大規模シミュレーションによる AFM のエネルギー減衰の解明

Energy dissipation of AFM studied by long-time computer simulation

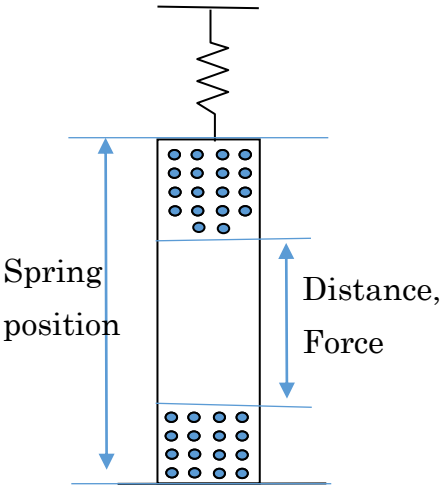
山口大理工 [1]，アールト大 [2]　○仙田康浩 [1]，嶋村修二 [1]，Janne Blomqvist[2]，Risto Nieminen[2]

Yamaguchi Univ. [1], Aalto Univ. [2]

°Yasuhiro Senda[1], Shuji Shimamura[1], Janne Bomqvist[2], Risto Nieminen[2]

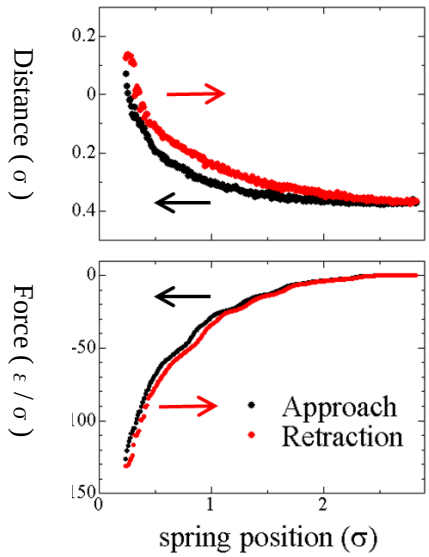
E-mail: senda@yamaguchi-u.ac.jp

非接触モードの原子間力顕微鏡（Atomic Force Microscopy，AFM ）では，試料表面の直上で振動するカンチレバーの振動数の変化を観測して試料表面の原子像が得られる．また，このカンチレバー振動の減衰量からも表面原子の様々な情報が得られる．この振動の減衰の仕組みについては，カンチレバーのプローブ先端と表面間の原子の振る舞いや有限温度での原子の熱振動による影響が指摘されているが，未だその詳細は明らかではない．研究の目的は，分子動力学法と連続体モデルを組み合わせた計算モデル（下左図）により，AFM のエネルギー減衰の仕組みを解明することである．これまでの我々の研究[1,2]で，試料表面のヒステリシスな振動（下グラフ）を伴ってプローブの振動エネルギーが格子振動へ吸収されることを明らかにした．しかし，これらの計算モデルは原子スケールにとどまり，現実の AFM 観測のスケールと異なることが課題であった．そこで，今回我々は，カンチレバーの振動数が MHz(= μ 秒)相当の計算モデルを用いて計算を行った．μ 秒オーダーの分子動力学シミュレーションを行うために，計算プログラムの並列化して大規模な計算を行った．この計算から，原子スケールでの計算モデルで現れた表面のヒステリシスな振動が，μ 秒単位のカンチレバー振動で出現するのかを調べる．また，現実の AFM 観測での振動数（数十～数百 kHz）でのエネルギー減衰の仕組みを解明する一助としたい．



ＡＦＭ計算モデル．

バネはカンチレバー，●はMD粒子をあらわす．



バネの上下振動に伴うプローブー表面間の原子間距離(上)とプローブー表面間引力（下）．

[1]仙田ら，応用物理学会 2014 年秋講演会

[2]Senda *et al.*,e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, 12, 339 (2014)

© 2015年 応用物理学会