

終端元素が規定された AFM 探針による単原子の電気陰性度測定

The determination of electronegativity of individual atoms

using chemically defined AFM tips

東大新領域¹ ○宮崎洋記¹, 小野田稔¹, 杉本宜昭¹

GSFS, Univ. of Tokyo¹, [○]Hiroki Miyazaki¹, Jo Onoda¹, Yoshiaki Sugimoto¹

E-mail: h-miyazaki@afm.k.u-tokyo.ac.jp

電気陰性度は化学における重要な概念である。これまで、電気陰性度は熱力学的手法を用いて、様々な結合エネルギーの集団平均として測定されてきた。しかし、電気陰性度は原子が置かれている周辺の環境によって変わりうるため、その観測のためには単原子レベルで電気陰性度を測定する技術が必要となる。

最近、原子間力顕微鏡(AFM)を用いて単原子レベルでの電気陰性度を測定する手法が提案された[1]。しかし、この手法では目的の原子の電気陰性度と、参照原子の電気陰性度の差の絶対値しか得ることができなかった。目的の原子の電気陰性度の値を決定するためには理論計算を併用する必要がある。

本研究では、実験のみにより目的の原子の電気陰性度を決定する手法を提案する。最初に、蒸着により Si 製の探針を Al でコートした。この探針を用いて、Al を蒸着した Si(111)-(7x7)表面の観察を行った。次に、探針の状態を変えながら、Si、Al 原子上のエネルギーカーブを何点か取得した。その結果、図 1(a),(b)に示すように 2 通りの結果が得られた。図 1(a)は Si 原子、Al 原子上の最大結合エネルギーがほぼ同じで、一方図 1(b)では Si 原子上に比べて Al 原子上の最大結合エネルギーが小さい。図中には化学結合理論[2]より導かれる Al 原子上での最大結合エネルギーが矢印で示されており、図 1(a)の矢印は Si で終端された探針、図 1(b)の矢印は Al で終端された探針での理論値を示している。実験結果が各々の理論値によく一致していることから、図 1(a)の時は、探針は Si で終端されており、図 1(b)の時は Al で終端されていると結論付けることができた。

最後に、この Al でコートされた探針を用いて目的の原子の電気陰性度の値を実験のみから決定することに成功した。

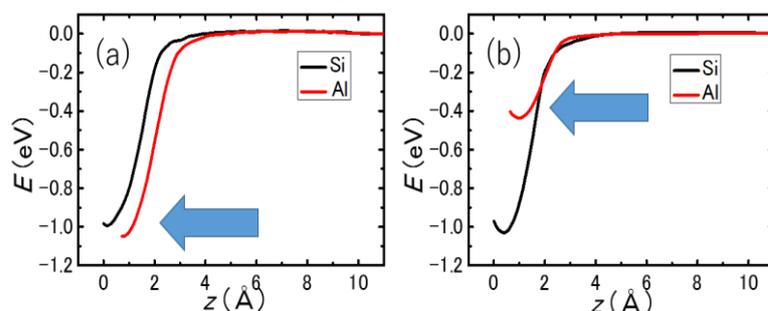


Fig.1: Bond energy curves measured by Al deposited AFM tips. The arrows indicate the theoretical values of maximum bond energy on the Al adatom predicted by (a) a pure Si tip and (b) an Al terminated tip.

[1] J. Onoda, et al., *Nat. Commun.* **8**,15155 (2017)

[2] L. Pauling, *J. Am. Chem. Soc.* **54**, 3570 (1932)