

第7章 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ(LiqAFM)

液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ(LiqAFM)は、液体環境中でのAFM実験をシミュレートするソルバーである。LiqAFMを使えば、液体中でのカンチレバーの振動を再現し、共鳴周波数等を算出することができる。また、粘弾性を持つ試料と探針の接触の様子をシミュレーションによって調べ、フォースカーブ等を求めるといった作業も実行可能である。

7.1 液中カンチレバー振動の計算方法

7.1.a カンチレバーのモデル化(一次元弾性梁モデル)

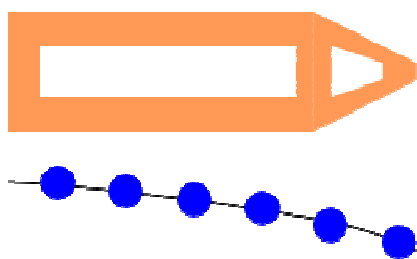


図 114 カンチレバーの一次元弾性梁モデル

LiqAFMにおいては、図 114のように、カンチレバーを、一次元弾性梁モデルによって取り扱う。一次元梁モデルは、カンチレバーの長さ方向に伸びており、垂直方向の振動と軸周りの回転振動の、二種類の運動をすると仮定する。

カンチレバーを、このような簡略化されたモデルで近似する理由は以下の通りである。

- 実際のAFM測定実験で使用されるカンチレバーは、軸方向に細長く、垂直方向の厚さや幅は、それに比べてごく薄い。
- 実際のAFM測定実験においては、カンチレバーの運動は、垂直方向の振動と軸周りの回転振動に限られる。

このようなモデル化によってカンチレバーの運動を調べるのであれば、図 114のように、孔の開いた形状のカンチレバーを考慮する必要はないのではと考えられるが、そうではない。次の節で説明するが、流体の運動の時間発展の計算では、カンチレバーの形状を考慮することが必要となる。このため液体のモデル化に際しては、二次元非圧縮性粘性流体と見なし、カンチレバーおよび周囲の空間を離散化し、流体力学方程式を数値計算で解く方法を採用する。

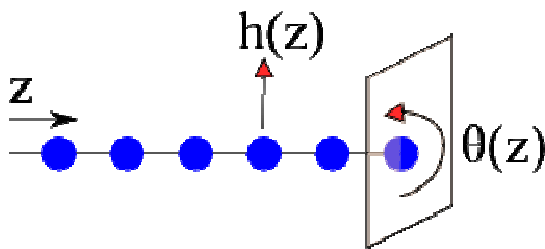


図 115 一次元弾性梁モデルの力学的自由度

以下に、一次元弾性梁モデルの運動方程式を考える。まず、図 115のように、梁の長さ方向の位置を変数 z で表す。次に、位置 z での、垂直方向の梁の変位を $h(z)$ 、反時計回りの回転角度を $\theta(z)$ で表すことにする。従って、 $h(z)$ は梁の垂直振動、 $\theta(z)$ は梁の回転振動を表現する。

変数 $h(z)$ および $\theta(z)$ に関する運動方程式は、次で与えられる。

$$\rho S(z) \frac{\partial^2}{\partial t^2} h(z) = - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left[EI(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} h(z) \right] - \gamma \rho S(z) \frac{\partial}{\partial t} h(z) + F^{\text{liq}}(z)$$

$$\rho I(z) \frac{\partial^2}{\partial t^2} \theta(z) = GI(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \theta(z) + T^{\text{liq}}(z)$$

