

原子間力顕微鏡による単原子の電気陰性度の決定<sup>†</sup>小野田 穰<sup>1,2</sup>・Martin ONDRÁČEK<sup>3</sup>・Pavel JELÍNEK<sup>3,4</sup>・杉本宜昭<sup>1,2</sup><sup>1</sup>東京大学大学院新領域創成科学研究科 ☎ 277-8561 千葉県柏市柏の葉 5-1-5<sup>2</sup>大阪大学大学院工学研究科 ☎ 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1<sup>3</sup>Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Cukrovarnická 10/112, Prague 162 00, Czech Republic<sup>4</sup>Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Department of Physical Chemistry, Palacky University, Šlechtitelů 27, 783 71, Olomouc, Czech Republic

(2017年3月3日受付; 2017年3月28日掲載決定)

## Electronegativity Determination of Single Atoms by Atomic Force Microscopy

Jo ONODA<sup>1,2</sup>, Martin ONDRÁČEK<sup>3</sup>, Pavel JELÍNEK<sup>3,4</sup> and Yoshiaki SUGIMOTO<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Department of Advanced Materials Science, University of Tokyo, 5-1-5 Kashiwanoha, Kashiwa, Chiba 277-8561<sup>2</sup>Graduate School of Engineering, Osaka University, 2-1 Yamada-Oka, Suita, Osaka 565-0871<sup>3</sup>Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Cukrovarnická 10/112, Prague 162 00, Czech Republic<sup>4</sup>Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Department of Physical Chemistry, Palacky University, Šlechtitelů 27, 783 71, Olomouc, Czech Republic

(Received March 3, 2017 ; Accepted March 28, 2017)

Electronegativity is one of the fundamental concepts in chemistry. Despite its importance, the experimental determination has been limited only to ensemble-averaged techniques. Here, we report a new methodology to evaluate the electronegativity of individual surface atoms by atomic force microscopy. By measuring bond energies on the surface atoms using different tips, we found characteristic linear relations between the bond energies of different chemical species. Using Pauling's equation for polar covalent bond, we successfully quantify their electronegativity values. Moreover, we demonstrate that the method is sensitive to variation of the electronegativity of given atomic species on a surface due to different chemical environments. Our findings open up new ways of analyzing surface chemical reactivity in atomic scale.

KEYWORDS : electronegativity, AFM

## 1. はじめに

電気陰性度は化学において重要かつ基本的な物理量である。1932年、化学の大家である Pauling は電気陰性度の定義を「the power of an atom in a molecule to attract electrons to itself (分子内の原子が電子を引き寄せる力)」とし、初めて定式化した<sup>1)</sup>。Fig. 1 に代表的な化学結合の種類を示す。二原子間の間で電子が等しく共有される場合は「共有結合 (Fig. 1 左)」, 片方の原子へ完全に電子が移行する場合は「イオン結合 (Fig. 1 右)」となる。

一般的に物質内部では、電子は二原子間で共有されつつ、電荷密度が片方の原子に偏った「極性共有結合 (Fig. 1 中央)」をとる。この場合、二原子のうち電気陰性度の高い原子の方に電子は偏り、電気陰性度差が大きいほど分極の度合いは大きくなる (Fig. 1)。これまで、各元素の電気陰性度は主にガスの反応熱のデータをもとにして決められており<sup>2)</sup>、それらの値は集団平均的な量であった。

その一方、表面の個々の原子を観察・測定する代表的なツールとして走査トンネル顕微鏡と原子間力顕微鏡 (AFM) があげられる。特に AFM の発展に関して、個々の原子上での化学結合力の精密測定から始まり<sup>3)</sup>、表面を構成する原子の元素識別<sup>4)</sup>、さらに最近では有機

<sup>†</sup> 第36回表面科学学術講演会 (2016年11月29日~12月1日)にて発表

E-mail : jonoda@afm.k.u-tokyo.ac.jp