金基板吸着スマネン単層薄膜上の原子間力顕微鏡の分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics simulation of Atomic-Force Microscopy on monolayer sumanene adsorbed onto Au surface

電通大院基盤理工 [1]，阪大院工 [2]，°蓑和 怜央 [1]，松山 倫太郎 [1]，山崎 浩輝 [1]，
櫻井 英博 [2]，佐々木 成朗 [1]

The Univ. of Electro-Commun. [1], Osaka Univ.[2], °Reona Minowa[1], Rintaro Matsuyama[1],
Koki Yamasaki[1], Hidehiro Sakurai[2], Naruo Sasaki[1]

E-mail: reona.minowa@uec.ac.jp

スマネン $C_{21}H_{12}$ は C_{60} の部分構造を有する π 共役化合物であり 2003 年にその合成法が報告された[1]．スマネンはボウル型構造であり，ボウルが反転する特性を持つ新奇な物質である．また，スマネンは金属基板上で容易に単層薄膜を形成することも報告され[2]，機能性薄膜としての種々の応用が期待されている．一方，我々はカーボン材料表面・界面の原子間力顕微鏡（AFM）シミュレーションに関する研究を進めてきた[3]．そこで本研究では金(111)基板上に吸着したスマネン単層薄膜上で AFM 探針を走査する分子動力学(MD)シミュレーションを行った．

金(111)基板，スマネン単層薄膜，水素終端ダイヤモンド探針からなる系を水平方向の周期的境界条件を課したユニットセルで記述する．熱浴の温度は T = 0.1 K とした．モデルポテンシャルには ReaxFF ポテンシャル[4]，計算手法には速度 Verlet 法を用いた．時間刻みは 0.1 fs, 探針の走査速度は 50 m/s とした．まず共役勾配法によって構造最適化した系を熱平衡状態にした後，探針による押し込みをシミュレーションした．次に各押し込み状態において高さ一定で水平方向に走査した．

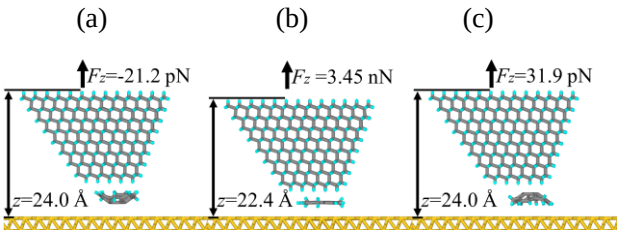

Fig.1: AFM tip for (a) approaching (z=24.0 Å), (b) closest approaching (z=22.4 Å), and (c) retracting (z=24.0 Å) processes.

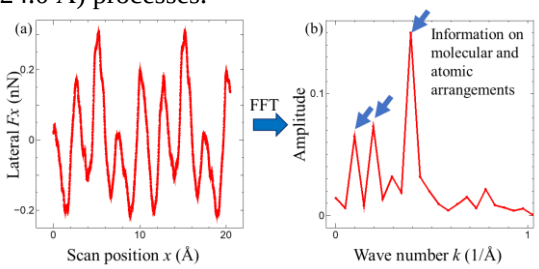

Fig.2: (a) Lateral force curve for the tip height of z=24.0 Å. (b) FFT spectrum of (a), peaks of which show typical periodicity of the system.

計算結果について説明する．まず，押し込み走査（Fig. 1）では探針を基板に近づけるにつれてスマネンがおわん型から平面型につぶされる傾向を見せ，探針を最も押し込んだときに平面型となり（Fig. 1(b)），探針を基板から離すと反転した．次に，探針が基板と釣り合った位置で水平走査を行うと，特徴的な周期性を有する水平力曲線が得られた．この水平力曲線の FFT 解析を行ったところ，スマネンの分子配列由来の周期性と，探針先端とスマネン分子の接触部の原子配列由来の周期性の情報が含まれていることが判明した．

参考文献

[1] H. Sakurai, T. Daiko, T. Hirao, Science **301**, 1878 (2003).
[2] S. Fujii, M. Ziatdinov, S. Higashibayashi, H. Sakurai, M. Kiguchi, J. Am. Chem. Soc. **138**, 12142 (2016).
[3] N. Sasaki et al., Tribol. Online 2012, 7, 96
[4] T. T. Jarvi; A. C. T. van Duin; K. Nordlund; W. A. Goddard III, J. Phys. Chem. A, 2011, 115, 10315.

© 2020年 応用物理学会