初めてSPMシミュレータを使われる方に向けての

ソルバ毎SPMシミュレータ計算事例

「SPMシミュレータ用途別機能紹介資料[Part2：液中環境下での高分子観察]」編

株式会社Advanced Algorithm & Systems

2017.12.27

１・目次

[Part2: 液中環境下での高分子観察]が提示する計算事例（１～１３）は、用途別市場において
https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf
https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_simulator_application_examples.html
研究テーマでは、バイオ・ソフトマテリアル

用途別市場では、食品　製薬　化粧品　バイオ　合成ゴム　医療用品

に固有の科学的知見、或は支配的条件に従う、代表的シミュレーション（アルゴリズム）に原理的に準拠しており、この用途別市場の産官学SPMユーザ様には、共通に使用される特性をもち、ユーザ所属先の事業形態・から部分を担当するか否か、の差異があるのみである。
還元すれば、これら計算事例は、用途別市場の産官学SPMユーザに取り、原理的に共有され、ユーザ各位が共通に使用出来ることになる。

共通性に着目し、初めてSPMシミュレータを使われる方に向けての、ソルバ毎SPMシミュレータ計算事例として用意しました。計算結果の解説も記載しています。SPMシミュレータを使う時の、基本的なシミュレーション実行例を示しています。実行例のデータファイルをダウンロードして、シミュレーションを行うための工程を知っていただき、その後、必要な箇所だけパラメータを変更すれば、ご要望に合ったシミュレーション計算を実行することができます。**本編は　「液中環境下での高分子観察」向けです。**
以下に参考事例モデルの各ソルバによる計算例のリストを示します。

４．LiqAFM(液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ)　Point oscillation（粘弾性接触解析機能）

- 溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較（水）　（計算事例９）
- 溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較（エタノール）　（計算事例１０）
- 溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較（n-ヘキサデカン）　（計算事例１１）

５・CG-RISM（原子スケール液中 AFM 像シミュレータ）　ForceCurve（フォースカーブ測定モード）

- CG-RISM によるフォースカーブ・シミュレーション（グラフェンシート）　（計算事例１２）
- CG-RISM によるフォースカーブ・シミュレーション（マイカ）　（計算事例１３）

６・本編でのSPMシミュレータにおけるソルバー一覧

2．LiqAFM(液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ） Point oscillation（粘弾性接触解析機能）

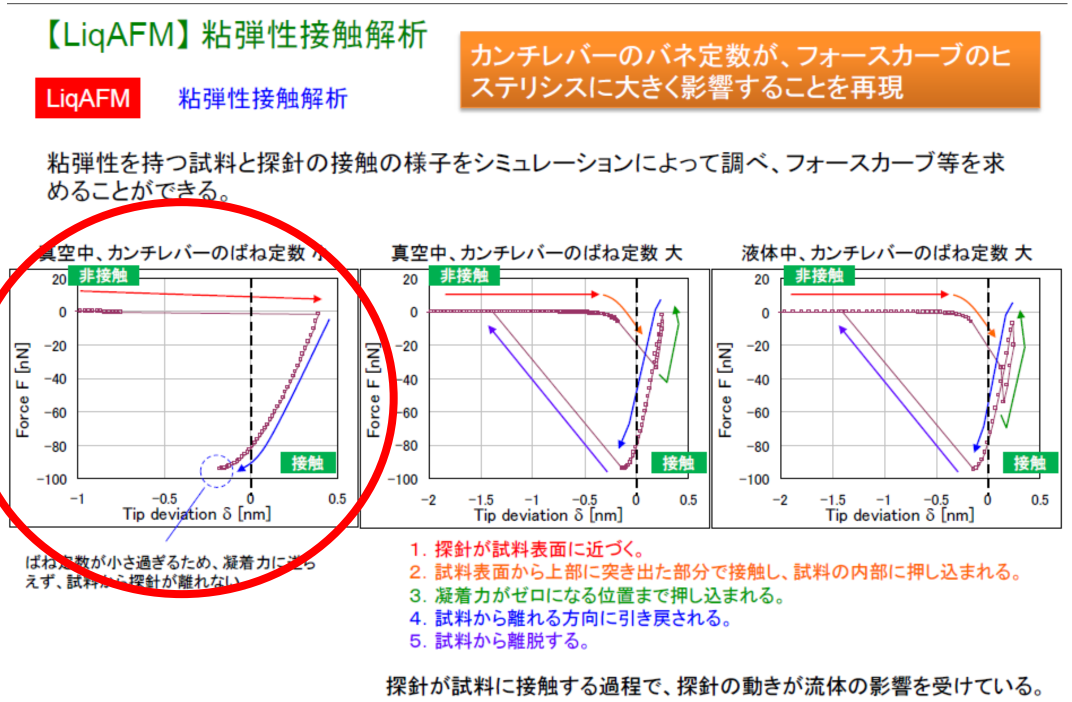
●LiqAFM　真空中での粘弾性解析を考慮したシミュレーション(カンチレバーのばね定数が小さい場合)　計算事例①

計算モード識別番号：[LiqAFM_Viscoelastic_001]（a）

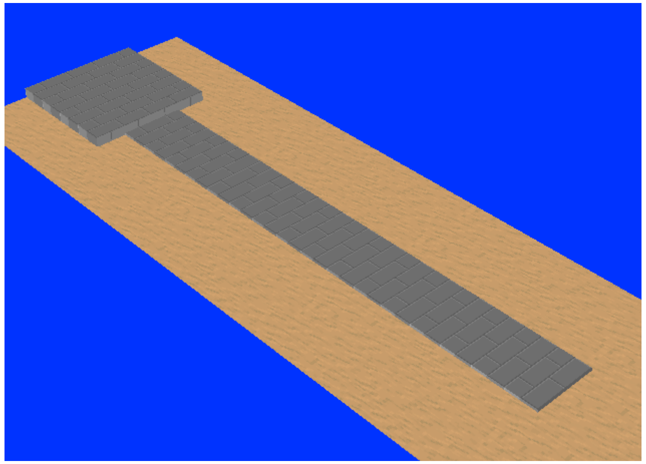
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Viscoelastic/LiqAFM_Viscoelastic.php

分類：LiqAFM　（粘弾性接触解析機能）、μmオーダー、液中環境、高分子

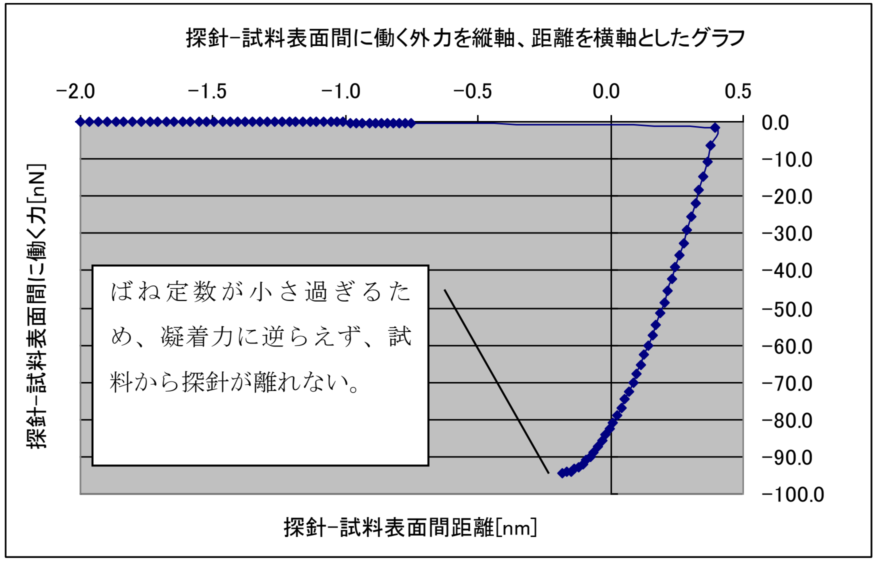
事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ

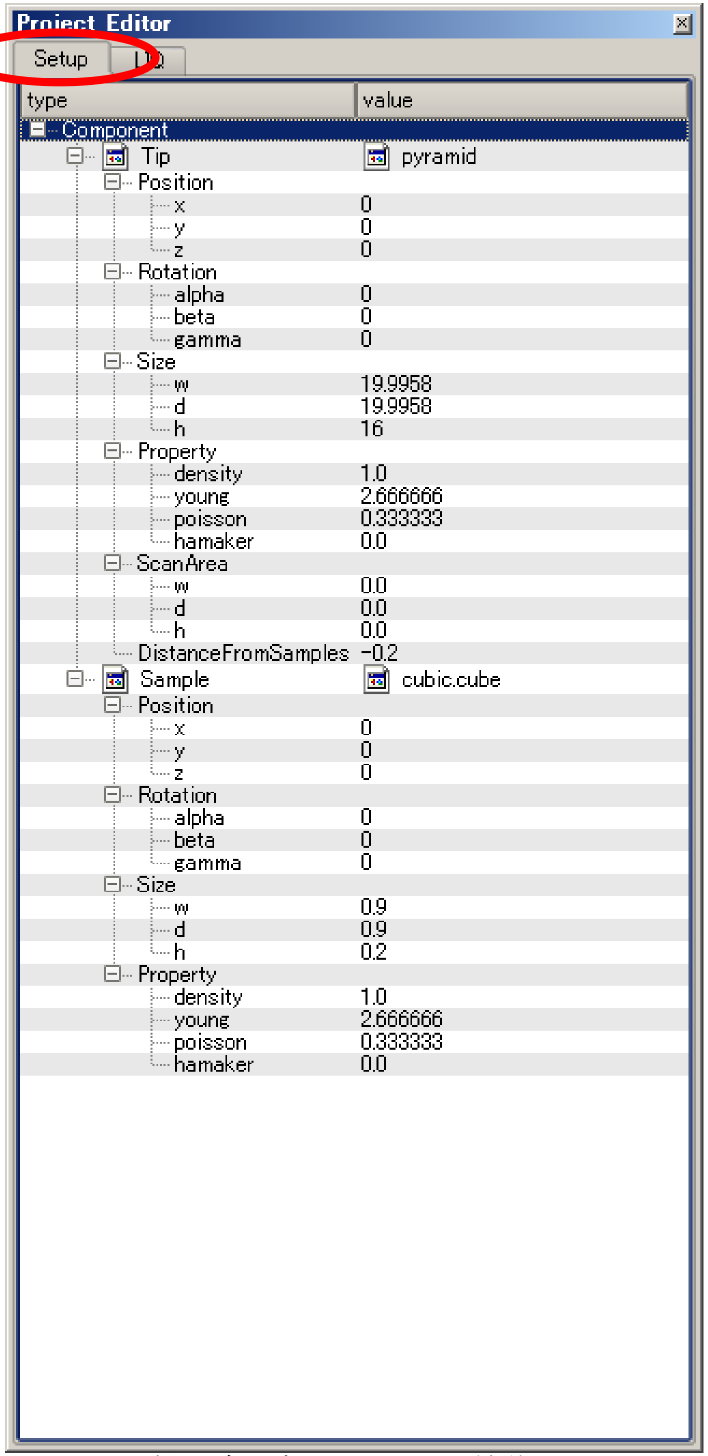


カンチレバーの形状



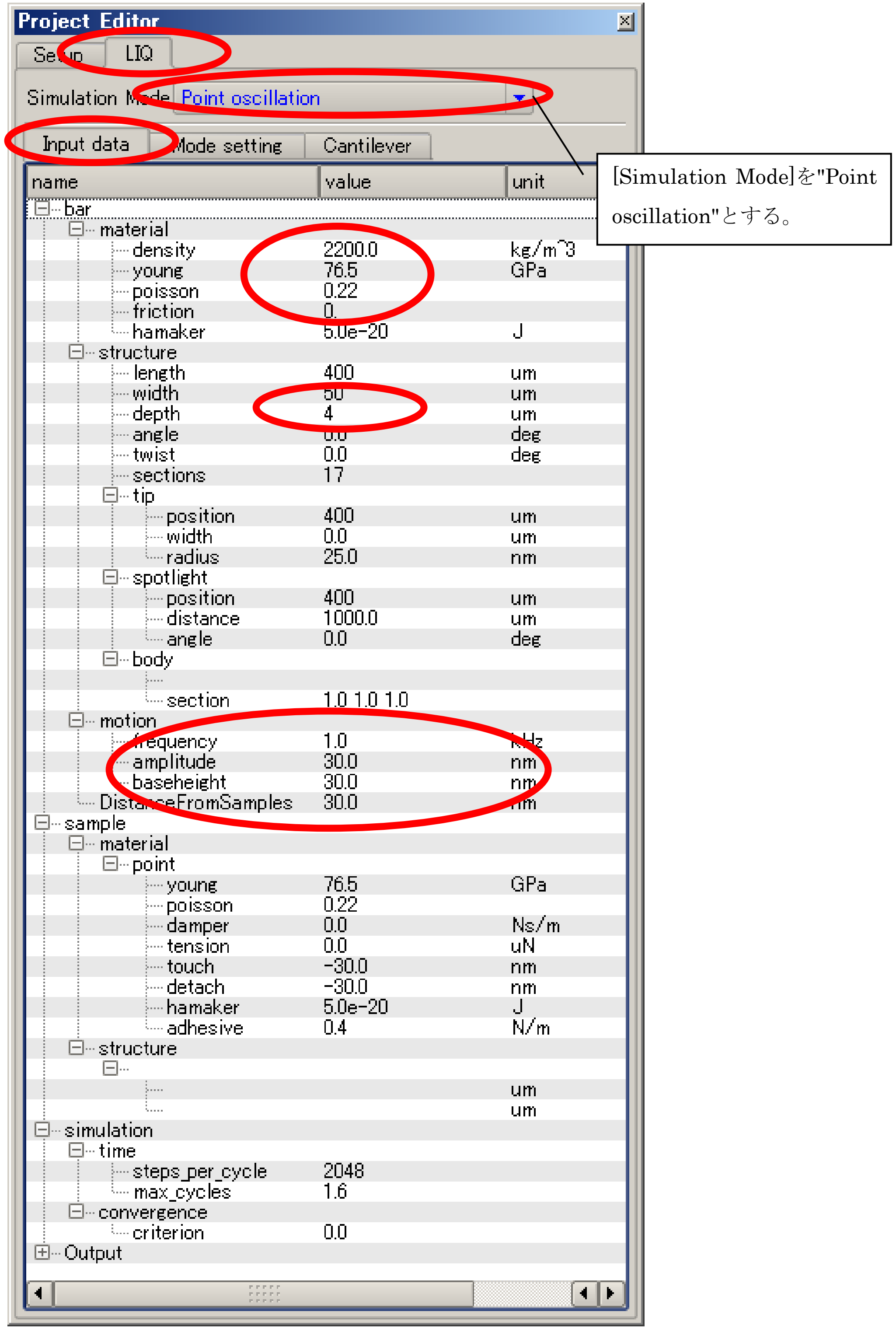
探針−試料表面間に働く外力を縦軸、距離を横軸としたグラフ

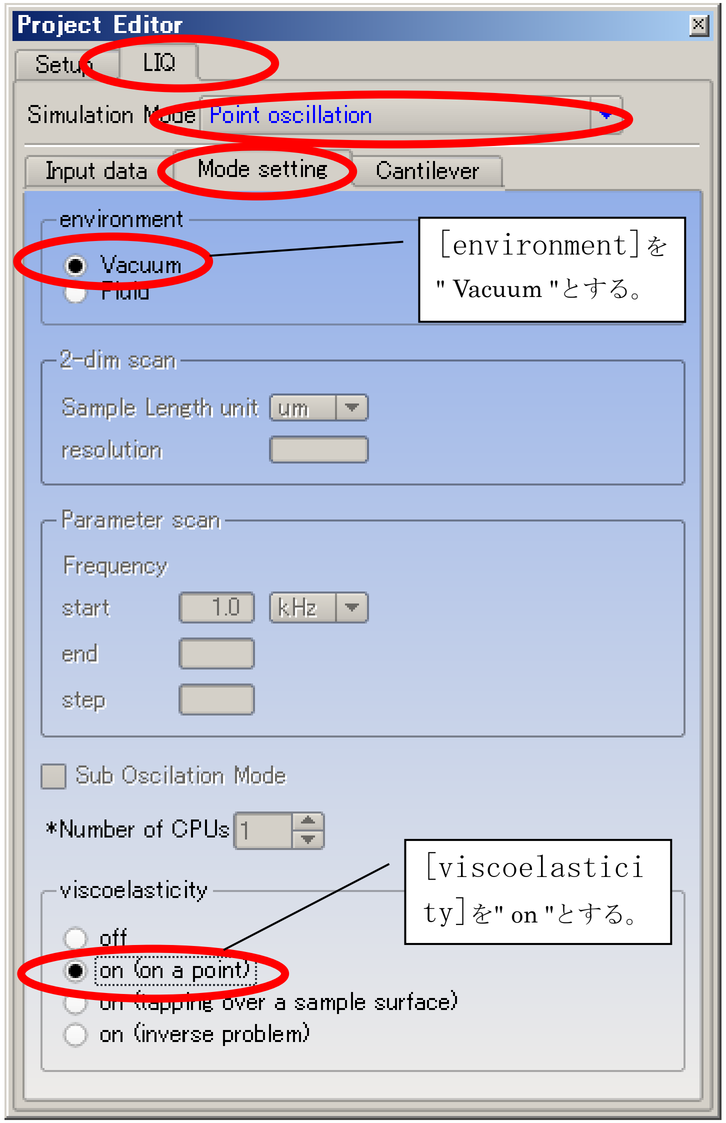
本事例では、粘弾性を持つ試料と探針の接触の様子をシミュレートします。
カンチレバーのばね定数がフォースカーブ等にどのような影響を与えるかを知る事ができます。
本事例は、真空中において、カンチレバーのばね定数が小さい場合です。
試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定を「on」として下さい。
液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ（LiqGUI）の起動時、この設定は「off」となっています。カンチレバーの厚さは4μmです。
カンチレバーの加振周波数は1KHz です。



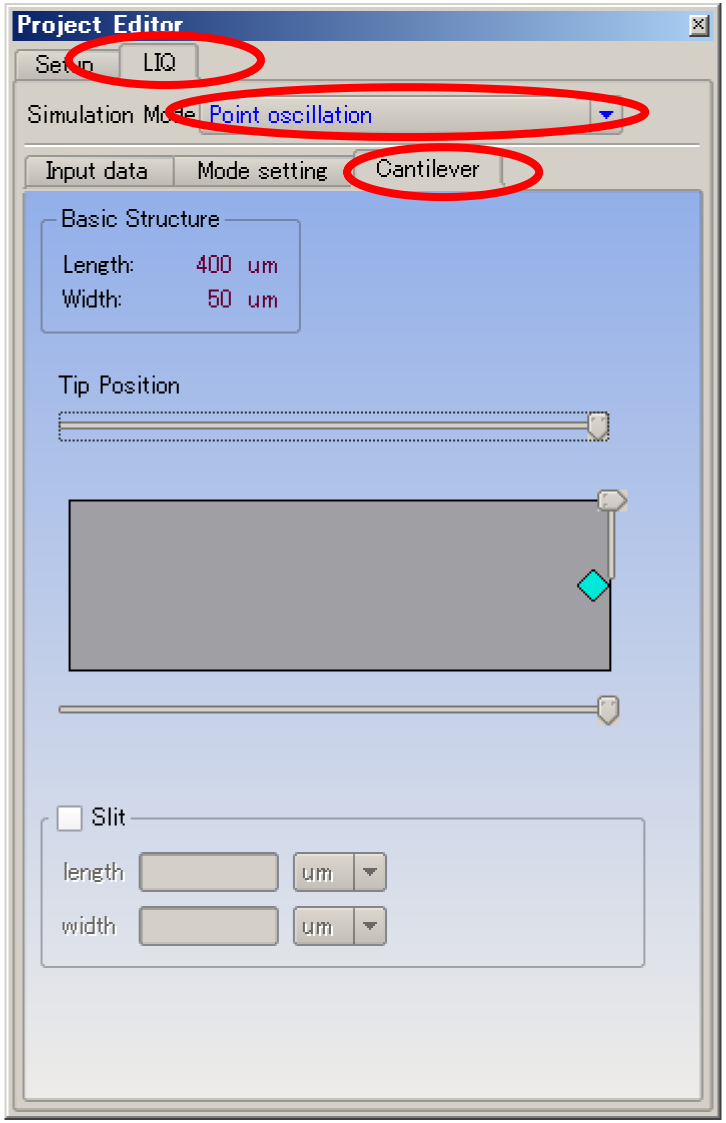
事例紹介モデルのセットアップ条件

設定条件





設定条件



設定条件

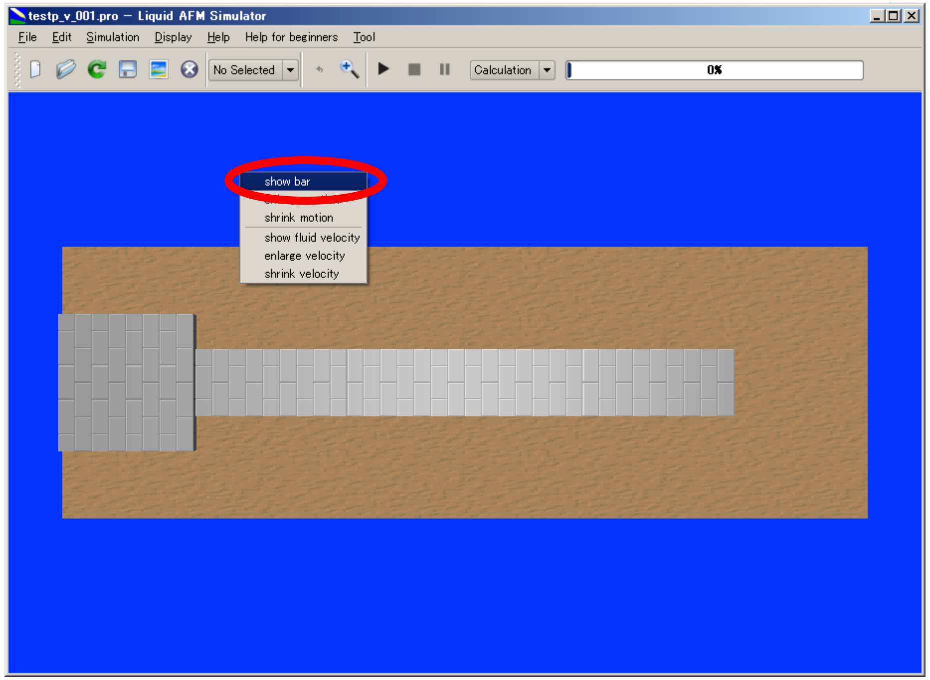
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

カンチレバーのばね定数が小さい場合、カンチレバーの物性値として、密度を 2200.0[kg/m^3]、ヤング率を 76.5[GPa]、ポアソン比を 0.22(無次元量)、ハマカー定数を 5.0E-20[J]に設定しています。真空中においては、[LIQ]タブ以下の、[Mode setting]タブを選択し、次に選んだタブの先頭にある、[environment]の項目において、"Vacuum"を選択します。[LIQ]タブの先頭にある[Simulation Mode]という名前の付いたコンボボックスにおいて、"Point oscillation "を選択します。

液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ 「LiqGUI.exe」 起動後の操作について説明します。
[LiqAFM_Viscoelastic_001]（a）のプロジェクトファイル「testp_v_001.pro」を読み込みます。紹介事例解析モデルが表示されます（右図）。
上記で、ご紹介した条件設定と内容確認を行って頂いた後、シミュレーションを実行してください。
マウス右クリックによるサブメニュー選択でシミュレーション経過の表示状態を変更することが可能です。

show bar・・・・・・・・ カンチレバーの表示／非表示。
enlarge motion・・・・ カンチレバーの動きが大きくなります。
shrink motion・・・・・カンチレバーの動きが小さくなります。
show fluid velocity・・流体の速度の表示／非表示。
enlarge velocity・・・ 流体の速度が大きくなります。
shrink velocity・・・・流体の速度が小さくなります。

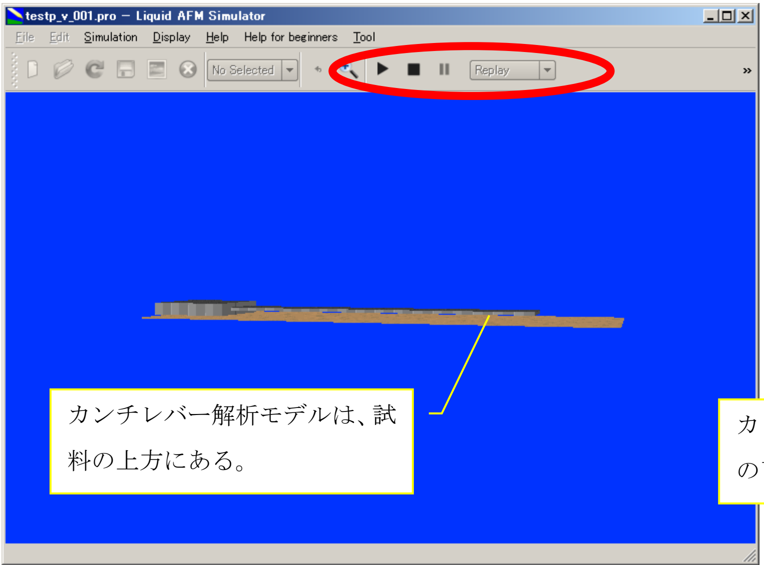
マウスホイールで、拡大（後方回転）縮小（前方回転）表示が可能です。
画面任意ポイントをマウスピックする事により３D表示が可能です。



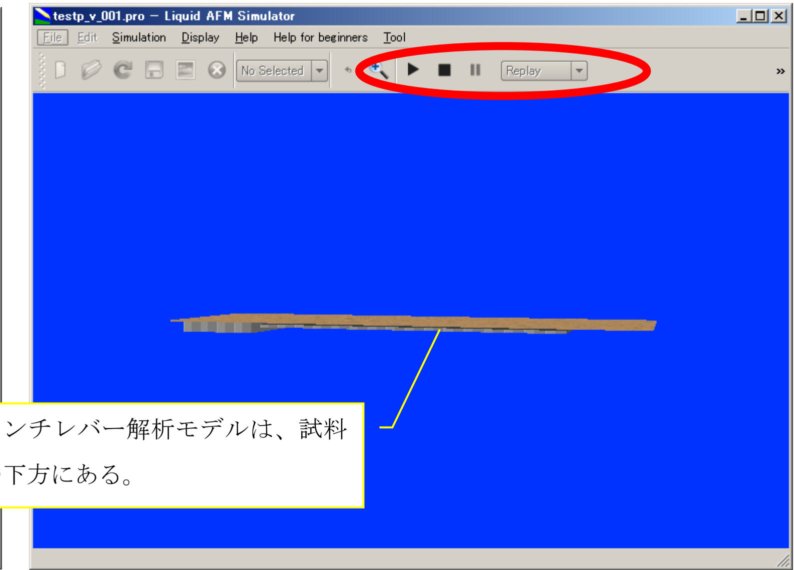
解析モデル表示

表示解析モデルは、シミュレーション経過に合わせて移動、変形します。
また、メニューより「Replay」を選択し、三角形のスタートボタンをクリックすると、観察し易い形でシミュレーション経過を再現できます。

プロジェクト・フォルダ"output"内のファイル"delta_tipforce.csv"に、探針の変位と探針にかかる外力の時間変化が記録されています。



解析モデルによる３D経過表示（T1）



解析モデルによる３D経過表示（T2 ＞ T1）

・ファイル"delta_tipforce.csv"内データは、以下の内容となっています。

```
# scan parameters
# frequency  = 1.000000e+003 [Hz]  ⇒  カンチレバーの振動周波数
# amplitude  = 3.000000e-008 [m]   ⇒  カンチレバーの振動振幅
# baseheight = 3.000000e-008 [m]   ⇒  カンチレバーの、試料からの距離
# interval   = 1
# where      = head
#
# 1:delta     2:tipforce    ⇒  1：探針-試料表面間距離 [m]      2：探針-試料表面間に働く力 [N]
-3.01E-08     -2.31E-13                                          ↓
-3.02E-08     -2.30E-13                                          ↓
-3.03E-08     -2.29E-13                                          ↓
-3.04E-08     -2.27E-13                                          ↓
・・・・      ・・・・
```

以上となります。

・注意点

baseheight：試料表面から静止時のカンチレバー中心までの高さ。

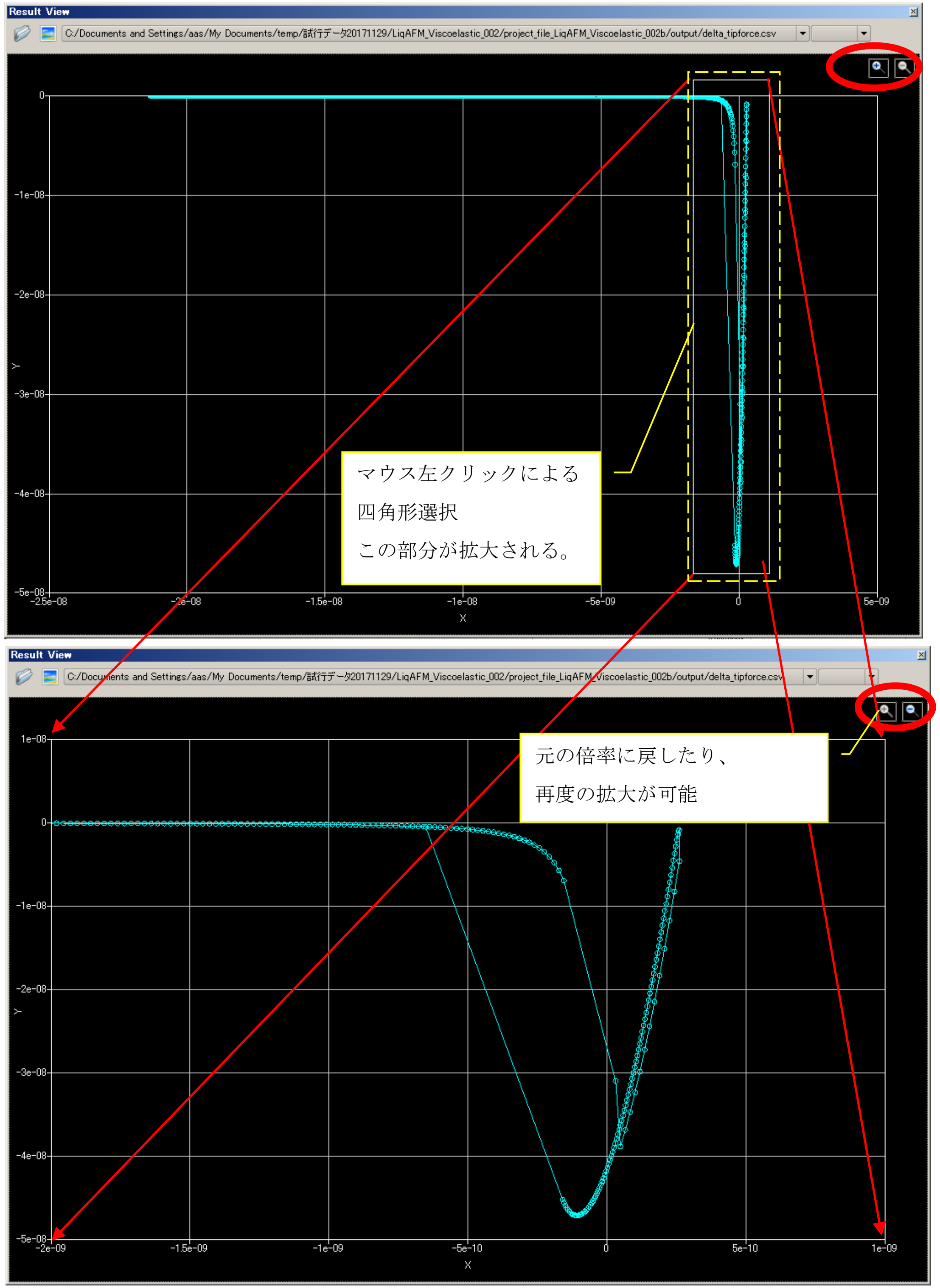
[探針を試料に接触させたいので、この値はカンチレバーの振動の振幅（amplitude）と、ほぼ等しい値が望ましいといえます]

・グラフの表示機能について

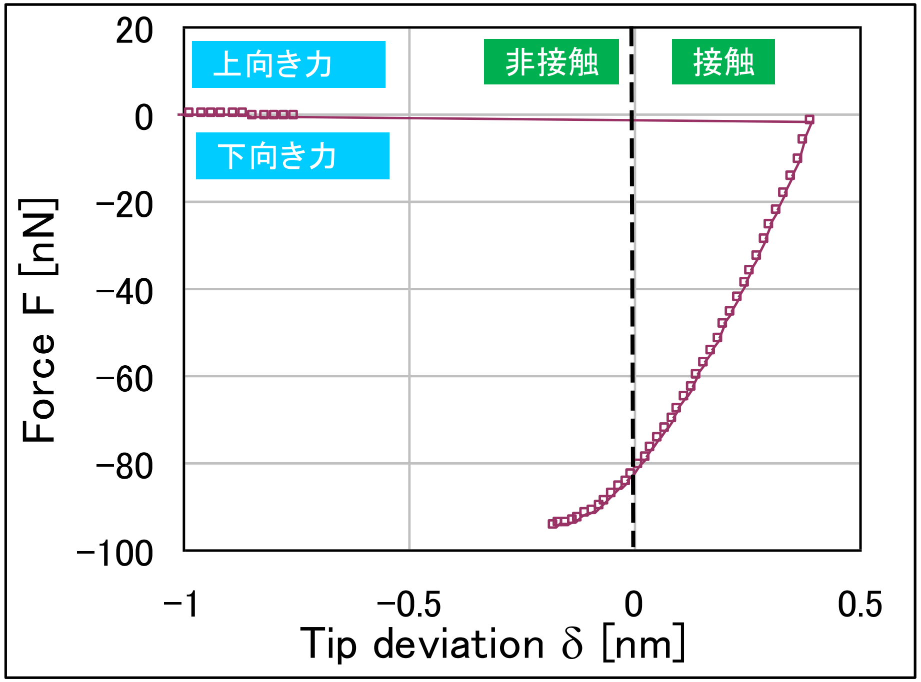
メニュー「Display」→「ResultView」のチェックを「ON」とし、データ「delta_tipforce.csv」を表示した場合を右図に示します。

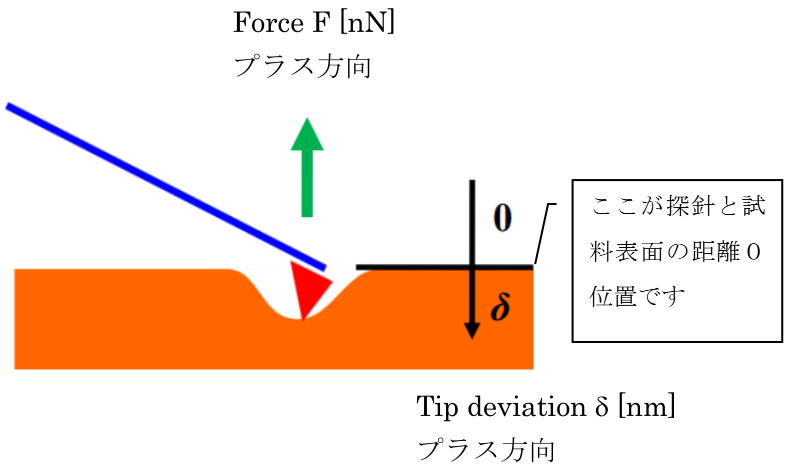
マウス左クリックによる四角形選択で、その囲った部分が拡大表示されます。画面右上に表示される拡大アイコン、縮小アイコンをクリックすることで、元の倍率に戻したり、再度の拡大が可能です。

マウスホイールを回す事で、グラフが上下方向にスクロールします。「ALT」キーを押しながらマウスホイールを回す事で、グラフが左右方向にスクロールします。拡大で表示できなくなった部分の確認が可能です。



次に、本紹介事例で用いられているシミュレーション手法について解説します。





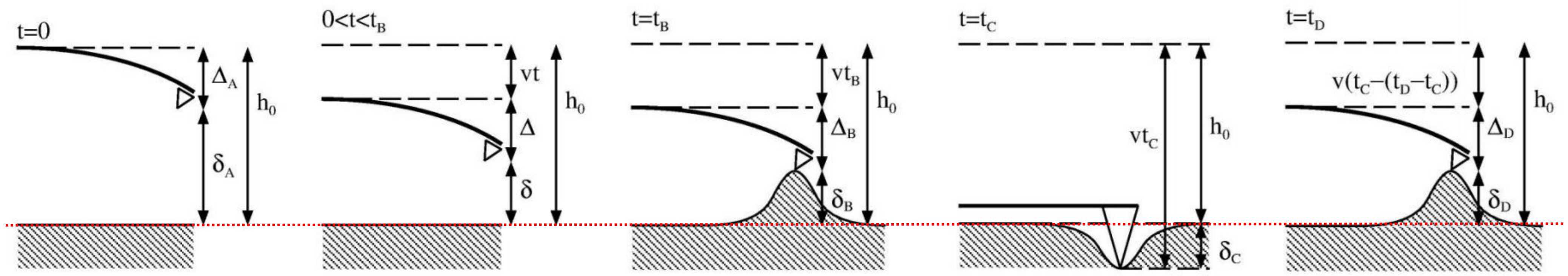
真空中、カンチレバーのばね定数 小の場合のフォースカーブ

真空中、ばね定数が小さなカンチレバーで粘弾性のある試料との接触をシミュレーションした際の、探針先端の変位δと、探針にかかる外力Fをプロットしたグラフ「delta_tipforce.csv」を解析することで、探針先端と、試料表面の挙動を知ることができます。
真空中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとします。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、引き戻されて試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。本事例では、カンチレバーのばね定数は、比較的小さな値に設定されているとします。
上記グラフの場合、カンチレバーのばね定数が小さいため、ファンデルワールス力の領域からJKR理論の領域へslip-inする際の、グラフの直線の傾きは小さく、ほとんど水平に近くなっています。また、探針が試料から離脱する過程はシミュレーションでは再現されていません。これは、ばね定数が小さ過ぎるため、凝着力に逆らえず、試料から探針が離れない状況となるからです。
グラフでは、横軸を探針先端部の変位、縦軸を探針先端部にかかる外力としています。横軸の変位は、試料表面をゼロとして、下向きを正としています。縦軸の外力 は、上向きを正としています。

ばね定数が小さなカンチレバーで粘弾性のある試料との接触をシミュレーションした際の、カンチレバーおよび探針先端と、試料表面の挙動については、以下の仮定において、カンチレバーがたわみ易く、Δの変化が大きい場合となります。

・ファンデルワールス力と JKR(Johnson-Kendall-Roberts) 理論との間の遷移(slip-in と slip-out)についての仮定探針が試料表面に次第に接近して、接触し、試料内部に押し込まれる様子を解説する。探針が試料に接触する瞬間では、試料表面は、上に盛り上がった状態となる。それから、探針は試料から受ける凝着力によって、試料内部に引き込まれる。しかし、探針が試料内部に引き込まれるに従って、探針が受ける凝着力は弱まり、ついには、凝着力はゼロとなる。このときが、探針が試料内部の最も奥に引き込まれた状態に相当する。
探針が試料に接触していない状態は、Hamaker の分子間力で記述するのが一般的である。
本シミュレータでは、探針が試料に接触してから試料内部に引き込まれるまで、および、探針が試料内部から押し戻されて離脱するまで、大きさが等しくて逆向きの速度で等速度運動すると仮定することにする。
以下、変数記号を説明します。

Δ：この変数は、カンチレバーのたわみによるz方向の変位を表すとする。下向きを正とする。この物理量は、AFM 実験において、直接測定可能な量である。
δ：この変数は、探針と試料との相互作用距離を表すとする。下向きを正とする。この物理量は、AFM 実験において、直接測定することは不可能とする。すなわち、他の物理量を組み合わせた計算によって、求められる量であるとする。
・探針の動きの大まかな流れ（以下のステップに分割します）。



［第 1 ステップ］　［第 2 ステップ］　［第 3 ステップ］　［第 5 ステップ］　［第 7 ステップ］

［第 1 ステップ］　時刻t＝0 において、探針と試料が、ばね弾性力と Hamaker 分子間力で釣り合っている状態。このときの、カンチレバーのたわみをΔ_A(＞0)、探針と試料表面の距離をδ_A(＜0)と書くことにする。
［第 2 ステップ］　時刻t＝0 から、徐々に探針を試料に近付けて行く状態。探針と試料は、ばね弾性力と Hamaker分子間力で釣り合っている。

［第 3 ステップ］　探針が試料に接触する瞬間の状態。このときの時刻をt_Bと書くことにする。また、このときのカンチレバーのたわみをΔ_B(＞0)、凝着力によって引き起こ

