

Title	Scanning Tunneling Microscopy Observation and Molecular Orbital Calculation of Organic Molecules Adsorbed on the Si (100) 2x1 Surface
Author(s)	笠, 谷恵
Citation	大阪大学, 1997, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/39972">https://hdl.handle.net/11094/39972</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	笠谷 恵
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第 12938 号
学位授与年月日	平成9年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科無機及び物理化学専攻
学位論文名	Scanning Tunneling Microscopy Observation and Molecular Orbital Calculation of Organic Molecules Adsorbed on the Si(100)2x1 Surface (Si表面における吸着有機分子の走査トンネル顕微鏡観察と分子軌道法による表面電子状態計算)
論文審査委員	(主査) 教授 川合 知二  (副査) 教授 中村 巨男 教授 山口 兆 姫路工業大学教授 馬越 健次

### 論文内容の要旨

走査トンネル顕微鏡 (Scanning Tunneling Microscopy:STM) は表面の構造や電子状態を 3次元実空間情報として与えることが出来る。しかし、STM によって得られる吸着有機分子の結像理由については未だ解っていない事が多い。本研究では、STM によって得られた分子像と、計算によって得られた吸着分子の電子状態を比較し、STM による有機分子のイメージング機構を明らかにすることを目的とした。本論文では Si(100)2x1 上の吸着有機分子の STM 観察と、有機分子を吸着させた Si クラスターの分子軌道計算を行い、これらの結果を比較することにより、STM における分子像の結像原因を議論している。

吸着分子像の STM 観察は超高真空内において行った。真空内において p-Si を加熱することによって 2x1 再構成表面を形成。清浄表面を STM によって確認後、同表面に少量の分子を蒸着し、再び STM 観察を行った。これらの作業により、Si(100)2x1 表面に吸着した分子の STM 像が得られ、それぞれの分子が、固有の特徴的な分子像を示していることが分かった。これらの結果は、分子が Si(100)2x1 表面においてそれぞれ特徴的な吸着構造を持って吸着していることを示唆している。

分子が吸着した表面の電子状態に対する計算は、Si ダイマー上に分子を置き、一つの分子/Si クラスターの分子軌道を計算することによって行った。これらの計算は構造最適化を伴い、最適化された構造から分子吸着サイトや吸着によって歪んだ分子の分子軌道を評価することが可能である。

本研究では STM 観察によって得られた固有分子像と分子/Si-クラスターの分子軌道とを比較するために、近似的に表面の状態関数を MOPAC によって計算された分子と Si 表面の分子軌道とにおきかえ、その真空内での減衰項が表面から十分離れた場所では軌道準位の持つエネルギーに従って指数関数的に減衰すると仮定した。

実験した分子の中で、シトシン吸着分子像のみが明らかなバイアス依存性を見せ、計算結果ではシトシン分子にはエネルギーの浅い位置には分子軌道がなく、深いエネルギー準位にのみ確認できた。これらの結果はシトシンの分子像が分子の軌道の存在によって与えられていることを示唆している。

幾つかの分子に対しては、計算の結果からトンネルに寄与すると考えられる分子軌道の表面に対して平行な面における広がり方が STM 像との一致を示した。これらの結果は分子の吸着構造のわずかな違いが分子軌道の形を大きく変え、それが STM による分子像に反映されていることを明らかに示した。

ベンタセン分子の分子像は Si ダイマー列の間が分子軌道の有無に関わらず、必ず暗くなっていた。これはダイマー

列間が空間的に大きいため、その部分は電子の伝導確率をダイマー列上よりも減少させると考えられる。この効果が分子像の Si ダイマー列間が必ず暗く与えられている原因であると考えた。

本論文は STM によって観察された吸着有機分子像を示し、分子像が吸着分子の分子軌道を反映していることを立証した。

#### 論文審査の結果の要旨

笠谷恵さんの論文は、走査トンネル顕微鏡におけるシリコン表面吸着有機分子像の結像理由を主題とし、これについて実験と計算の両面から研究し、吸着分子の分子軌道と STM 像との関係を明らかにしている。種々の吸着有機分子について実験を行い、その観察結果と分子軌道法による電子状態計算結果を比較検討し、それにもとづいてシリコン表面吸着有機分子像の起源に対して、新たな見解を提出した。これは、多くの実験がありながらそのメカニズムが定まっていなかった走査トンネル顕微鏡による分子像観察研究の分野に大きく貢献している。

よって本論文を博士（理学）の学位論文として十分に価値あるものと認める。