

接触モード AFM シミュレータの開発 ～探針の凝着機構の解析への応用～

佐々木 成朗*¹, 大島 和敏*², 高橋 忠孝*³, 板村 賢明*⁴, 三浦 浩治*⁵

Development of Contact-Mode AFM Simulator - Application to Analysis of Adhesion of AFM Tip-

Naruo SASAKI*¹, Kazutoshi OSHIMA*², Tadataka TAKAHASHI*³,
Noriaki ITAMURA*⁴, Kouji MIURA*⁵

ABSTRACT : We have developed a simulator of contact-mode atomic-force microscopy based on numerical integration of equation of motion of cantilever. As an example of application of this simulator, effect of protrusion of the tip apex on the adhesive dynamics of the cantilever is studied. It is clarified that, as the size of the tip-apex protrusion is increased, the force acting on the protrusion increases, which gives significant change of the shape of the force-distance curve.

Keywords : Atomic Force Microscopy, Adhesion, Force Curve, Tip, Simulation

(Received October 3, 2006)

1. はじめに

原子間力顕微鏡(AFM: Atomic Force Microscopy)¹⁾は、試料表面として、金属・半導体から生体・高分子試料のような絶縁体まで使用出来る汎用性の高い走査プローブ顕微鏡の一つである。AFMには多数の駆動モードがあるが、その一つである接触モード AFM は、探針を先端に付着させたカンチレバーと呼ばれる板バネを試料表面に押し付けて、静的にレバーのたわみを測定して試料表面のナノレベルの凹凸を計測するモードである。一方動的モード AFM²⁾³⁾は、レバーを機械的に振動させて試料表面のナノレベルの凹凸だけでなく動的情報を計測するモードである。いずれのモードも試料表面のナノ計測法としてほぼ確立している。

本研究室では、動的モード AFM (dynamic-AFM)⁴⁾、静的接触モード AFM のカンチレバーの汎用動力学シミュ

レータの開発^{5) 6)}を進めている。特に本稿では、2005年度特別研究費「原子間力顕微鏡における摩擦・凝着機構の数値的研究」のテーマの一つとして進めた接触モード AFM シミュレータの開発⁶⁾について報告する。

AFM の原子分解能のメカニズムには探針先端の構造、例えば微小突起の存在が非常に大きく関わっている事が知られている。そのため探針先端の突起を考慮する事は AFM 測定の結果を解釈する上で極めて重要である。そこで本シミュレータを、微小突起が付着した AFM 探針の試料表面への凝着現象の解析に適用した結果を紹介する。

2. モデルと計算法

シミュレーションでは、AFM のカンチレバーの変位 u に対して、下記の運動方程式(1), (2)を解く。

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R_1, u + u_0) - \frac{1}{k}F(R_2, u + u_0 - 2R_2) = 0 \quad \dots\dots(1)$$

*1 : 成蹊大学理工学部 物質生命理工学科 教授
naru@st.seikei.ac.jp

*2 : 成蹊大学大学院工学研究科 物理情報工学専攻 修士学生

*3 : (株) 横河電機

*4 : 成蹊大学理工学部 物質生命理工学科 助手

*5 : 愛知教育大学 物理学教室 教授

$$F(R, z) = \frac{2}{3} \pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^2 \right] \dots\dots\dots(2)$$

この時、AFM を図 1 のようにモデル化し、先端に球状探針が付着したカンチレバーを一定速度で試料表面に接近、離脱させる場合を考える。

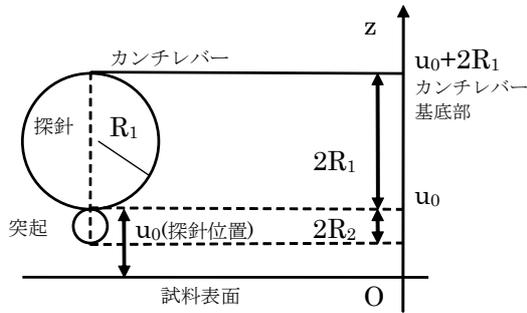


図 1 接触 AFM のモデル

ここで、 u : カンチレバーが伸び縮みしていない時の探針の初期位置 u_0 からの探針の変位, u_0 : 探針先端の初期位置, z : 時刻 τ での探針位置 $z(\tau)$, $F(R, z)$: 曲率半径 R の球形探針先端及び突起に働く相互作用力, Q : カンチレバーの Q 値, k : カンチレバーのバネ定数, ρ : 探針と表面の原子の数密度, σ : 原子半径に関わるパラメータ, ϵ : 原子の結合エネルギーに関わるパラメータ, R_1 : 探針の曲率半径, R_2 : 突起の曲率半径である。