ただし、 ρ はカンチレバーの材質の密度、 $S(z)$ は位置 z におけるカンチレバーの断面積とする。位置 z での、カンチレバーの水平幅を $w(z)$ 、鉛直厚さを $d(z)$ として、次の関係式が成立する。

$$S(z) = w(z)d(z)$$

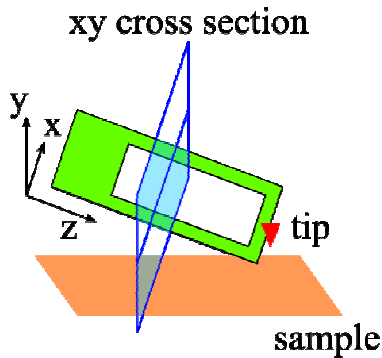
E はカンチレバーの材質の縦弾性率(ヤング率)、 G は横弾性率、 γ は減衰率とする。減衰率 γ の次元は、時間の逆数である。 $I(z)$ は位置 z でのカンチレバーの断面二次モーメントで、次の関係式で与えられる。

$$I(z) = \frac{1}{2} w(z)d(z)^3$$

$F^{\text{liq}}(z)$ は、位置 z での流体抗力と探針が試料から受ける接触力の和である。 $F^{\text{liq}}(z)$ は、単位長さ当たりの力として与えられる。 $T^{\text{liq}}(z)$ は、位置 z での流体抗力と探針が試料から受ける接触力のトルクの和である。 $T^{\text{liq}}(z)$ は、単位長さ当たりのモーメントで与えられる。

シミュレーションを行う際は、カンチレバーの根元で強制的に振動させている。

7.1.b 流体のモデル化(二次元非圧縮性粘性流体)



LiqAFMにおいては、流体は、二次元非圧縮性粘性流体として取り扱われる。図 116のように、カンチレバーの長さ方向に沿ったz軸に垂直なxy平面内に運動を制限された流体を考える。(水平方向をx軸、鉛直方向をy軸とする。)さらに、粘性の効果が強いと考え、ストークス流として近似する。

図 116 カンチレバーの長さ方向に沿ったz軸に垂直なxy平面の図

- 流体を、このような簡略化されたモデルで近似する理由は以下の通りである。
- 流体を駆動するカンチレバーは、水平方向にほぼ一樣なので、流体の運動はカンチレバーに対して垂直な面内に制限されると考えられる。
 - 流体の速度は、流体内の音速より十分小さいので、非圧縮性流体と見なして良い。
 - 流体のスケールが100[μm]オーダーであり、流体の運動は慣性項より粘性項の方が支配的となるので、ストークス流と見なせる。

以下に、流体の満たすべき運動方程式について考える。まず、二次元空間内での、非圧縮性流体のNavier-Stokes方程式を考える。

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p + \nu \Delta \vec{v},$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$$

ただし、 $\vec{v}(x, y) = (v_x(x, y), v_y(x, y))$ はxy平面内の流体の速度ベクトル場、 $p(x, y)$ は圧力場、 ρ は流体の密度、 ν は流体の動粘性率とする。流体の動粘性率 ν は、粘度 μ 、密度 ρ と、以下の関係式で結ばれる。

$$\nu = \frac{\mu}{\rho}$$

ここで、慣性項 $(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}$ より粘性項 $\nu \Delta \vec{v}$ の方が支配的であると考え、上で示したNavier-Stokes方程式を、次のStokes方程式で近似する。

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \vec{\nabla} p + \nu \Delta \vec{v},$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$$

二次元非圧縮性流体は、流れ関数 ψ と渦度 ω を使って記述すると方程式が簡略化される。

$$v_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x},$$

$$\omega = \partial_x v_y - \partial_y v_x$$

このとき、以下の方程式が成立する。

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = \nu \Delta \omega,$$

$$\Delta \psi = -\omega$$

シミュレーションの際は、初期状態において流体は静止しているとする。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するように境界条件を設定する。基板表面、および、無限遠では流体は静止しているとする。これらの境界条件の下で、流体の運動方程式を数值的に解く。[参考文献：M.Tsukada, N.Watanabe, Jpn. J. Appl. Phys. 48 (2009)035001]

数値計算においては、これまでに説明した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る。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に分割され、時間変数も等間隔に分割される。

