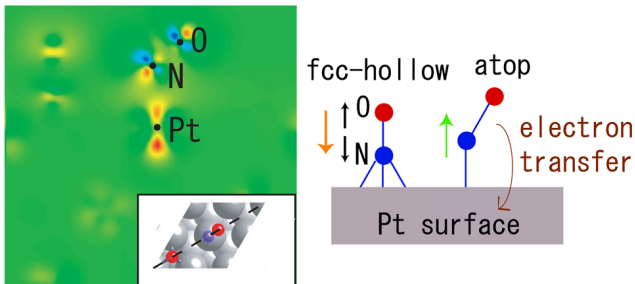


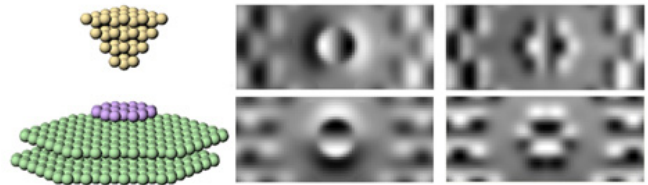
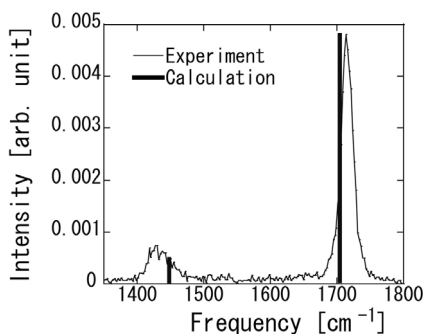
振動分光の不思議：NO分子/Pt(111)の場合

Origin of strange vibrational spectra of NO on Pt(111) surface (Regular Paper)

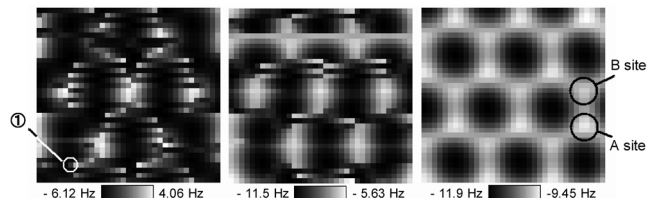
H. Aizawa, Y. Morikawa, S. Tsuneyuki, K. Fukutani and T. Ohno, Vol. 5, pp. 122-125 (2 October, 2007)



NO 分子の Pt(111)表面での吸着現象は、重要な触媒反応系の一つとして長い間盛んに研究されてきたが、分子の吸着サイトや分子配向について間違った理解がされてきた。例えば、電子エネルギー損失分光や赤外反射吸収分光では、atop サイトに吸着した NO 分子の N-O 伸縮振動のピークしか観察されなかったため、吸着は atop サイトのみであると信じられてきた。しかし、最近の STM や LEED 実験、第一原理理論計算から atop 以外に fcc-follow サイトにも NO 分子が吸着されていることが強く示唆された。しかし、それは上述の振動分光の結果と矛盾する。そこで、本研究では振動分光のスペクトルのピーク強度を第一原理計算から求めた。その結果、fcc-follow サイトに吸着した NO 分子の振動子強度が atop サイトに吸着した NO 分子からの電荷移動によって強く遮蔽されて 1/10 程度に弱められていることが明らかになった。このために、fcc-follow サイトに吸着した NO 分子の振動ピークがスペクトルに強く出ないことがわかった。



原子間力顕微鏡(AFM)像の理論シミュレーションはさまざまな手法で様々な試料に対して行われているが、AFM 探針の走査によって動く分子や小片が存在する場合のシミュレーションは、摩擦や潤滑の研究として興味深い。本研究ではダイヤモンド探針を使い、グラファイト表面の AFM 像を、動くことのできるグラファイト薄片が探針の下に存在する状況でシミュレーションした。このような状況は実験で実際に起こる場合があると考えられている。薄片の大きさや探針との距離、あるいは薄片が試料表面上の欠陥にトラップされている場合など、さまざまな状況のもとで計算を行った。その結果、薄片が探針走査によって滑ったりスウィングしたり回転したり、さまざまな運動をし、その結果、像が特徴的に変化することがわかった。



薄膜形態のフラクタル性

Fractality of nanostructured semiconductor films

(Regular Paper) Z. Zh. Zhanabayev and T. Yu. Grevtseva Vol. 5, pp. 132-135 (9 November, 2007)



さまざまな顕微鏡によってさまざまな薄膜の特徴的な表面形態が明らかにされているが、それらはフラクタル性を持っている。本研究では stochastic・fractal モデルに基づく理論計算をして、実験によって観察されているいくつかの薄膜のモルフォロジーを再現することに成功した。

グラファイト薄片を AFM 探針が引きずっていたら

Theoretical Simulations of Atomic Force Microscopy of Graphite Flake on Graphite Surface

(Regular Paper) M. Harada, M. Tsukada, and N. Sasaki, Vol. 5, pp. 126-131 (31 October, 2007)