本シミュレータでは、探針及び試料表面を連続体の剛体であると仮定して $F(R, z)$ を求めた。すなわち 6-12 タイプの LJ ポテンシャルを、球状探針と半無限空間との間で積分して求めた全エネルギーの一次微分が(2)式で表される。シミュレーションではパラメータとして、ファンデルワールス相互作用の典型的なオーダーである、 $\epsilon=0.01(\text{eV})$, $\rho=0.25^{-3}(\text{nm}^{-3})$, $\sigma=0.25(\text{nm})$ を用いる。また Q 値=10 の場合を考え、液中のような粘性の高い環境下でのレバー稼動を想定する。(1)式を 4 次の Runge-Kutta 法で解いて、 u_0 を一定の速度で上昇、下降させるシミュレーションを行った。

シミュレーションの実行から計算結果の可視化まで一連の作業を、接触 AFM シミュレータ上で行う。図 2 は Visual Basic を用いて開発した接触 AFM シミュレータの実行画面である。本研究では、図 2 上段中央の画面(縦軸：先端突起にかかる相互作用力、横軸：レバーの根元の位置)と、図 2 下段右の画面(縦軸：先端突起—試料表面間距離、横軸：レバーの根元の位置)に着目して研究を進めた。

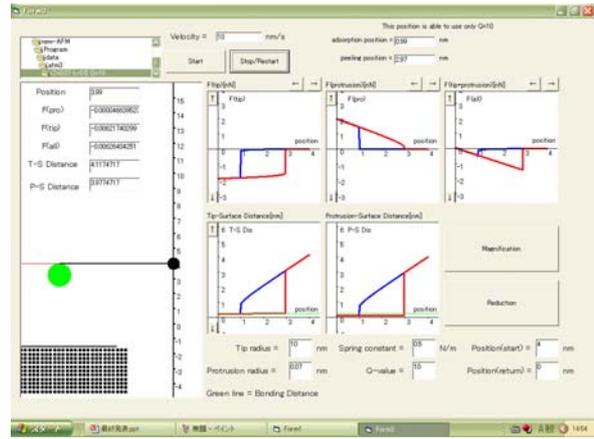
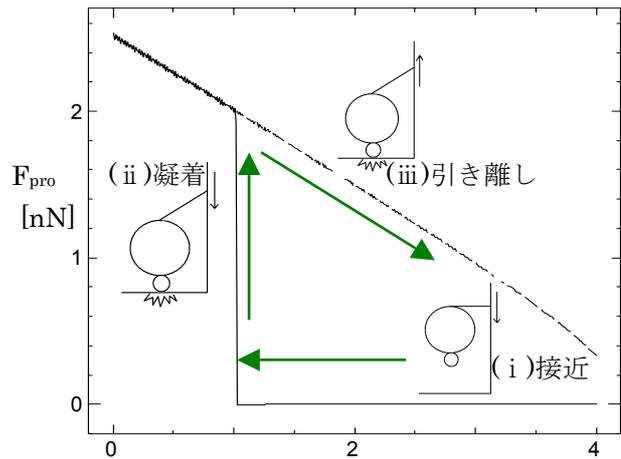


図 2 接触 AFM シミュレータ実行画面

3. シミュレータの適用例～突起効果

3. 1 突起にかかる力



突起—試料表面間距離 [nm]

図 3 突起にかかる力の突起高さ依存性

探針にかかる力 F_{tip} , 先端突起にかかる力 F_{pro} , 探針と突起にかかる力の和 F_{total} に着目して、本シミュレータを AFM 探針の凝着過程に適用する。ここで(1), (2)式の表記を用いると

$$F_{tip} = F(R_1, u + u_0) \dots\dots\dots(3)$$

$$F_{pro} = F(R_2, u + u_0 - 2R_2) \dots\dots\dots(4)$$

$$F_{total} = F_{tip} + F_{pro} \dots\dots\dots(5)$$

と表される。以後、突起—試料表面間距離 $u_0 - 2R_2$ の関数として力をプロットする。

図 3 は、探針半径 $R_1=10\text{nm}$ の時、半径 $R_2=0.05\text{nm}$ の突

起にかかる相互作用力を示した力曲線である。レバーの (i) 表面への接近, (ii) 表面への凝着, (iii) 表面からの引き離し, の各過程に対応する特徴的な形状を示している。探針が表面へ接近するほど, 突起はより大きな引力を受けるようになるが, 凝着の際, 突起の受ける相互作用力は引力から斥力に不連続的に変化する。これは探針先端で衝突が起きている事を示している。更に探針を試料に押し付けると突起はより大きな斥力を受けるようになるが, 再び引き離していくと斥力が小さくなっていく様子が示されている。