される試料表面の変位をδ_B(＜0)と書くことにする。
[第 4 ステップ]探針が、徐々に試料内部に押し込まれて行く状態。探針と試料は、ばね弾性力と JKR理論による凝着力で釣り合っている。
[第 5 ステップ] 探針が、試料内部に最も深く押し込まれた状態。このとき、ばね弾性力と JKR 理論による凝着力が丁度相殺されて、探針にかかる力はゼロになっているとする。このときの時刻をt_Cと書くことにする。また、このとき、探針にかかる力はゼロなので、明らかに$\Delta=0$が成り立つ。探針が押し込まれることによって窪んだ試料表面の変位をδ_C(＞0)と書くことにする。[第 6 ステップ] 時刻t_Cから、徐々に、探針が試料から引き抜かれて行く状態。探針と試料は、ばね弾性力と JKR 理論による凝着力を受けている。[第 7 ステップ] 探針が試料から離れる瞬間の状態。このときの時刻をt_Dと書くことにする。また、このときのカンチレバーのたわみをΔ_D(＞0)、凝着力によって引き起こされる試料表面の変位をδ_D(＜0)と書くことにする。ばね定数が小さなカンチレバーについては、凝着力に逆らえず、試料から探針が離れない場合、シミュレーションをこの時点で中断する。
[第 8 ステップ]時刻t_Dから、徐々に、探針が試料から離れて行く状態。探針と試料は、ばね弾性力と Hamaker 分子間力で釣り合っている。

・参考
[LIQ]タブ以下、[Input data]タブにある、[sample]->[material]->[point]->[adhesive]項目について以下に説明します。
「adhesive」は「接着剤、粘着性物質」の意味で、本シミュレーターでは「試料の表面張力」のことです。単位は[N/m]となります。粘弾性接触力学を考慮したシミュレーションを行う場合[試料の粘弾性解析モード（viscoelasticity）設定が「on」の場合]に使用します。

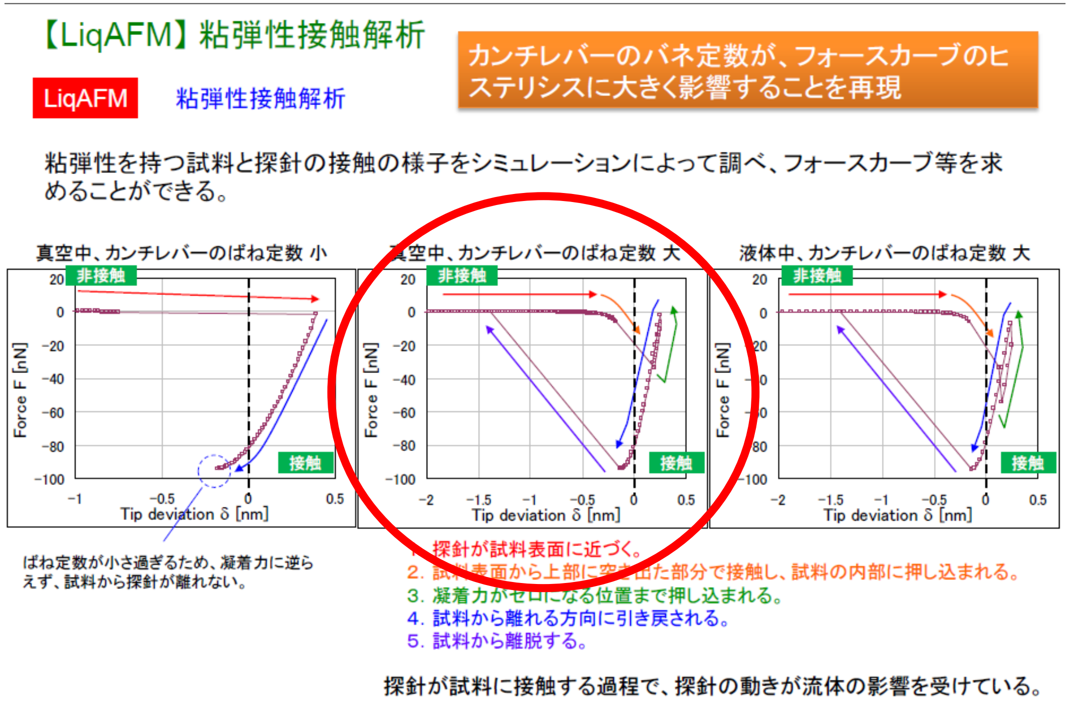
●LiqAFM　真空中での粘弾性解析を考慮したシミュレーション(カンチレバーのばね定数が大きい場合)　**計算事例②**

計算モード識別番号：[LiqAFM_Viscoelastic_001]（ｂ）

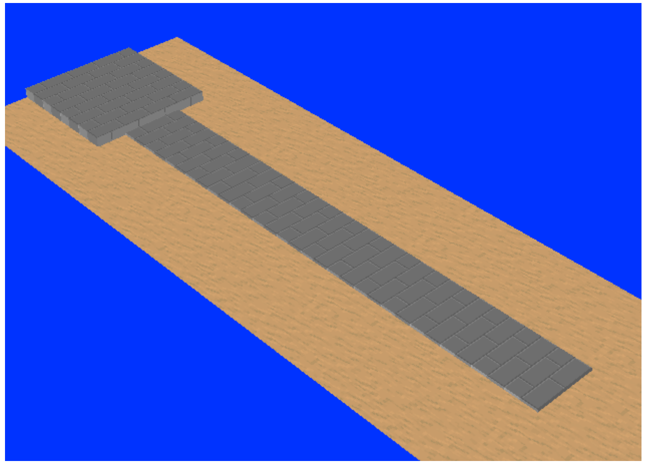
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Viscoelastic/LiqAFM_Viscoelastic.php

分類：LiqAFM　(粘弾性接触解析機能)、μｍオーダー、液中環境、高分子

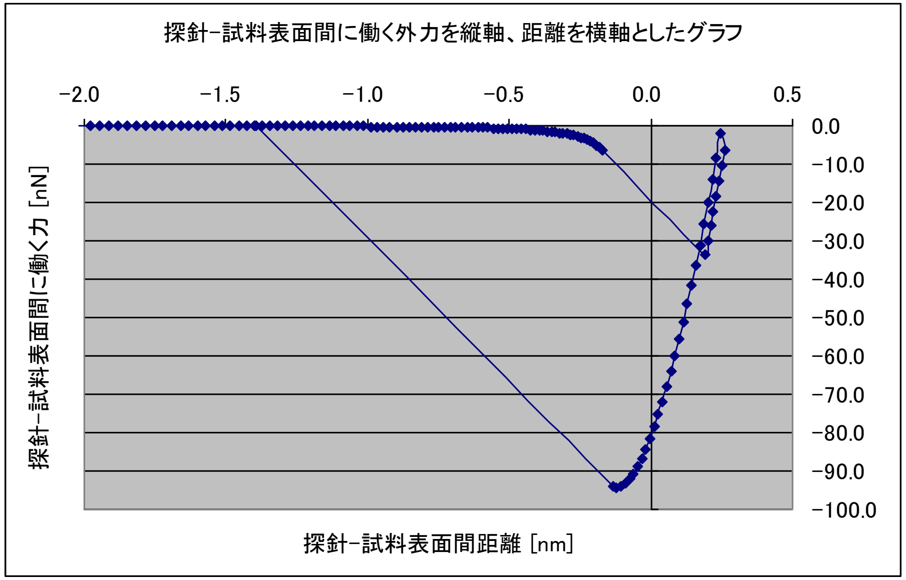
事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ



カンチレバーの形状



探針−試料表面間に働く外力を縦軸、距離を横軸としたグラフ

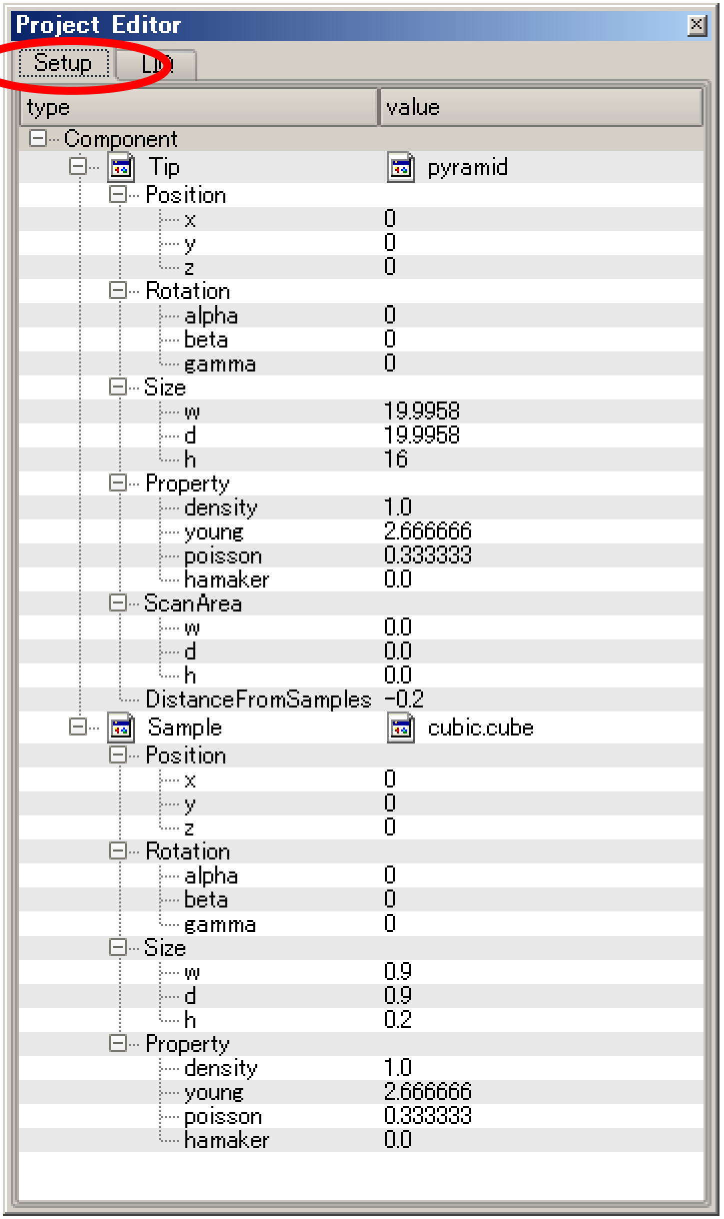
本事例では、粘弾性を持つ試料と探針の接触の様子をシミュレートします。カンチレバーのばね定数がフォースカーブ等にどのような影響を与えるかを知る事ができます。

本事例は、真空中、カンチレバーのばね定数が大きい場合の事例です。

試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定を「on」として下さい。

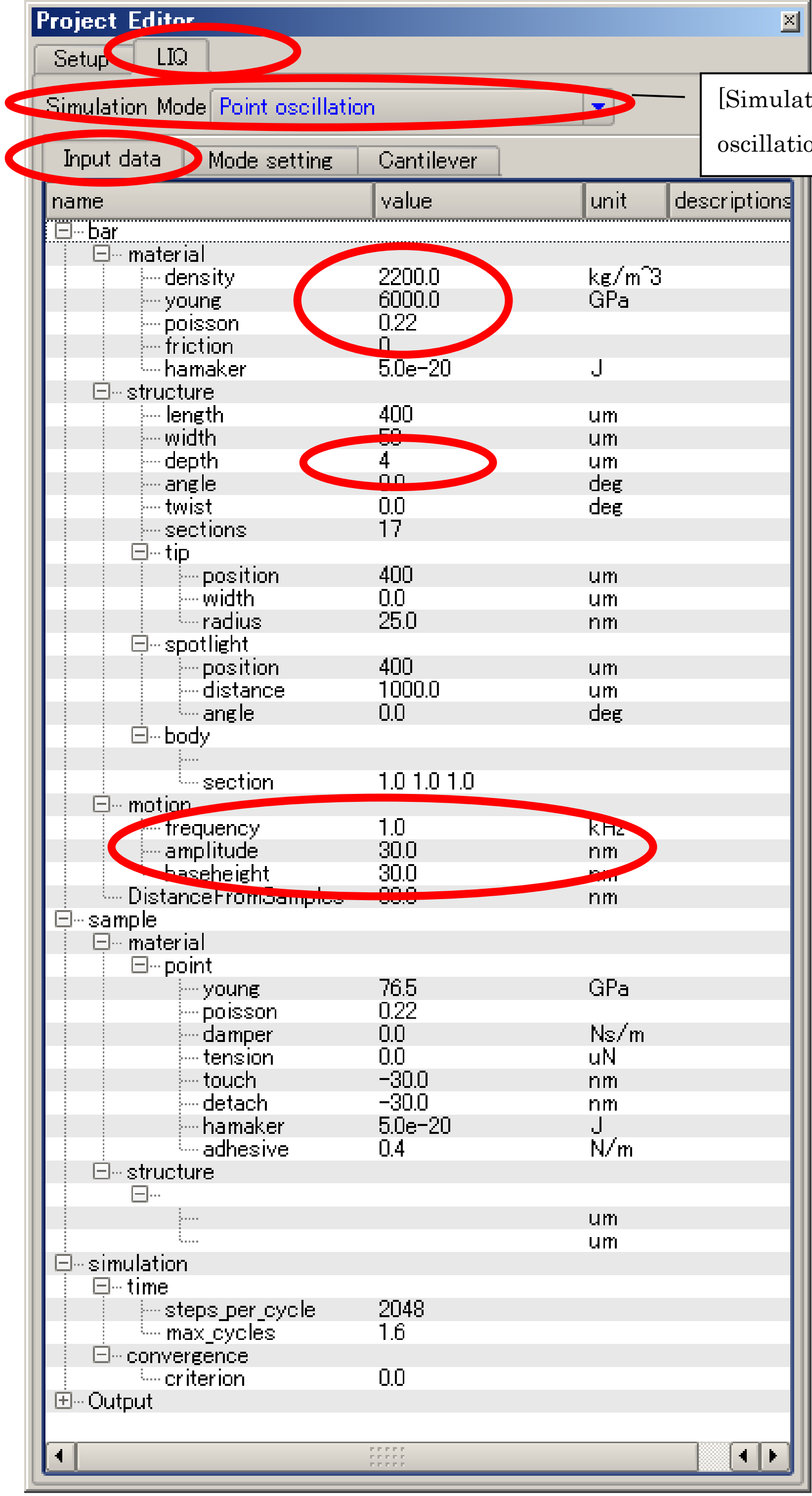
カンチレバーの厚さは４μｍです。

カンチレバーの加振周波数は１KHｚです。

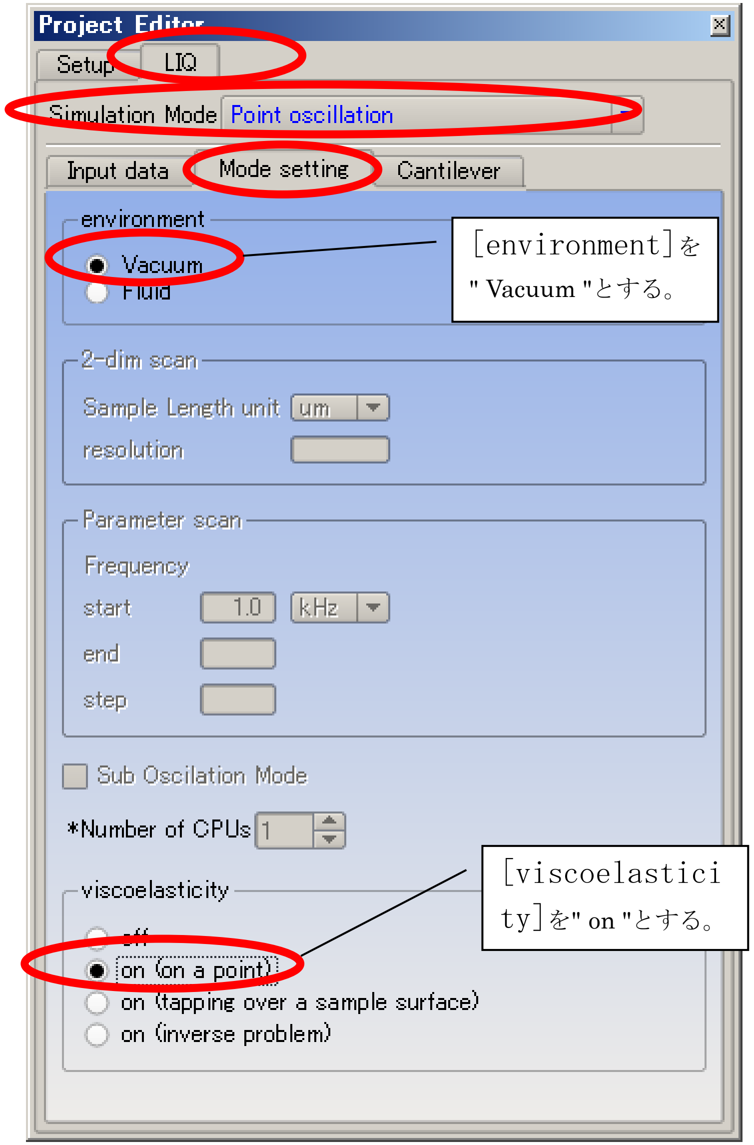


モデルのセットアップ条件

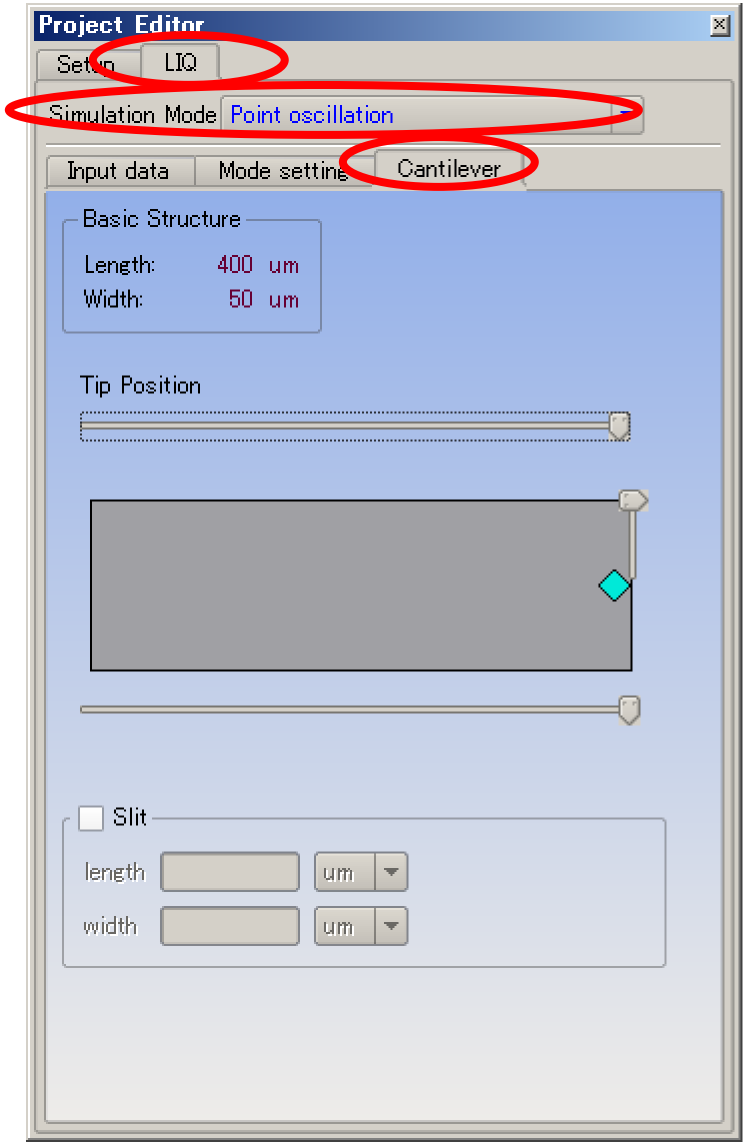
設定条件



[Simulation Mode]を"Point oscillation"とする。



設定条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

カンチレバーのばね定数が大きい場合、カンチレバーの物性値として、密度を2200.0[kg/m^3]、ヤング率を6000.0[GPa]、ポアソン比を0.22(無次元量)、ハマカー定数を5.0E-20[J]に設定しています。真空中においては、[LIQ]タブ以下の、[Mode setting]タブを選択し、次に選んだタブの先頭にある、[environment]の項目において、"Vacuum"を選択します。[LIQ]タブの先頭にある[Simulation Mode]という名前の付いたコンボボックスにおいて、"Point oscillation "を選択します。

・本紹介事例で用いられているシミュレーション手法について

真空中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとします。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的大きな値に設定されているとします。

探針は、まず、試料表面から上部に突き出た部分で接触し、そのまま試料の内部に押し込まれます。凝着力がゼロになる位置まで押し込まれると、探針は、今度は、試料から離れる方向に引き戻されることになります。シミュレーションでは、探針が試料から離脱した直後まで計算がなされています。

ばね定数が大きなカンチレバーで粘弾性のある試料との接触をシミュレーションした際の、カンチレバーおよび探針先端と、試料表面の挙動については、先の仮定（ファンデルワールス力と JKR理論との間の遷移について）において、カンチレバーがたわみ難く、Δの変化が小さい場合となります。

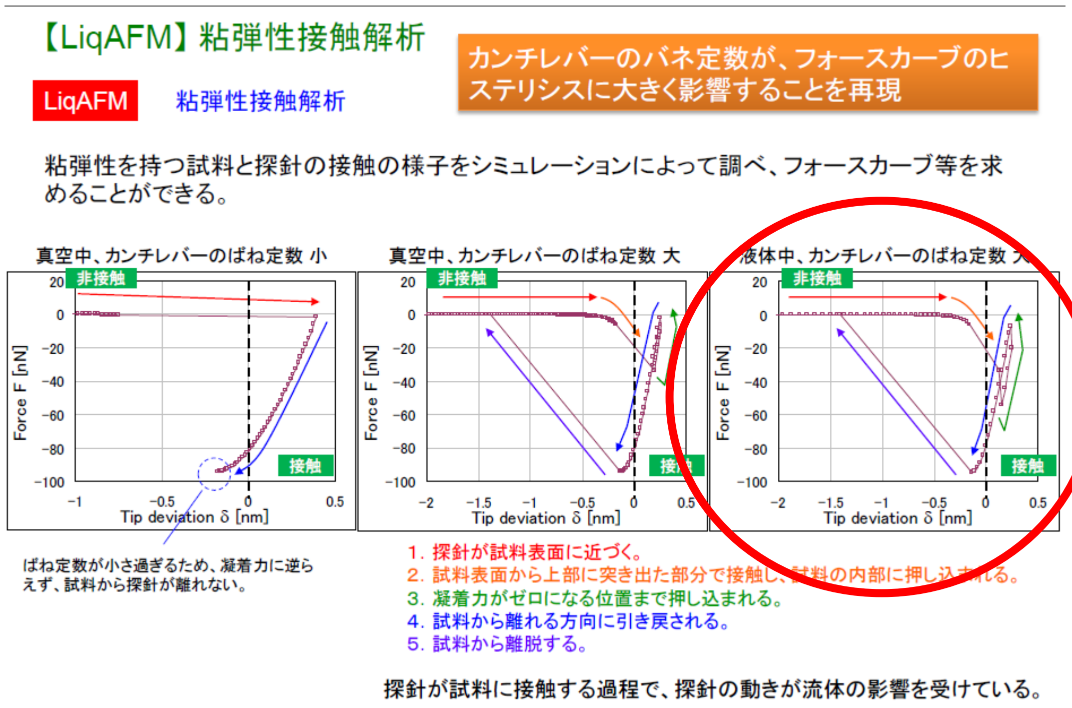
●LiqAFM　液体中での粘弾性解析を考慮したシミュレーション(カンチレバーのばね定数が大きい場合)　計算事例③

計算モード識別番号：[LiqAFM_Viscoelastic_001]（ｃ）

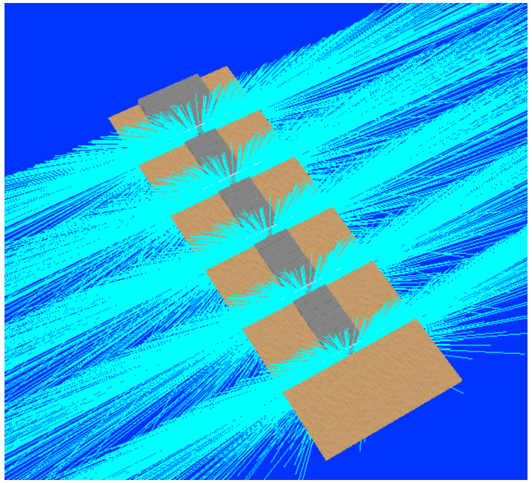
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Viscoelastic/LiqAFM_Viscoelastic.php

分類：LiqAFM （粘弾性接触解析機能）、μｍオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。

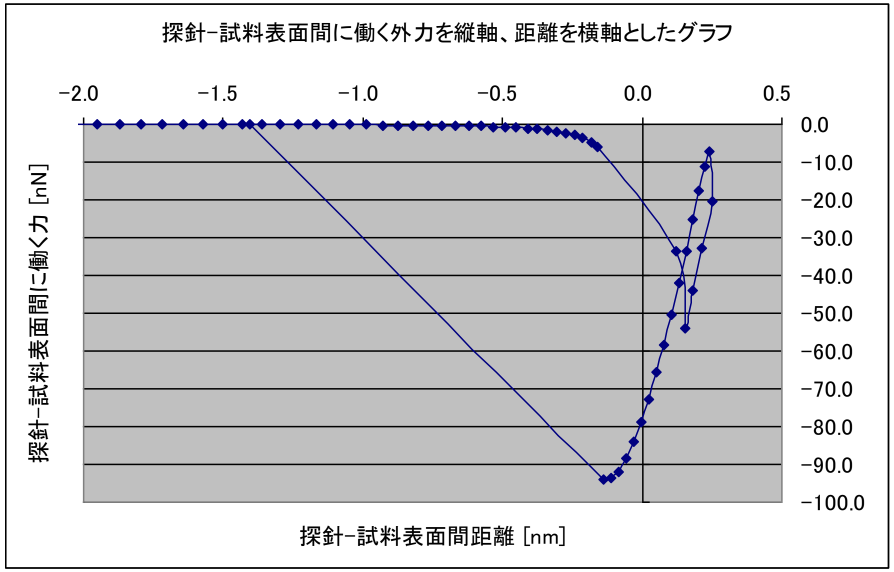


事例紹介ページ



カンチレバーの形状

液体中のシミュレーションの場合、カンチレバーの周りの流体の速度が表示されます。



探針−試料表面間に働く外力を縦軸、距離を横軸としたグラフ

本事例では、粘弾性を持つ試料と探針の接触の様子をシミュレートします。カンチレバーのばね定数がフォースカーブ等にどのような影響を与えるかを知る事ができます。

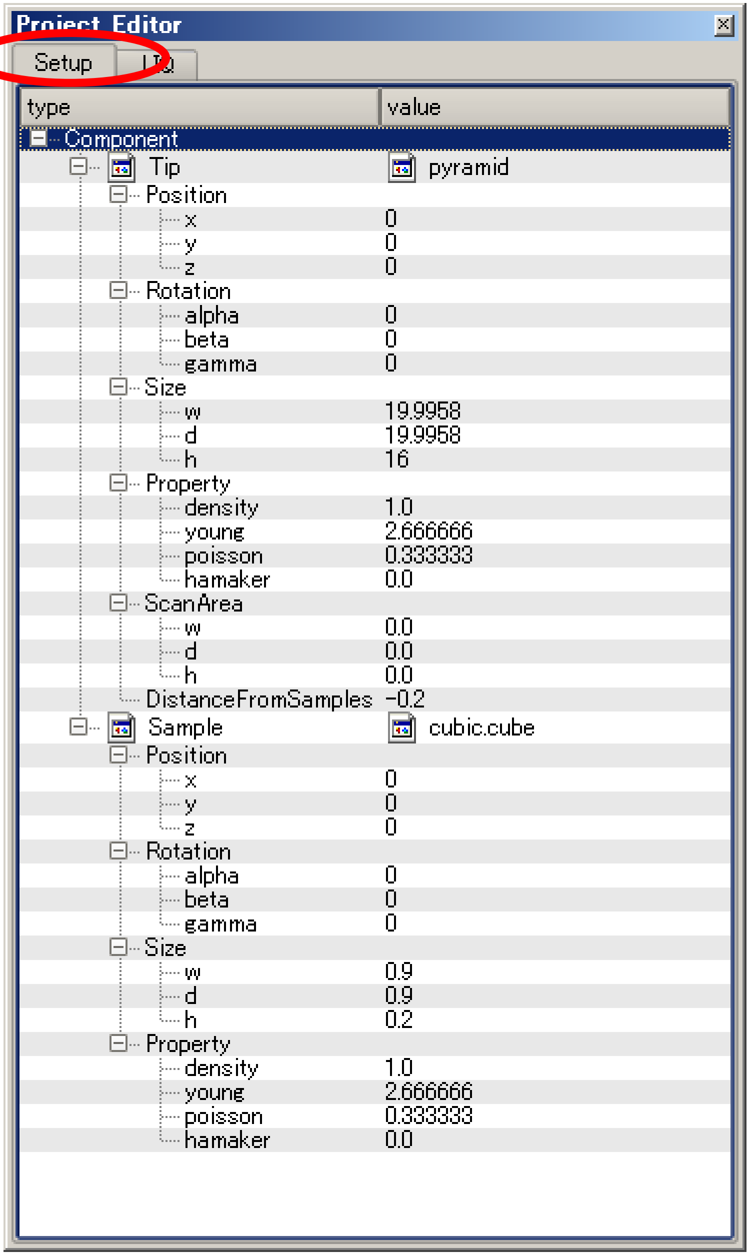
本事例は、液体中、カンチレバーのばね定数が大きい場合の事例です。

試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定を「on」として下さい。

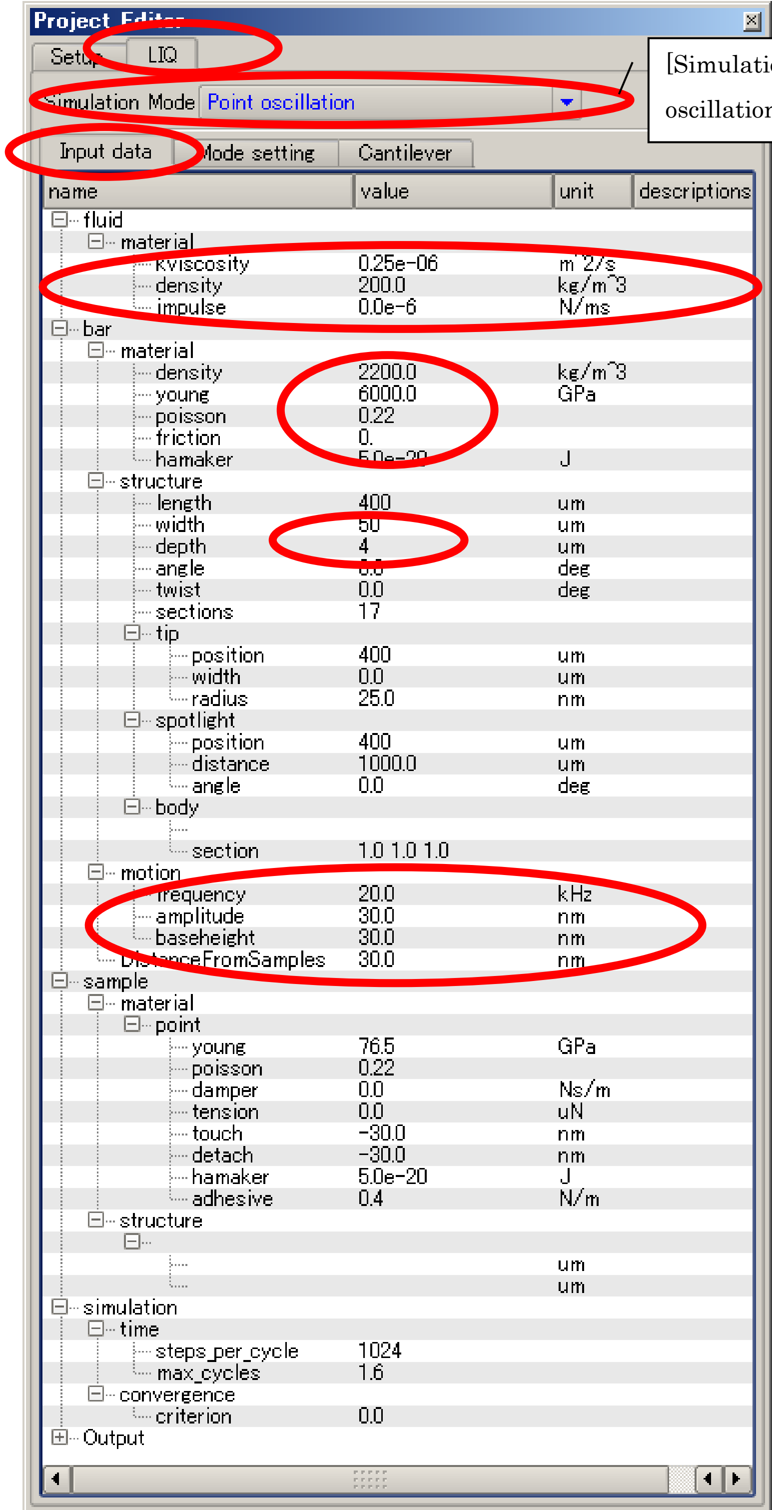
水より希薄な流体を仮定し、動粘性率 0.25E-6[m^2/s]，密度 200.0[kg/m^3]の液体中をシミュレートします。カンチレバーの厚さは４μｍです。

カンチレバーの加振周波数は20KHｚです。

設定条件

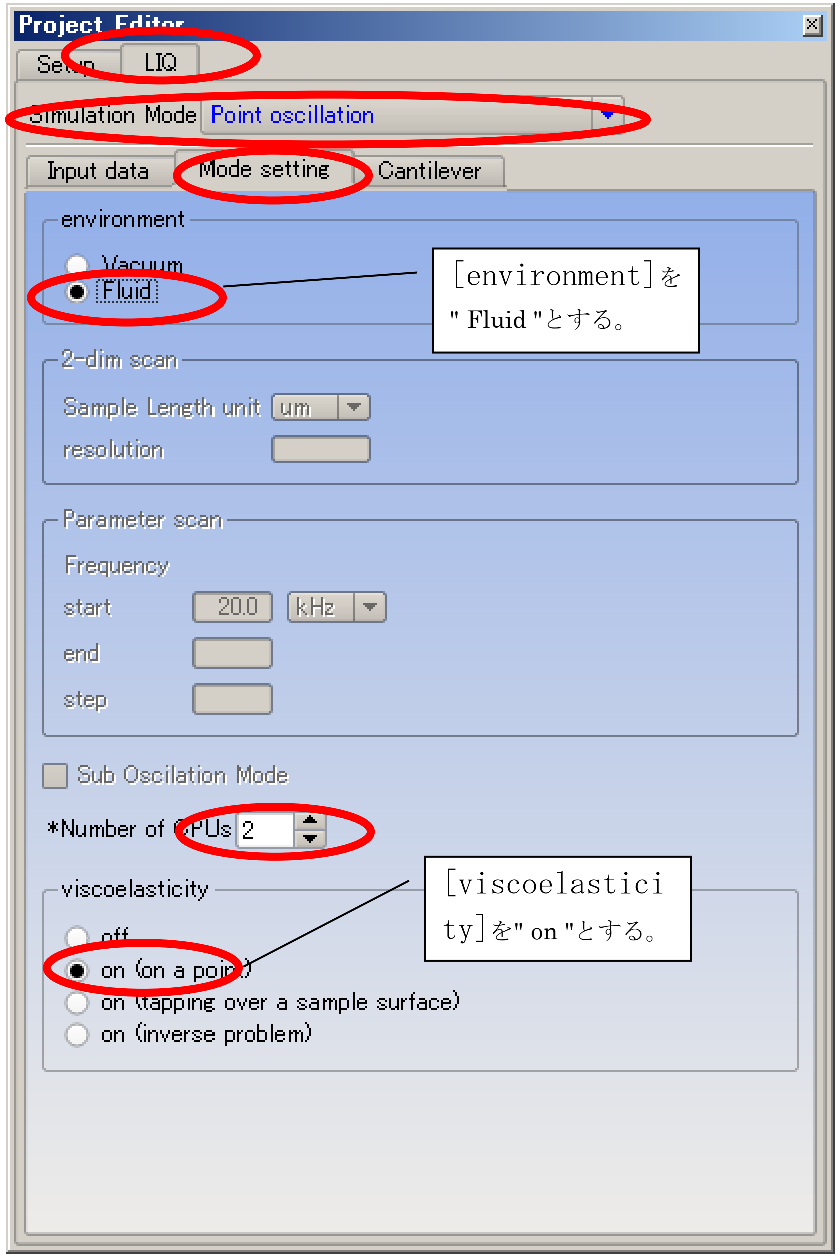


モデルのセットアップ条件

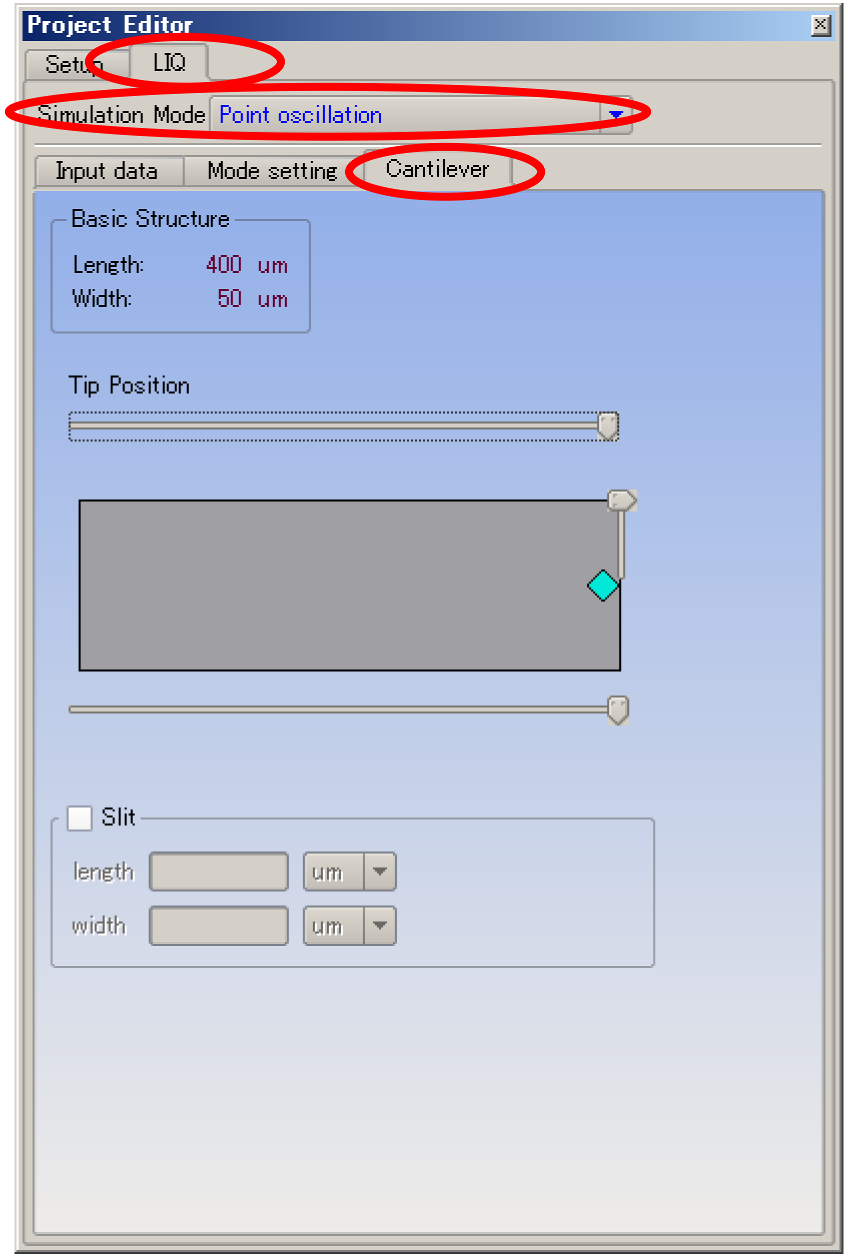


[Simulation Mode]を"Point oscillation"とする。

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。



設定条件



設定条件

カンチレバーのばね定数が大きい場合、カンチレバーの物性値として、密度を 2200.0[kg/m^3]、ヤング率を 6000.0[GPa]、ポアソン比を 0.22(無次元量)、ハマカー定数を 5.0E-20[J]に設定しています。[LIQ]タブの先頭にある[Simulation Mode]という名前の付いたコンボボックスにおいて、”Point oscillation ”を選択します。液体中においては、[LIQ]タブ以下の、[Mode setting]タブを選択し、次に、選んだタブの先頭にある、[environment]の項目において、”Fluid”を選択します。また、流体の物性値として、「動粘性率 (kviscosity)」、「密度 (density)」、「分子のランダムな撃力 (impulse)」

