

課題番号 : F-17-TT-0010  
 利用形態 : 機器利用  
 利用課題名(日本語) : 走査プローブ顕微鏡による表面ナノ構造の計測  
 Program Title (English) : Analysis of surface nanostructure using scanning probe microscopy  
 利用者名(日本語) : 岡田有史, 美濃宏亮  
 Username (English) : A. Okada, K. Mino  
 所属名(日本語) : 京都工芸繊維大学  
 Affiliation (English) : Kyoto Institute of Technology  
 キーワード/Keyword : 形状・形態観察・分析、成膜・膜堆積、溶媒蒸発法、第一原理計算

### 1. 概要(Summary)

本研究では、(1)真空蒸着で作製された金属表面に溶液を用いた分子配列の作製を行い、STMを用いたナノレベル観察を行った。また(2)金属表面の酸化初期過程の走査トンネル顕微鏡 (STM)イメージに関して第一原理計算との比較による詳細な解析を行った。

### 2. 実験(Experimental)

#### 【利用した主な装置】

走査型プローブ顕微鏡

#### 【実験方法】

有機分子を配列させる Au(111)基板は、350 °Cにおいて金を劈開マイカ上に真空蒸着し、フレームアニールで結晶化させて作製した。メラミン (MEL)およびテレフタルアルデヒド (TPA)は超純水に、そしてトリス(4-ブロモフェニル)トリアジン (TBPT)は 1,4-ブタンジオールに溶解させてそれぞれ試料溶液とした。これらを基板に滴下し、ホットプレートで乾燥させた。

酸化初期過程に関する研究では、Mo(110)の酸化初期過程について得られていた STM 像の単位格子を抽出し、大小のモデル作製を行った後、平面波近似による第一原理計算 (VASPソフトウェア)を用いて構造最適化を行い、STM 像のシミュレーションを行った。

### 3. 結果と考察(Results and Discussion)

MEL-TPA 分子配列の作製では、溶媒の pH 調整や還元剤による反応中間体の保護などを行ったが、共有結合性の構造を高い再現性で得ることは困難であった。これは作製時の大気中の水分など、制御すべき課題が残っているためと考えられる。TBPT を用いた分子配列の作製では、Fig. 1 に示すように大気中で個々の分子 (挿入図に構造を示す)を見分けることができた。さらに、分子の配

向によって分子の中心の明暗が異なることがわかった。これは分子の中心のトリアジン環と基板との相互作用が従来報告されているベンゼン環に比べて強く、分子-基板での電子軌道の重なりによる局所状態密度の変動が吸着サイトごとに大きく異なったためと考えられる。この分子は複数の構造を取ることがわかった。現在、構造モデルの検討を行うと共に、分子同士の反応による共有結合性ネットワークの作製を試みている。

Mo 表面の酸化過程の STM 像の解析では、Fig. 2 に示すように、実験で得られた像とよく似たシミュレーション像が得られた。また、表面に周期的に応力が発生している可能性が指摘された。この応力は酸化に伴うステップ-テラスの生成メカニズムにおいて重要な役割を果たしていると考えられる。

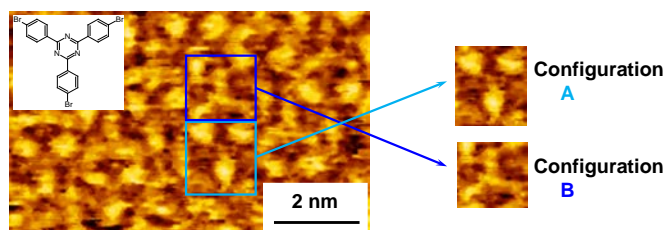


Fig. 1 Typical STM image of TBPT/Au(111) surface prepared by solvent evaporation method. Inset: Molecular structure of TBPT.

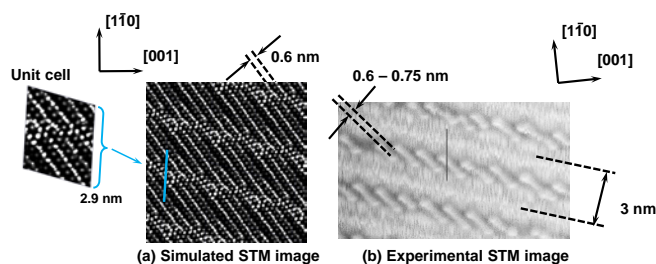


Fig. 2 (a) Simulated and (b) Experimentally obtained STM images.

#### 4. その他・特記事項(Others)

金属 Mo 表面の酸化初期過程の STM 像に関する第一原理計算 (名古屋大学)は原紳介氏 (東京理科大学)と共同で行った。

#### 5. 論文・学会発表(Publication/Presentation)

- (1) A. Okada, S. Hara, and M. Yoshimura, Jpn. J. Appl. Phys., 56, 095501 (2017).
- (2) A. Okada, T. Naeshirozako, K. Nishimura, M. Yoshimura, and K. Kadono, Jpn. J. Appl. Phys., 56, 045202 (2017).
- (3) 岡田有史, 豊田麗, 美濃宏亮, 吉村雅満, 角野広平, 表面科学, 38, 384-389 (2017).
- (4) K. Mino, S. Hasui, M. Shiota, A. Okada, M. Yoshimura, and K. Kadono, The 25th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, 平成 29 年 12 月 7 日 (ポスター).

#### 6. 関連特許(Patent)

なし。