7.2 液中平板状カンチレバーの振動

この節では、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の動きのシミュレーション計算について説明する。また、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も解説する。さらに、カンチレバーに複数の孔を開け、カンチレバーの形状と実効粘性率との間にどのような関係が有るかについても調べる。なお、この節では、カンチレバーと試料との間の粘弾性接触力学については考慮しない。

7.2.a 固有振動解析と共鳴のピーク



図 117 孔のないカンチレバー

このカンチレバーを、密度 $200.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ 、動粘性率 $0.25 \times 10^{-6}[\text{m}^2/\text{s}]$ の流体中で振動させることを考える。ここでは、計算の都合上、水より希薄な流体を仮定した。

カンチレバーを流体中で周波数 $4.0[\text{kHz}]$ で強制振動させた場合の、カンチレバーの振幅の時間変化は図 118のグラフのようになる。グラフを見ると、カンチレバーの振幅は、時間と共に一定の値に収束することが分かる。

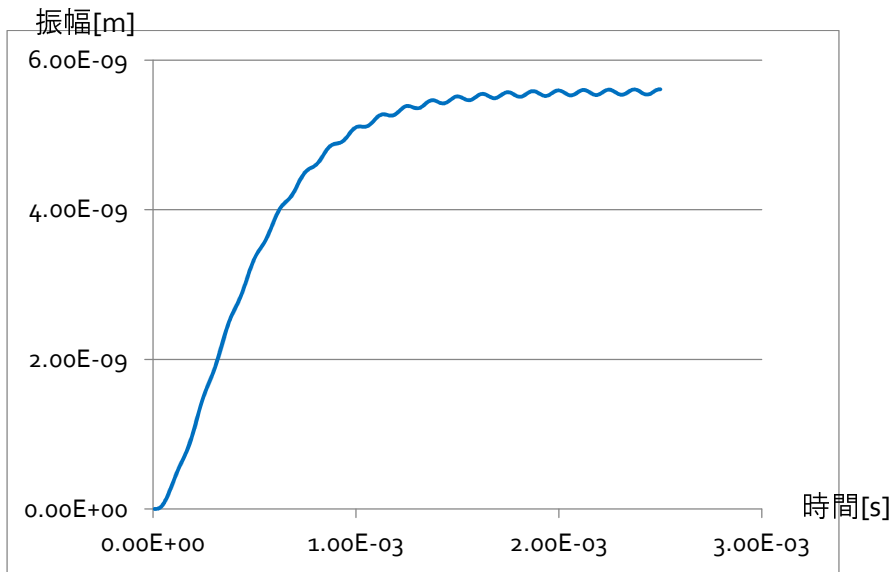


図 118 カンチレバーを流体中で強制振動させた場合の、カンチレバーの振幅の時間変化

そこで、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のが図 119のグラフである。このグラフを見ると、カンチレバーの共鳴周波数は、およそ18.0[kHz]であることが分かる。