を入力してください。GUIから流体の動粘性率を設定する方法は次の通りです。まず最初に、[LIQ]タブ以下の、[Input data]タブを選択します。次に、項目[fluid]→[material]において、"kviscosity"を所望の値に設定します。しかし、GUIから設定できる流体の動粘性率の最小値は、1.0e-06[m^2/s]です。そのため、本事例のように、0.25e-06[m^2/s]のような小さな値はGUIから設定できません。このような場合は、projectファイルをテキスト・エディタで直接編集して、値を書き込むしかありません。
次に、[Mode setting]タブ中において、"Number of CPUs"の値を"2"に設定します。(ここで指定可能な、並列計算のためのCPUの個数は、使用しているパソコンに依存します。いわゆる、Core2 のマシンの場合、指定できるCPU数は最大で"2"となります。4Core搭載のパソコンであれば、CPU数を"4"に指定出来ます。また、項目[environment]で"Vacuum"を選択した場合、"Number of CPUs"の値は入力不可となります。)
カンチレバーの振動周波数は、先の真空中の事例（１．０KHｚ）と異なり、２０．０KHｚに設定されています。

・本紹介事例で用いられているシミュレーション手法について
液体中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとします。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的大きな値に設定されているとします。
「真空中、大きいばね定数のカンチレバーで粘弾性のある試料との接触シミュレー ション」とほぼ同様の挙動となります。
ばね定数が大きなカンチレバーで粘弾性のある試料との接触をシミュレーションした際の、カンチレバーおよび探針先端と、試料表面の挙動については、先の仮定（ファンデルワールス力と JKR理論との間の遷移について）において、カンチレバーがたわみ難く、Δの変化が小さい場合となります。

・流体の影響について
探針が試料に接触する過程で、探針の動きが流体の影響を受けていることが見てとれます。これは、周辺の流体からの強い流体抗力による、カンチレバーの弾性変形により振動特性が変化したことによります。
流体は当初は静止していますが、カンチレバーの振動によって流れが発生します。カンチレバーと流体が接触するカンチレバー表面では流体の速度はカンチレバーの速度と一致します。試料表面や十分に遠方では流体は静止しています。これらが流体の境界条件となります。
これらの境界条件の下で、流体の運動方程式を数値的に解きます。[参考文献：M.Tsukada, N.Watanabe, Jpn. J. Appl. Phys. 48 (2009)035001]
数値計算においては、カンチレバーの運動方程式と流体の運動方程式を、時間・空間に関して離散化して解くことになります。カンチレバーおよび流体の領域は、空間的に直方体の格子上に分割され、時間変数も等間隔に分割されます。液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ (LiqAFM) の粘弾性接触力学シミュレーションでは、試料表面上の指定した一点において、探針-試料間の粘弾性接触の様子を調べる設定となっています。数値計算の手法は、おおよそ次の通りです。カンチレバーの運動方程式と流体のStokes方程式を差分法で数値計算しながら、各時刻のステップで探針と試料の距離を調べ、一定の距離まで近付いたら探針は試料に凝着したと判断します。

・参考１「粘弾性とは」(岩波理化学辞典第５版より)
粘弾性とは「緩和現象の結果として、弾性変形と粘性流動が重なって現れる現象。ふつう液体は*ずれ*変形に対しては粘性を示すだけで弾性は示さないが、高分子の溶液や融体は粘性とともに弾性をも示す。マクスウェル・モデルはそのもっとも簡単な模型である。一方、固体においても緩和現象の結果、弾性とともに粘性が現われる場合がある。フォークト・モデルはその挙動を表わすもっとも簡単な模型である。」

・参考２「粘弾性とは」(wikipediaより)
粘弾性（ねんだんせい、英: viscoelasticity）とは粘性と弾性の両方を合わせた性質のことである。基本的にすべての物質が持つ性質であるが、特にプラスチックやゴムなどの高分子物質に顕著に見られる。一般に粘性は液体の、弾性は固体の性質と考えられる。どちらもそれぞれにおける変形のしやすさ（しにくさ）を表すものであるが、その様相には大きな差がある。固体は加えられた力に応じて変形するが、加えた力がなくなれば元の形に戻る。液体の場合にはやはり変形するが、力がなくなっても元には戻らない。ところが、例えばビニールの場合、引っ張ると伸びるが、力を抜いてもすぐには戻らず、ゆっくりと元に戻る。また卵の白身は液体に見えるが、かき混ぜた箸をはずすと多少だが跳ね返るように戻る。これらの物質は粘性と弾性を兼ね備えているために、このような挙動をすると考えられる。ある物質が粘弾性体か、あるいは粘性体または弾性体に近いのかは、その物質に一定のひずみを与えたときの応力緩和（応力の時間変化）の緩和時間を見ることで判別できる。緩和時間が観測の時間スケールに対して十分短ければ（ひずみに起因する応力の減少が早い)、粘性体として扱われ、また、長ければ（ひずみに起因する応力の減少が遅い)、弾性体として扱われ、同等のスケールであれば粘弾性体として扱われる。このことから、緩和時間と観測時間スケールの比はデボラ数と名付けられ、判別の目安として用いられる。

３．LiqAFM(液中ソフトマテリアル AFMシミュレータ) Parameter Scan(Resonance Curve)（共振周波数解析機能）

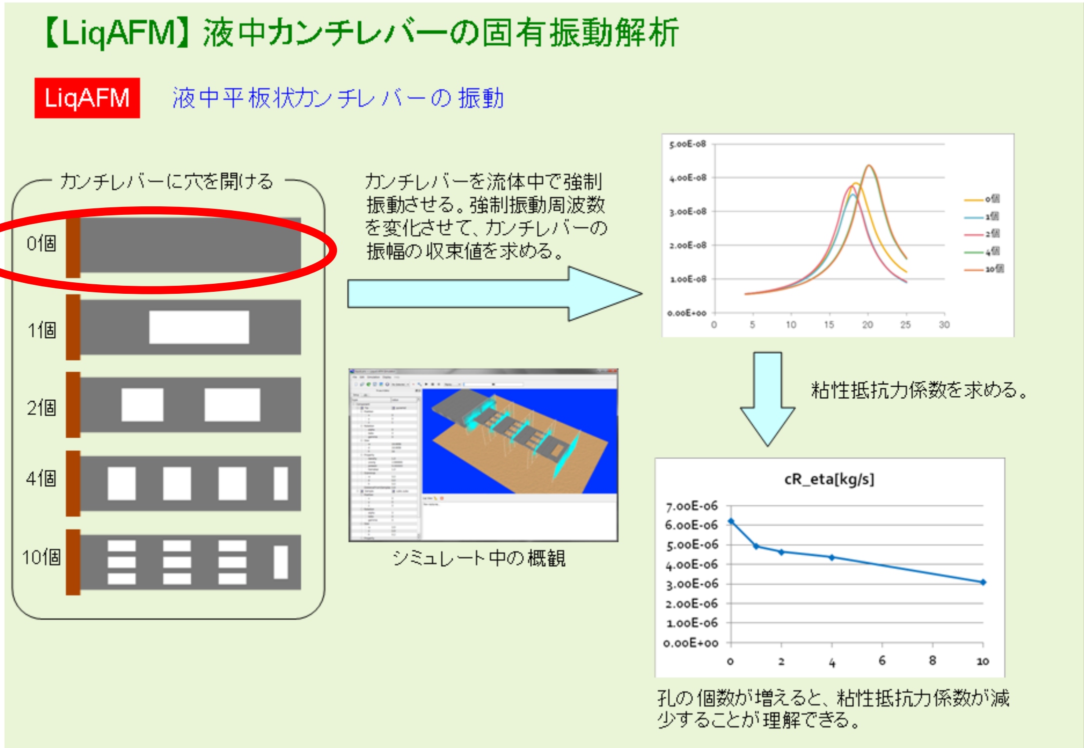
●LiqAFM　様々な形のカンチレバーの非粘弾性試料での共振周波数シミュレーション(孔のないカンチレバーの場合)　**計算事例④**

計算モード識別番号：[LiqAFM_Resonance_001]（00）

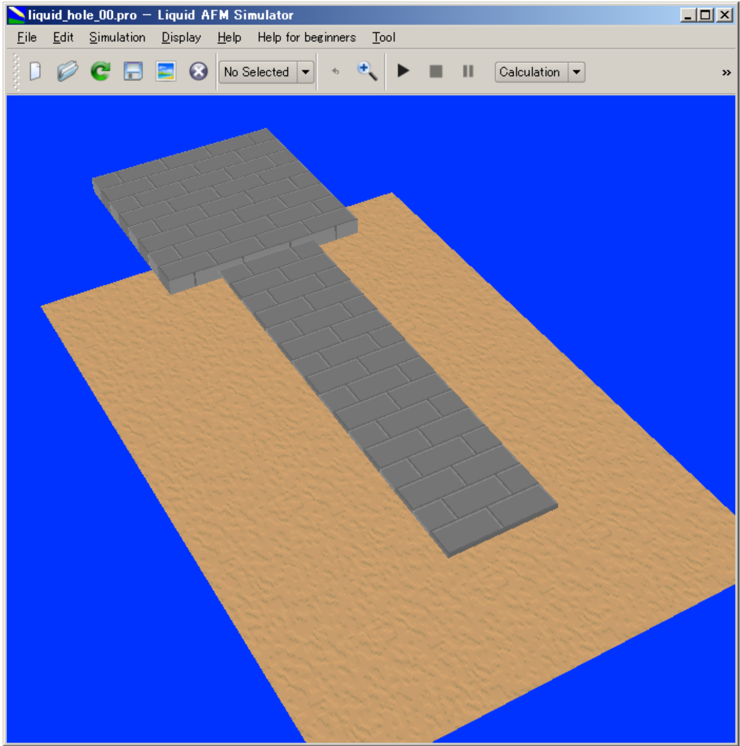
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Resonance/LiqAFM_Resonance.php

分類：LiqAFM （共振周波数解析機能）、μｍオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ

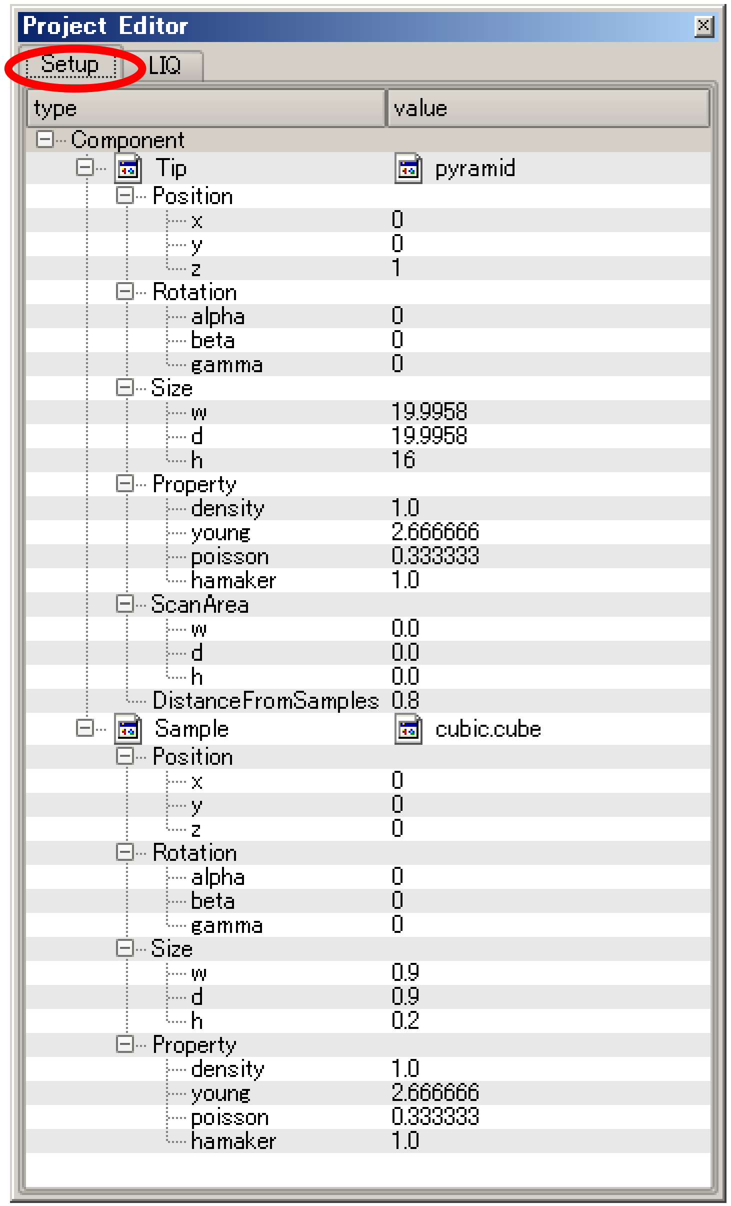


カンチレバーの形状

液体中で平板状のカンチレバーを強制振動させた際の、流体とカンチレバー先端部の動きのシミュレーション計算方法および、強制振動周波数を変化させて、繰り返しシミュレーションを行うことにより、カンチレバーの共鳴周波数を求める方法について解説します。

本事例は、試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定が「ｏｆｆ」の場合の事例です。また、孔のないカンチレバーの場合です。

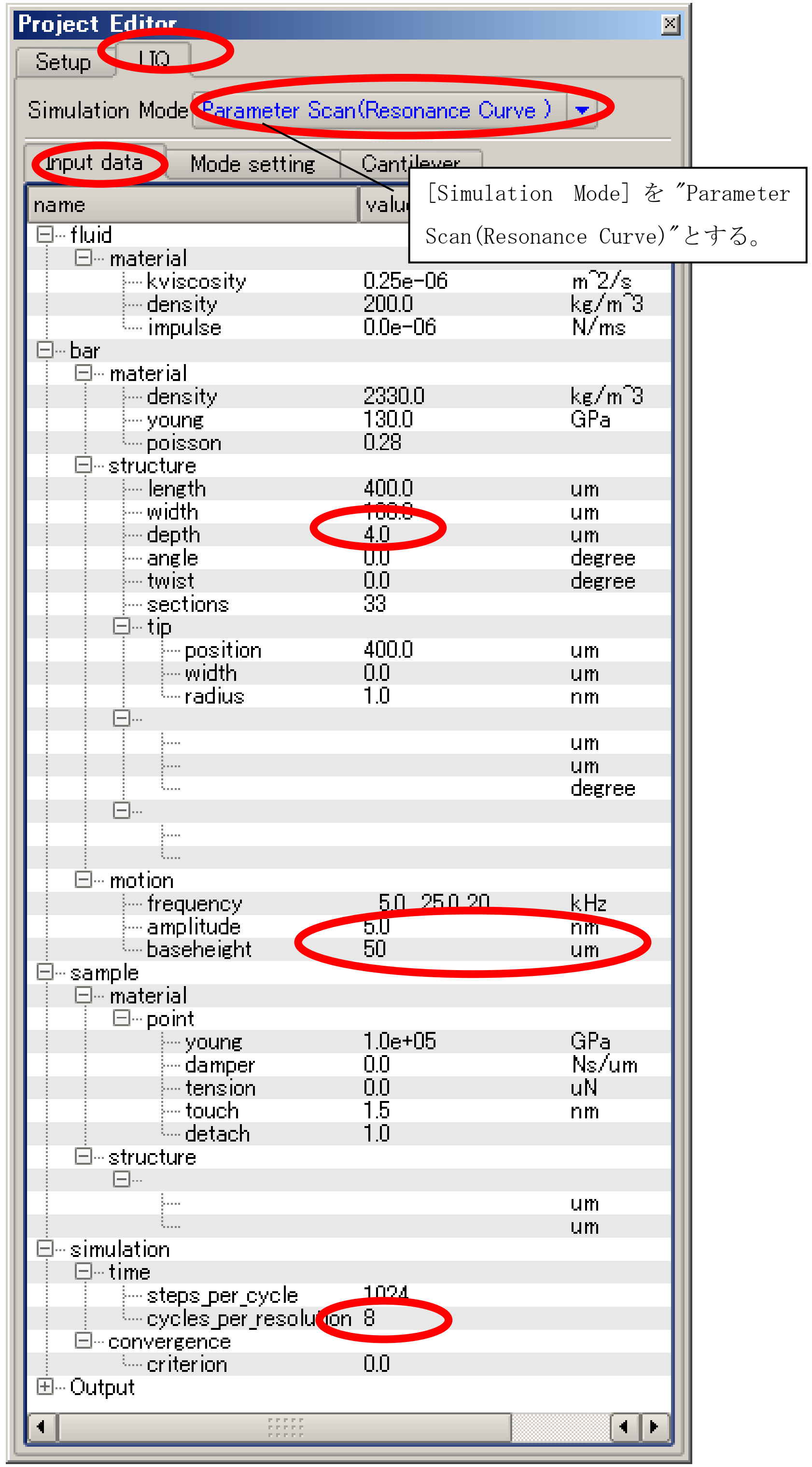
カンチレバーの厚さは４μｍです。カンチレバーの試行振動周波数を５ＫＨｚより２５ＫＨｚまで２０分割でスキャンします。出力データとして各ステップでの計算値（探針取り付け位置振幅、最大振幅、捩れ、探針の受ける力）がファイルに保存されます。励振周波数成分の振幅の時間変化は、時間と共に一定の値に収束することが判ります。カンチレバーの強制振動周波数を変化させて、カンチレバーの振幅が時間と共に収束する値をプロットしたグラフを見ると、カンチレバーの共鳴周波数を知る事ができます。

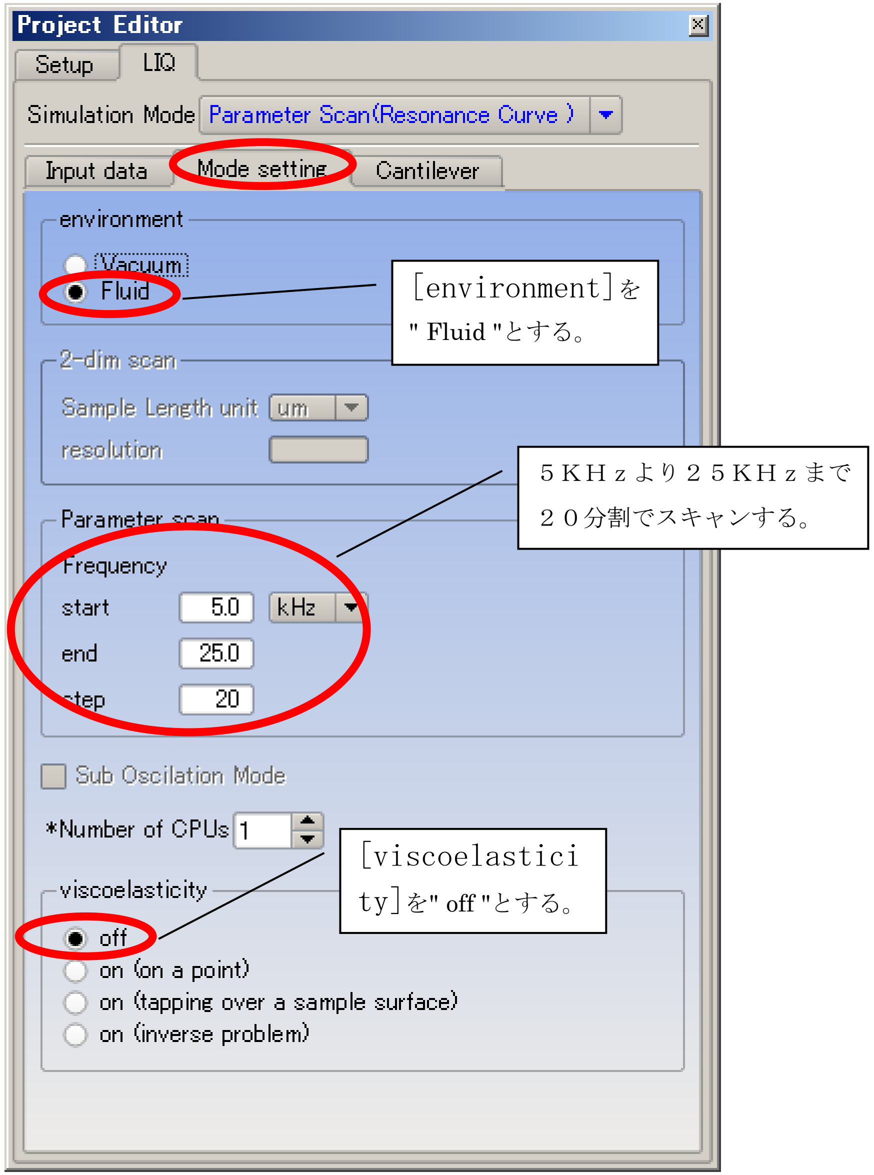


モデルのセットアップ条件

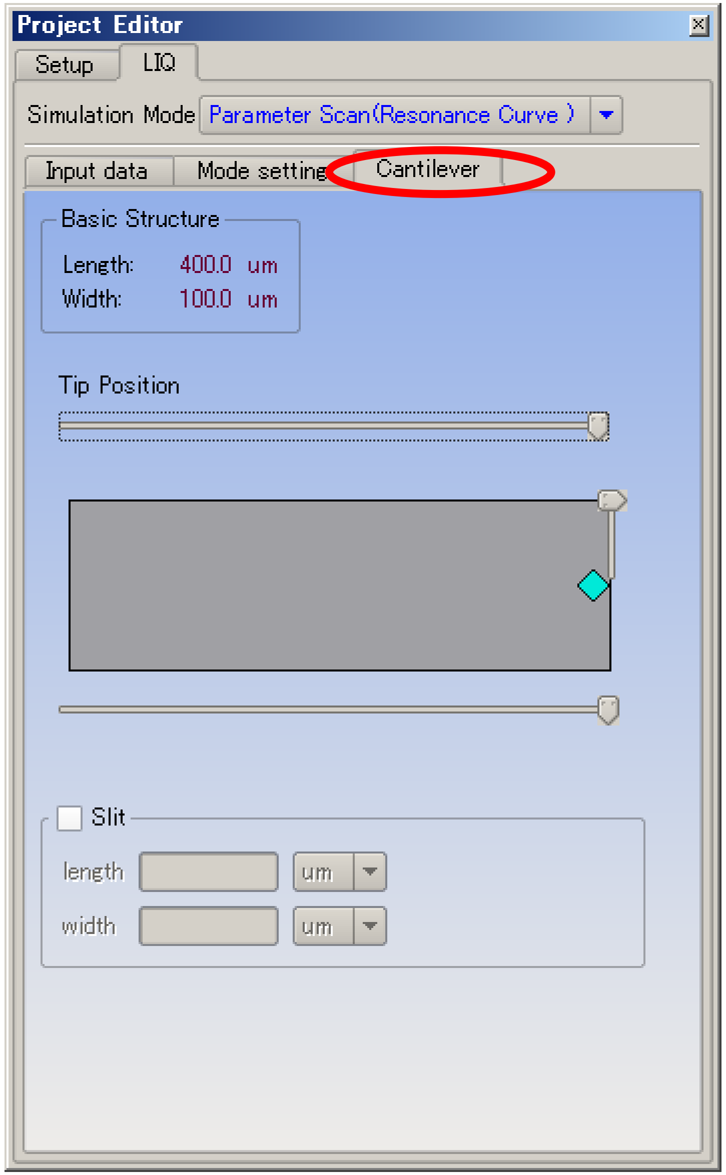
[LIQ]タブの先頭にある[Simulation Mode]という名前の付いたコンボボックスにおいて、"Parameter Scan(Resonance Curve)"を選択します。

設定条件





設定条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

メニューバーの[Display]→[Result View]を選択すると、[Result View]という名前の新しいウィンドウが開くので、新しいウィンドウで、フォルダ"output"内のファイルを選択すると、それぞれのグラフが描かれます。"resonance.csv"を選択すると、共鳴曲線が描かれます。

共鳴曲線（強制振動周波数に対する振幅収束値の曲線）でピークとなった周波数が、共鳴周波数となります。

グラフから共振角振動数ω_0およびQ値を読み取り、粘性抵抗力係数を求めることになります。

但し、Q値とは、Q=$\frac{\omega_0}{\omega_2 - \omega_1}$、但し、$\omega_1$、$\omega_2$は振幅が$\frac{A\omega_0}{\sqrt{2}}$となる（但し、$A\omega_0$は$\omega=\omega_0$の時の振幅）２つの角振動数$\omega_2>\omega_1$となります。

多数の孔の開いたカンチレバーの流体中での振動のシミュレーションより、粘性抵抗力係数を求めるための解析手順は以下の通りである。まず、液体中のばねに取り付けられた質点の運動方程式として、次を考える。

$$m\ddot{z} = -kz - cR\eta\dot{z} + F_0\cos\omega t$$

ただし、kはばね定数、cは無次元係数、Rは質点の半径、ηは液体の粘性率、$F_0\cos\omega t$は外力項とする。

ここで、以下の要領でQ値を導入する。

$$cR\eta = \frac{m\omega_0}{Q}$$

このとき、適当な初期条件における質点の運動方程式の解は、以下で与えられる。

$$z = \frac{F_0}{(k-m\omega^2)^2 + (\frac{m\omega_0\omega}{Q})^2}[(k-m\omega^2)\cos\omega t + \frac{m\omega_0\omega}{Q}\sin\omega t]$$

上の式で現れるω_0は、共振角振動数であり以下の関係式が成立すると考えられる。

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

と与えられる。これは、共振角振動数から、ばね定数が得られると解釈することが可能である。また、Q値から粘性抵抗力係数が、次のように求められる。

$$cR\eta = \frac{\sqrt{mk}}{Q}$$

SPMシミュレータ・ガイドブック（SPM_guidebook.pdf）P87より抜粋

但し、周波数ｆと角振動数ωの関係式は$\omega=2\pi f$、 単位はω(rad/s)、2π(rad/回)、f(回/s)となります。

・紹介事例での共鳴周波数の求め方

共鳴曲線の最大値A_0　３．４０［10^{-8}m］、at　f_0　＝　２００００［Hz］

A_0の$\dfrac{1}{\sqrt{2}}$は２．４０４［10^{-8}m］

$A=\dfrac{A_0}{\sqrt{2}}$ となる時の周波数は

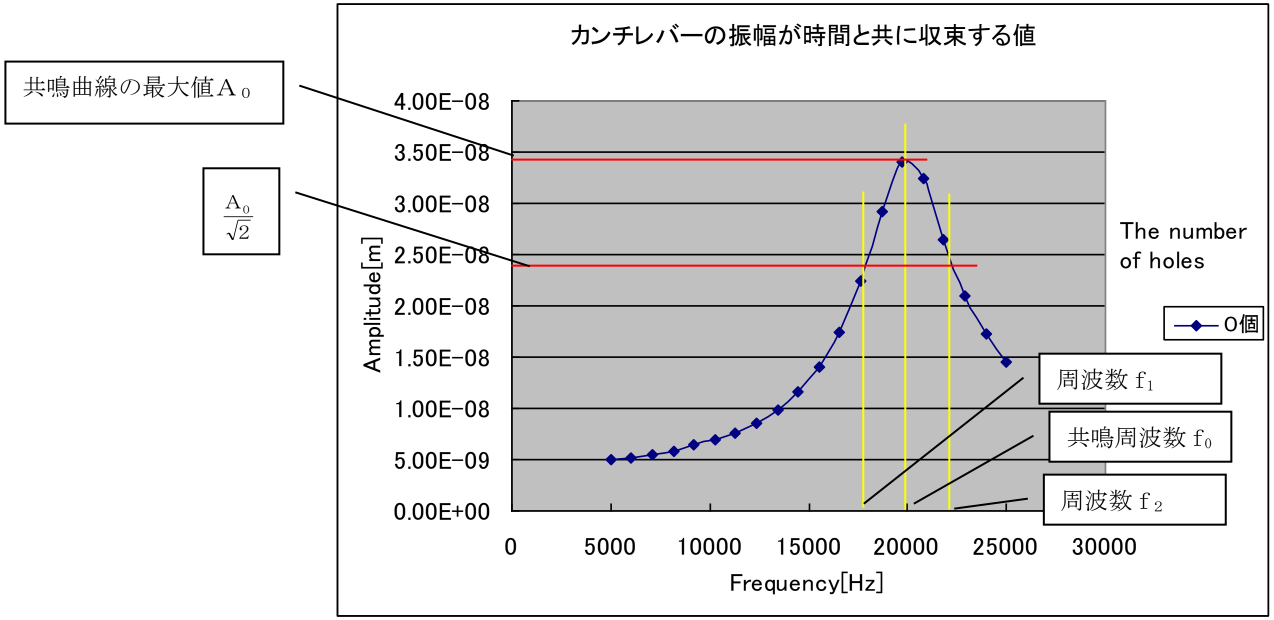
f_1＝１７９００［Hz］、f_2＝２２１００［Hz］

$$Q値=\frac{\omega_0}{\omega_2-\omega_1} \rightarrow \frac{2\pi\ f_0}{2\pi\ f_2-2\pi\ f_1} \rightarrow \frac{f_0}{f_2-f_1}$$

$$=\frac{20000}{22100-17900}$$

＝４．７６

バー密度	2330	［kg・m^3］
長さ	400	［μm］
幅	100	［μm］
厚さ	4	［μm］
バー重さm	3.728E-10	[kg]



$$粘性抵抗力係数 cR\eta=\frac{m\ \omega_0}{Q} \rightarrow \frac{m(2\ \pi\ \ f_0)}{Q} \rightarrow 2\ \pi\ m\ (f_2-f_1)$$

＝9.837E-06　[kg/s]

$$ばね定数\qquad k=m\cdot\omega_0^{\ 2}$$

＝5.890　[N/m]

出力データとして各ステップでの計算値は、以下のようなファイルに保存されます。

カンチレバーの動画	barmotion.bar	バイナリ
流体の速度　（液中計算の場合のみ）	fluidmotion	バイナリ
探針の高さの時間変化	height.csv	テキスト（CSV）
カンチレバー各点の振幅の時間変化	height_amplitude.csv	テキスト（CSV）
探針に働く力	tipforce.csv	テキスト（CSV）

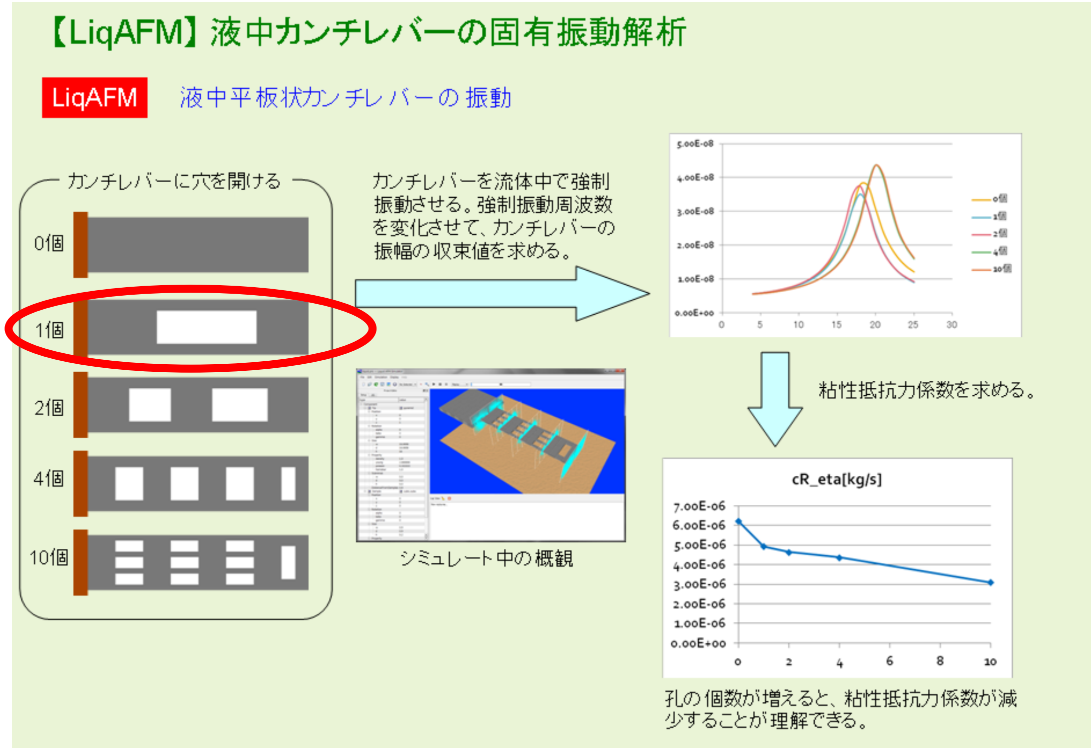
●LiqAFM　様々な形のカンチレバーの非粘弾性試料での共振周波数シミュレーション(孔が１個あるカンチレバーの場合)　計算事例⑤

計算モード識別番号：[LiqAFM_Resonance_001]（01）

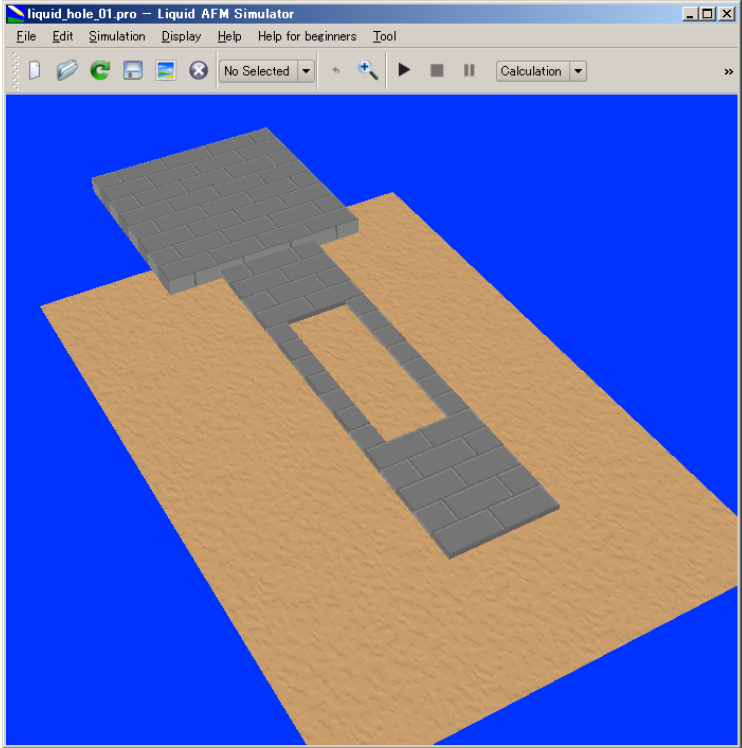
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Resonance/LiqAFM_Resonance.php

分類：LiqAFM　（共振周波数解析機能）、μｍオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ

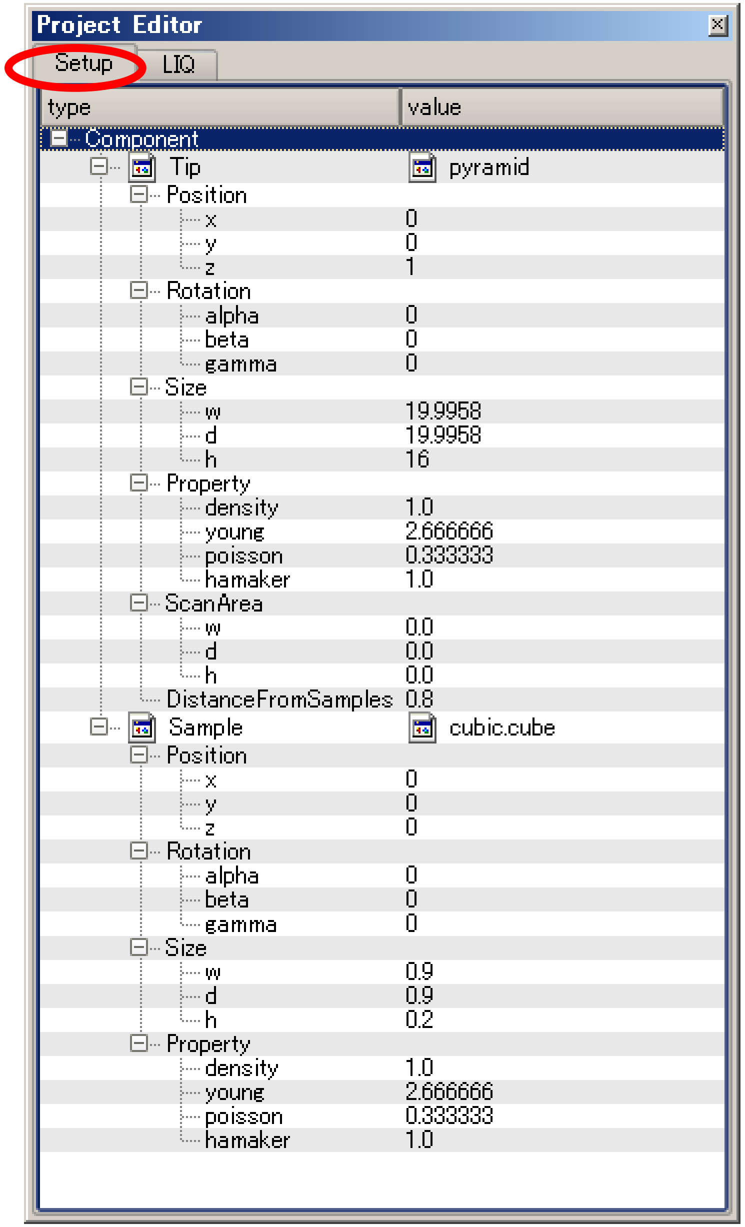


カンチレバーの形状

液体中で平板状のカンチレバーを強制振動させた際の、流体とカンチレバー先端部の動きのシミュレーション計算方法および、強制振動周波数を変化させて、繰り返しシミュレーションを行うことにより、カンチレバーの共鳴周波数を求める方法について解説します。

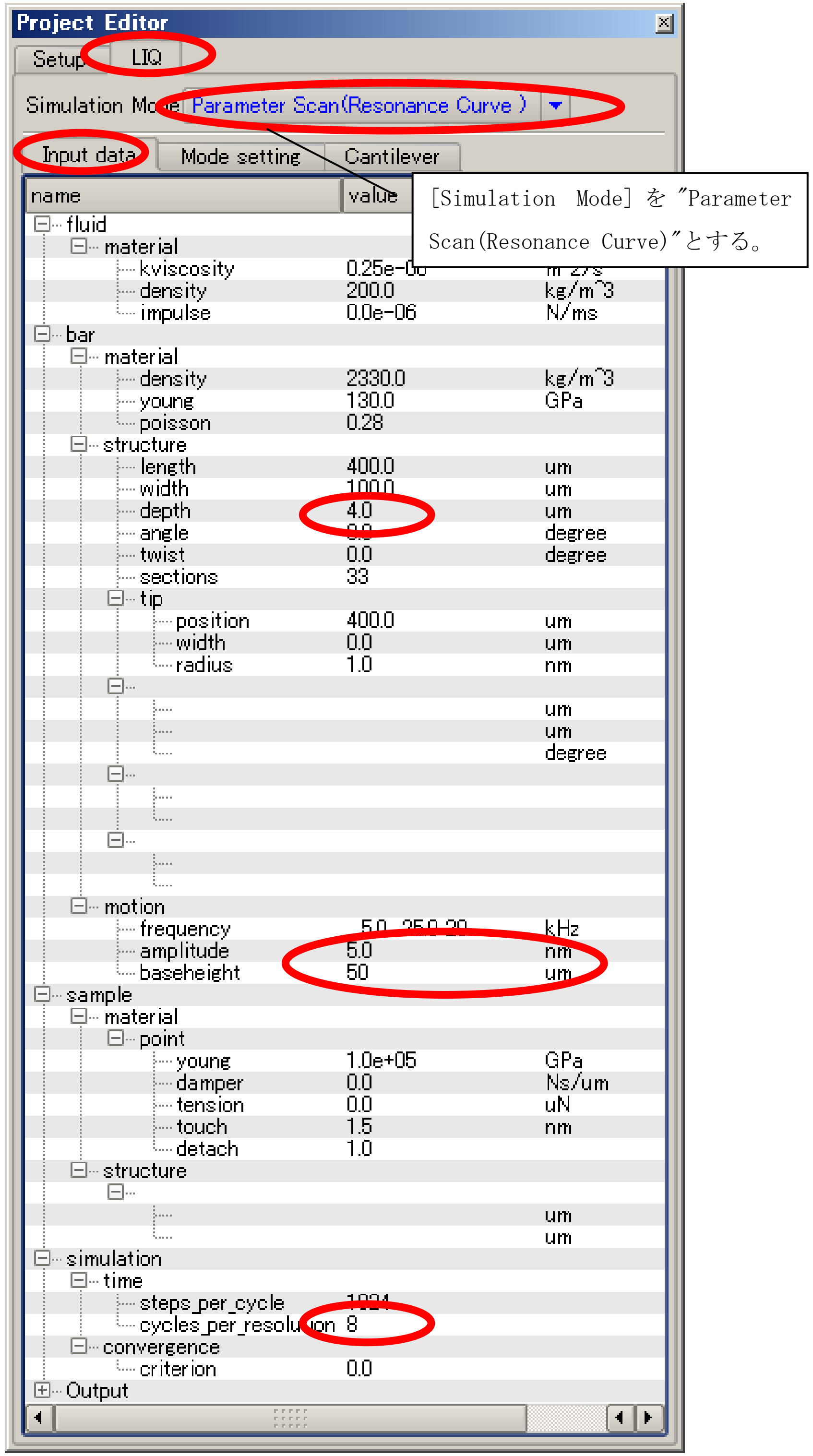
本事例は、試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定が「ｏｆｆ」の場合の事例です。また、孔が１個あるカンチレバーの場合です。

