

原子間力顕微鏡における Pauling の化学結合論

Pauling's Theory of the Chemical Bond in Atomic Force Microscopy



アルバータ大¹, 東大新領域² ○(PC)小野田 穰¹, 杉本 宜昭²

Univ. of Alberta¹, GSFS Univ. of Tokyo², °(PC)Jo Onoda¹, Yoshiaki Sugimoto²

E-mail: jonoda@ualberta.ca

化学結合は物質を構成する原子と原子のあいだに働き、物質の構造や性質を決定する。化学者 Pauling は、当時確立したばかりの量子力学を用いて、化学結合の本質を明らかにした[1]。Pauling の化学結合論は、ガスの反応熱の測定などにより求められた様々な単体と化合物間の化学結合エネルギーの関係を説明し、大きな成功を収めた。その一方、原子間力顕微鏡(AFM)の発展により探針の位置精度と力感度が向上し、単原子スケールでの力(または、エネルギー)の測定が可能となった。ここで、試料として Si などの半導体表面を考えた場合、表面の Si 原子はダングリングボンドをもつ。AFM 探針が Si 原子などにより終端しダングリングボンドを持つ場合は、探針と表面の Si 原子の間には強い化学結合力が生じる。

本件では、AFM によって単原子スケールで測定した化学結合エネルギーに対して、Pauling の化学結合論を適用した我々の研究結果を報告する。実験は室温 AFM 装置によって行われ、探針として Si カンチレバー、基板試料として Si(111) を用いた。この表面に Si と同程度の電気陰性度をもつ元素(Ge, Sn など)や、異なる電気陰性度をもつ元素(Al や O など)を準備し、化学結合エネルギーの測定を行った。図 1 は Al の結果を示している。様々な Si 探針を用いて、横軸は Si 原子上、縦軸は Al 原子上の最大化学結合エネルギーとしてプロットを行うと、一次関係が現れた。この一

次関係は様々な元素に対して普遍的に表れる。この結果を Pauling の化学結合論により解釈すると、直線の傾きから「表面原子の元素識別」、切片から「表面原子の電気陰性度測定」を行えることが判明した。また、図 1 に示すように異なる元素で終端した探針は異なる直線を示しており、「探針原子の元素識別」も可能であることが分かった[2]。これらの結果は、Pauling の化学結合論は原子スケールにおいても良く成り立ち、AFM で得られる化学結合エネルギーのデータ間に統一的な見方を与えることを示している。

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

[2] J. Onoda, et al., *Nano Lett.* **20**, 2000 (2020).

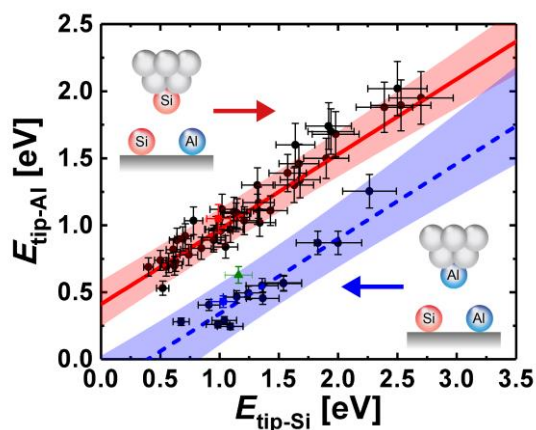


Fig. 1: Scatter plot of the bond energies measured on surface Si and Al adatoms. Si- (red solid line) and Al- (blue dashed line) terminated tips show different trends in the plot.