

原子間力顕微鏡モデルのハーモニックバランス法による近似理論解の導出

吉田 峻人¹
Ryoto Yoshida

清水 邦康²
Kuniyasu Shimizu

千葉工業大学 大学院 工学研究科 情報通信システム工学専攻¹
Dept. of Information and Communication Systems Engineering, Chiba Institute of Technology
千葉工業大学 工学部 情報通信システム工学科²

Dept. of Information and Communication Systems Engineering, Faculty of Engineering, Chiba Institute of Technology

1 まえがき

走査型プローブ顕微鏡 (SPM) は片持ち梁の先端を試料に接近させ、その間に働く相互作用力による影響を観察し、マイクロ/ナノオーダの非常に小さな試料の情報を取得するために使用されている。本研究では、SPM から派生している様々な顕微鏡の中で基礎となる原子間力顕微鏡 (AFM) を研究対象とする。AFM の主要な走査モードとして Dynamic-mode AFM (DAFM) がある。これは片持ち梁を共振周波数で振動させ試料に接近することで原子間力の影響を振幅の変位として検出し、試料の形状を観察する。探針試料間距離が変化することによって原子間力は、非線形な特性が現れる。そして、非線形性が強くなると形状測定に影響を及ぼし、アーチファクトなどのノイズが現れる [1]。

本研究では、DAFM において探針先端の一点に注目して 1 自由度ばねモデルと原子間力のモデルであるモースポテンシャルを用いて運動方程式にハーモニックバランス法の一様を適用し近似理論解を導出することを試みる。導出した理論解から周波数応答特性を検討する。特に、探針試料間距離がカンチレバー振動に及ぼす影響について調査する。

2 研究結果

カンチレバーの探針先端の一点に着目することで 1 自由度ばねモデルを適用し運動方程式を導く。導いた運動方程式に対し変数 z とそのほかパラメータを用いることで次の正規化された運動方程式が得られる。

$$\frac{d^2 z}{dt^2} + d \frac{dz}{dt} + z - \varepsilon = a_e \cos \omega \tau - \beta e^{-(\alpha z + \gamma)} (1 - e^{-(\alpha z + \gamma)}) \quad (1)$$

ここで、パラメータ d および ε は、それぞれ減衰率および探針試料間距離に相当する。パラメータ a_e および ω は、プローブ探針に印加する振幅および角周波数を表す。また、 α, β, γ は原子間力の特性を決定するパラメータである。

次に原子間力のモデルとしてモースポテンシャルを用い、先行研究 [2] で用いられた原子間力を模擬した。式 (1) の近似解を $z(\tau) = c(\tau) + a(\tau) \cos \omega \tau + b(\tau) \sin \omega \tau$ と仮定し、理論解の導出を行う。まず原子間力の指数関数項を 3 次近似する。そして近似解をハーモニックバランス法により時間経過が速い状態、遅い状態が存在すると仮

定して考える。この時、遅い場合の振動の変位は非常に小さいと考えられ、状態変数 z の二階微分項および一階微分項に減衰率 d を乗じた値を無視することができる。これらの近似を用いることで理論解を導出することができる (紙面の都合上、導出された理論解は省略する)。

以下の結果では、先行研究 [2] で用いられた原子間力を模擬するために $\alpha = 3.29315, \beta = 70.1232, \gamma = -2.6$ と設定する。また、その他のパラメータは $d = 0.01, a_e = 0.01$ と固定し、探針試料間距離を表す ε および強制外力項の角周波数 ω を制御パラメータとして周波数応答特性を計算する。

図 1 は導出した近似解の振幅を計算したものである、実線は安定な解、点線は不安定な解を表している。周波数の値によって解が複数現れる。また、図 2 は位相 ϕ の周波数特性を表す。原子間力の影響により線形系 (赤線) と比較して左方向にシフトした特性が得られた。

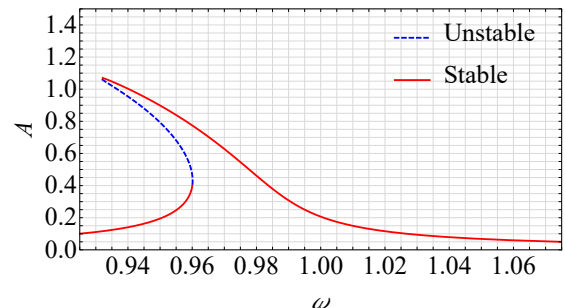


図 1 振幅特性 ($\varepsilon = 3.4$)

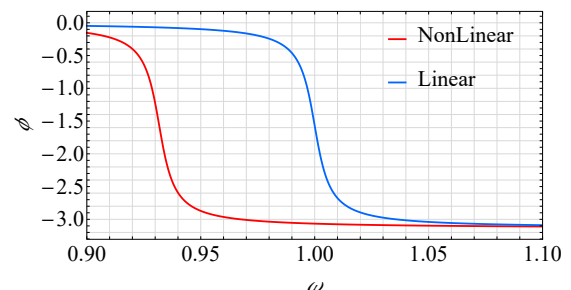


図 2 位相特性 ($\varepsilon = 3.4$)

参考文献

- [1] R. García and R. Pérez, *Surface Science Reports*, vol.47, pp.197–301, 2002.
- [2] H. Nagao *et al.*, *NOLTA, IEICE*, vol.8, no.2, pp.118-128, 2017.