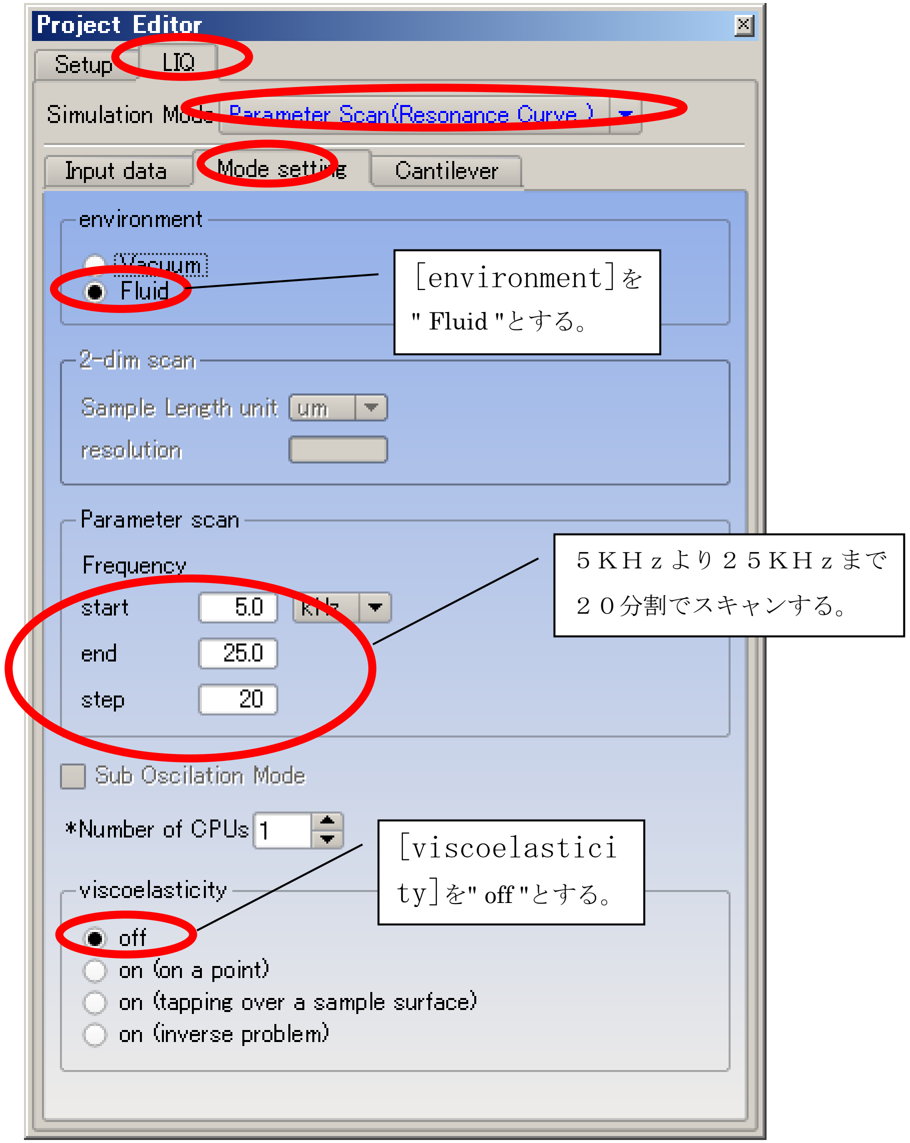
カンチレバーの厚さは４μｍです。カンチレバーの試行振動周波数を５ＫＨｚより２５ＫＨｚまで２０分割でスキャンします。出力データとして各ステップでの計算値（探針取り付け位置振幅、最大振幅、捩れ、探針の受ける力）がファイルに保存されます。励振周波数成分の振幅の時間変化は、時間と共に一定の値に収束することが判ります。カンチレバーの強制振動周波数を変化させて、カンチレバーの振幅が時間と共に収束する値をプロットしたグラフを見ると、カンチレバーの共鳴周波数を知る事ができます。



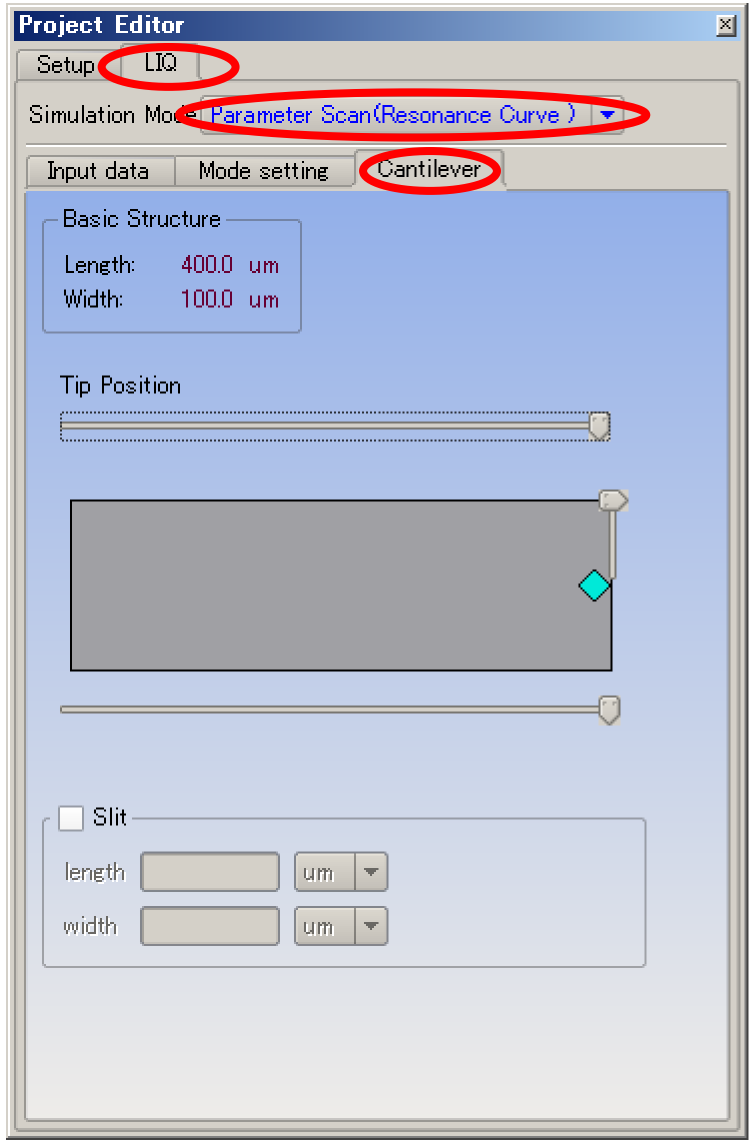
モデルのセットアップ条件

設定条件





設定条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

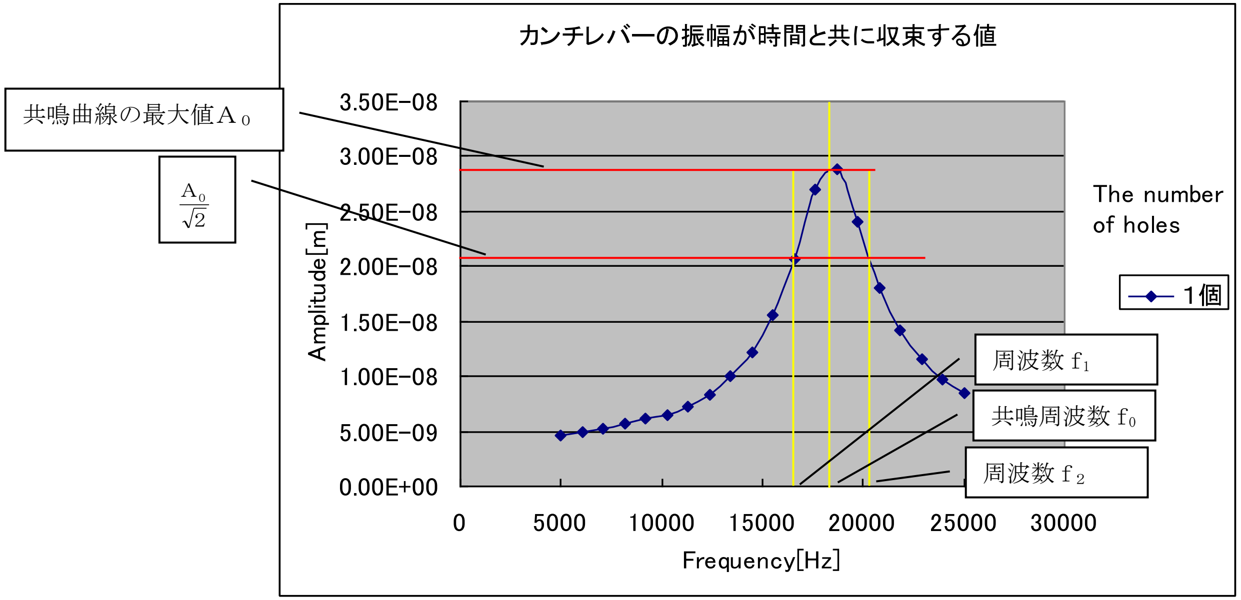
・紹介事例での共鳴周波数の求め方

共鳴曲線の最大値A_0　２．９０［10^{-8}m］、at　f０　＝　１８４００［Ｈｚ］

A_0の$\dfrac{1}{\sqrt{2}}$は２．０５［10^{-8}m］

$A=\dfrac{A_0}{\sqrt{2}}$ となる時の周波数は

f_1＝１６３００［Ｈｚ］、f_2＝２０４００［Ｈｚ］



$$Q値=\frac{\omega_0}{\omega_2-\omega_1}\rightarrow\frac{2\pi\ f_0}{2\pi\ f_2-2\pi\ f_1}\rightarrow\frac{f_0}{f_2-f_1}$$

$$=\frac{18400}{20400-16300}$$

＝４．４９

バー密度	2330	［ｋｇ・m^3］
長さ	400	［μｍ］
幅	100	［μｍ］
厚さ	4	［μｍ］

孔面積比　$\dfrac{192}{702}=$　0.27

バー重さｍ　$3.728\times10^{-10}\times(1-0.27)=2.721\times10^{-10}$［ｋｇ］

$$粘性抵抗力係数\ cR\eta=\frac{m\ \omega_0}{Q}\rightarrow\frac{m(2\ \pi\ f_0)}{Q}\rightarrow 2\pi m\ (f_2-f_1)$$

＝7.010E-06　[kg/s]

ばね定数　$k=m\cdot\omega_0^{\ 2}$

＝3.675[N/m]

孔が１個あるカンチレバーモデルの作成法については、以下を参照してください。

１・「より複雑な形状のカンチレバーを使ったシミュレーション」(SPMシミュレータ・チュートリアルP99)

２・「7.4.a 液体中での、多数の孔を開けたカンチレバーのシミュレーション」(SPMシミュレータ・ガイドブックP93)

３・「（２）カンチレバーに関するパラメータ」(SPMシミュレータ・リファレンスマニュアルP12)

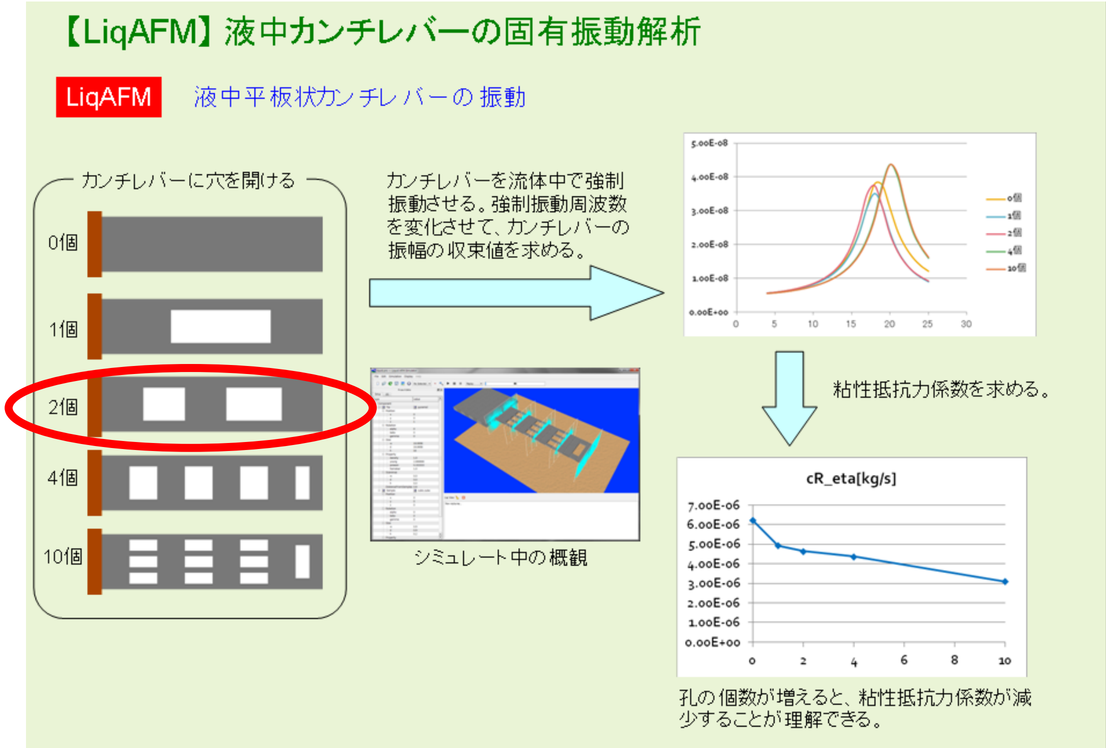
●LiqAFM　様々な形のカンチレバーの非粘弾性試料での共振周波数シミュレーション(孔が２個あるカンチレバーの場合)　**計算事例⑥**

計算モード識別番号：[LiqAFM_Resonance_001]（02）

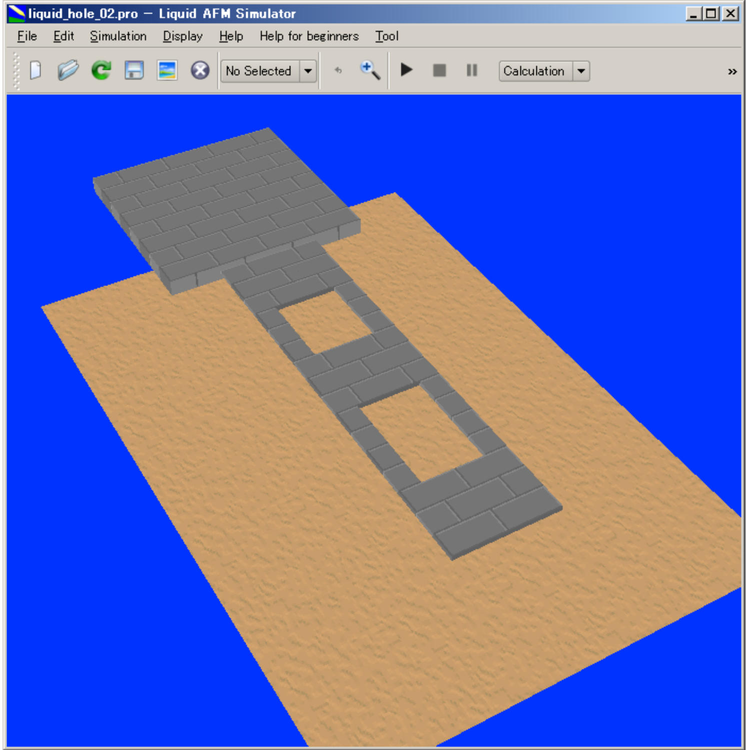
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Resonance/LiqAFM_Resonance.php

分類：LiqAFM　（共振周波数解析機能）、μｍオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ



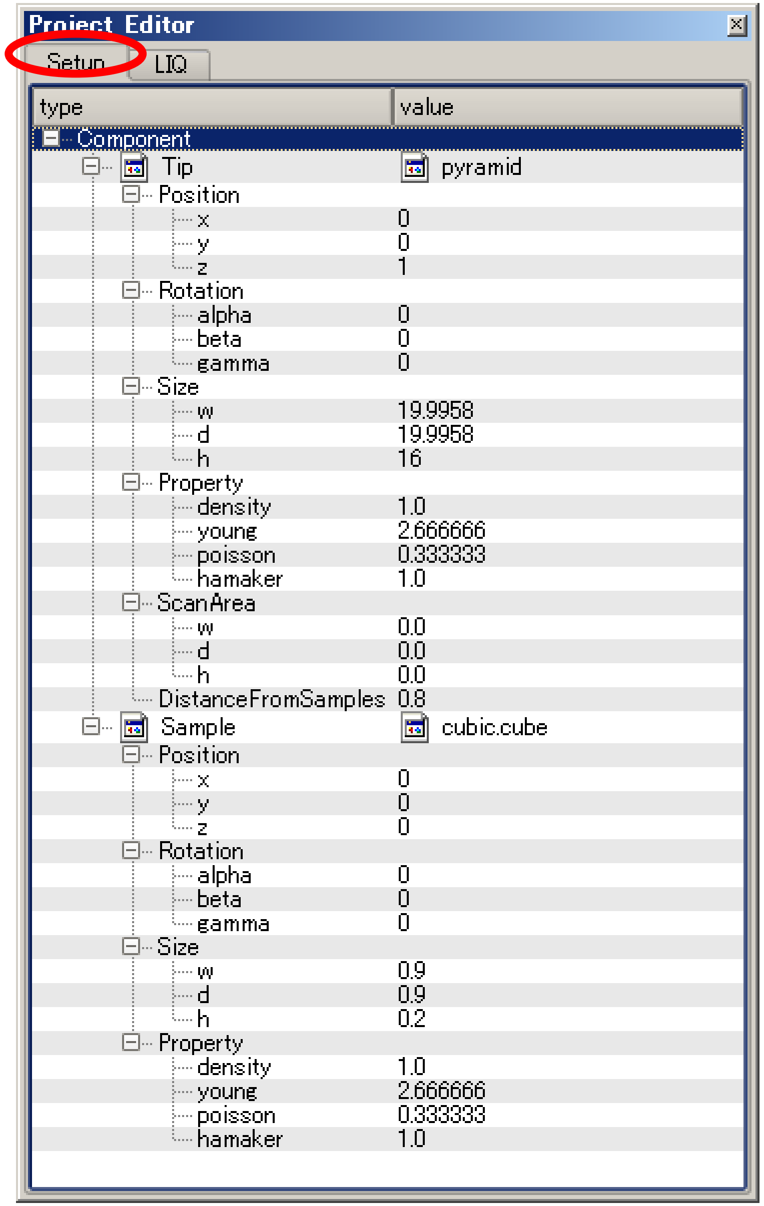
カンチレバーの形状

液体中で平板状のカンチレバーを強制振動させた際の、流体とカンチレバー先端部の動きのシミュレーション計算方法および、強制振動周波数を変化させて、繰り返しシミュレーションを行うことにより、カンチレバーの共鳴周波数を求める方法について解説します。

本事例は、試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定が「ｏｆｆ」の場合の事例です。また、孔が２個あるカンチレバーの場合です。

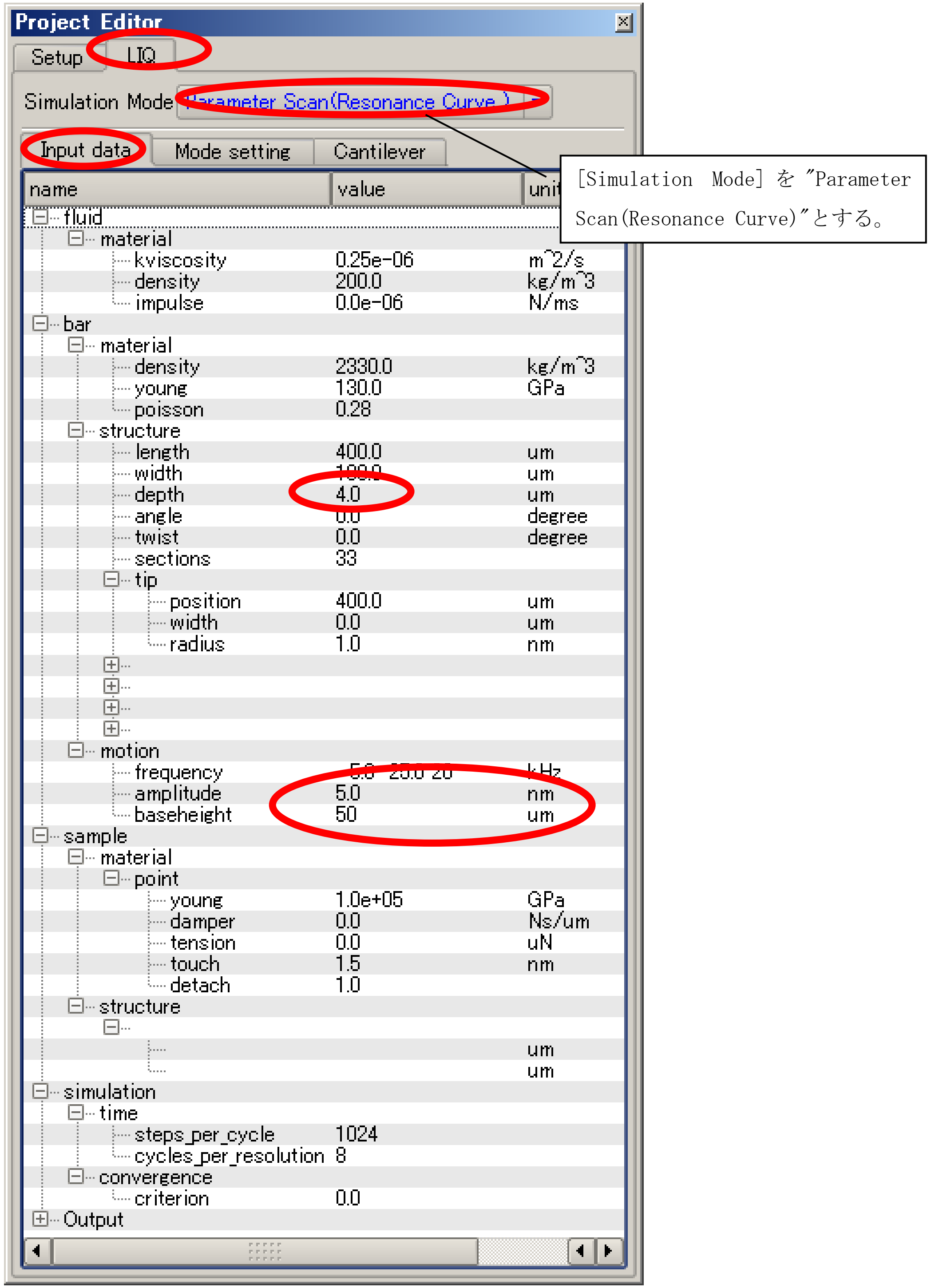
カンチレバーの厚さは４μｍです。

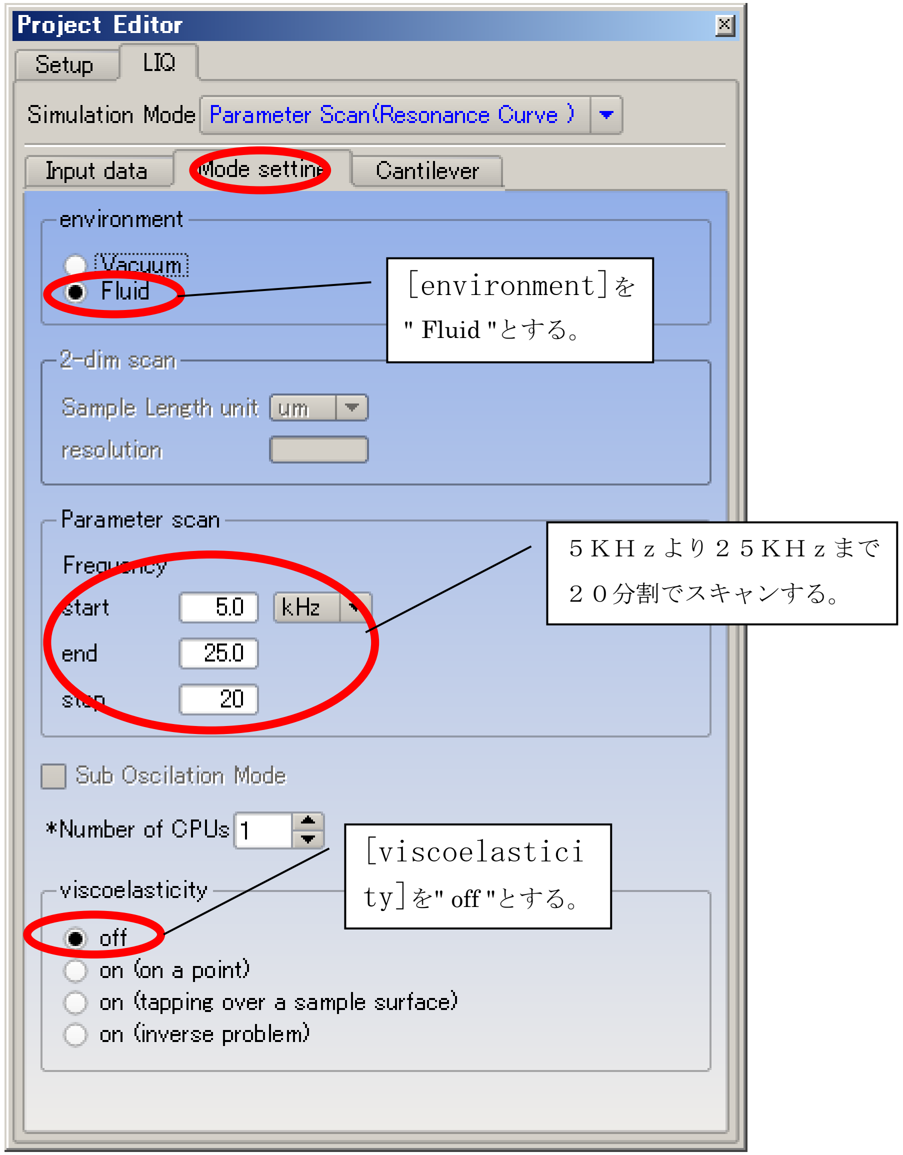
カンチレバーの試行振動周波数を５ＫＨｚより２５ＫＨｚまで２０分割でスキャンします。出力データとして各ステップでの計算値（探針取り付け位置振幅、最大振幅、振れ、探針の受ける力？）がファイルに保存されます。励振周波数成分の振幅の時間変化は、時間と共に一定の値に収束することが判ります。カンチレバーの強制振動周波数を変化させて、カンチレバーの振幅が時間と共に収束する値をプロットしたグラフを見ると、カンチレバーの共鳴周波数を知る事ができます。



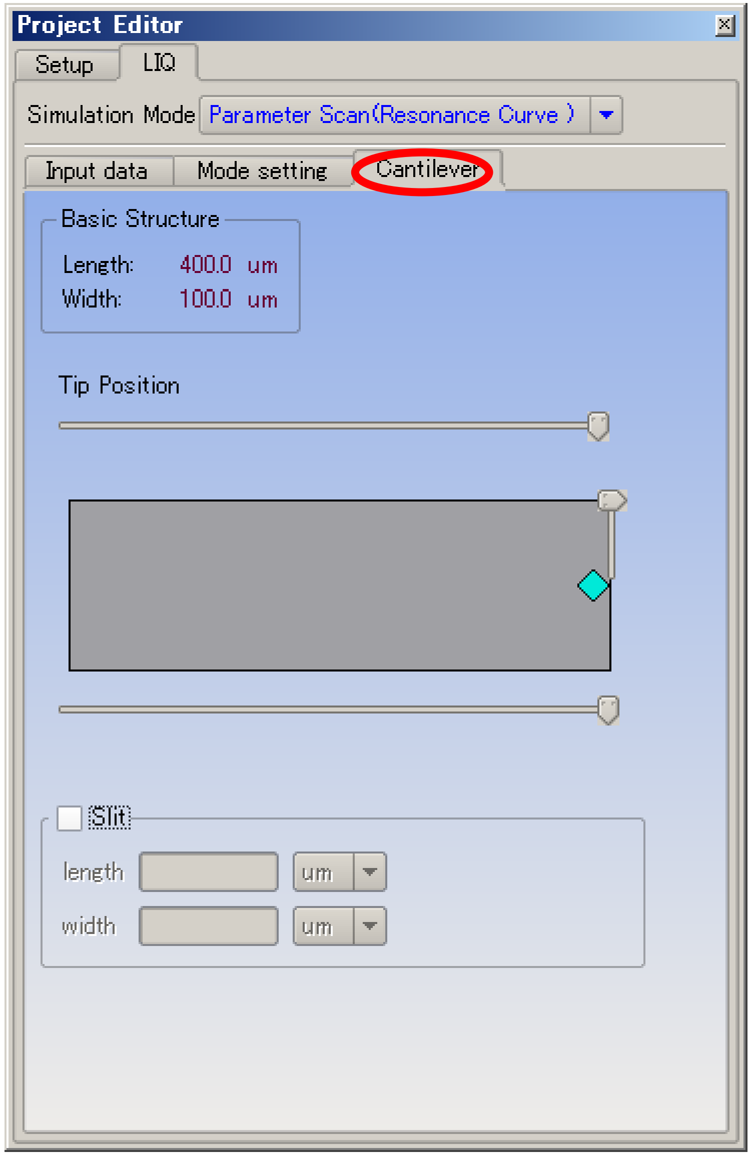
モデルのセットアップ条件

設定条件





設定条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

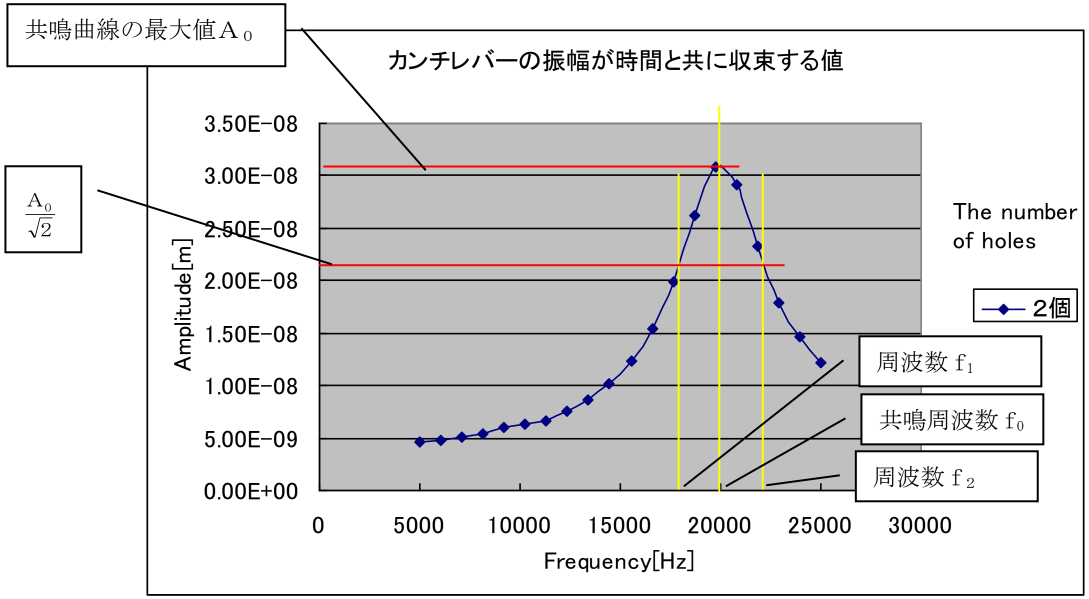
・紹介事例での共鳴周波数の求め方

共鳴曲線の最大値A_0　３．１０［10^{-8}m］、at　f0　＝　２００００［Ｈｚ］

A_0の$\frac{1}{\sqrt{2}}$は２．１９［10^{-8}m］

$A=\frac{A_0}{\sqrt{2}}$となる時の周波数は

f_1＝１７９５０［Ｈｚ］、f_2＝２２０００［Ｈｚ］



$$Q値=\frac{\omega_0}{\omega_2-\omega_1}\rightarrow\frac{2\pi\ f_0}{2\pi\ f_2-2\pi\ f_1}\rightarrow\frac{f_0}{f_2-f_1}$$

$$=\frac{20000}{22000-17950}$$

＝４．９４

バー密度	2330	［ｋｇ・m^3］
長さ	400	［μ m］
幅	100	［μ m］
厚さ	4	［μ m］

孔面積比$\frac{192}{702}=$　=0.27

バー重さm　$3.728\times10^{-10}\times(1-0.27)=2.721\times10^{-10}$［kg］

粘性抵抗力係数c　$cR\eta=\frac{m\ \omega_0}{Q}\rightarrow\frac{m(2\ \pi\ f_0)}{Q}\rightarrow 2\pi m\ (f_2-f_1)$

＝6.925E-06　［kg/s］

ばね定数　$k=m\cdot\omega_0^{\ 2}$

＝4.342［N/m］

孔が２個あるカンチレバーモデルの作成法については、以下を参照してください。

１・「より複雑な形状のカンチレバーを使ったシミュレーション」（SPMシミュレータ・チュートリアルP99）

２・「7.4.a 液体中での、多数の孔を開けたカンチレバーのシミュレーション」（SPMシミュレータ・ガイドブックP93）

３・「（２）カンチレバーに関するパラメータ」（SPMシミュレータ・リファレンスマニュアルP12）

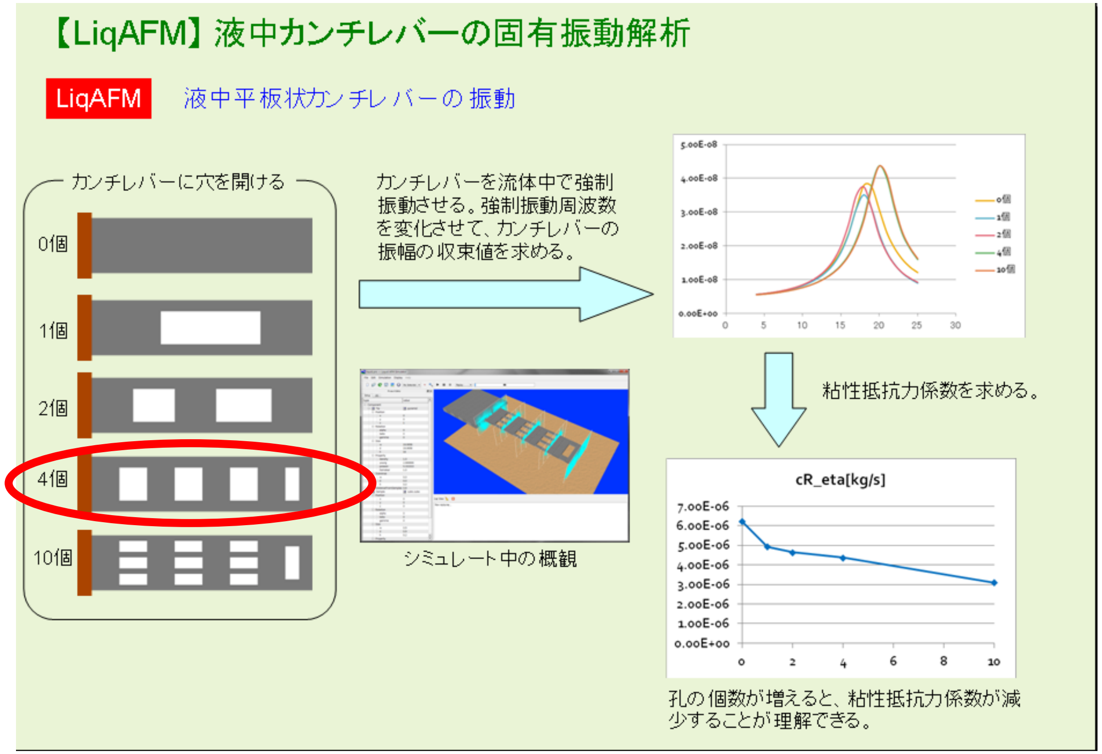
●LiqAFM　様々な形のカンチレバーの非粘弾性試料での共振周波数シミュレーション(孔が４個あるカンチレバーの場合)　**計算事例⑦**

計算モード識別番号：[LiqAFM_Resonance_001]（04）

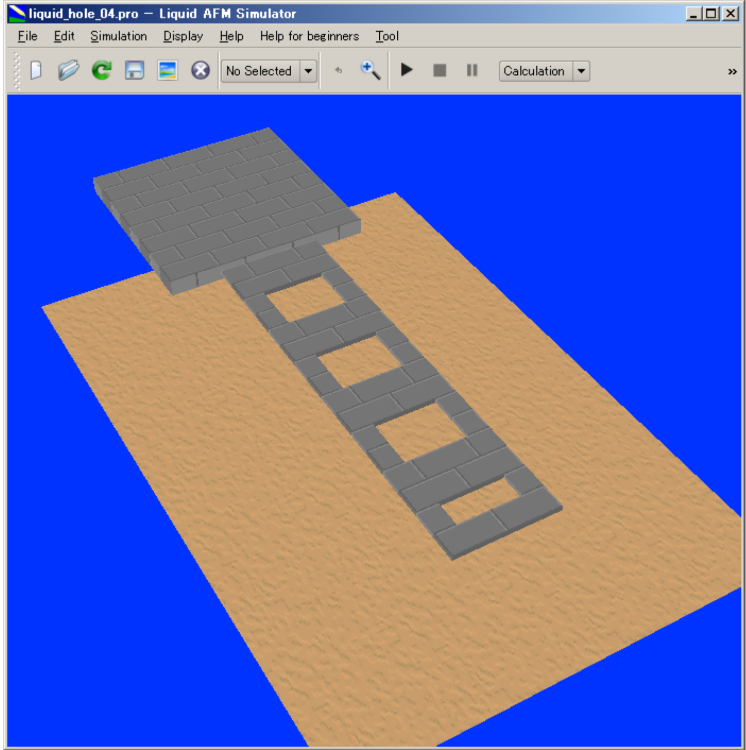
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Resonance/LiqAFM_Resonance.php

分類：LiqAFM　（共振周波数解析機能）、μｍオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ



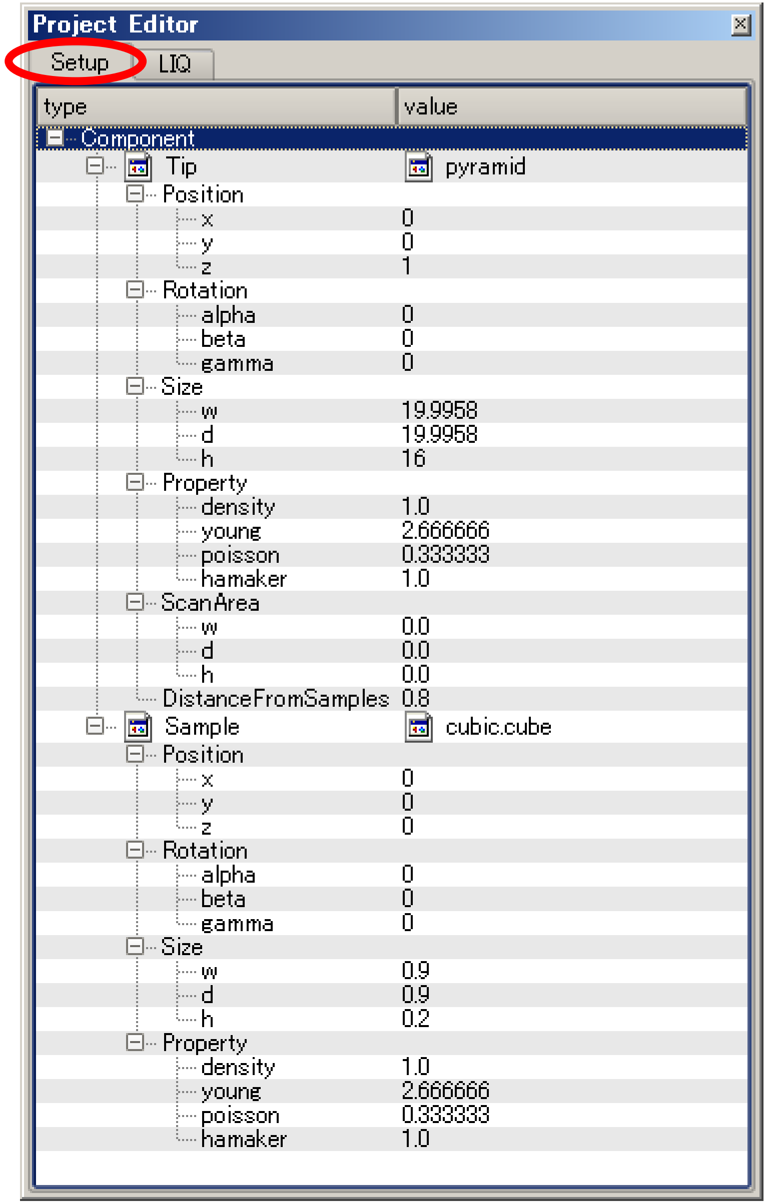
カンチレバーの形状

液体中で平板状のカンチレバーを強制振動させた際の、流体とカンチレバー先端部の動きのシミュレーション計算方法および、強制振動周波数を変化させて、繰り返しシミュレーションを行うことにより、カンチレバーの共鳴周波数を求める方法について解説します。