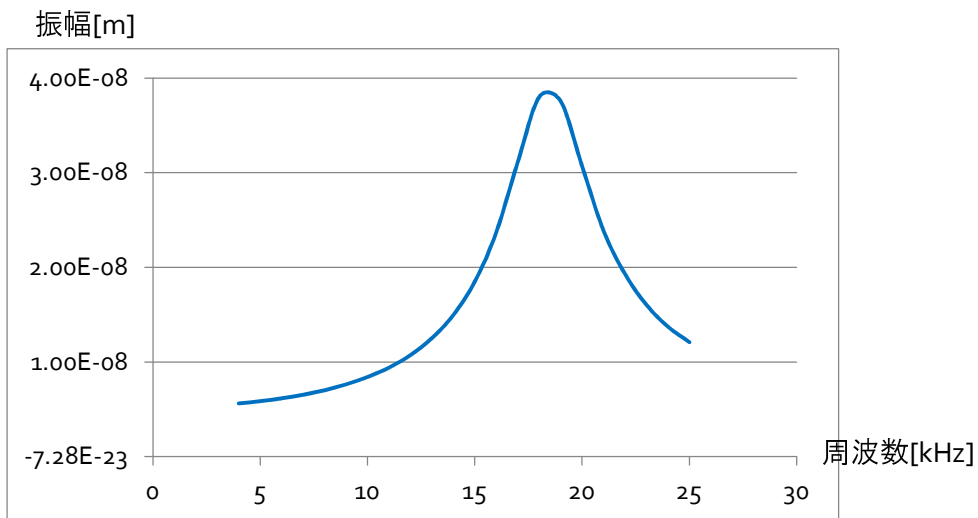


図 119 カンチレバーの強制振動周波数を変化させて、カンチレバーの振幅が時間と共に収束する値をプロットしたグラフ

7.2.b カンチレバーの孔の効果と実効粘性率

この節では、カンチレバーに多数の孔を開けることによって、カンチレバーが流体から感じる実効粘性率が変化することについて、シミュレーション計算で議論することにする。

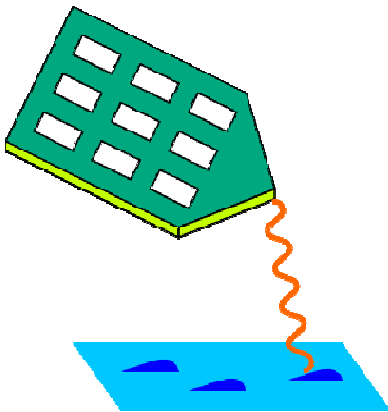


図 120 カンチレバーの先端に高分子鎖を付着させて、これを探針として AFM 実験する

ここで、以下の状況を考える。図 120 のように、カンチレバーの先端に高分子鎖を付着させて、これを探針として AFM 実験を行うことを考える。これにより、高分子鎖の弾性率等の物性値を調べたいとする。このような実験は、AFM によってソフトマテリアルを調べる研究で実際に行われている。

このような実験を行う場合、カンチレバーの感じる粘性抵抗力がノイズとなって邪魔をすることが予想される。そのため、粘性抵抗力が小さなカンチレバーが必

要となる。そこで、カンチレバーに多数の小さな穴を開けて、カンチレバーが感じる実効粘性率を小さく抑えれば良い、という考えに到達する。

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。

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

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 値から粘性抵抗係数が、次のように求められる。

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

前の節で使用した、長さ、幅、厚さが、それぞれ、 $400[\mu\text{m}]$ 、 $100[\mu\text{m}]$ 、 $4[\mu\text{m}]$ で与えられるカンチレバーを考える。このカンチレバーに、図 121、図 122、図 123、図 124 で示すように、1個、2個、4個、10個の孔を開けることとする。そして、これらのカンチレバーを、密度 $200.0[\text{kg}/\text{m}^3]$ 、動粘性率 $0.25 \times 10^{-6}[\text{m}^2/\text{s}]$ の流体中で振動させる。



図 121 孔が 1 個のカンチレバー



図 122 孔が 2 個のカンチレバー



図 123 孔が 4 個のカンチレバー



図 124 孔が 10 個のカンチレバー

図 117、図 121、図 122、図 123、図 124 の五種類のカンチレバーを流体中で強制振動させる。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のが図 125 のグラフである。

