

イオン系表面の AFM シミュレーション

AFM simulation for ionic crystal surface

山口大工¹ ○仙田康浩¹, Janne Blomqvist², Risto Nieminen²

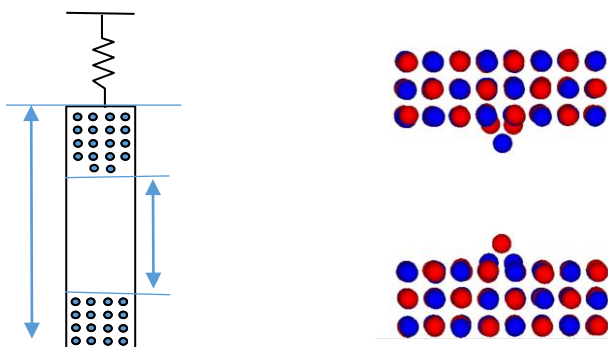
Yamaguchi Univ.¹, Aalto Univ.²

○Yasuhiro Senda¹, Janne Blomqvist², Risto Nieminen²

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, 試料表面とカンチレバー先端間の原子間力によりカンチレバーの共鳴周波数に変化する. 同時に, この原子間力によりカンチレバーの振幅は減衰する. この振動減衰のメカニズムについては, 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. NaCl 等のイオン系物質表面での振動減衰によるエネルギー減衰像が観測されている. また, 計算機シミュレーションによる研究により, これらイオン系物質表面のエネルギー散逸の仕組みの研究が進んでいる[1].

我々は分子動力学法とバネのモデルを組み合わせた AFM の計算モデル (左図) を提案しており, これまでレナードジョーンズ原子間相互作用力を用いて分散力による AFM のエネルギー減衰の仕組みを議論してきた[2]. 今回はクーロン力で結びついたイオン系原子モデル (右図) を用いてイオン系物質表面の AFM シミュレーションを実施する. これまでのイオン系表面でのシミュレーション研究によれば, 振動に伴う表面イオンの不安定な運動によりプローブ先端-表面間力にヒステリシスが生じる[1]. 従来から提案されているこの減衰のメカニズムを検証するとともに, 分散力による減衰のメカニズムと比較する.



左図: AFM計算モデル. バネはカンチレバー, ●は原子モデルの粒子をあらわす.

右図: イオン系の原子モデル. 青球はプラスイオン, 赤球はマイナスイオン

1. Kantorovich *et al.* PRL **93** 236102 (2004), F Federeci Canova *et al.*, Nanotechnology **22** 045702(2011)
2. 仙田ら, 応用物理学会講演会(~2015 春), Y. Senda, *et al.* Journal of Physics: Condensed Matter, in press (2016)