本事例は、試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定が「ｏｆｆ」の場合の事例です。また、孔が４個あるカンチレバーの場合です。

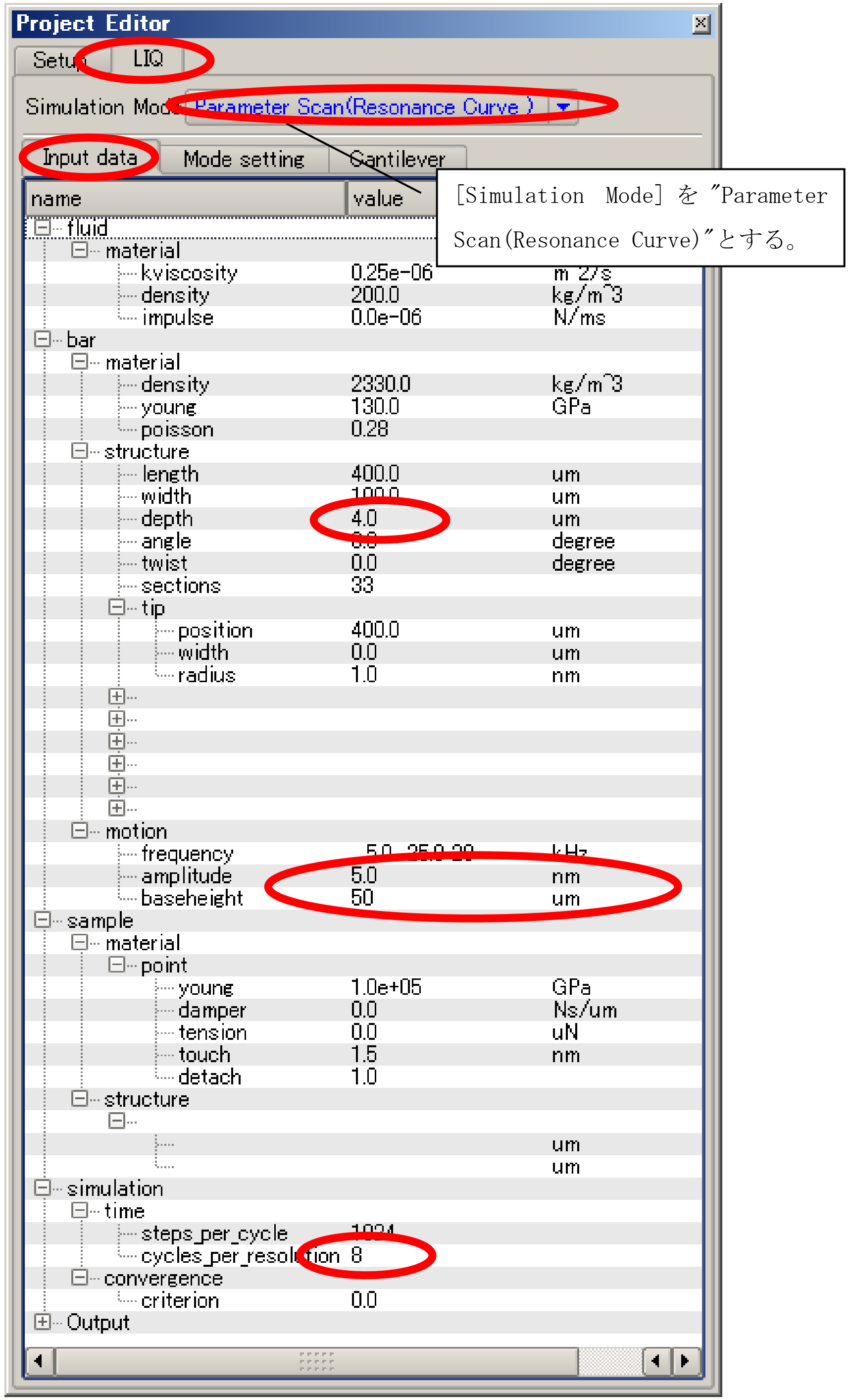
カンチレバーの厚さは４μｍです。

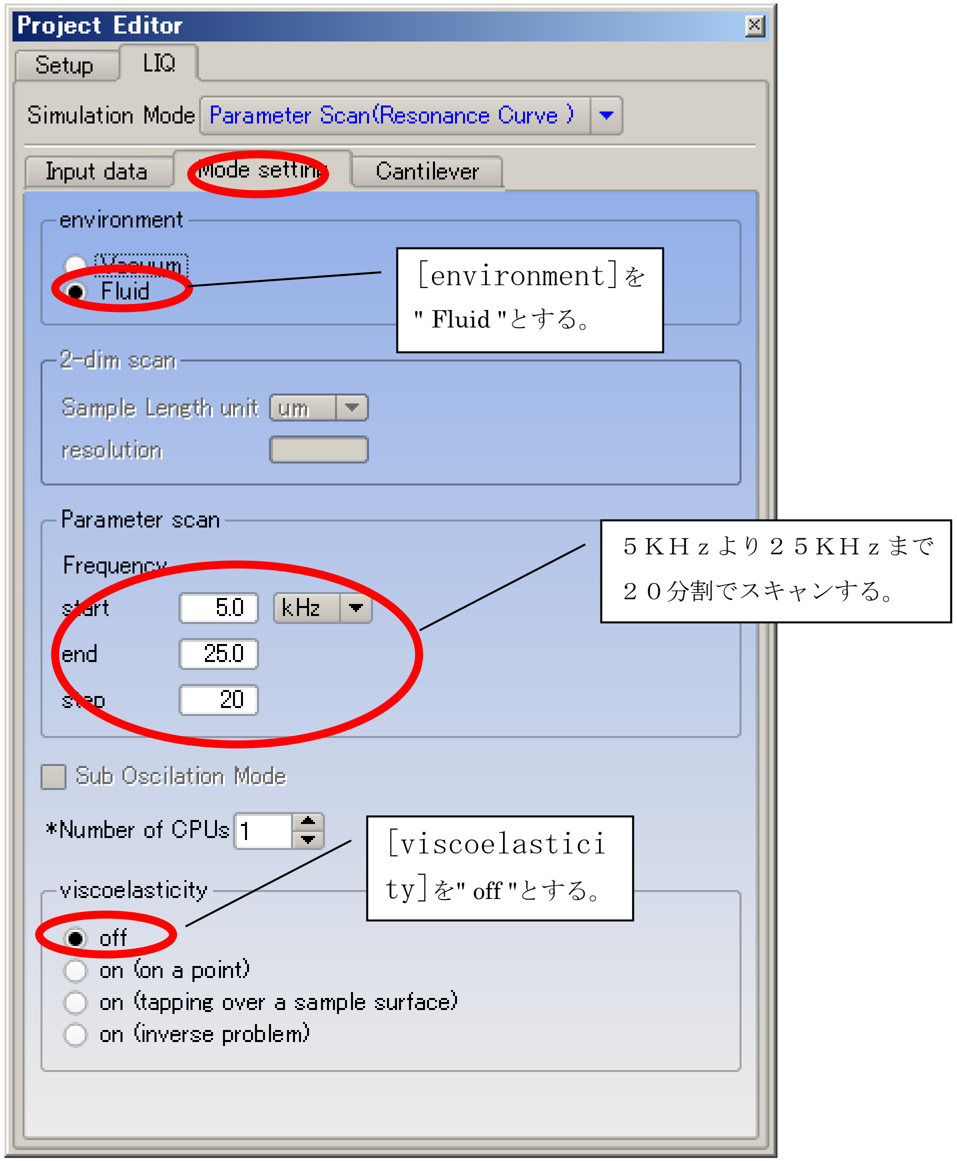
カンチレバーの試行振動周波数を５ＫＨｚより２５ＫＨｚまで２０分割でスキャンします。出力データとして各ステップでの計算値（探針取り付け位置振幅、最大振幅、振れ、探針の受ける力？）がファイルに保存されます。励振周波数成分の振幅の時間変化は、時間と共に一定の値に収束することが判ります。カンチレバーの強制振動周波数を変化させて、カンチレバーの振幅が時間と共に収束する値をプロットしたグラフを見ると、カンチレバーの共鳴周波数を知る事ができます。



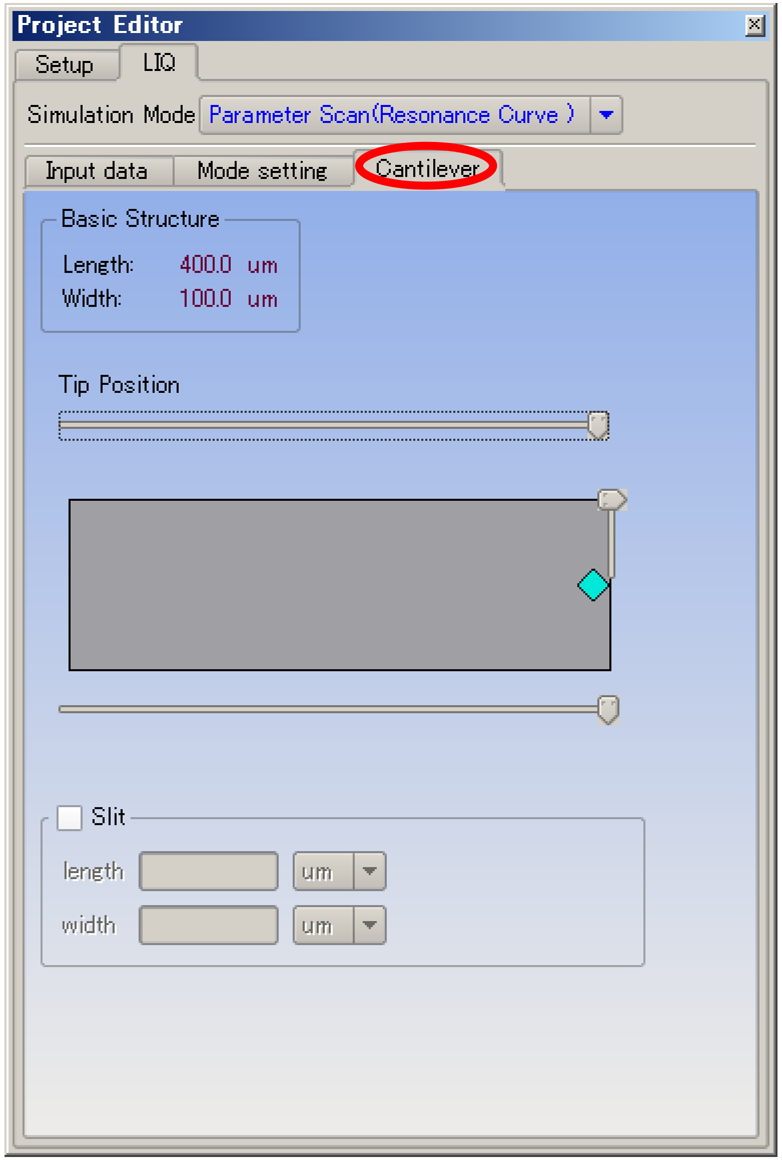
モデルのセットアップ条件

設定条件





設定条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

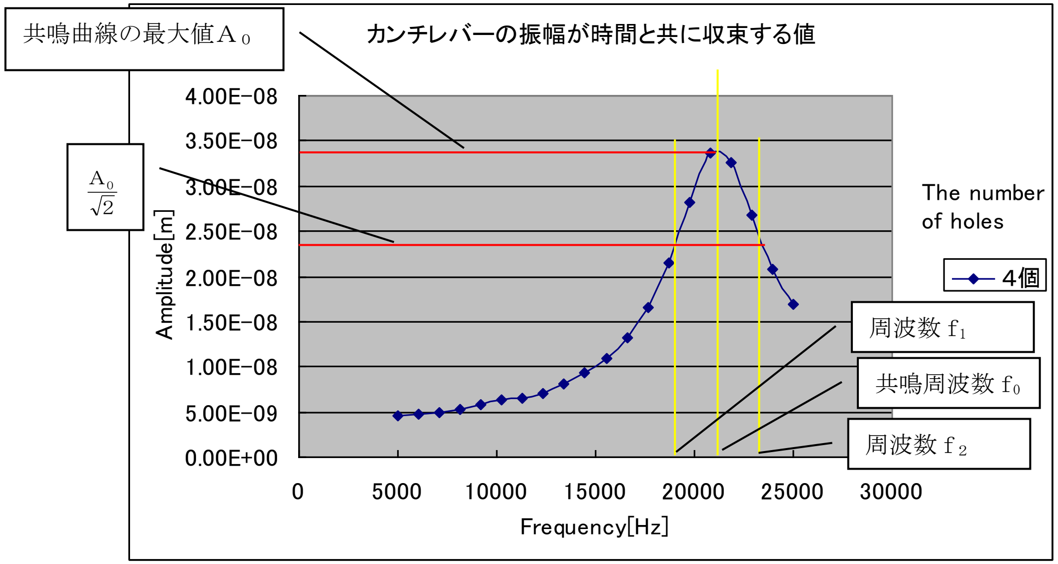
・紹介事例での共鳴周波数の求め方

共鳴曲線の最大値A_0　３．３６［10^{-8}m］、at　f０　＝　２１０００［Ｈｚ］

A_0の$\dfrac{1}{\sqrt{2}}$は２．３８［10^{-8}m］

$A=\dfrac{A_0}{\sqrt{2}}$ となる時の周波数は

f_1＝１９０００[Ｈｚ]、f_2＝２３０００[Ｈｚ]



$$Q値=\frac{\omega_0}{\omega_2-\omega_1}\ \rightarrow\ \frac{2\pi\ f_0}{2\pi\ f_2-2\pi\ f_1}\ \rightarrow\ \frac{f_0}{f_2-f_1}$$

$$=\frac{21000}{23000-19000}$$

＝５．２５

バー密度	2330	［ｋｇ・m^3］
長さ	400	［μｍ］
幅	100	［μｍ］
厚さ	4	［μｍ］

孔面積比$\dfrac{192}{702}=$　0.27

バー重さm　$3.728\times10^{-10}\times(1-0.27)=2.721\times10^{-10}$[kg]

粘性抵抗力係数$cR\eta=\dfrac{m\ \omega_0}{Q}\ \rightarrow\ \dfrac{m(2\ \pi\ f_0)}{Q}\ \rightarrow$　２πｍ（f_2-f_1）

＝6.84E-06　[kg/s]

ばね定数　$k=m\cdot\omega_0^{\ 2}$

＝4.787［N/m]

孔が４個あるカンチレバーモデルの作成法については、以下を参照してください。

１・「より複雑な形状のカンチレバーを使ったシミュレーション」(SPMシミュレータ・チュートリアルP99)

２・「7.4.a 液体中での、多数の孔を開けたカンチレバーのシミュレーション」(SPMシミュレータ・ガイドブックP93)

３・「(２) カンチレバーに関するパラメータ」(SPMシミュレータ・リファレンスマニュアルP12)

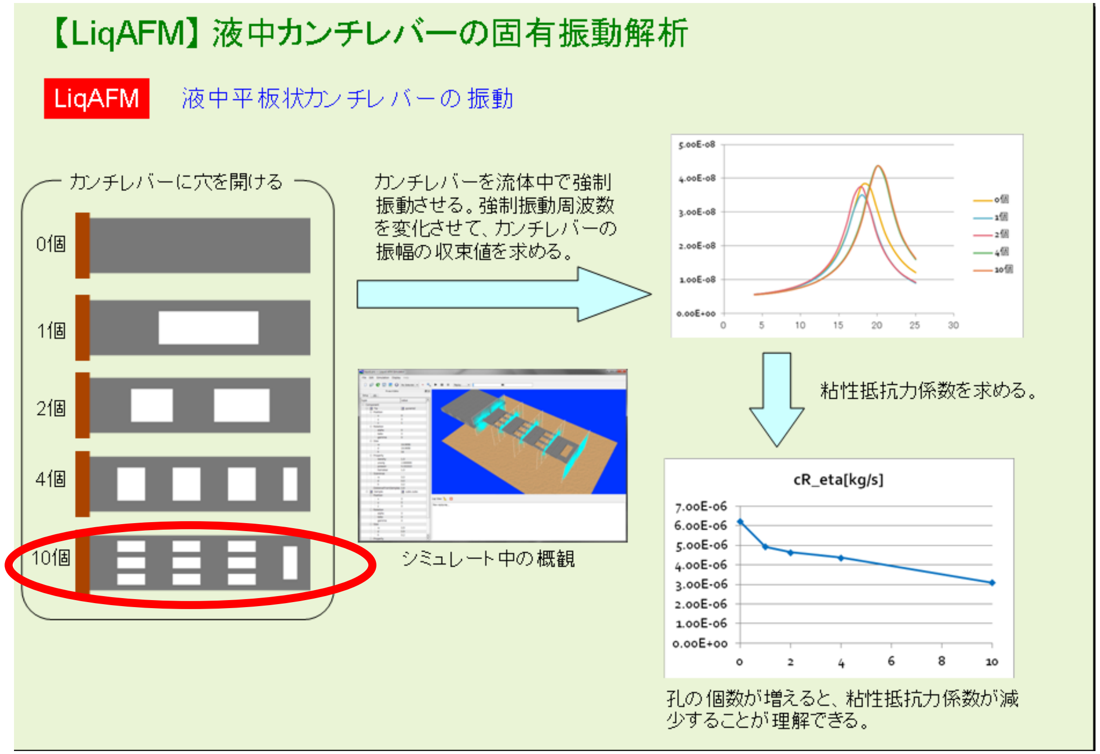
●LiqAFM　様々な形のカンチレバーの非粘弾性試料での共振周波数シミュレーション(孔が１０個あるカンチレバーの場合)　**計算事例⑧**

計算モード識別番号：[LiqAFM_Resonance_001]（10)

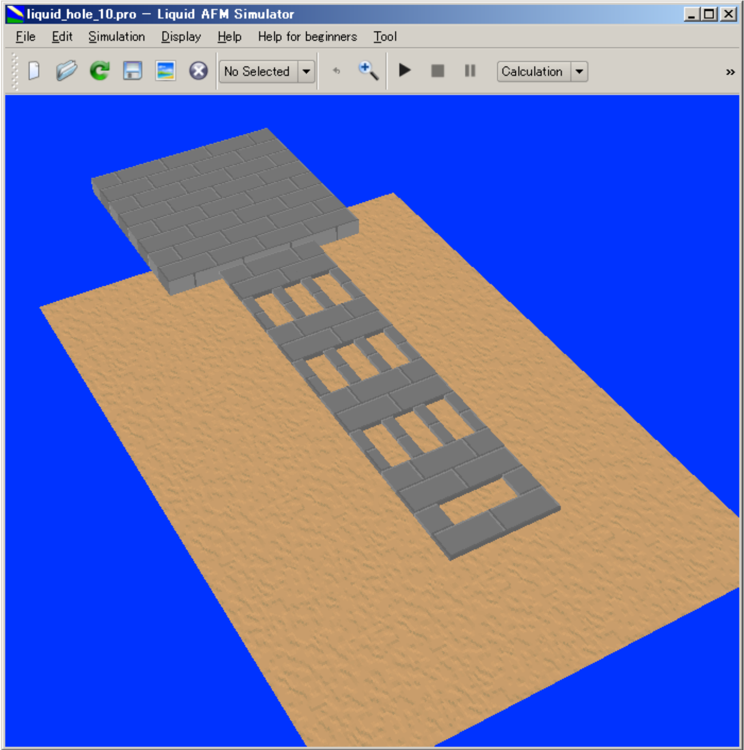
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Resonance/LiqAFM_Resonance.php

分類：LiqAFM （共振周波数解析機能）、μｍオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ



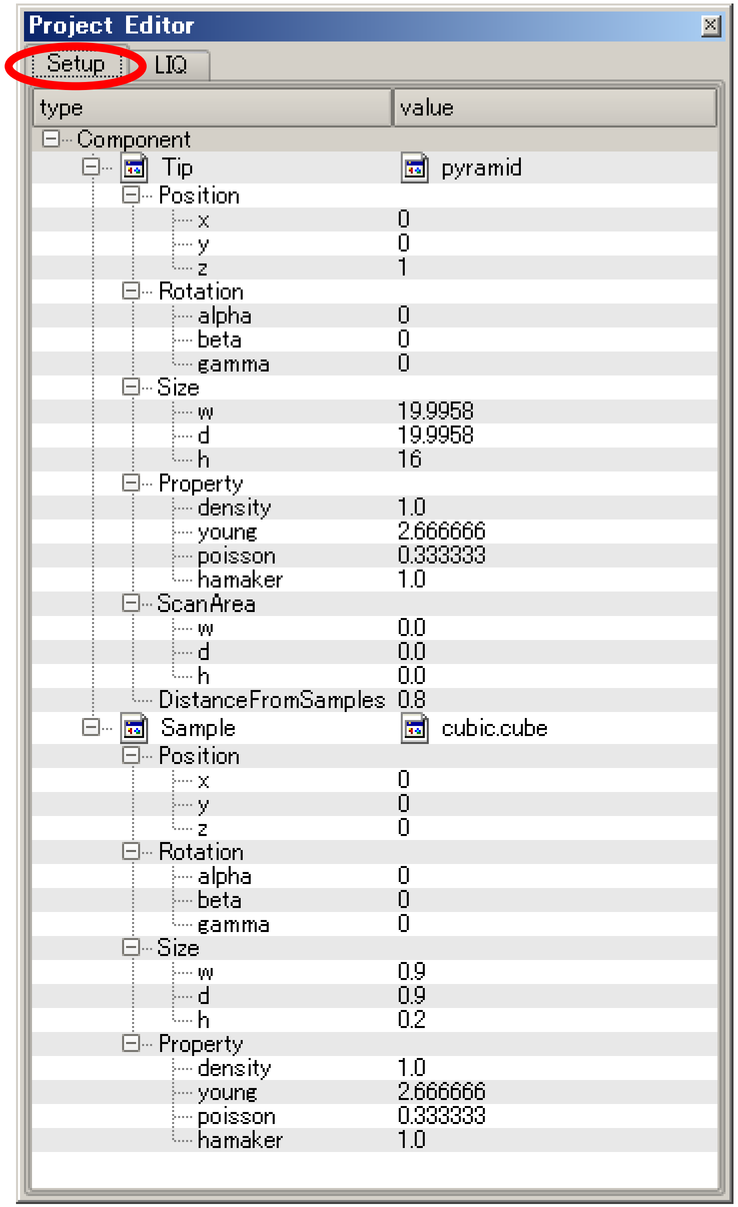
カンチレバーの形状

液体中で平板状のカンチレバーを強制振動させた際の、流体とカンチレバー先端部の動きのシミュレーション計算方法および、強制振動周波数を変化させて、繰り返しシミュレーションを行うことにより、カンチレバーの共鳴周波数を求める方法について解説します。

本事例は、試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定が「ｏｆｆ」の場合の事例です。また、孔が１０個あるカンチレバーの場合です。

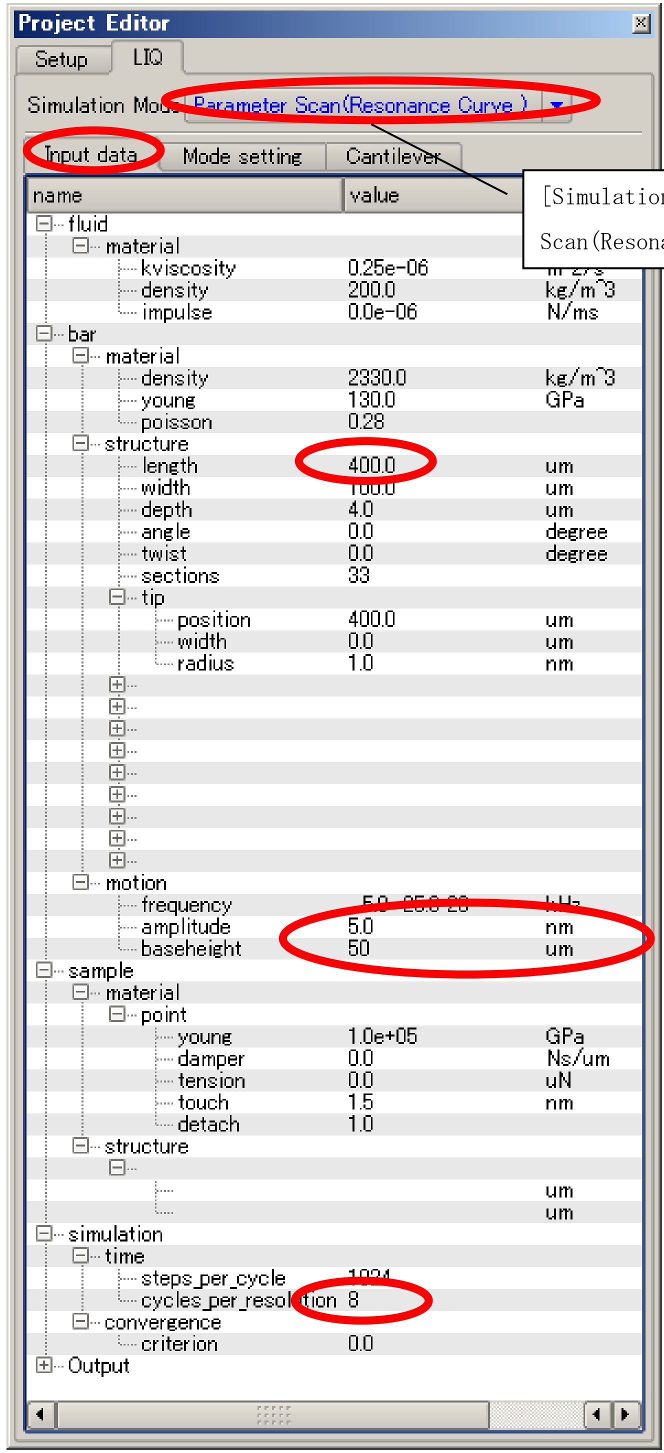
カンチレバーの厚さは４μｍです。

カンチレバーの試行振動周波数を５ＫＨｚより２５ＫＨｚまで２０分割でスキャンします。出力データとして各ステップでの計算値（探針取り付け位置振幅、最大振幅、振れ、探針の受ける力）がファイルに保存されます。励振周波数成分の振幅の時間変化は、時間と共に一定の値に収束することが判ります。カンチレバーの強制振動周波数を変化させて、カンチレバーの振幅が時間と共に収束する値をプロットしたグラフを見ると、カンチレバーの共鳴周波数を知る事ができます。

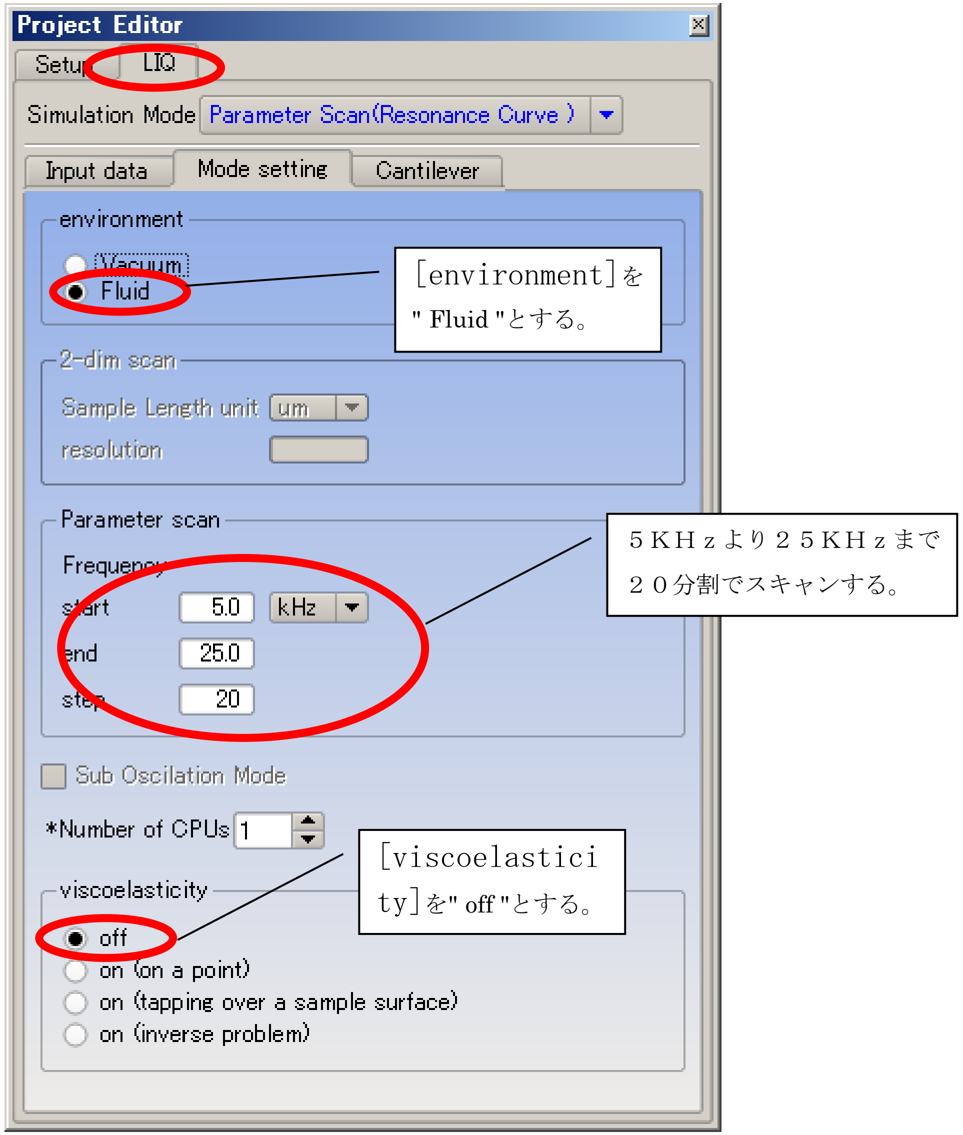


モデルのセットアップ条件

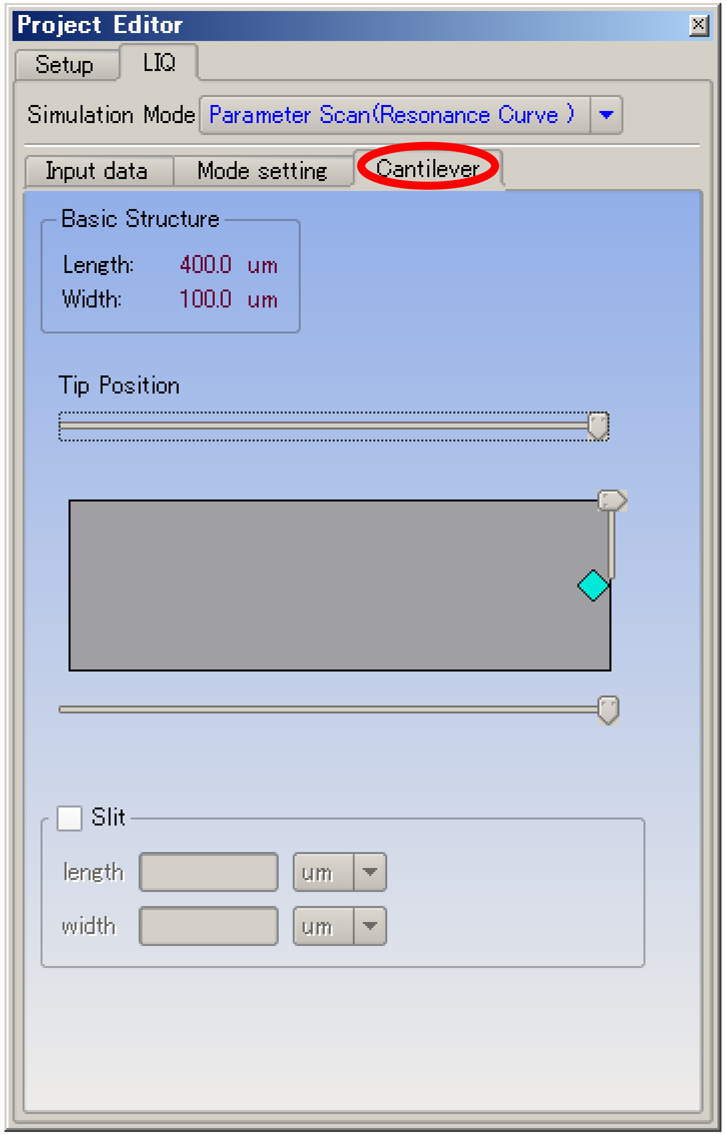
設定条件



[Simulation Mode] を "Parameter Scan(Resonance Curve)"とする。



設定条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

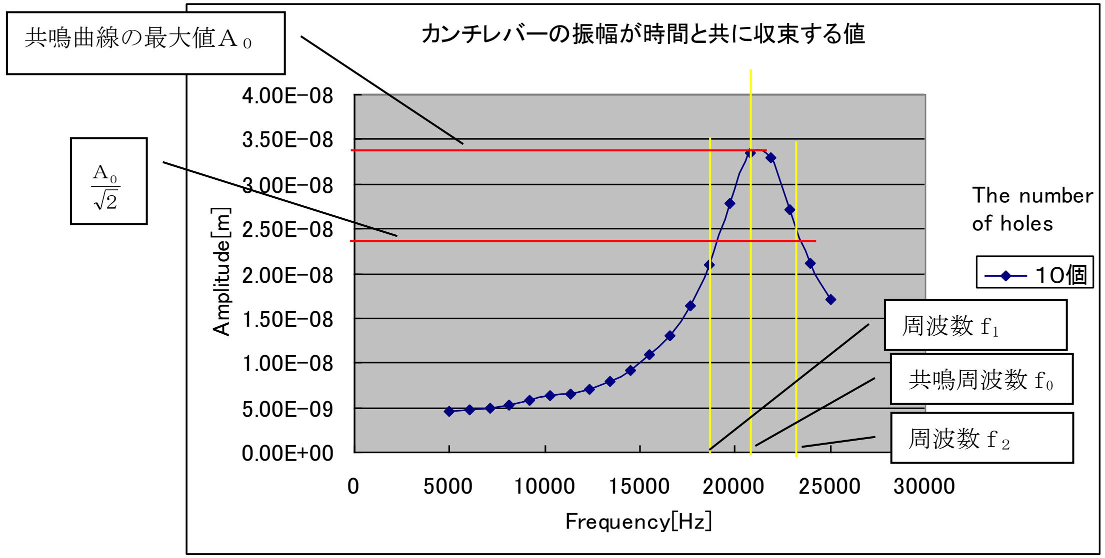
・紹介事例での共鳴周波数の求め方

共鳴曲線の最大値A_0　３．４０［10^{-8}m］、at　f0　＝　２１１００［Ｈｚ］

A_0の$\dfrac{1}{\sqrt{2}}$は２．４０［10^{-8}m］

$A=\dfrac{A_0}{\sqrt{2}}$となる時の周波数は

f_1＝１９１００[Ｈｚ]、f_2＝２３１００[Ｈｚ]



$$Q値=\frac{\omega_0}{\omega_2-\omega_1}\ \rightarrow\ \frac{2\pi\ f_0}{2\pi\ f_2-2\pi\ f_1}\ \rightarrow\ \frac{f_0}{f_2-f_1}$$

$$=\frac{21100}{23100-19100}$$

$$=5.275$$

バー密度	2330	［ｋｇ・m^3］
長さ	400	［μｍ］
幅	100	［μｍ］
厚さ	4	［μｍ］

孔面積比$\dfrac{213}{702}=$　0.303

バー重さｍ　$3.728\times10^{-10}\times(1-0.303)=2.64\times10^{-10}$［kg］

$$粘性抵抗力係数\ cR\eta=\frac{m\ \omega_0}{Q}\ \rightarrow\ \frac{m(2\ \pi\ f_0)}{Q}\ \rightarrow\ 2\ \pi\ m\ (f_2-f_1)$$

＝6.635E-06　[kg/s]

ばね定数　$k=m\cdot\omega_0^{\ 2}$

＝4.640　[N/m]

孔が１０個あるカンチレバーモデルの作成法については、以下を参照してください。

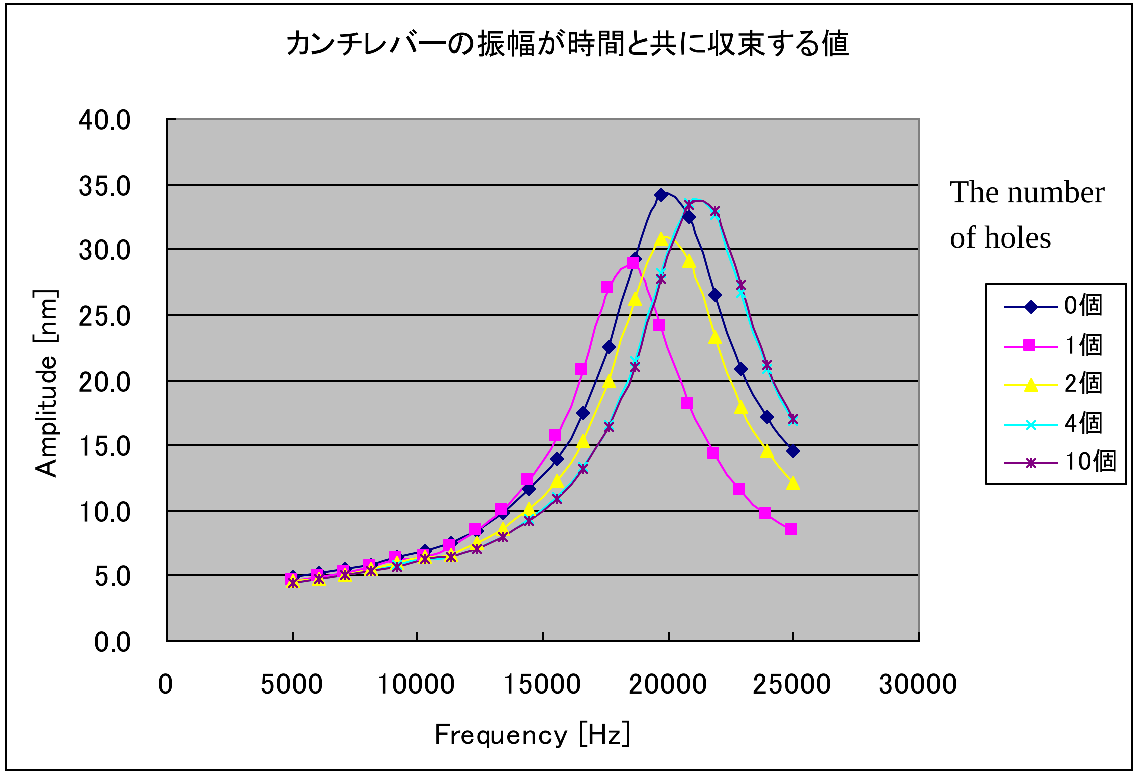
１・「より複雑な形状のカンチレバーを使ったシミュレーション」(SPMシミュレータ・チュートリアルP99)

２・「7.4.a 液体中での、多数の孔を開けたカンチレバーのシミュレーション」(SPMシミュレータ・ガイドブックP93)

３・「（２）カンチレバーに関するパラメータ」(SPMシミュレータ・リファレンスマニュアルP12)

以下に、五種類のカンチレバーに対して、カンチレバーの強制振動周波数を変化させて、カンチレバーの振幅が時間と共に収束する値をプロットしたグラフを示します。グラフから共振角振動数ω_0およびQ 値を読み取り、粘性抵抗力係数cRη を求めることになります。

