 計0件	(取得済み) 計0件 (出願中) 計0件
Webページ (URL)	研究室ホームページ: http://www.jaist.ac.jp/ms/labs/yukikoyt プレスリリース日本語版: http://www.jaist.ac.jp/news/press/2012/post-322.html プレスリリース英語版: http://www.jaist.ac.jp/en/top/newst/2012/05/structurally-flexible-silicene-integrated-with-si-wafers.html
国民との科学・技術対話の実施状況	1. 富山県立高岡高校の理科担当の先生7人が実験室を訪問され、研究内容を説明した。2012.10.05 2. 本学の一般向けオープンキャンパス「JAIST FESTIVAL 2012」にて青少年科学教室「原子を観る:走査トンネル顕微鏡を使ってみよう!」を開催。高校生 3 名を相手に走査トンネル顕微鏡による原子像観察に関する講義と実演を行った。2012.09.29
新聞・一般雑誌等掲載 計9件	1. “Sticky problem snares wonder material”, Nature 誌(英国), vol. 495., p. 152-153 (2013). 2013.03.14 2. “Silicene: The next wonder material emerges from the shadows”, ZDNet(Web ニュース、アメリカ合衆国)、2012.07.04. http://www.zdnet.com/silicene-the-next-wonder-material-emerges-from-the-shadows-7000000209/ 3. “Silicene may join graphene as wonder material”, COSMOS 誌オンライン版(オーストラリア)、2012.07.02. http://www.cosmosmagazine.com/news/silicene-may-join-graphene-wonder-material/ 4. “Silicene pops out of the plane” Physics World 誌オンライン版(英国)、2012.06.20. http://physicsworld.com/cws/article/news/2012/jun/20/silicene-pops-out-of-the-plane 5. 「北陸先端大、シリコン膜作成、厚み、原子一個分、半導体の性質」、日経産業新聞、12 面、2012.05.31. 6. 「北陸先端大、次世代電子材料「シリセン」の面積製造技術を確立」、日刊工業新聞、29 面、2012.05.31. 7. 「ケイ素で極薄シート、先端大、大きく作る手法開発」、北國新聞、43 面、2012.05.31. 8. 「極薄ケイ素シート、大きく作る、新素材開発に期待、先端大が新手法」、北陸中日新聞、26 面、2012.05.31. 9. 「ケイ素の極薄シート作製に新手法 電子材料に応用期待」、共同通信、2012.05.30.
その他	1. Silicene - control of atomic-scale buckling by epitaxial strain, Yukiko Yamada-Takamura, Seminar at MESA+ Institute for Nanotechnology, University of Twente, Enschede, the Netherlands, 2012.10.02 (オランダの大学における招待講演) 2. Band Engineering of Silicene through Structure Control, Yukiko Yamada-Takamura, DARPA 2D Materials beyond Graphene Workshop, Pont-a-Mousson, France, 2012.09.26 (アメリカ国防省国防高等研究計画局主催のワークショップにおける招待講演) 3. ケイ素(Si)原子 1 層のシート“シリセン”の合成に成功、KEK 物構研トピックス、2012.06.14. http://imss.kek.jp/news/2012/topics/120614Silicene/index.html 4. 世界で初めてシリセンの構造と性質の関係を実験から解明～グラフェンでは難しいバンドギャップの導入が可能～、Nanotech Japan、2012.06.12. https://nanonet.go.jp/muta49cxx-281/#_281

4. その他特記事項

- ・査読有り論文 1 が Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology の June 25, 2012 issue に採録された。

実施状況報告書(平成24年度) 助成金の執行状況

本様式の内容は一般に公表されます

1. 助成金の受領状況(累計)

(単位:円)

	①交付決定額	②既受領額 (前年度迄の 累計)	③当該年度受 領額	④(=①-②- ③)未受領額	既返還額(前 年度迄の累 計)
直接経費	112,000,000	78,580,000	17,710,000	15,710,000	
間接経費	33,600,000	23,574,000	5,313,000	4,713,000	
合計	145,600,000	102,154,000	23,023,000	20,423,000	0

2. 当該年度の収支状況

(単位:円)

	①前年度未執 行額	②当該年度受 領額	③当該年度受 取利息等額 (未収利息を除 く)	④(=①+②+ ③)当該年度 合計収入	⑤当該年度執 行額	⑥(=④-⑤) 当該年度未執 行額	当該年度返還 額
直接経費	68,229,690	17,710,000	0	85,939,690	71,826,256	14,113,434	0
間接経費	0	5,313,000	0	5,313,000	5,313,000	0	0
合計	68,229,690	23,023,000	0	91,252,690	77,139,256	14,113,434	0

3. 当該年度の執行額内訳

(単位:円)

	金額	備考
物品費	54,119,100	超高真空高温走査プローブ顕微鏡システム、 スペクトルリード、ウェハートレー等
旅費	1,265,300	研究発表旅費等
謝金・人件費等	13,844,632	研究員、研究補助員人件費
その他	2,597,224	学会参加費、装置修理費等
直接経費計	71,826,256	
間接経費計	5,313,000	
合計	77,139,256	

4. 当該年度の主な購入物品(1品又は1組若しくは1式の価格が50万円以上のもの)

物品名	仕様・型・性能 等	数量	単価 (単位:円)	金額 (単位:円)	納入 年月日	設置研究機関 名
ソフトウェアCD(CRISP software)	CRISP software for HRTEM i	1	614,013	614,013	2012/5/14	北陸先端科学技術大学院大学
超高真空高温走査プローブ顕微鏡システム	VTSTM100-D RH MPC, MA	1	44,625,000	44,625,000	2013/3/27	北陸先端科学技術大学院大学
スペクトルリード(4-grid SPECTRALED 254mm)	4-grid, 254mm, B002921	1	2,151,660	2,151,660	2013/3/27	北陸先端科学技術大学院大学
ソフトウェア(Electronics and software for Auger Spectroscopy)	B002972	1	2,838,360	2,838,360	2013/3/27	北陸先端科学技術大学院大学
リードファンシャッター(LEED fan Shutter)	B002744	1	574,980	574,980	2013/3/27	北陸先端科学技術大学院大学