

原子間力顕微鏡による単一原子の電気陰性度測定

Electronegativity of Single Atoms Determined by Atomic Force Microscopy

東大新領域¹, 阪大院工², チェコ科学アカデミー³,○(PC)小野田 穰^{1,2}, Martin Ondráček³, Pavel Jelínek³, 杉本 宜昭^{1,2}Univ. of Tokyo¹, Osaka Univ.², ASCR³,°(PC)Jo Onoda^{1,2}, Martin Ondráček³, Pavel Jelínek³, and Yoshiaki Sugimoto^{1,2}

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

電気陰性度は化学結合の極性をはじめ、種々の化学現象を考えるうえで重要な基本概念であり、1932年に Pauling によって初めて具体的な表式が与えられた[1]。実験的には集団平均であるガスの反応熱のデータを基に、各元素に対して1つの電気陰性度の値が定められている。一方、近年の原子間力顕微鏡(AFM)の発展は目覚ましく、共有結合力による元素識別や[2, 3]、単一分子内の結合手の可視化、及び、結合次数の同定に成功してきた[4]。本研究では、AFMによる単一原子の電気陰性度測定を試みた。実験はSiカンチレバーを探針とした室温AFM装置を用いて行った。Si表面上のSiとO原子上(図(a))においてエネルギーカーブを計測すると、O上ではSi上よりも大きな最大化学結合エネルギー(それぞれ図(b)の $E_{\text{tip-O}}$ と $E_{\text{tip-Si}}$)を示した。化学活性度の異なる様々なSi探針を用いて同様の実験を繰り返すと、 $E_{\text{tip-Si}}$ vs $E_{\text{tip-O}}$ プロットは図(c)のように切片をもつ一次関係となった。さらに、Alなど他の元素に対しても同様の検証を行った結果、このような一次関係は普遍的に出現することが分かった。Paulingの極性共有結合の式[1]を用いて一次関係を解析すると、切片から個々の原子の電気陰性度を見積もることが可能である。当日は、同一元素が異なる環境下に置かれた場合に受ける電気陰性度への影響についても議論する。

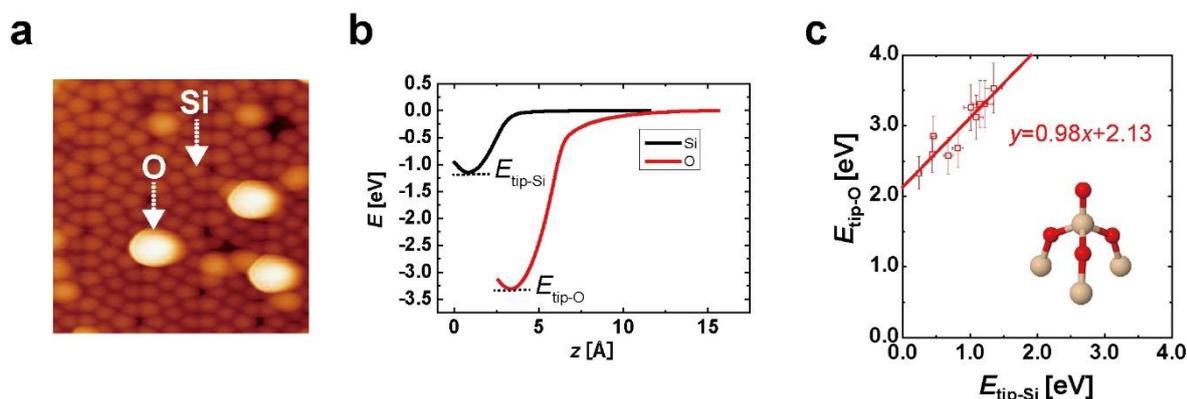


Figure : (a) AFM topographic image of the O adsorbed Si(111)-(7×7) surface. (b) Energy spectroscopies acquired on the Si and O adatoms indicated in (a). (c) The scatter plot of bond energies obtained with different AFM tips. The inset represents the tetrahedral SiO₄ structure (denoted as O in (a)).

[1] L. Pauling, *J. Am. Chem. Soc.* **54**, 3570 (1932).[3] J. Onoda et al., *Phys. Rev. B* **92**, 155309 (2015).[2] Y. Sugimoto et al., *Nature* **446**, 64 (2007).[4] L. Gross et al., *Science* **337**, 1326 (2012).