孔の個数０のカンチレバーの長さ×幅である面積を１.０とすると
孔の個数１より４の、孔以外の面積は、0.726 となり、
孔の個数１０の、孔以外の面積は、0.697 となるとします。
（典型例の図面より導出）
各カンチレバーの質量は、孔の個数０のカンチレバーとの
面積比により計算されます。
液体中のばねに取り付けられた質点の運動方程式より



$$\text{粘性抵抗力係数} \quad cR\eta = \frac{m\,\omega_0}{Q}$$

$$\text{ばね定数} \quad k = m_0^2$$

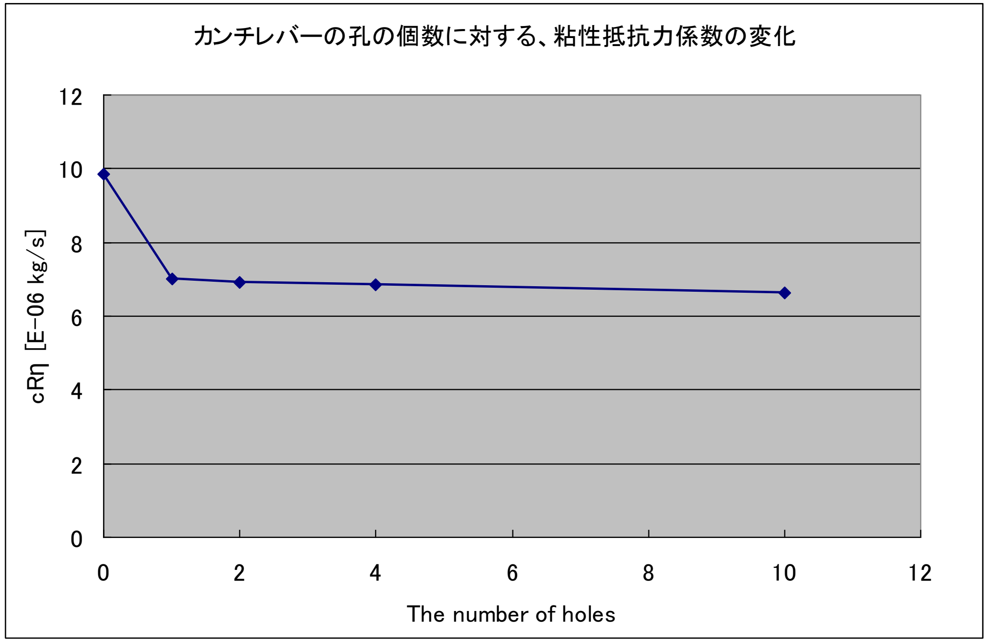
が導かれます。
となるので、粘性抵抗力係数もばね定数も
質量m、Q値と共振角振動数ω_0で決まる事がわかります。

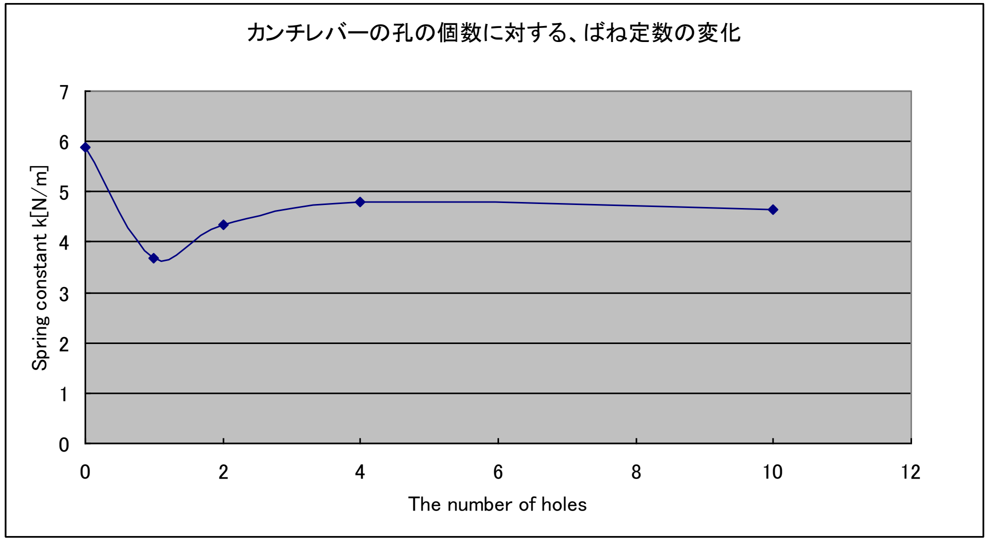
計算例（グラフの読み取り精度により結果数値が異なる場合があります）

孔の個数	個	0	1	2	4	10
共振周波数 f_0	Hz	20000	18400	20000	21000	21100
共振角振動数ω_0	rad/s	125660	115607	125660	131943	132571
Q 値	------	4.76	4.49	4.94	5.25	5.275
質量 m	10^{-10}[kg]	3.728	2.721	2.721	2.721	2.64
ばね定数　k	[N/m]	5.890	3.675	4.342	4.787	4.640
粘性抵抗力係数　cRη	10^{-6} [kg/s]	9.837	7.010	6.925	6.840	6.635

但し、$\omega=2\pi f$ 、cRη は粘性抵抗力係数です。
Q値は、「Quality Factor」といって、共振周波数における信号の「鋭さ」として表しています。

カンチレバーの孔の個数に対する、粘性抵抗力係数の変化（右上）及び、カンチレバーの孔の個数に対する、ばね定数の変化（右下）のグラフを示します。
孔の個数が増えると、粘性抵抗力係数が減少する傾向にあるが、ばね定数の変化は、孔の個数に因らないことがわかります。





4．LiqAFM(液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ) Point oscillation（粘弾性接触解析機能）

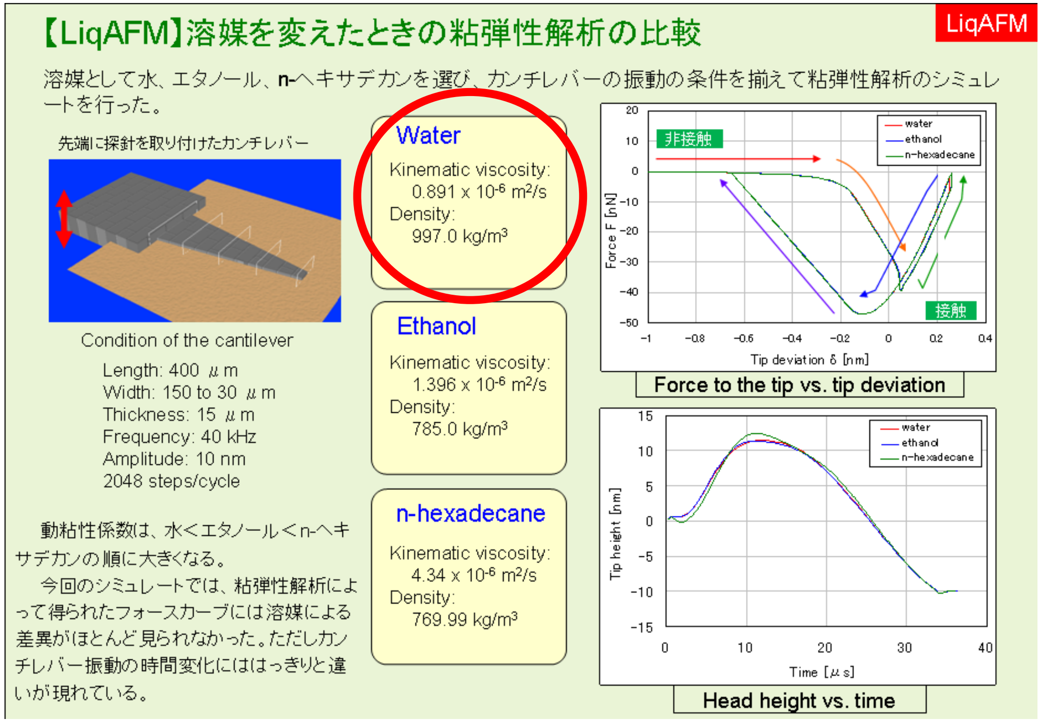
●LiqAFM　溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較（水）　計算事例⑨

計算モード識別番号：[LiqAFM_Viscoelastic_002]（a）

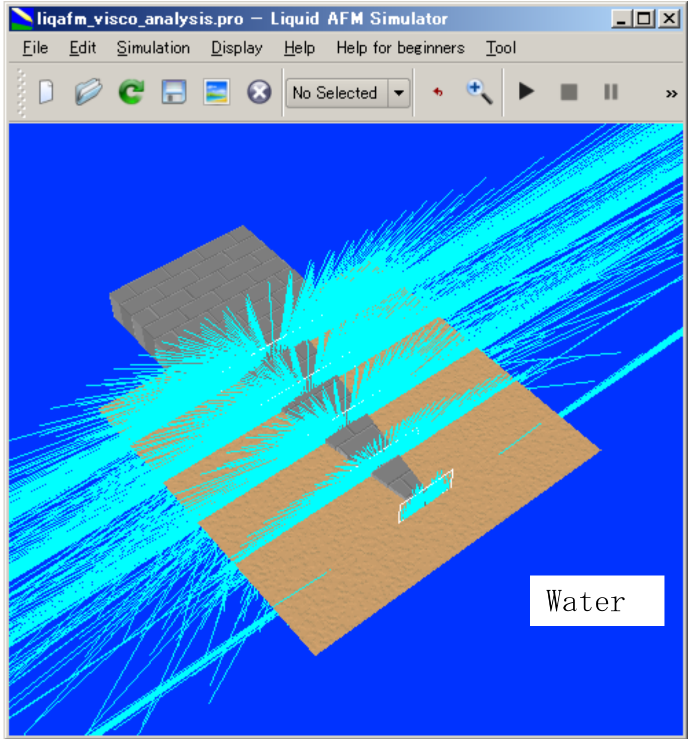
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Viscoelastic/LiqAFM_Viscoelastic.php

分類：LiqAFM　（粘弾性接触解析機能）、μmオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ



カンチレバーの形状と流体速度の可視化

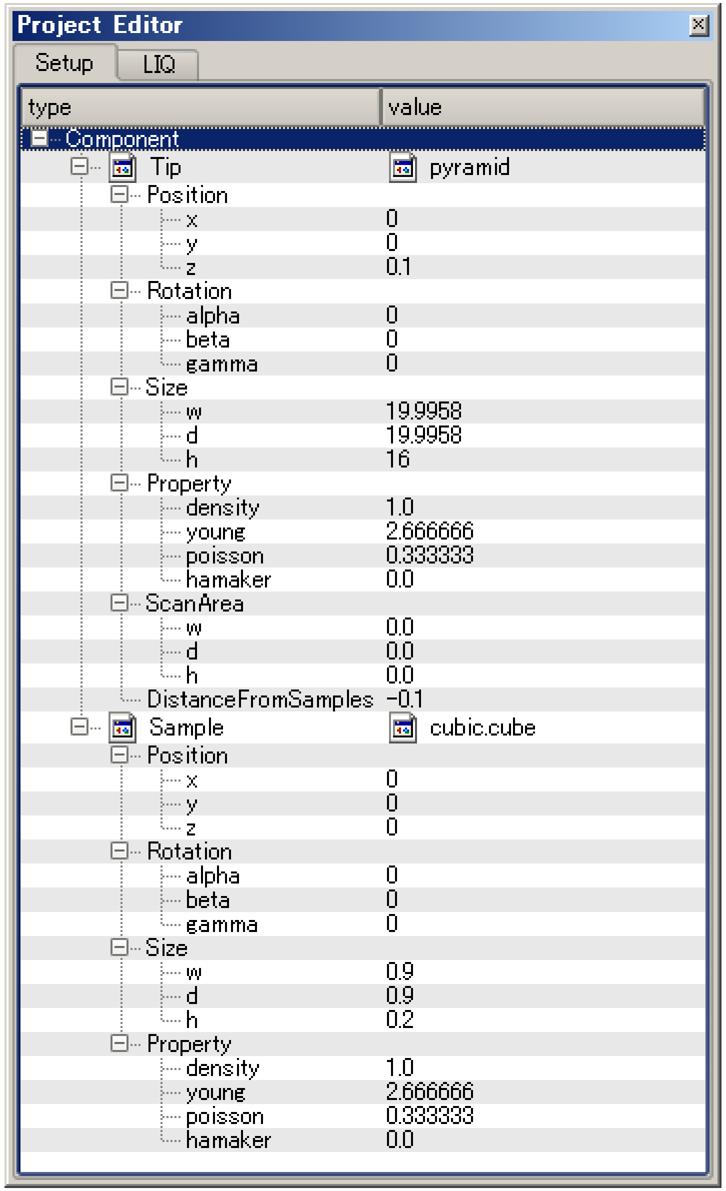
本事例では、溶媒がフォースカーブ等にどのような影響を与えるかをシミュレートします。

本事例は溶媒が水（Water）の場合の事例です。

試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定を「on」として下さい。

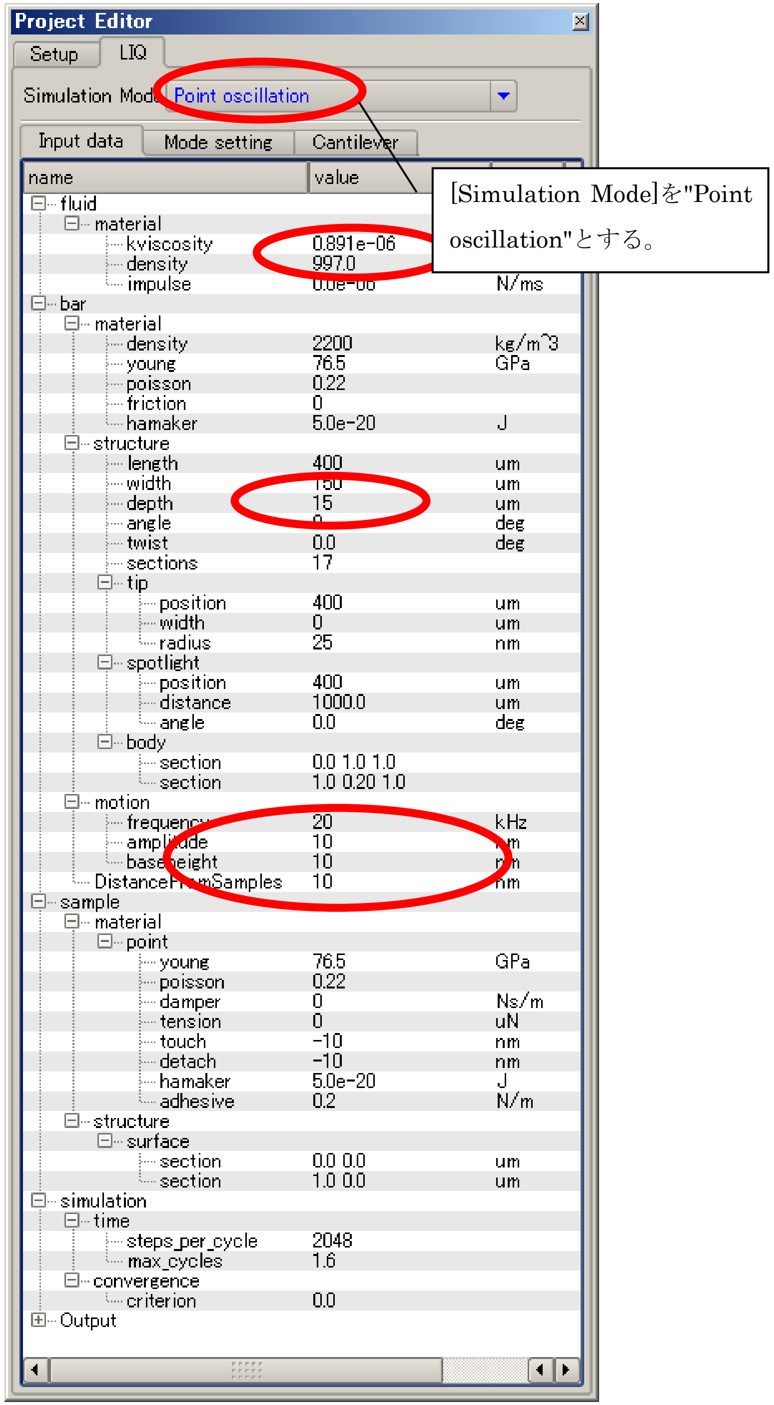
カンチレバーのばね定数は小さいですが、厚さは15μmです。

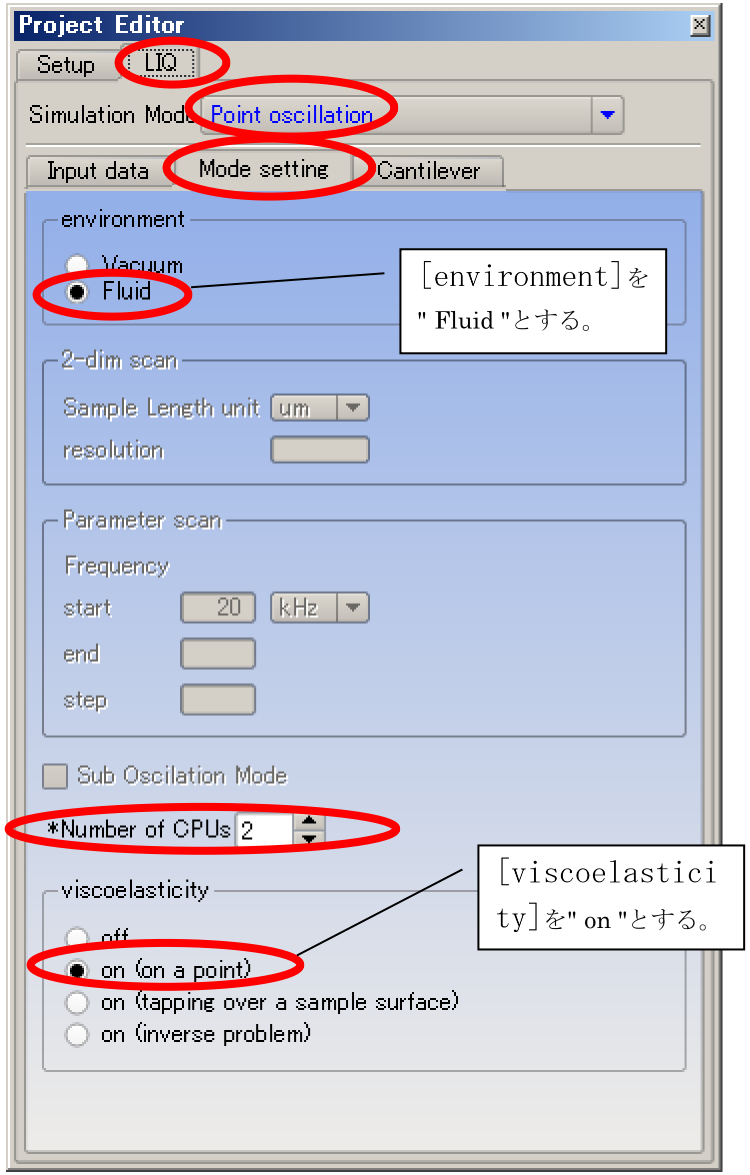
カンチレバーの加振周波数は20KHｚです。



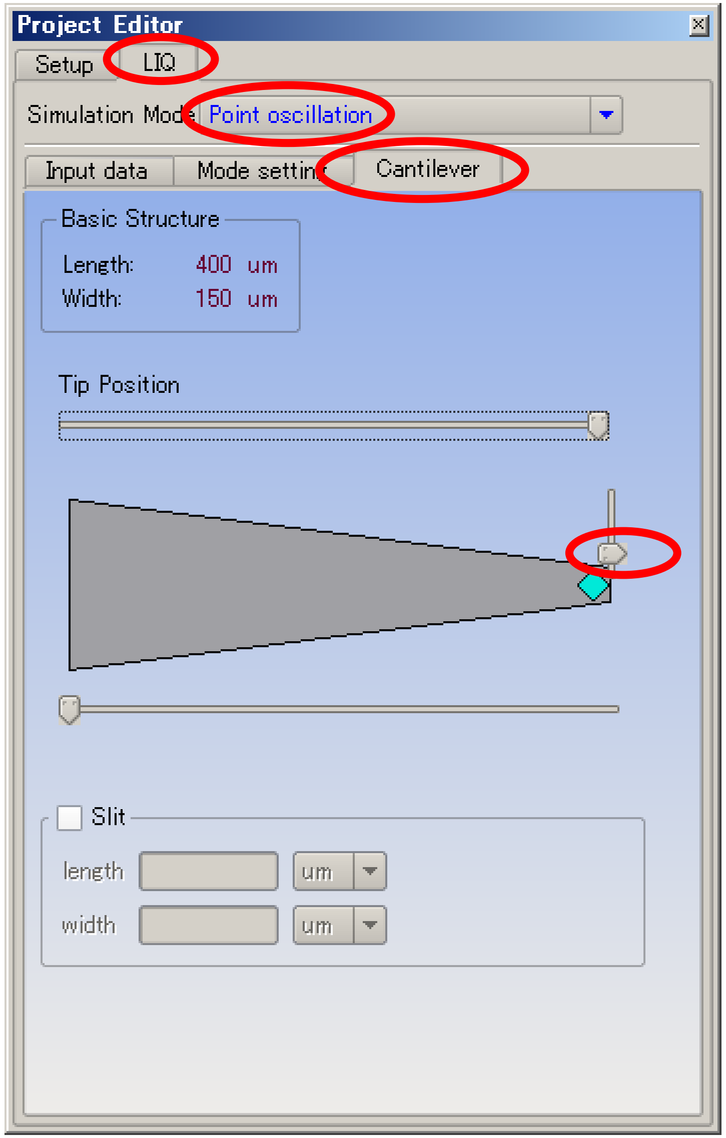
モデルのセットアップ条件

設定条件





設定条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

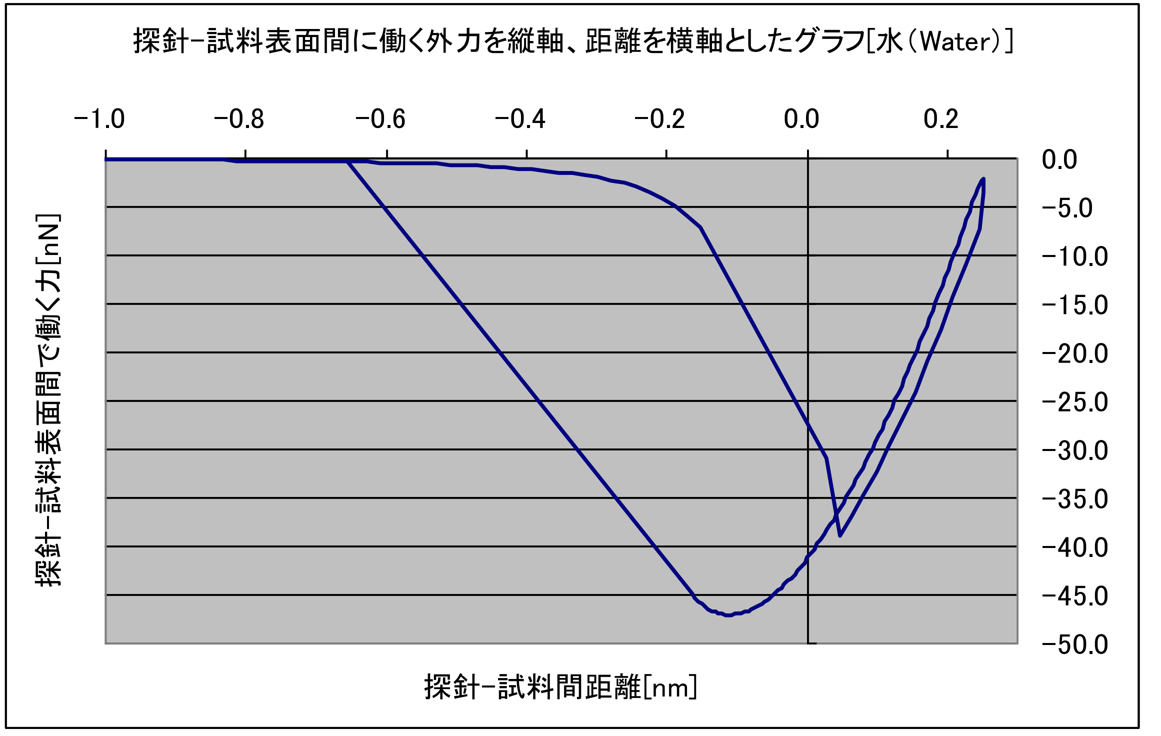
カンチレバーのばね定数が小さい場合、カンチレバーの物性値として、密度を2200.0[kg/m^3]、ヤング率を76.5[GPa]、ポアソン比を0.22(無次元量)、ハマカー定数を5.0E-20[J]に設定しています。

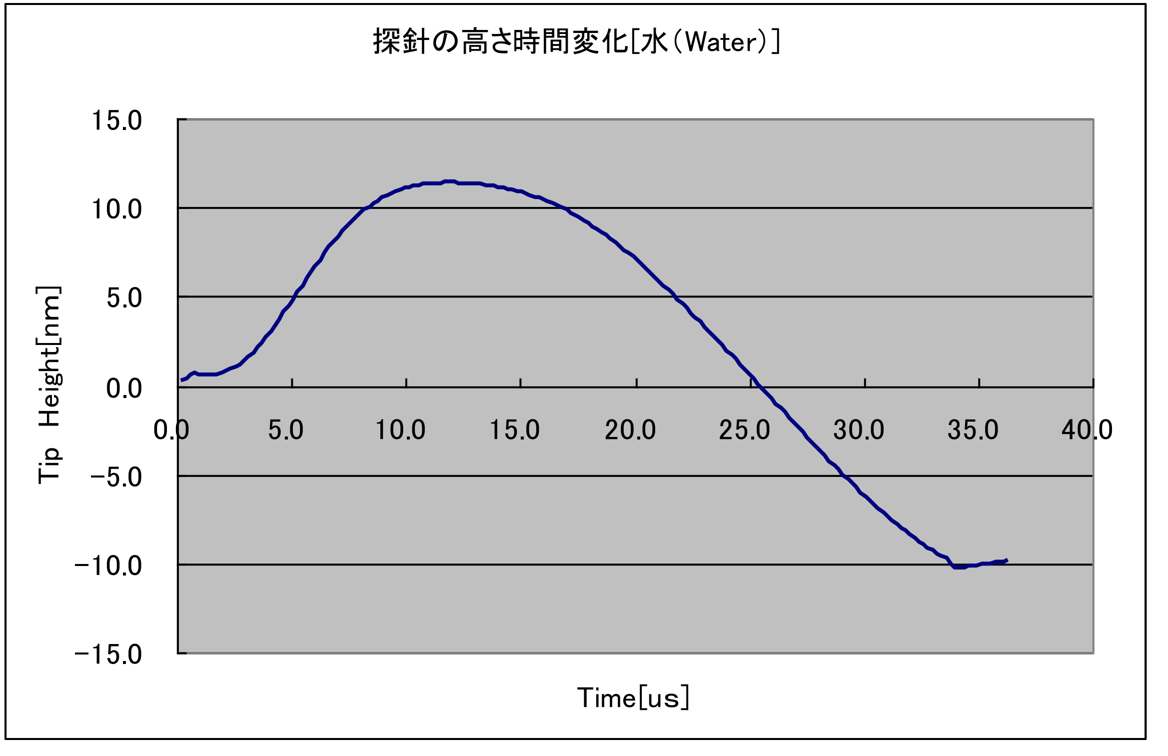
「delta_tipforce.csv」(探針-試料表面間に働く外力と距離)
と「height.csv」(探針の高さ時間変化) のグラフを右に示します。

ResultViewで、出力ファイルとしてdelta_tipforceを指定すると、
探針-試料間の距離および引力・斥力の時間変化を見る事が出来ます。

粘弾性接触力学を考慮したシミュレーションを実行する場合は、
GUI画面左側のProject Editorウィンドウ内に配置されている
LIQ→Mode settingタブの、“viscoelasticity”設定を「on」に
することに注意する必要があります。
(この設定は、デフォルトでは「off」となっています。)

以下のようなデータがシミュレーション結果として出力されます。
height：カンチレバーの先端(探針取付け位置)の高さの時間変化。
height_amplitude：カンチレバーの先端の振幅の時間変化。
twist：カンチレバーの捩れ角度。
tipforce：探針が試料と接触したときに受ける力の時間変化。
delta_tipforce：探針-試料間の距離および引力・斥力の時間変化。
Movie：探針のみ動きに関する動画。
bar_motion：カンチレバー全体の動作に関する動画。





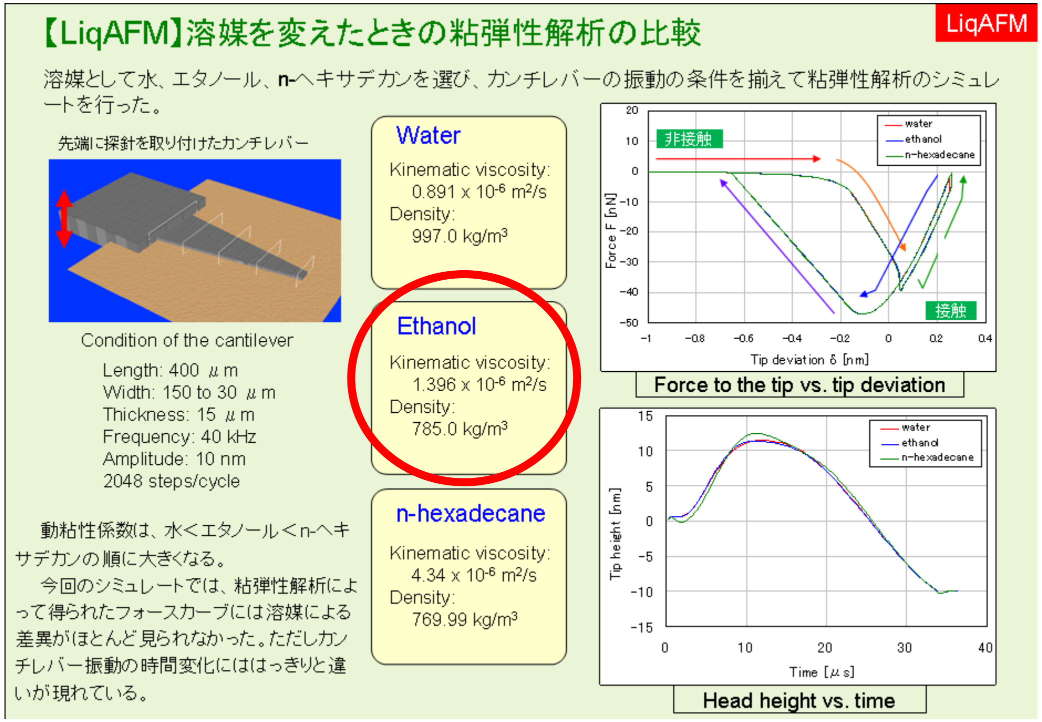
●LiqAFM　溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較（エタノール）　計算事例⑩

計算モード識別番号：[LiqAFM_Viscoelastic_002]（b）

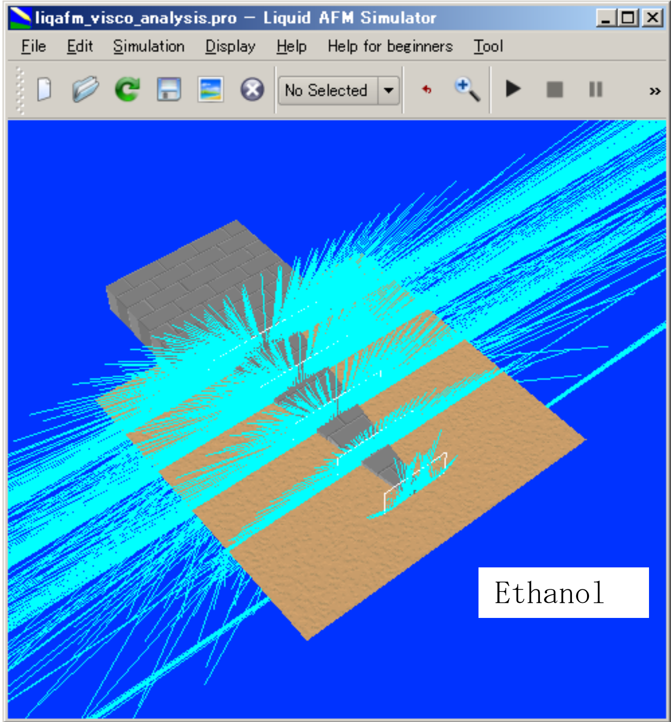
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Viscoelastic/LiqAFM_Viscoelastic.php

分類：LiqAFM　（粘弾性接触解析機能）、μmオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ



カンチレバーの形状と流体速度の可視化

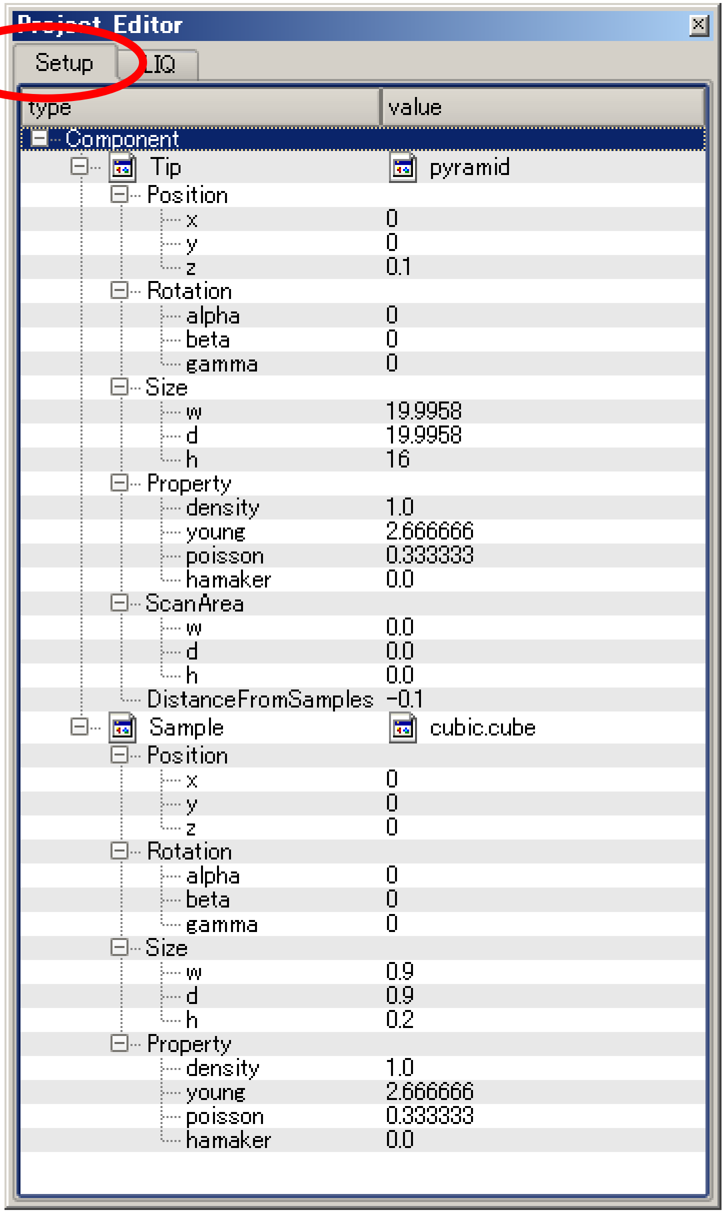
本事例では、溶媒がフォースカーブ等にどのような影響を与えるかをシミュレートします。

本事例は溶媒がエタノール（Ethanol）の場合です。

試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定を「on」として下さい。

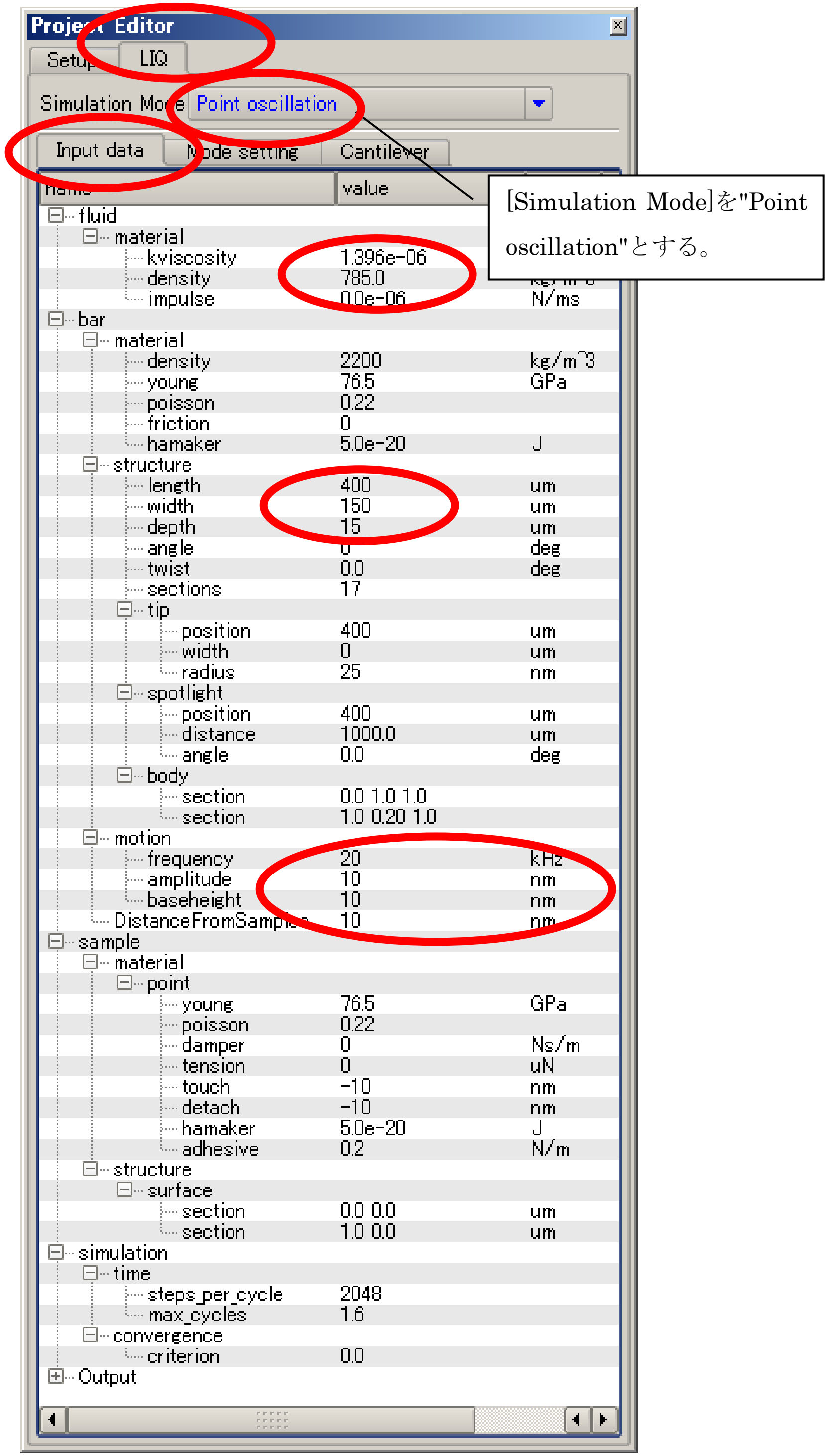
カンチレバーのばね定数は小さいですが、厚さは15μmです。

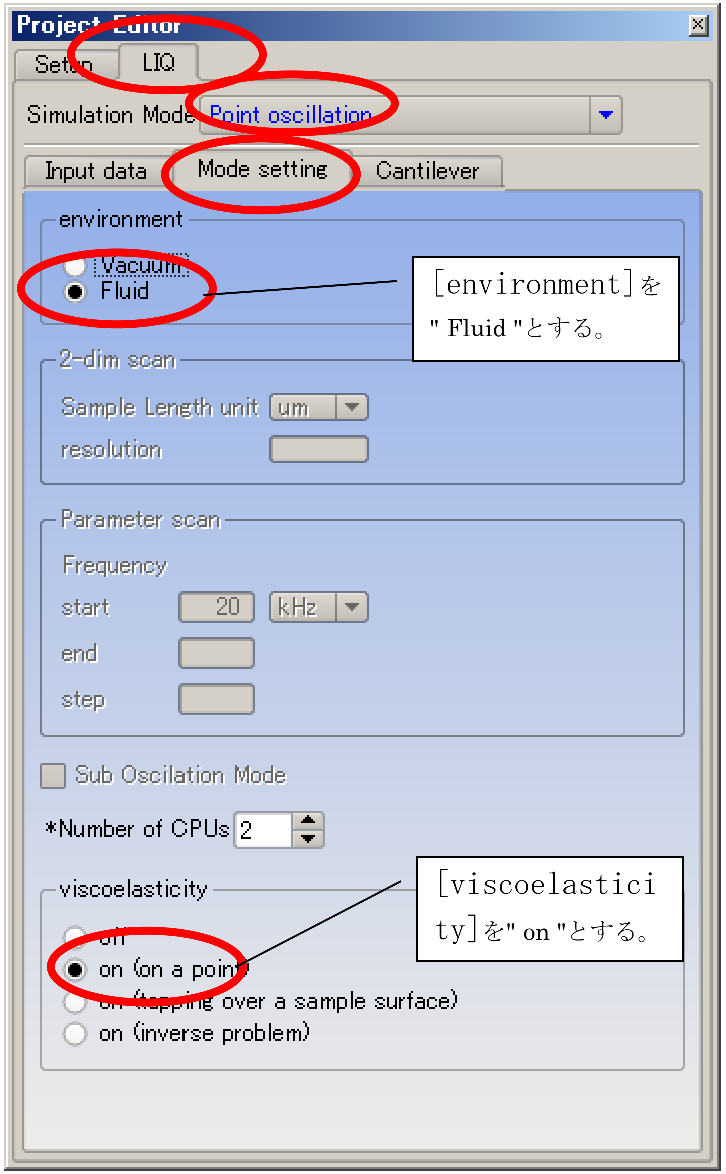
カンチレバーの加振周波数は20KHｚです。



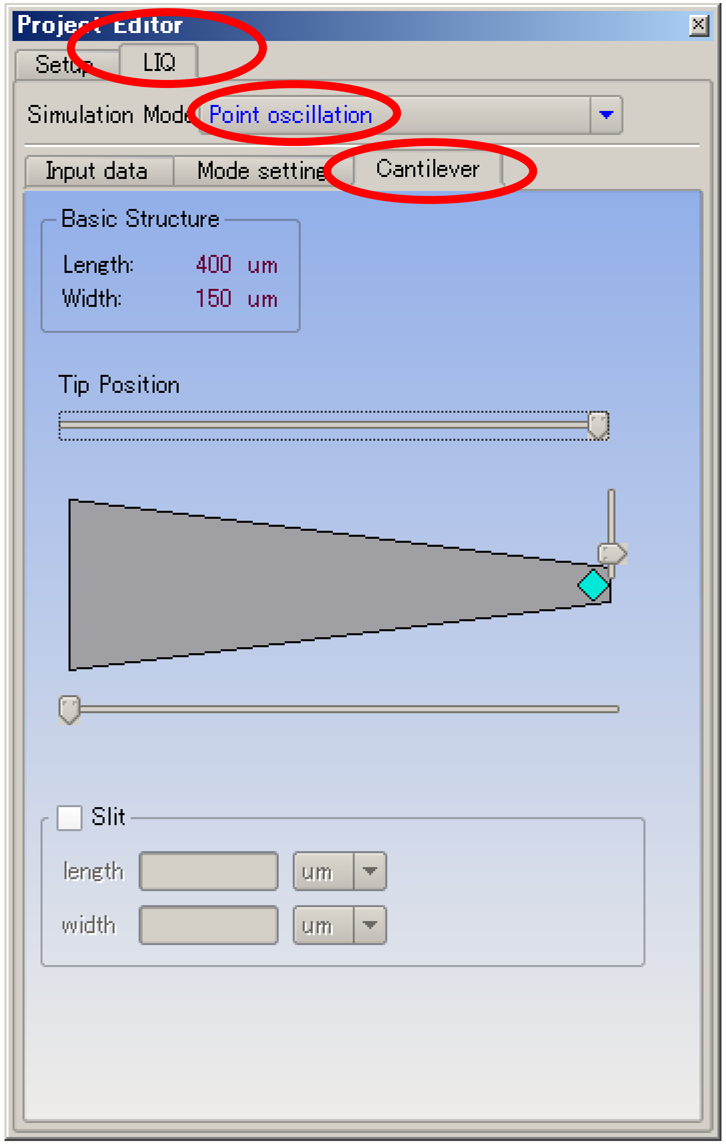
モデルのセットアップ条件

設定条件





設定条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

カンチレバーのばね定数が小さい場合、カンチレバーの物性値として、密度を 2200.0[kg/m^3]、ヤング率を 76.5[GPa]、ポアソン比を 0.22(無次元量)、ハマカー定数を 5.0E-20[J]に設定しています。

