

## 論文審査の結果の要旨

氏名 ミッシェル ゴチエ

本論文は、非接触原子間力顕微鏡 (Atomic Force Microscopy, A F M) の動作原理について理論的に明らかにした研究である。つまり、A F M探針と試料表面との間の相互作用および制御回路系全体を非線形動力学複雑系として捉え、従来の摂動論を越える理論を構築し、それによる数値シミュレーション法を開発して、従来理論では理解できなかったいくつかの現象を明らかにすることに成功した。また、A F M測定中に起こる構造的に可逆な原子尺度のエネルギー散逸機構を解明し、逆にこれを利用してA F M測定の新しい可能性を理論的に予言した。これらの研究成果によって、A F Mの基本原理の理解が飛躍的に進み、原子尺度・ナノメータスケール科学の研究にとっても重要な知見を与える研究となっている。

本論文は四つの章から構成されている。第1章では本研究の背景、特に、A F Mの基礎的事項と従来の理論について概観し、その中から生まれた問題意識および本研究の目的が述べられている。第2章では、A F Mの動作理論について、従来の摂動論の詳細及びその限界が記述され、その後、論文提出者が考案した新しい理論の定式化が詳述されている。さらに、その理論をもとに数値シミュレーションを行い、それによって実験で観測されている現象およびA F Mの動作原理の詳細が明らかにされている。第3章では、A F M測定中に起こるエネルギー散逸について、探針をブラウン運動する粒子、試料表面原子をそれとランダムに相互作用する粒子と考案して新しいモデルを提出した。そのモデルから、試料表面のフォノンの局所状態密度の観測の可能性、およびそれを利用して、観察原子の質量の判別、最表面より内部に存在する欠陥の検出の可能性などを予言した。最後に、第4章において本論文で明らかにされた結果、その意義、および今後の研究の展望をまとめている。

最近の表面物理の分野での研究の進展は目覚しく、それは原子スケールで観察・測定が可能な各種実験手法の進歩に負うところが大きい。その中で、本研究のテーマである原子間力顕微鏡 (A F M) は、導電体だけでなく絶縁体試料の表面構造を原子レベルで観察・加工できる実験手法として、幅広い分野で利用されている。しかし、その動作原理は必ずしも十分明らかになっているとは言い難い状態であった。特に、何故、原子分解能が得られるのか、何故A F Mが安定に動作するのか、という

もっとも基本的なことさえ、理論的に十分解明されていなかった。本論文は、AFMに関し、そのような本質的な事項を極めて明快に説明する理論を構築したものである。

本研究の成果は大きく分けて二つある。

#### (1) 非接触AFMの非線形動力的複雑系としての理解・記述

従来は無視されていたAFM制御回路系のモデル化を注意深く行い、探針と試料表面との相互作用も取り入れたAFMシステム全体を記述するモデルを構築し、さらに、それに基づく数値シミュレーションを実際に行った。その結果、AFMが安定に動作する理由が解明されるとともに、系の応答時間が有限であることによって動作が不安定になる条件も見出された。また、実験で観測されながらその起源が謎だったいくつかの現象（トポグラフ像と散逸像との間のコントラストの反転やずれ、探針構造の変化に対して散逸像だけが敏感に変化することなど）に対して適切な説明を与えることができた。

#### (2) 原子尺度のエネルギー散逸機構の解明

AFM動作中でのエネルギー散逸機構および、何故原子尺度でエネルギー散逸が変化して原子分解能の散逸像が得られるのか、という基本的な問題に対して、従来提出されていた理論は不完全なものだった。そこで、申請者は、ブラウン運動のモデル化から新しい理論を提出した。つまり、AFM探針をブラウン運動する粒子とみたと、格子振動している試料表面の原子をそのブラウン運動粒子にランダムに相互作用する粒子と考える。そうすると観測される散逸像は、フォノンの局所状態密度の分布を表わしている、という極めて根本的で重要な結論に到達した。逆にこの事実を利用すれば、表面原子の質量に敏感な解析や表面第二原子層以下の画像化が可能になる、という事実を予言し、実際数値シミュレーションでそれらを示した。これらの予言はまだ実験で観測されていないが、AFMの新しい可能性を示唆する重要な結論であり、当該分野で高く評価されている。

以上のように、論文提出者は、非接触原子間力顕微鏡について理論的に詳細に研究し、その動作の根本原理に関わる重要な知見を得た。このように本研究は、最先端の実験技術に関して様々な理論手法を駆使して初めてなされたものであり、その独創性が認められたため、博士(理学)の学位論文として十分の内容をもつものと認定し、審査員全員で合格と判定した。なお、本論文は、共同研究者らとの共同研究であるが、論文提出者が主体となって理論の構築、数値シミュレーションおよび解析を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。