3. 2 力の突起半径依存性

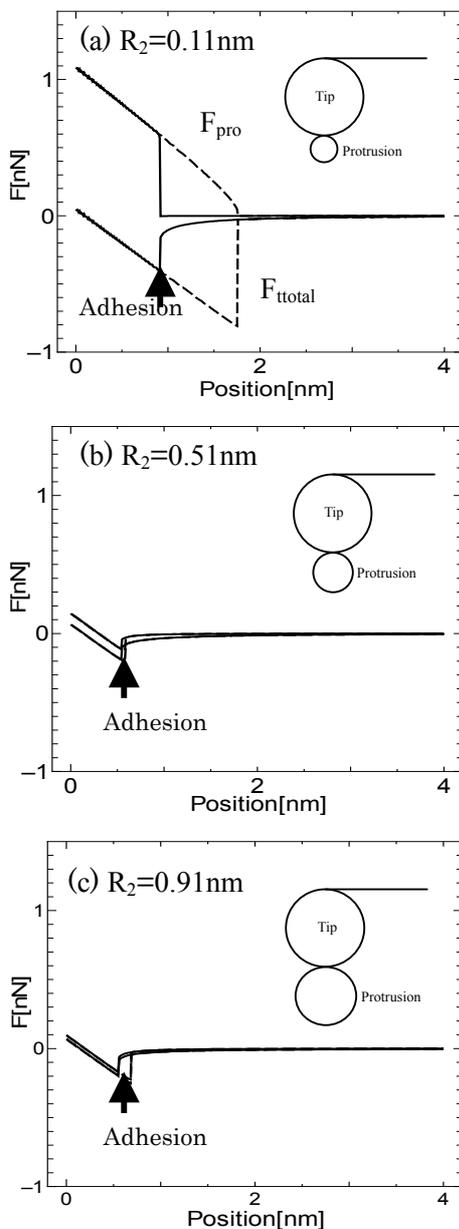


図4 各突起半径に対する探針全体が受ける力 F_{total} と突起が受ける力 F_{pro} の力曲線

図4の実線, 破線はそれぞれカンチレバーの試料への接近過程, 及び引き離し過程に対応している。図4より, 突起半径 R_2 が大きくなるに従い, 突起にかかる力 F_{pro} が探針全体にかかる力 F_{total} に近づく事が分かる。これは以下のように理解出来る。突起半径 R_2 が増加すると根元の探針が試料表面に近づきにくくなるため, $F_{tip} \rightarrow 0$ となる。全相互作用力 F_{total} は $F_{total} = F_{tip} + F_{pro}$ と表されるので, 結果として $F_{total} \rightarrow F_{pro}$ となると考えられる。

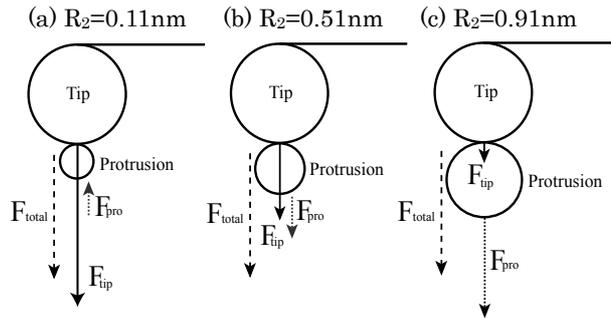


図5 凝着直後に探針及び突起にかかる力 (大きさの割合のみ定性的に表示)

この一連の変化を凝着直後の探針, 突起にかかる力として表したのが図5である。突起半径が増加するに伴い, 凝着直後の F_{pro} が斥力から引力へ減少している。シミュレーションにより, 凝着直後の F_{pro} が 0 になるのは $R_2=0.23nm$ の時(すなわち(a)と(b)の間)である事が分かった。突起半径が $R_2=1.0nm$ 前後まで増加すると, 凝着直後の F_{pro} は一定の微小な引力値に近づいていく事も分かった。

4. おわりに

本研究では接触 AFM シミュレータを開発し, これが凝着現象を伴う力曲線の解析に適用出来る事を示した。特に探針先端の突起効果に着目して, 凝着直後に探針及び突起にかかる力の解析を行った。今回は探針, 試料表面共, 連続体の剛体と見なしたが, 今後は弾性体の効果を取り入れ, Hertz 理論や JKR 理論に基づく, より現実に近い凝着現象の評価・解析を目標とする。

参考文献

- 1) G. Binnig, C. F. Quate, and Ch. Gerber, Phys. Rev. Lett., **56**, 930 (1986).
- 2) T. R. Albrecht, P. Grutter, D. Horne, and D. Rugar, J. Appl. Phys. **69**, 668 (1991).

- 3) F. J. Giessibl, *Science* **267**, 67 (1995).
- 4) 高橋忠孝, 佐々木成朗: 「動的 AFM における探針先端突起のサイズ効果」第 24 回表面科学講演大会 2004 年 11 月 8 日～10 日, 講演要旨集 p.68 (2004).
- 5) 佐々木成朗, 高橋忠孝: 「動的モード原子間力顕微鏡の振動シミュレーション方法, プログラム, 記録媒体, 振動シミュレータ」, 国際特許出願 PCT/JP2005/019985 号, 2005.10.
- 6) 佐々木成朗, 高橋忠孝: 「接触モード原子間力顕微鏡の凝着シミュレータ, 凝着シミュレーションプログラム, 凝着シミュレーションプログラムを記憶した記録媒体及び凝着シミュレーション方法」, 特願 2006-94243 号, 2006.3.