「delta_tipforce.csv」(探針−試料表面間に働く外力と距離)
と「height.csv」(探針の高さ時間変化)のグラフを右に示します。

以下のようなデータがシミュレーション結果として出力されます。

height：カンチレバーの先端(探針取付け位置)の高さの時間変化。

height_amplitude：カンチレバーの先端の振幅の時間変化。

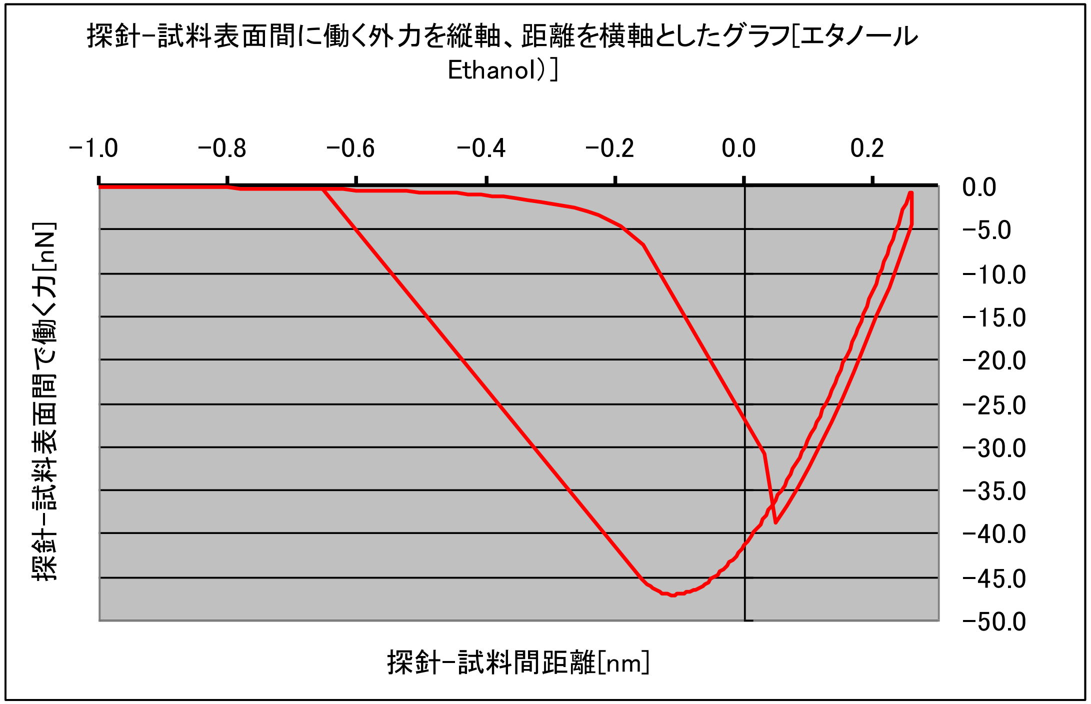
twist：カンチレバーの捩れ角度。

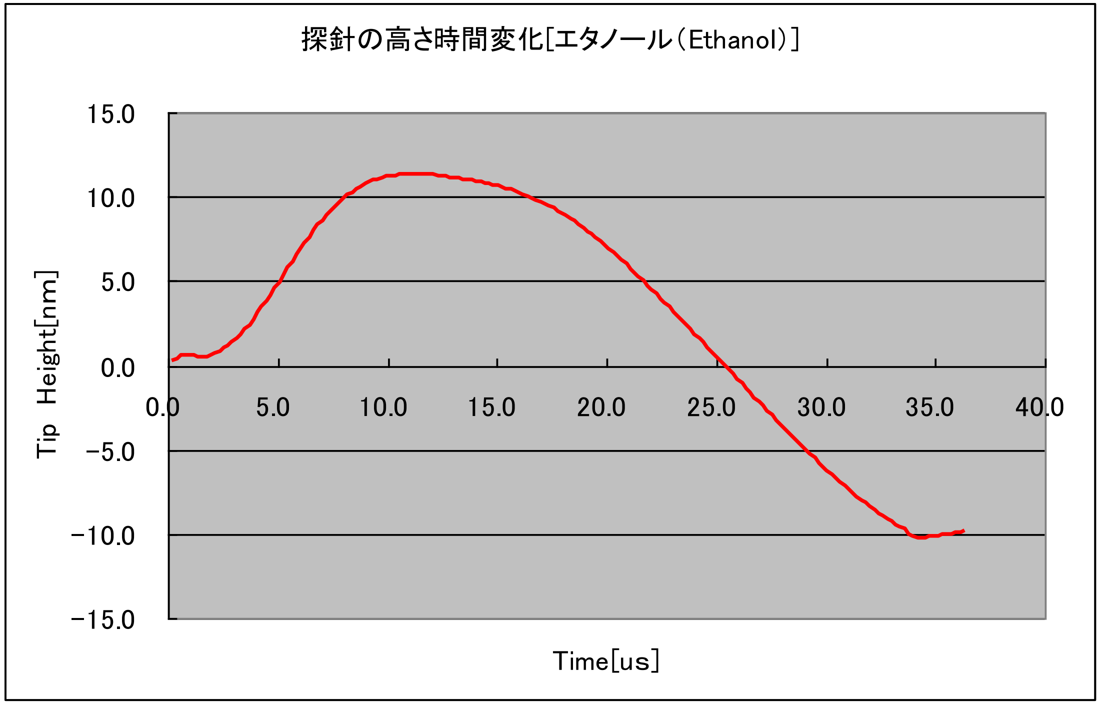
tipforce：探針が試料と接触したときに受ける力の時間変化。

delta_tipforce：探針−試料間の距離および引力・斥力の時間変化。

Movie：探針のみ動きに関する動画。

bar_motion：カンチレバー全体の動作に関する動画。





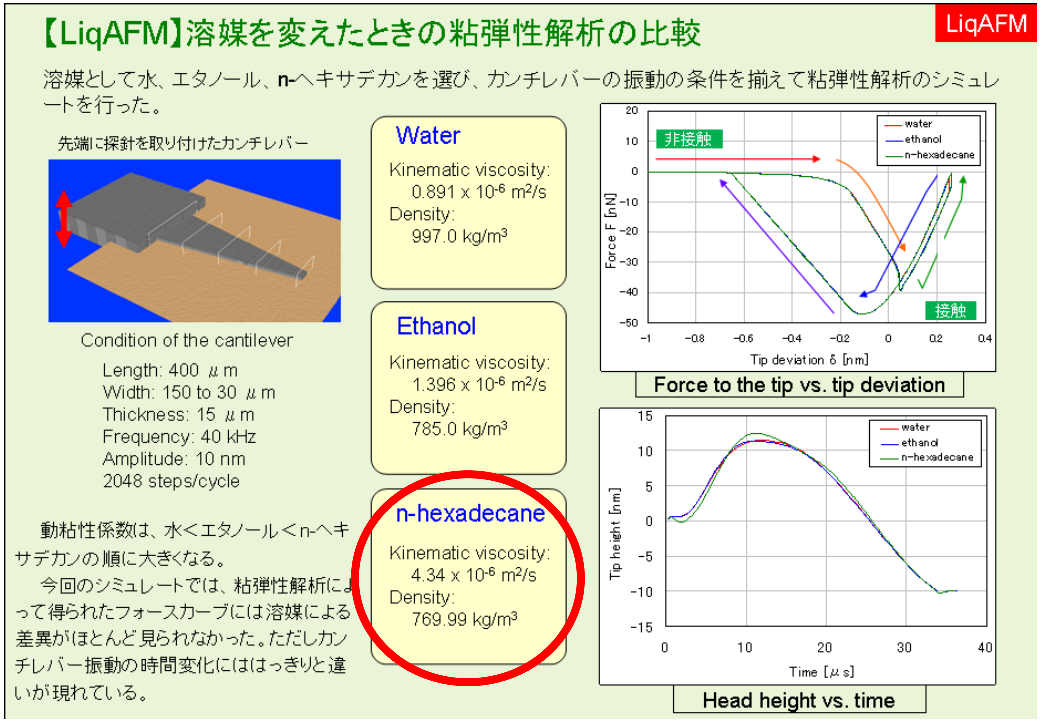
●LiqAFM　溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較（n-ヘキサデカン）　**計算事例⑪**

計算モード識別番号：[LiqAFM_Viscoelastic_002]（ｃ）

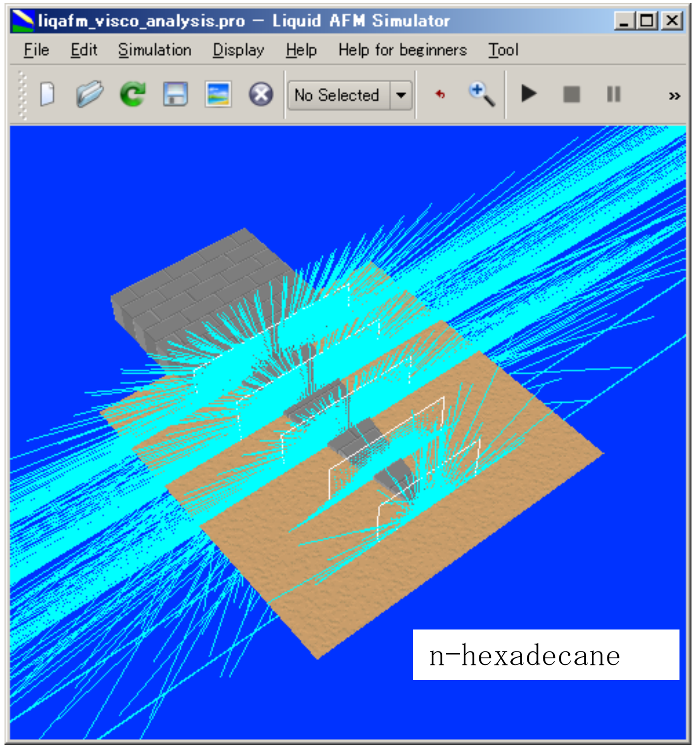
ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/LiqAFM/Viscoelastic/LiqAFM_Viscoelastic.php

分類：LiqAFM （粘弾性接触解析機能）、μｍオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。

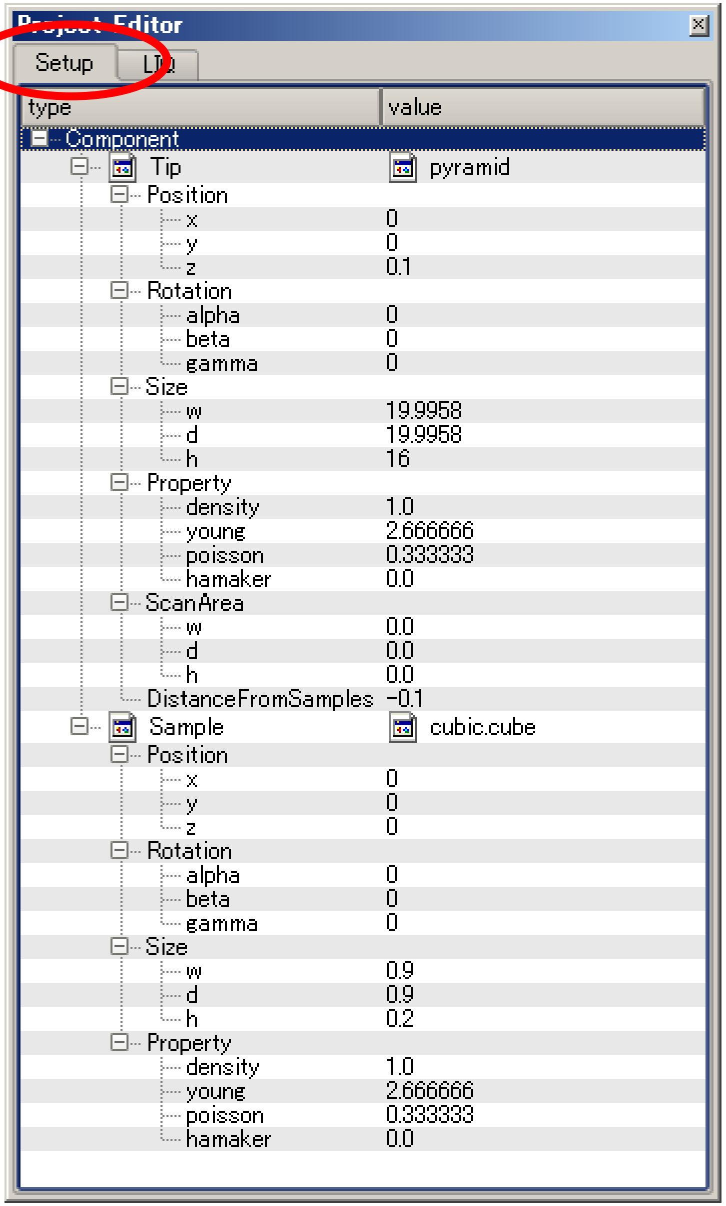


事例紹介ページ



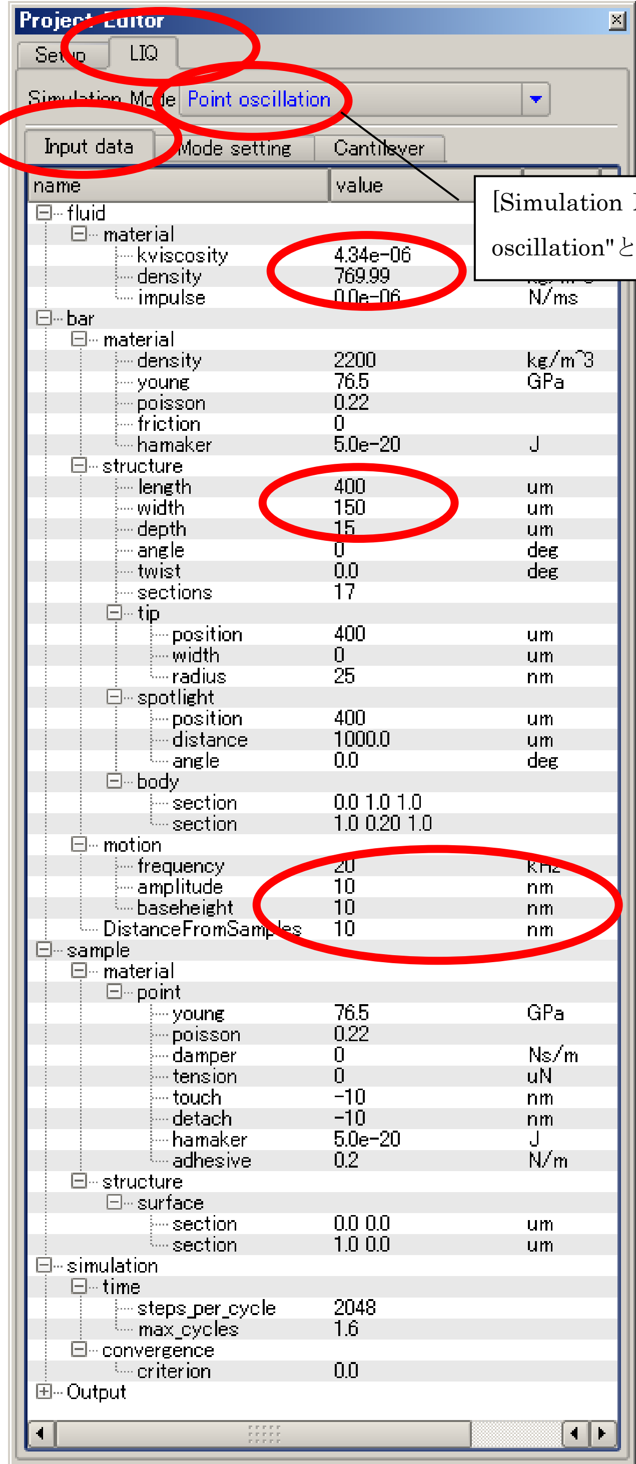
カンチレバーの形状と流体速度の可視化

本事例では、溶媒がフォースカーブ等にどのような影響を与えるかをシミュレートします。
本事例は溶媒がn-ヘキサデカン（n-hexadecane）の場合です。
試料の粘弾性解析モード（Viscoelasticity）設定を「on」として下さい。
カンチレバーのばね定数はが小さいですが、厚さは15μｍです。
カンチレバーの加振周波数は20KHｚです。

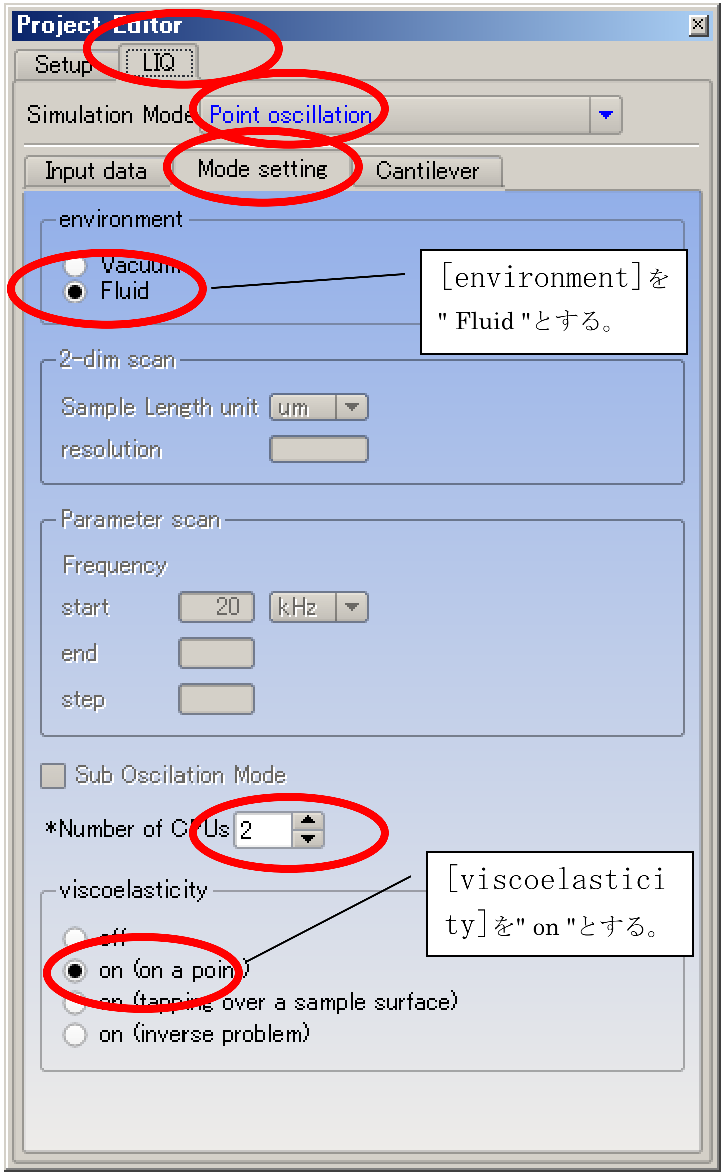


モデルのセットアップ条件

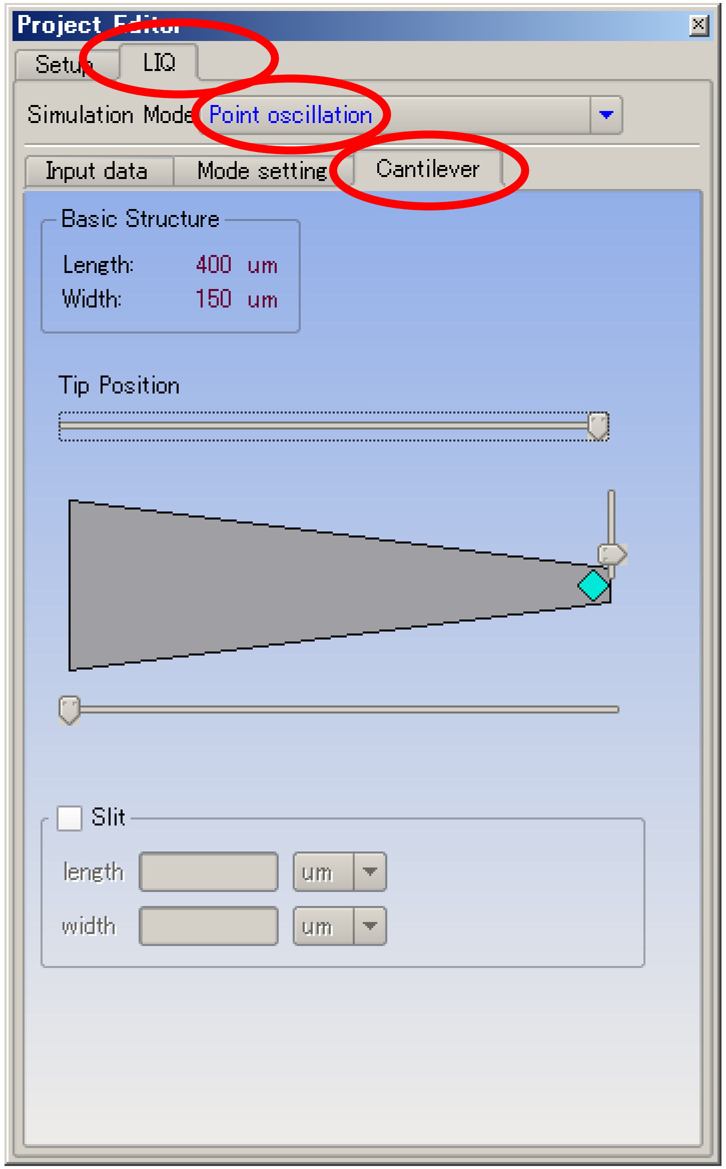
設定条件



[Simulation Mode]を"Point oscillation"とする。



設定条件



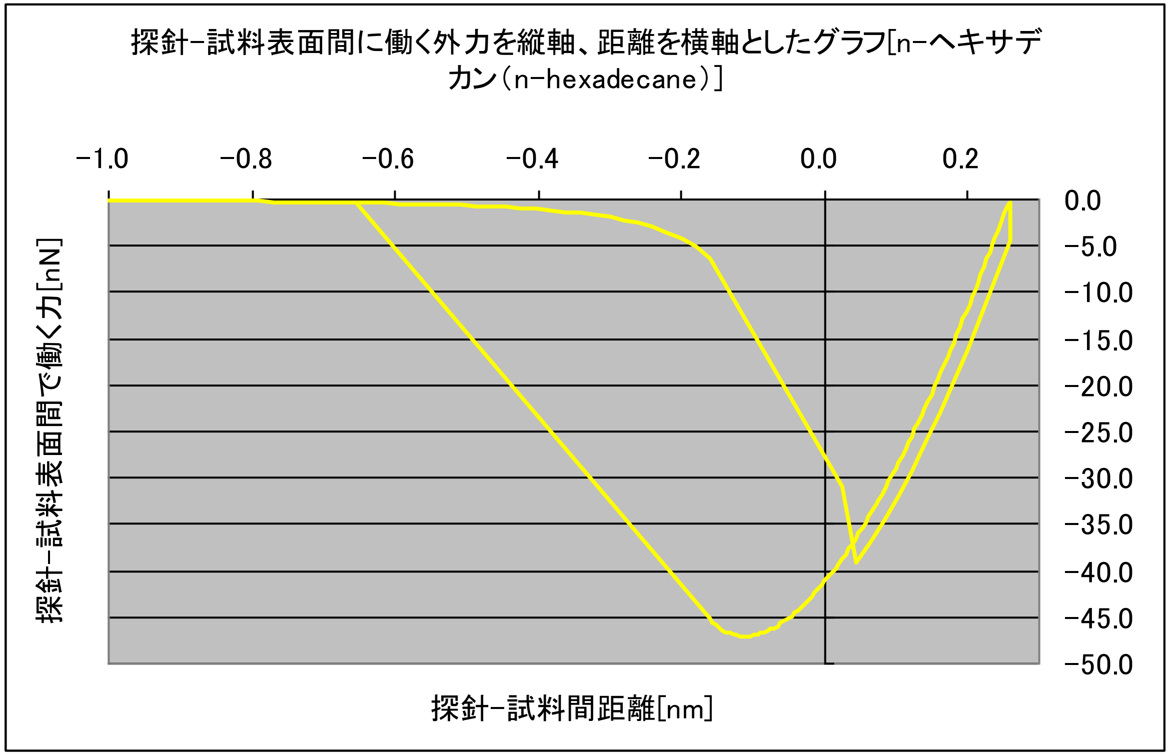
設定条件

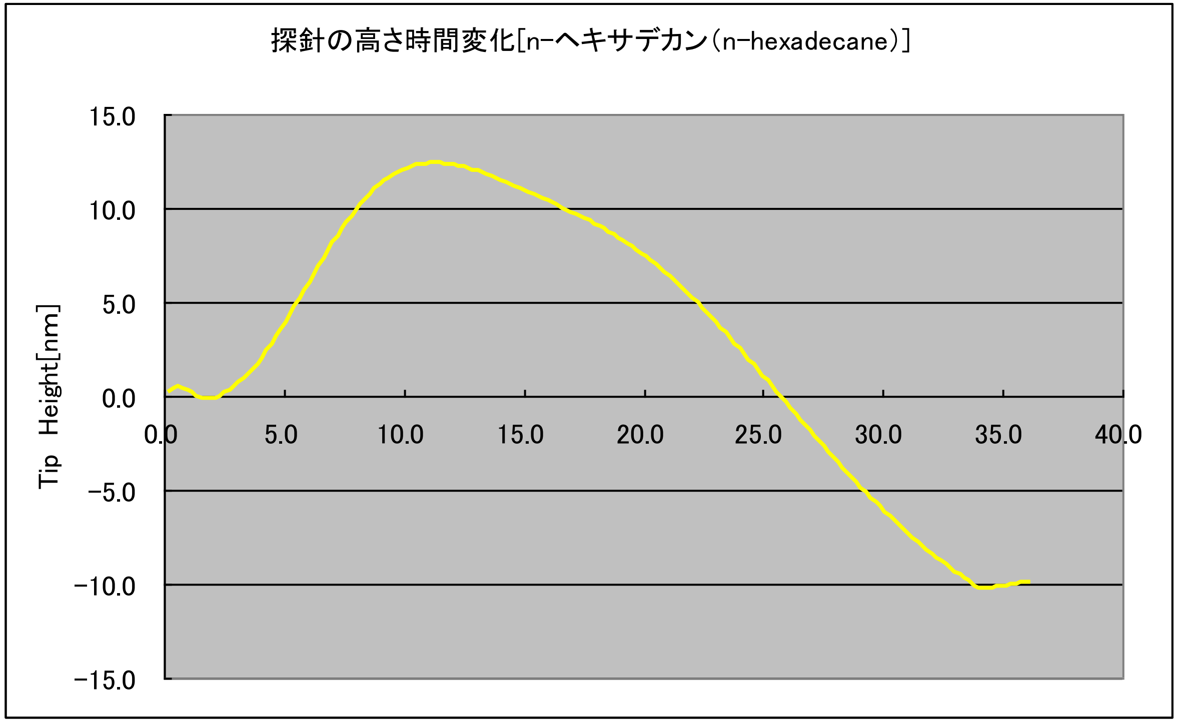
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

カンチレバーのばね定数が小さい場合、カンチレバーの物性値として、密度を 2200.0[kg/m^3]、ヤング率を 76.5[GPa]、ポアソン比を 0.22(無次元量)、ハマカー定数を 5.0E-20[J]に設定しています。

「delta_tipforce.csv」(探針-試料表面間に働く外力と距離)
と「height.csv」(探針の高さ時間変化) のグラフを右に示します。

以下のようなデータがシミュレーション結果として出力されます。
height：カンチレバーの先端 (探針取付け位置) の高さの時間変化。
height_amplitude：カンチレバーの先端の振幅の時間変化。
twist：カンチレバーの捩れ角度。
tipforce：探針が試料と接触したときに受ける力の時間変化。
delta_tipforce：探針-試料間の距離および引力・斥力の時間変化。
Movie：探針のみ動きに関する動画。
bar_motion：カンチレバー全体の動作に関する動画。

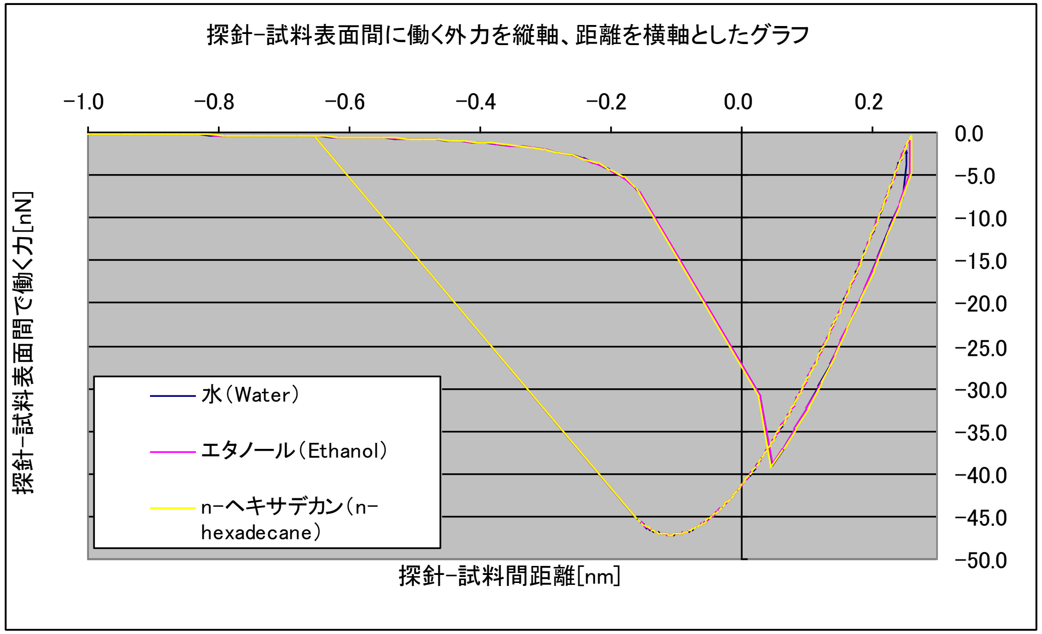


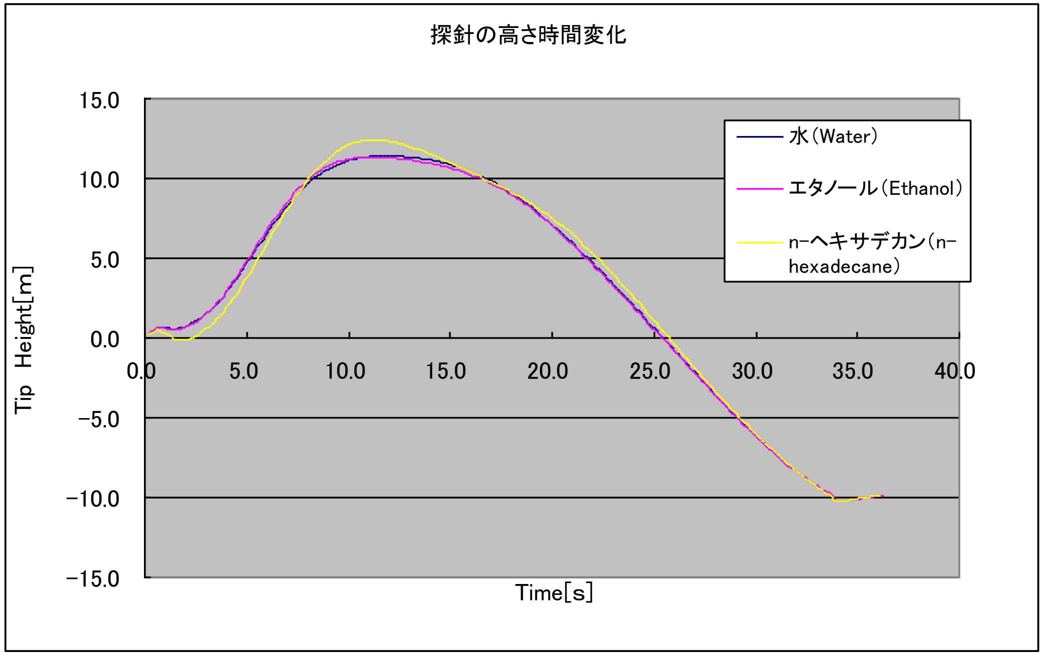


・水（Water)、エタノール（Ethanol)、n-ヘキサデカン（n-hexadecane）がそれぞれ溶媒となった場合の「探針-試料表面間に働く外力と距離」(右上図)および「探針の高さ時間変化」(右下図）を同じグラフに示します。

溶媒名	密度kg/m^3	動粘性係数 10^{-6} m^2/s
H_2O（水）	997.0	0.891
C_2H_5OH（エタノール）	785.0	1.396
$CH_3(CH_2)_{14}CH_3$ (n-ヘキサデカン)	769.99	4.34

但し、温度は不明。
粘弾性解析によって得られたフォースカーブには溶媒による差異がほとんど見られません。ただしカンチレバー振動の時間変化にははっきりと違いが現れています。





５．CG-RISM（原子スケール液中AFM 像シミュレータ）　ForceCurve（フォースカーブ測定モード）

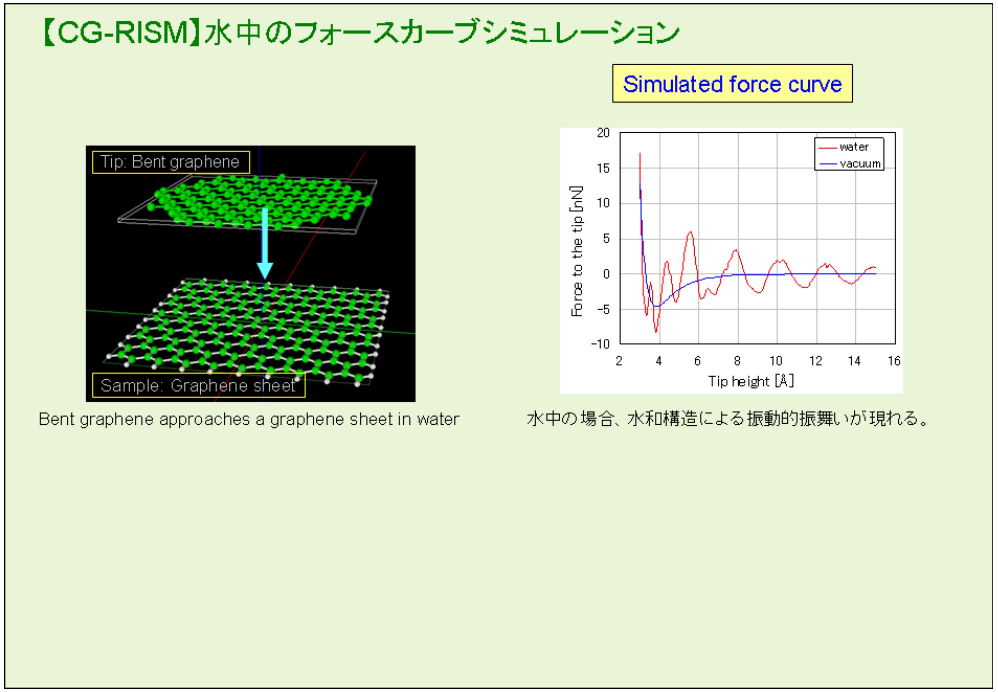
●CG-RISMによるフォースカーブ・シミュレーション（グラフェンシート）　計算事例⑫

計算モード識別番号：［CGRISM_ForceCurve_Inorganic_003］

ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/CGRISM/ForceCurve/CGRISM_ForceCurve.php

分類：CGRISM　（水中 AFM 計算）、μmオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。



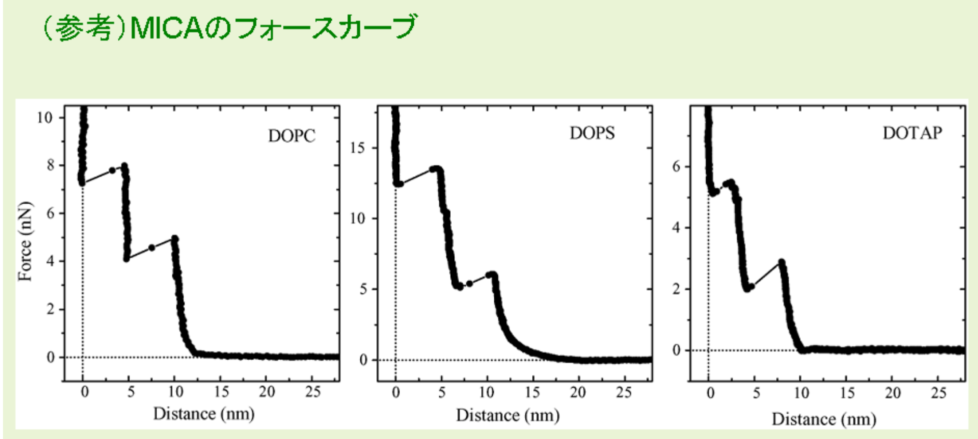


Fig. 36. Typical force-vs.-distance curve measured on a planar mica surface in buffer after exposure to 1,2-dioleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DOPC), 1,2-dioleoyl-sn-glycero-3-phospho-L-serine (DOPS), and 1,2-dioleoyl-3-trimethylammonium-propanechloride (DOTAP) vesicles. The AFM tips were first coated with chromium and gold and then with a monolayer of mercapto undecanol ($HS(CH_2)_{11}OH$). For details see Ref. [738].

