

## 論文審査の結果の要旨

氏名 小泉 悟

1986年にBennigらによって開発された原子間力顕微鏡(Atomic Force Microscopy; AFM)は、探針先端と試料表面との間に働く原子間の力の検出により、試料表面の構造を原子尺度で測定できる装置として期待された。しかし、当初開発された接触方式のAFMでは真の原子分解能は達成されず、ようやく1995年になって、Albrechtらによる非接触AFMを用いて、GiessiblがSi再構成表面の単原子観察に初めて成功した。それ以降、非接触AFMの実験法は急速に進展し、現在では表面や表面上のナノ構造を原子尺度で観察するための優れた手法と考えられている。しかしながら、非接触AFMの原理、特に、観測される顕微鏡像の本質、原子尺度分解能の機構などはまだ必ずしもよく理解されていない。

本論文提出者小泉悟は、非接触AFMの画像化機構の解明を目指して、顕微鏡でみる対象と顕微鏡探針として、どちらも構造のよく知られているSi再構成表面、Si探針を選び、両者の間に働く相互作用について第一原理計算による解析を行った。より具体的には、探針先端の模型として $\text{SiH}_3$ 、表面模型として $\text{Si}(100)\text{-p}(2\times 2)$ 再構成表面を選び、表面 $\text{p}(2\times 2)$ 単位格子の全域にわたって探針先端の高さを変えた計算を行った。

本論文は4章と付録Aからなる。序章に続く第2章では、解析に用いた計算手法が説明されている。第一原理計算では、密度汎関数法に基づき、探針先端と表面からなる系について、共役勾配法によって全エネルギーを最小にする構造最適化を行い、探針先端・表面間の相互作用を算出する。具体的には、Ceperley-Alder型の局所密度近似、および、TroullierとMartinsの方法で構成された分離型擬ポテンシャルを用いる。こうして算出した原子尺度の力は、佐々木らの理論を用い

て、探針(カンチレバー)の固有振動の周波数シフトに変換され、非接触 AFM 像の観測結果と比較される。

第3章では、得られた計算結果が詳しく議論されている。本研究では、相対位置が固定され3個の終端水素に繋がる探針先端の1個のSi原子、および、表面模型として裏面が水素終端された5層のSi原子が、探針の位置ごとに構造最適化される。この計算によって、Si(100)-p(2×2)表面では、探針の影響で表面構造が複雑に変化すること、すなわち、探針の水平位置の違いにより、探針の高さの変化に応じて以下の三つの特徴的な振舞いが見出された。1) 表面は連続的に変形し、探針に掛かる力も連続的に変化する。2) 探針を表面に近づけていくとき、表面構造および探針に掛かる力が不連続に変化するが、探針を表面から遠ざけていくときは両者とも連続的な変化を示す。3) 探針を表面に近づけていくときも、表面から遠ざけていくときも、表面構造および探針に掛かる力が不連続に変化する。ただし、両者が不連続な変化を示す探針の高さは、探針を近づけていったときと遠ざけていったときとで異なっている。

これらの結果は、Si(100)-p(2×2)再構成表面における、隣接する表面Si原子が形成するダイマー構造に密接に関係するものであり、特に結果2)は、非接触 AFM の原理が表面の観察にだけでなく、表面の原子構造の力学的な制御にも利用できること、また結果3)は、力曲線が履歴をもち、原子尺度での散逸機構の一つであることが指摘されている。なお、付録Aでは、探針先端をSi<sub>4</sub>H<sub>9</sub>とした場合について計算を行い、上記の結果が探針の大きさにあまり依存しないことが確かめられている。

以上に述べた本論文の研究成果は、全Si原子の構造最適化を第一原理計算手法を用いて実行することにより、Si再構成表面に対する探針の効果を解析し、非接触 AFM 像の出現機構を明らかにしたものである。「散逸顕微鏡」の提起を含め、本研究で得られた多くの新たな知

見が当該分野の研究進展に果たした貢献は十分なものがあり、学位論文として高く評価される。

したがって、博士(理学)の学位を授与できると認める。