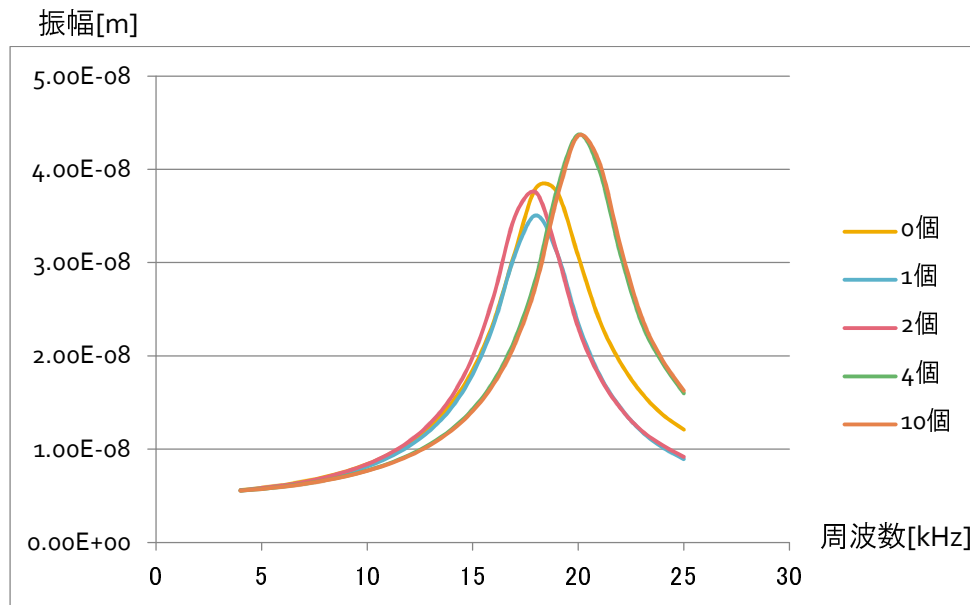


図 125 五種類のカンチレバーに対して、カンチレバーの強制振動周波数を変化させて、カンチレバーの振幅が時間と共に収束する値をプロットしたグラフ

図 125 の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と、表 11 のようになる。ただし、質量 m は、カンチレバーの材質の密度を $2330[\text{kg}/\text{m}^3]$ として算出している。

表 11 5 種類のカンチレバーの、質量、ばね定数、 Q 値、粘性抵抗力係数

孔の個数	0	1	2	4	10
m [kg]	3.73×10^{-10}	2.75×10^{-10}	2.75×10^{-10}	2.75×10^{-10}	2.75×10^{-10}
k [N/m]	4.77	3.52	3.52	4.34	2.17
Q	6.78	6.30	6.70	7.89	7.87
$cR\eta$ [kg/s]	6.22×10^{-6}	4.93×10^{-6}	4.64×10^{-6}	4.38×10^{-6}	3.10×10^{-6}

