

X線誘起の試料表面近傍力場変化の XANAM による成分分析

Compositional Analysis of changes in X-ray-induced-force-field in the vicinity of a sample surface by means of XANAM

名大院工¹、北大触媒セ²、ICU³、KEK-PF⁴

○鈴木秀士¹、向井慎吾²、田旺帝³、野村昌治⁴、朝倉清高²

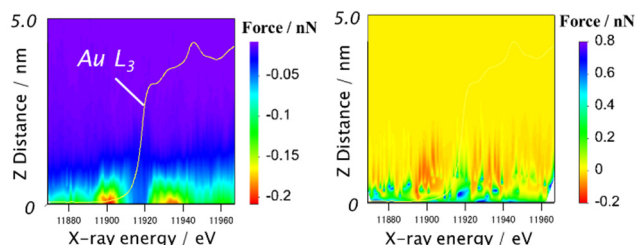
Nagoya Univ.¹, Hokkaido Univ.², ICU³, KEK-PF⁴

○Shushi Suzuki¹, Shingo Mukai², Chun Wang-Jae³, Masaharu Nomura⁴, Kiyotaka Asakura²

E-mail: shushi@apchem.nagoya-u.ac.jp

異種原子同士が接触する表面／界面は新たな機能性・化学特性を創発する重要な場として活発な研究が行われている。しかし、元素を識別しながら異種原子同士の原子配列や構造物を直接、顕微的に分析するのは未だ容易ではない。この問題を克服するために我々は、表面／界面のナノ構造を個々に識別しながら、化学状態を特定する手法として「X線支援原子間力顕微鏡(XANAM)」を開発してきた。これは非接触原子間力顕微鏡(NC-AFM)における表面と探針間における力相互作用が、試料側元素の吸収端エネルギーを持つX線照射によって変化するという現象を基礎として、元素情報を導く。既に、NC-AFMの研究では力相互作用には、共有結合性を持つ化学結合力が含まれる事がわかっている。我々は、この化学結合力に局在する占有・非占有電子軌道にX線励起電子が相互作用することで力変化が生じていると仮説を立てている。そこで、この仮説の証明のために、以前より力場スペクトルのエネルギー依存性の測定し、van der Waals力、静電的相互作用力、化学結合力等に分離する解析を行っている。これによりX線誘起される力変化の由来をのいずれであるか特定できる。加えて、X線斜入射時に観測される表面近傍のX線散乱や回折、定在波等に関連する知見も局所力場の解析を通じて得られると期待される。

実験は、つくばの高エネルギー加速器研究機構の放射光研究施設(KEK-PF) BL-7Cにて、専用に設計・製作したNC-AFM(XANAM)装置で測定を行った。解析は、Wolfram社製 Mathematica v.9にて、①周波数シフト信号から力信号変換、②残留およびX線誘起の静電的相互作用の分離、③van der Waals相互作用の分離、④残りの成分を化学結合由来と仮定したモース関数によるフィッティング、の一連の手続きを行う計算コードを作成して行った。①はJ.E. Saderらの理論式[1]を用いた。また②③は円錐形状の探針を仮定したS. Hudletら[2]およびS. Kuhnら[3]の理論式を用いた。他に、二次電子放出によって空間的な電子の偏りが生じ、長距離的な静電的相互作用が生じると仮定し、Patch Chargeによる効果[4]を計算に導入した。以上の計算を探針形状のパラメータを保存しつつ、カイ二乗フィットを行うことで全体最適解を計算した。下図左は①(全力合計)、右は④(共有結合力)についてのエネルギー依存性である。さらなる結果の最適化が必要であるものの、吸収端付近での化学結合力の変化が仮説通り生じていることを示した。発表では他の力成分やPatch Chargeの影響について報告する。



図：①、④の解析結果(詳細は本文参照)

[1] Sader, J. E. and S. P. Jarvis, *Appl. Phys. Lett.*, **84** (2004) 1801-1803.

[2] Hudlet, S. et al., *Eur. Phys. J. B*, **2** (1998) 5-10.

[3] Kuhn, S. and P. Rahe, *Phys. Rev. B*, **89** (2014) 235417.

[4] Burnham, N. A. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **69** (1992) 144-147.