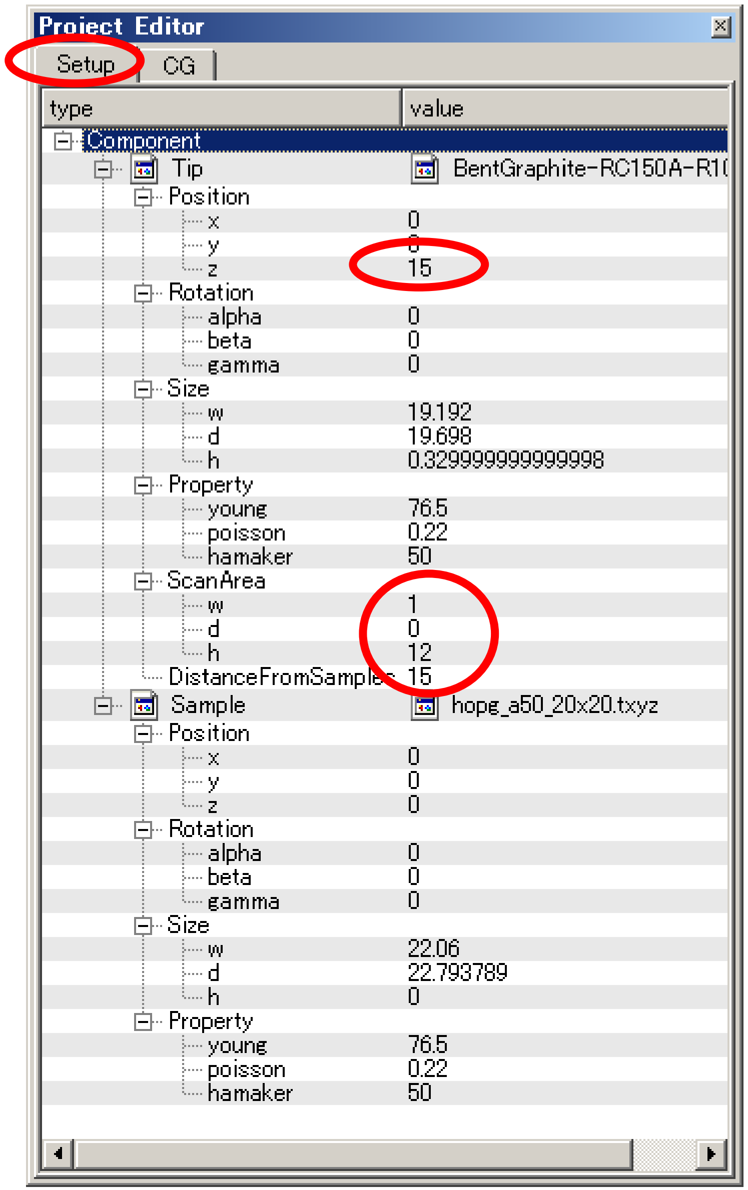
Hans-Ju¨rgen Butt et. al, Surface Science Reports 59 (2005) 1–152.
Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications

事例紹介ページ

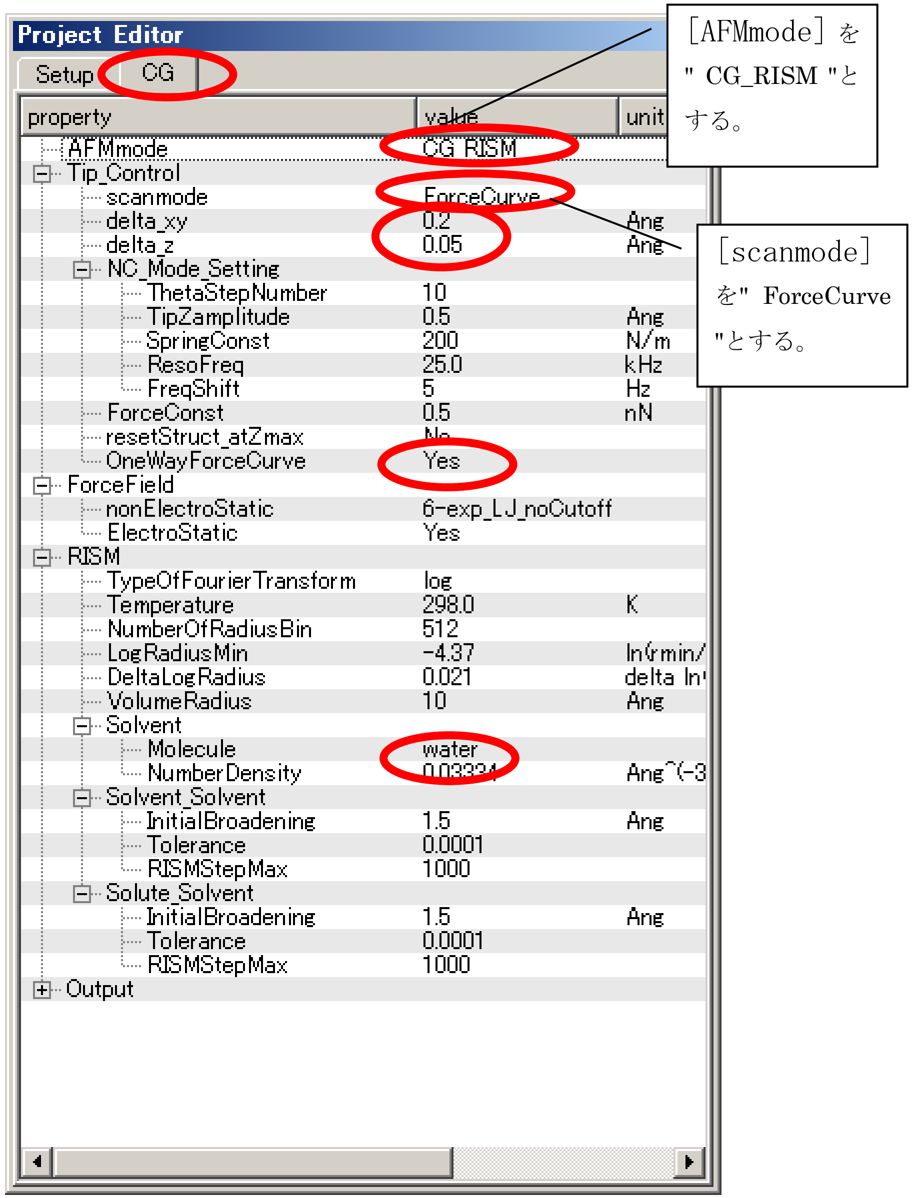
本事例では、共役勾配（ＣＧ）法により、与えられた探針位置ごとの系（探針＋試料＋基板）の安定原子配置を決定し、その原子配置において、探針が受ける力を求めます。試料と探針が液中にある場合、本シミュレータでは、Reference Interaction Site Mode（RISM）法を用いて、探針に働く力を計算しています。探針として「Bent Graphene」、試料として「Graphene Sheet（グラフェンシート）」{HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)}を用いています。

本事例は溶媒が水（Water）の場合です。試料と探針の間隔を縮めながら、探針に作用する力を計算します。真空中では「CG」法、水中では「CGRISM」法を用います。設定では、AFMMode(真空中計算か水中計算かの指定)として「CG_RISM」を選択し、scanmode(探針のスキャンモード)として「ForceCurve」を選択します。

SPMシミュレータを起動し、シミュレータ選択ボックスから[CG]および[Calculation]を選択することで使用可能です。



モデルのセットアップ条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

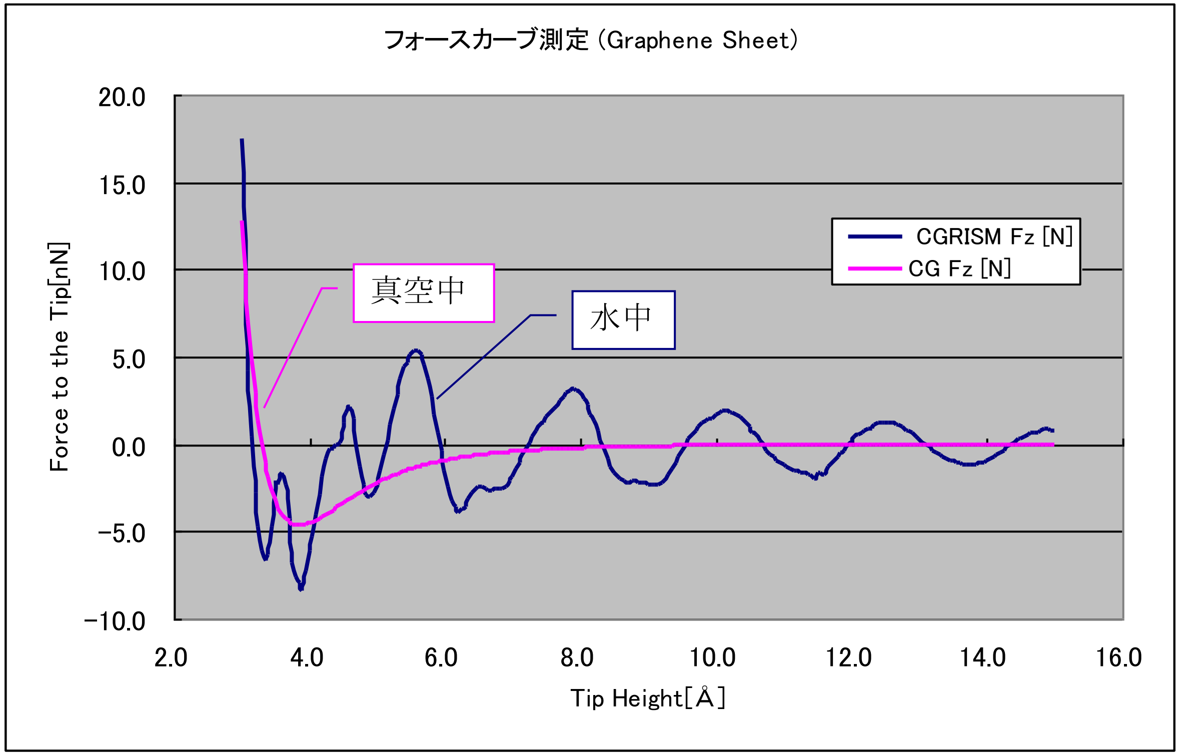
・主な設定値について
AFMMode　　：真空中計算か水中計算かの指定。真空中計算ならば「 CG 」を、水中計算ならば「 CG_RISM 」を選択します。
Tip_Control：探針(カンチレバー)に関するパラメータ設定項目
scanmode　：探針のスキャンモード。 ConstZ、ConstForce、ncAFM-ConstZ、ForceCurve、MinForceHeightの中から選択します。
選択したスキャンモードによって、設定可能な パラメータ項目、及び出力されるファイルが異なります。
ForceCurve ：フォースカーブ測定モード。ある xy 位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します。
Solvent – Molecule　　:溶媒の種類。現在は水だけに対応しており、変更は不可です。
Solvent – NumberDensity:溶媒（水）の数密度。Åˆ(-3) 単位。
scanarea – ｄ又はｗが０　：ｘｙ面でのスキャンは行わず、１座標ポイントでのｚ方向スキャンとなります。
「Fz」　を　「Force to the tip 」とします。
Tip Height (DistanceFromSample)：スキャン初期高さ位置となります。
scanarea – h　　　　　：スキャン高さ幅となります。
Tip Height (DistanceFromSample)　－　scanareaのｈ：スキャン終了高さ位置となります。
delta_z　　　　　　　：スキャン高さ方向分割幅となります。

・本紹介事例で用いられているシミュレーション手法について
　本シミュレータは、探針および試料を原子の集団としてモデルを組み立て、個々の原子に古典力場を設定することで、AFM画像のシミュレーションを行います。共役勾配（ ＣＧ ）法により、与えられた探針位置ごとの系（探針＋試料＋基板）の安定原子配置を決定します。その原子配置において、探針が受ける力を求めます。このとき、系の温度は絶対零度を仮定するため、温度の揺らぎ効果は考慮されません。
共役勾配法の英訳はConjugate-Gradient method であり、本シミュレータの略語CG はここからつけられている。
　構造最適化AFM 像シミュレータ（CG）では液中での測定に対応したシミュレーションも可能です。試料と探針が液中にある場合、それらと液体との相互作用により、系の自由エネルギーは真空中とは異なるものとなります。そして探針に働く力は、この自由エネルギーの変位に関する微分として与えられます。この自由エネルギーの増減量は、試料と探針からなる構造物および液体を構成している原子の組に対する相関関数が分かれば計算することができますが、その相関関数を計算する方法として本シミュレータではReference Interaction Site Mode（RISM）法を採用しています。
（参考　ＭＤシミュレータでは、分子動力学（ＭＤ）法により、与えられた探針位置ごとの系（探針＋試料＋基板）の原子配置を決定します。この原子位置は、初速度や温度を初期条件として、各原子についてニュートンの運動方程式を解く事で得られます。系の温度はＭＤ法の範囲内で与えることができ、温度の揺らぎ効果を考慮することができます。ただし平衡状態に達するまで大きなタイムステップを必要とすることが多く、そのため計算コストは増大します。）
・参考
構造最適化AFM像シミュレータ・・・分子内部のエネルギーが最小になるような原子配置を探索することにより、安定な分子構造を求める方法

分子動力学AFM像シミュレータ・・・原子一つ一つについてニュートンの運動方程式を解くことにより、分子構造の時間変化を求める方法

フォースカーブ（探針に働く力）シミュレーション結果を右図に示します。

水中計算（紺色）では、真空中計算（シアン色）とは異なり探針に作用する力が、探針の高さ位置に対して振動するような値となることがシミュレートされます。
探針の「Bent Graphene」および試料の「Graphene Sheet（グラフェンシート）」共に、水和構造を持つと思われ、この影響が出ているといえます。

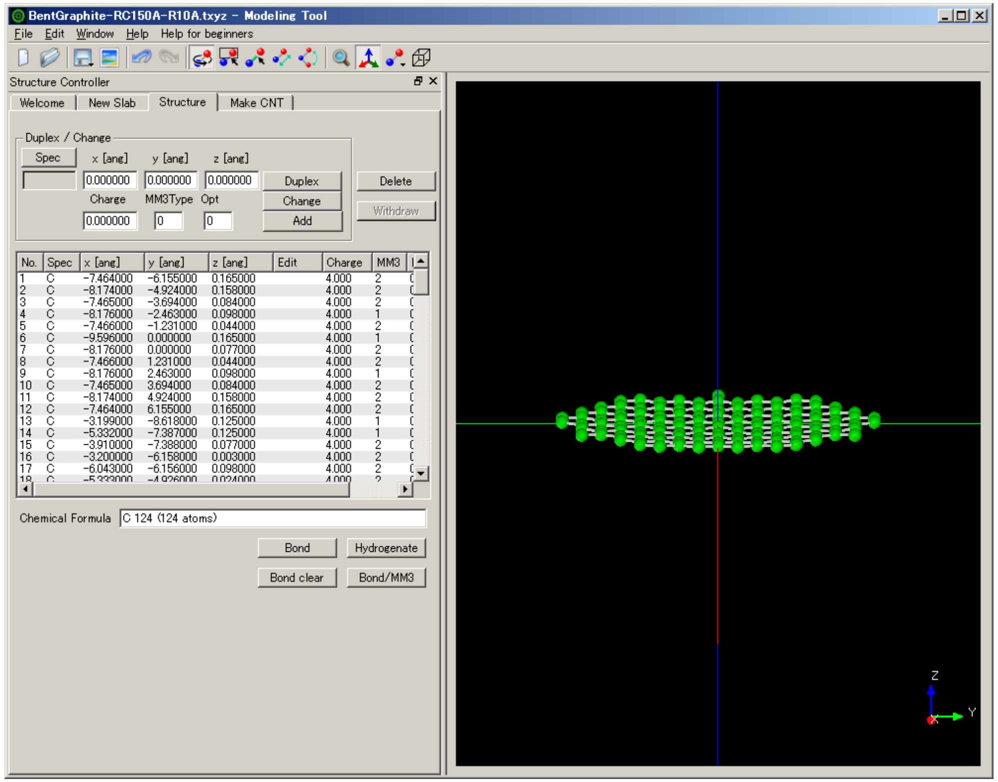


・水和構造について

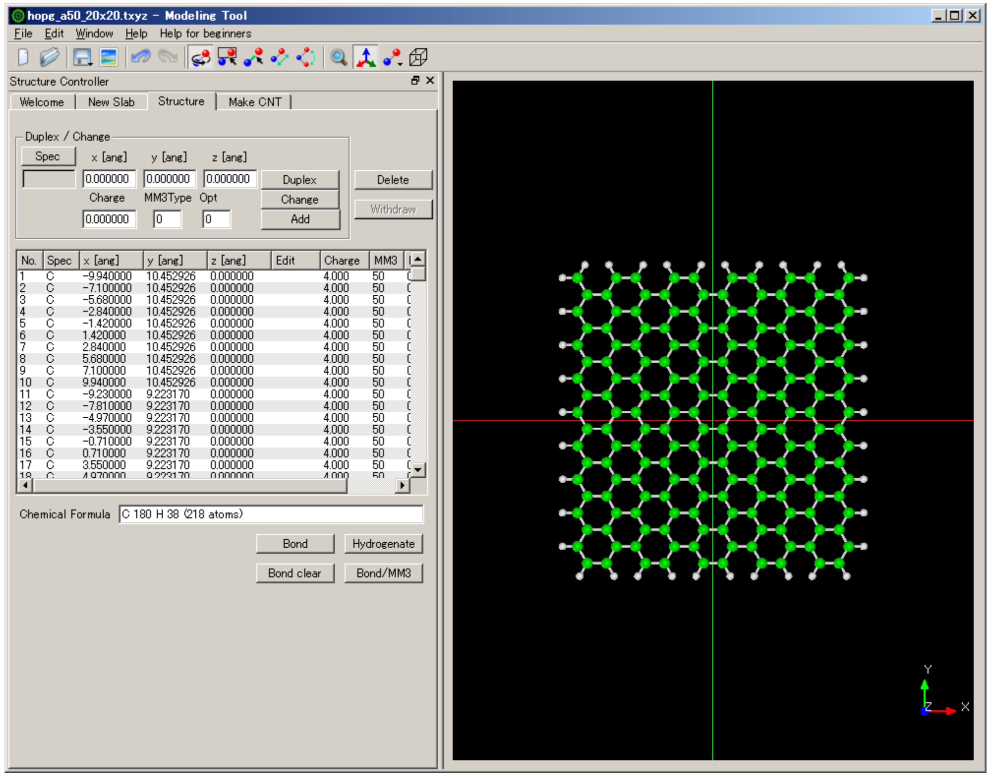
水に溶けるタンパク質はその周囲を水に取り巻かれている。タンパク質に接する水分子は、その水素原子や酸素原子が、タンパク質に結合し水分子の向きが定められる構造となっている。この構造を水和構造と呼ぶ。

タンパク質に結合する水の配向（水和構造）---「タンパク質周囲の水分子の配向の観察に成功 - 新薬創製への新しい指針に期待 - 」科学技術振興調整費ニュース［第 239 号］より

試料である「Graphene Sheet（グラフェンシート）」のデータ「hopg_a50_20x20.txyz」
をモデリングツール「SetModel」で見ると次のようになります。（下右図）。
また、探針としての「Bent Graphene」のデータ「BentGraphite-RC150A-R10A.txyz」も同様に
モデリングツール「SetModel」で見ることが可能です。炭素「C」のみより出来ており、
やや曲率を持った曲面としてデータ化されています。中央部がやや凹んでいることがわかります（下左図）。



探針「Bent　Graphene」のモデルデータ表示



試料「Graphene　Sheet」のモデルデータ表示

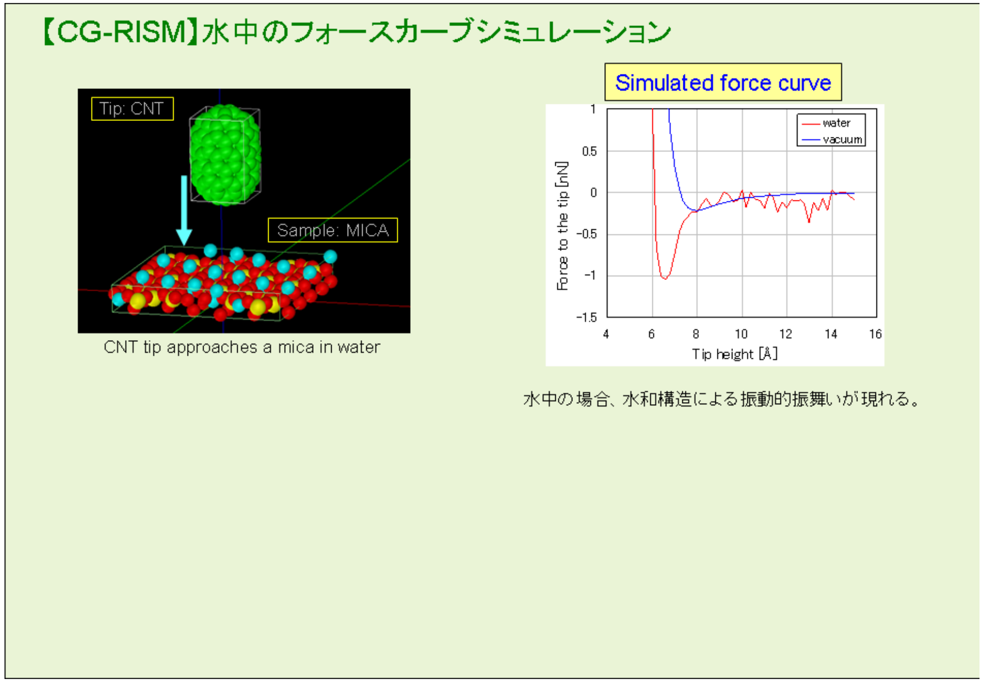
●CG-RISMによるフォースカーブ・シミュレーション（マイカ）　計算事例⑬

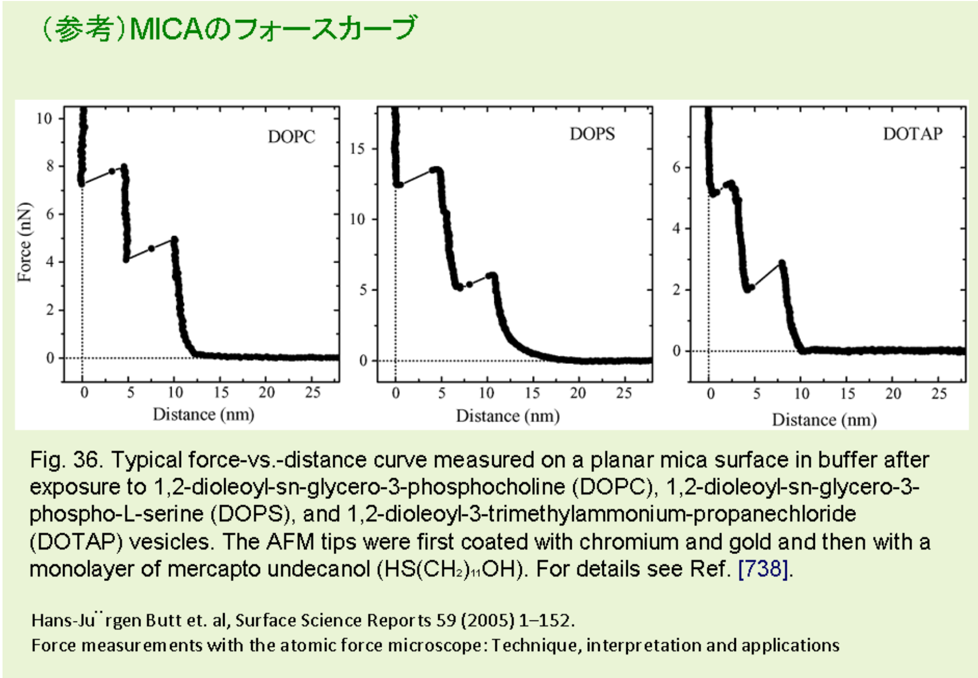
計算モード識別番号：[CGRISM_ForceCurve_Inorganic_002]

ソルバ・モード・計算例アドレス　https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/CGRISM/ForceCurve/CGRISM_ForceCurve.php

分類：CGRISM　（水中 AFM 計算）、μmオーダー、液中環境、高分子

事例紹介ページを下に示します。



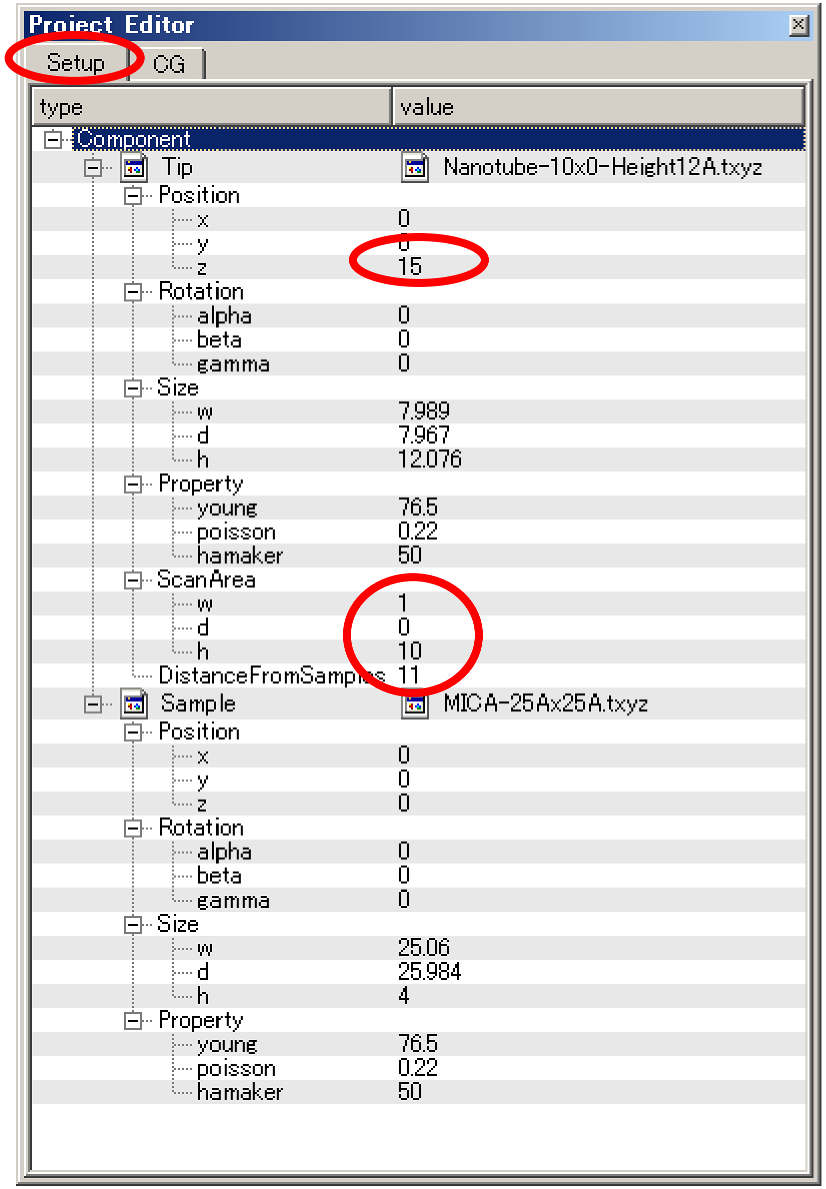


事例紹介ページ

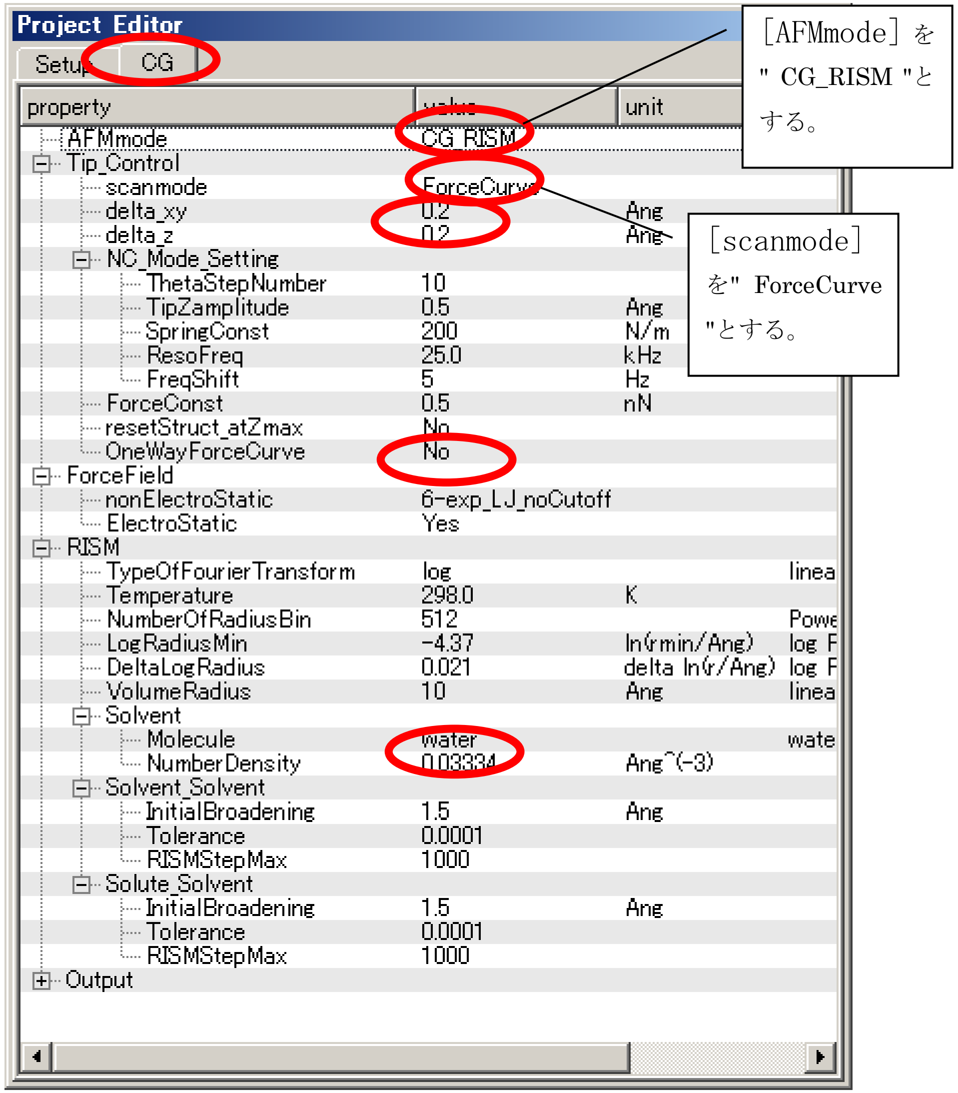
本事例では、共役勾配（ＣＧ）法により、与えられた探針位置ごとの系（探針＋試料＋基板）の安定原子配置を決定し、その原子配置において、探針が受ける力を求めます。試料と探針が液中にある場合、本シミュレータでは、Reference Interaction Site Mode (RISM) 法を用いて、探針に働く力を計算しています。探針として「CNT（カーボンナノチューブ）」、試料として「MICA（マイカ、雲母）」を用いています。

本事例は溶媒が水（Water）の場合です。試料と探針の間隔を縮めながら、探針に作用する力を計算します。真空中では「CG」法、水中では「CGRISM」法を用います。設定では、AFMMode（真空中計算か水中計算かの指定）として「CG_RISM」を選択し、scanmode（探針のスキャンモード）として「ForceCurve」を選択します。

SPMシミュレータを起動し、シミュレータ選択ボックスから[CG]および[Calculation]を選択することで使用可能です。



モデルのセットアップ条件

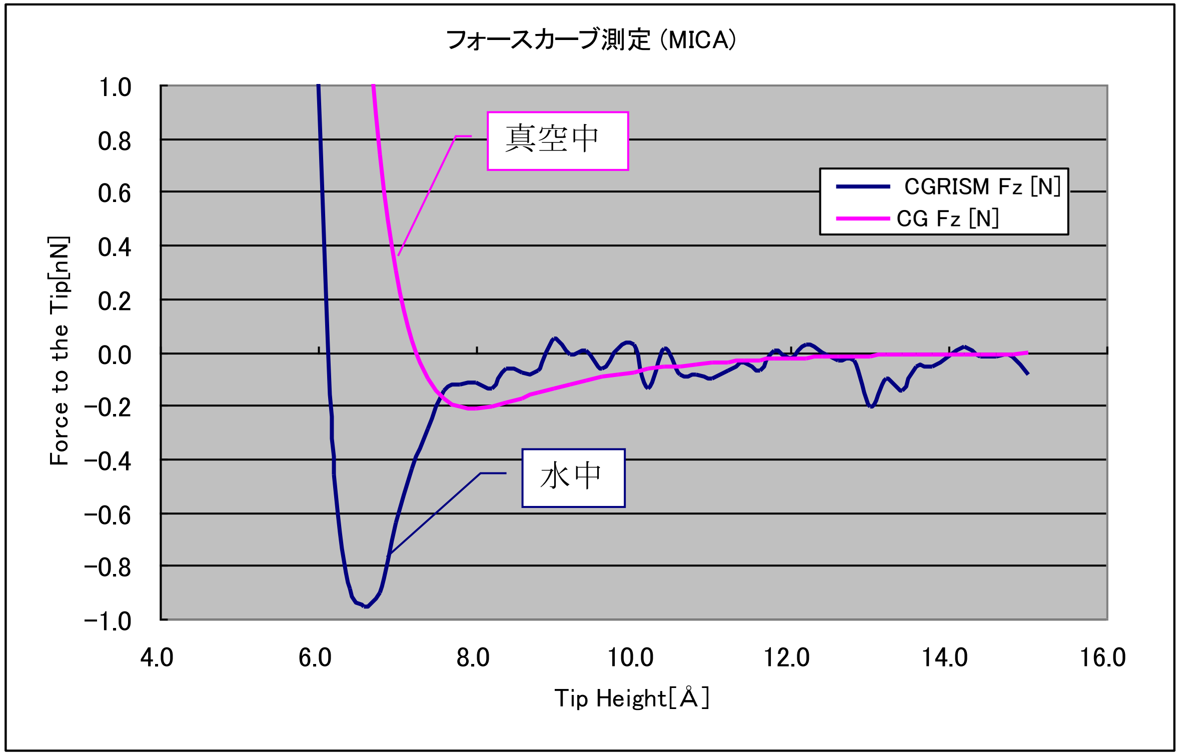


設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

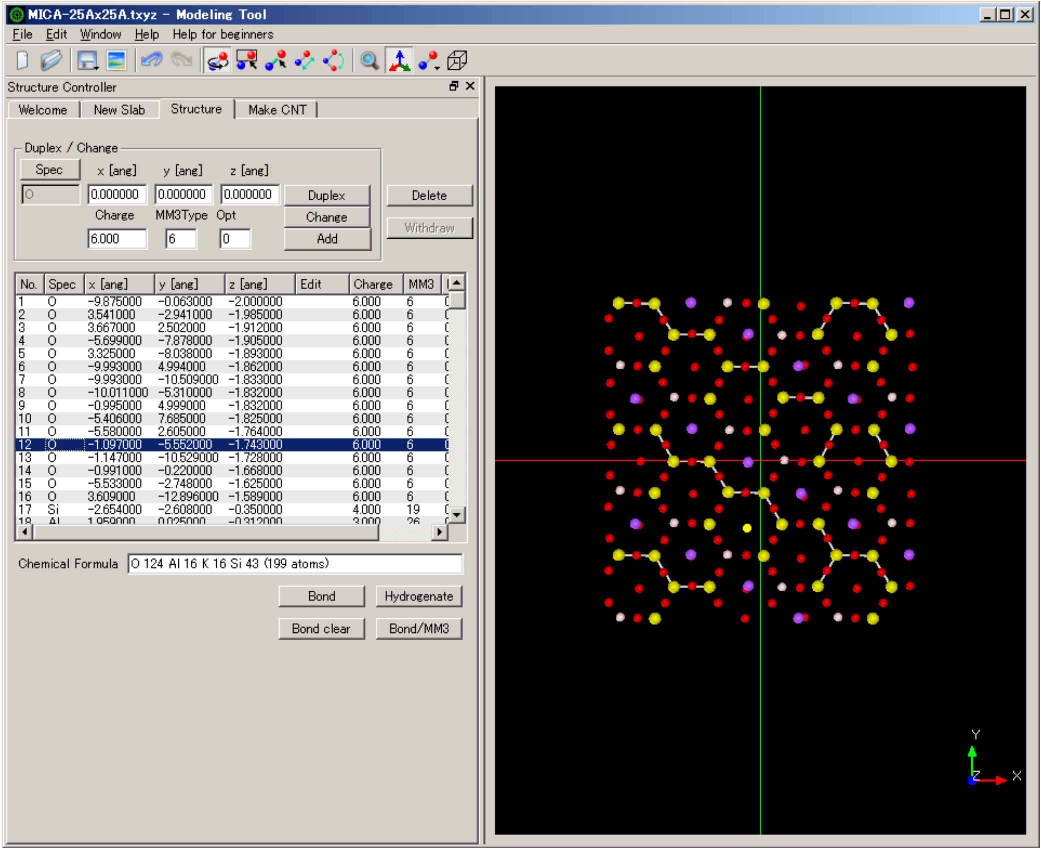
フォースカーブ（探針に働く力）シミュレーション結果を右図に示します。

水中計算（紺色）では、真空中計算（シアン色）とは異なり
探針に作用する力が、探針の高さ位置に対して振動する
ような値となることがシミュレートされます。
探針の「CNT（カーボンナノチューブ）」および試料の
「MICA（マイカ、雲母）」共に、水和構造を
持つと思われ、この影響が出ているといえます。



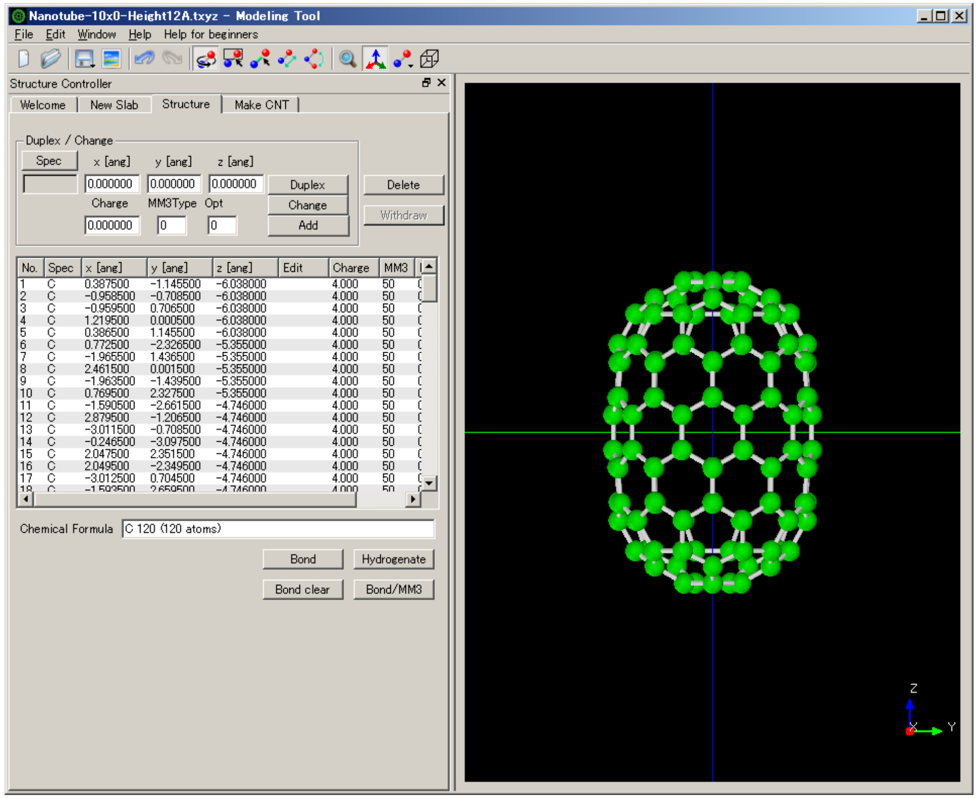
[マイカは層状ケイ酸塩鉱物の一種で、主成分はSiO_2、Al_2O_3、K_2O及び結晶水です。]（岡部マイカ工業所HPより）と解説されています。
結晶水（けっしょうすい）は、ホストとなる分子やイオンと共有結合を作らずに結晶中に含まれる水の分子を指します（wikipediaより）。

試料である「MICA」のデータ「MICA-25Ax25A.txyz」
をモデリングツール「SetModel」で見ると次のようになります。
本事例のデータでは、
主成分は、O、Si、Al、Kの４種となっています（右図）。
また、CNTのデータ「Nanotube-10x0-Height12A.txyz」も同様に
モデリングツール「SetModel」で見ることが可能です。(下左図)
炭素「C」のみより出来ており、楕円体としてデータ化されています。



試料「MICA」のモデルデータ表示

探針「CNT 」のモデルデータ表示



６・本編での SPM シミュレータにおけるソルバー一覧　（事例として取上げたソルバー・モード・機能を赤字で示しました）

●：対応済	×：未対応					
V20170313	V20160722	ソルバー	モード１	モード２	モード名称	機能・その他
●	●	LiqAFM	Point oscillation Parameter Scan			液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ 粘弾性接触解析 共振周波数解析機能
●	●	CG	ConstZ ConstForce ncAFM-ConstZ **ForceCurve** MinForceHeight			構造最適化 AFM 像シミュレータ 古典力場法による原子モデルの最適化計算 液中計測用は CG-RISM を用いる。
●	×	CG-RISM	ConstZ ForceCurve ncAFM-ConstZ			原子スケール液中 AFM 像シミュレータ 現在は水だけに対応