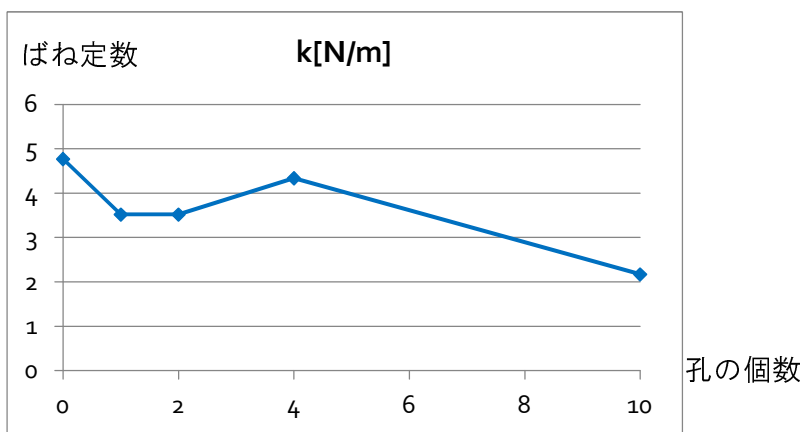


図 126 カンチレバーの孔の個数に対する、ばね定数の変化

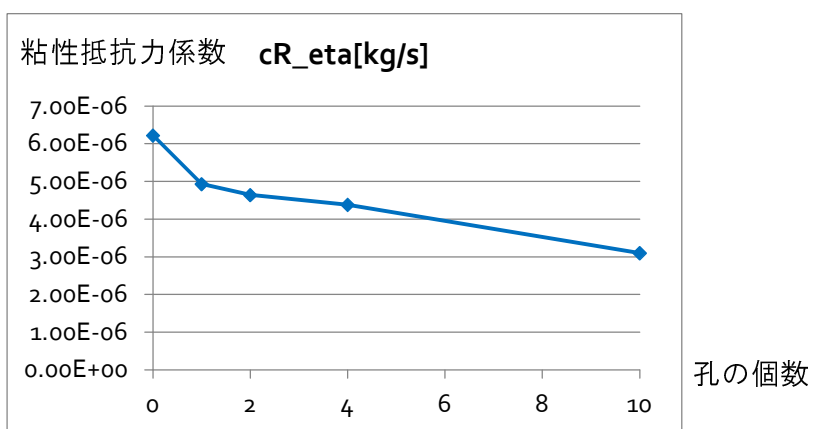


図 127 カンチレバーの孔の個数に対する、粘性抵抗力係数の変化

図 127のグラフから、孔の個数が増えると、粘性抵抗力係数が減少することが理解される。

図 128に、10個の孔の開いたカンチレバーの振動をシミュレーションしている際の、GUIの外観を示す。

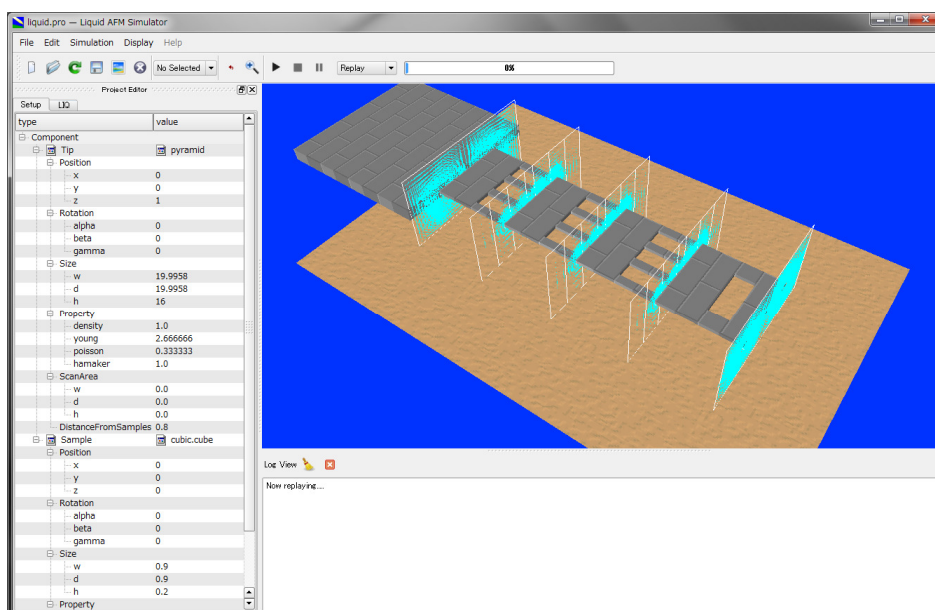


図 128 10 個の孔の開いたカンチレバーの振動をシミュレーションしている際の、GUI の外観

7.3 液中カンチレバーによる試料表面への粘弾性接触力学の計算法

LiqAFMでは、探針-試料間の粘弾性接触力学をシミュレートするためのオプションが用意されている。GUI画面左側のProjectEditorウィンドウ内に配置されているLIQ→Mode settingタブの、viscoelasticityボタンによって、このオプションを有効に出来る。このボタンは、デフォルトではoffになっているが、onに切り替えることで、粘弾性接触力学シミュレーションが可能となる。

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る。数値計算の手法は、おおよそ以下の通りである。すなわち、前節で説明した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する。

ファンデルワールス力領域からJKR理論領域へ遷移(slip-in)した場合、探針は、試料の凝着力によって、等速度運動で試料内部に引き込まれる。この際の探針の速度は、カンチレバーによって励振された探針の典型的な速度とほぼ同じに設定される。

JKR理論領域に遷移した探針の運動は、[5]章「粘弾性接触問題の取り扱い方法」で説明した通りとなる。

なお、探針が試料から離脱する瞬間で、シミュレーションは停止する設定となっている。計算結果データとして、delta_tipforce.csvという名前のファイルが出力される。このファイルは、探針のz方向の変位と、試料から探針に作用する外力のz方向成分の、時間変化を書き出したものである。

以下に、具体的な計算例を三つ紹介する。これらのシミュレーションにおける、各種物性値、パラメータの設定値は7-4節で説明する。

7.3.a 真空中、ばね定数が大きなカンチレバーの場合

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をシミュレーションした場合を考える。図 129のグラフは、その際の、探針先端の変位と、探針にかかる外力をプロットしたものである。なお、このグラフを得るには、delta_tipforce.csvのデータから得られる横軸 z 、縦軸 F のグラフ全体に対して、領域 $-2.0 \times 10^{-9} \leq z \leq 5.0 \times 10^{-10}$, $-1.0 \times 10^{-7} \leq F \leq 0$ を拡大する必要がある。グラフのカーブは、赤い矢印に従って時間発展するとする。

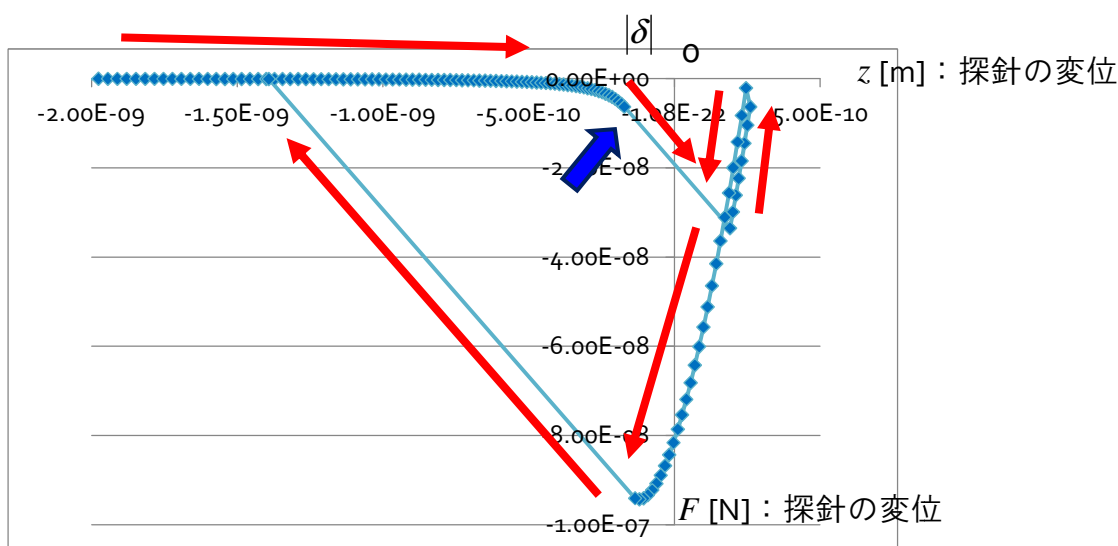


図 129 真空中、大きいばね定数のカンチレバーで粘弾性のある試料との接触をシミュレーションした際の、探針先端の変位と、探針にかかる外力をプロットしたグラフ

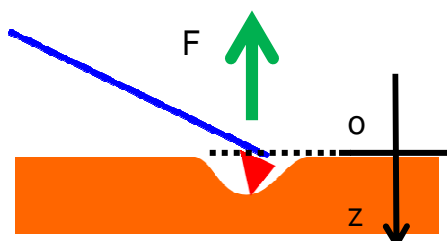


図 130 変数 z , F の向き

ただし、図 130のように、 z は鉛直方向下向きに正、 F は鉛直方向上向きに正とする。上のグラフでは、探針が試料に接触しているときの、探針先端部にかかる凝着力は80~100[nN]程度となっている。これは、適切な値である。

図 129の見方は次の通りである。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る。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る。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る。

探針が試料表面に接触する際の盛り上がりの高さは、

$$|\delta| = \left(\frac{AD}{6k} \right)^{1/3}$$

で表される。ただし、 A はHamaker定数、 k はばね定数、 D は探針の直径を表している。

7.3.b 真空中、小さいばね定数のカンチレバーの場合

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場合を考える。下のグラフは、その際の、探針先端の変位と、探針にかかる外力をプロットしたものである。なお、このグラフを得るには、delta_tipforce.csvのデータから得られる横軸 z 、縦軸 F のグラフ全体に対して、領域 $-1.0 \times 10^{-9} \leq z \leq 6.0 \times 10^{-10}$, $-1.0 \times 10^{-7} \leq F \leq 0$ を拡大する必要がある。グラフのカーブは、赤い矢印に従って時間発展するとする。

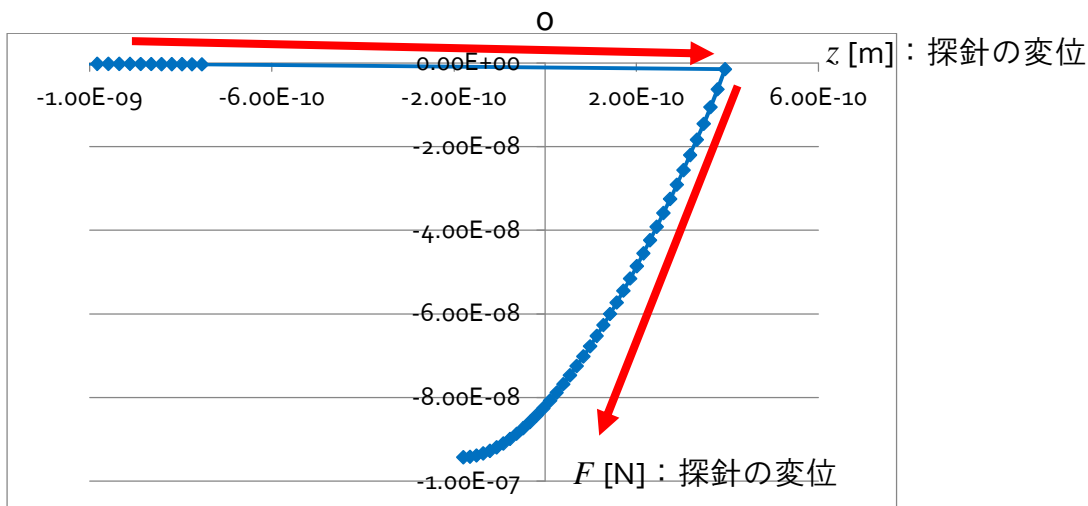


図 131 真空中、ばね定数が小さなカンチレバーで粘弾性のある試料との接触をシミュレーションした際の、探針先端の変位と、探針にかかる外力をプロットしたグラフ

図 131のグラフの場合、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る。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ない。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ある。(探針がJKR理論からファンデルワールス分子間力にslip-outする過程で、カンチレバーのばね定数が小さい場合、無限遠に近い距離に飛ばされてしまうケースが多い。)

7.3.c 液体中、ばね定数が大きなカンチレバーの場合

液体中、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場合を考える。図 132のグラフは、その際の、探針先端の変位と、探針にかかる外力をプロットしたものである。なお、このグラフを得るには、delta_tipforce.csvのデータから得られる横軸 z 、縦軸 F のグラフ全体に対して、領域

$-2.0 \times 10^{-9} \leq z \leq 5.0 \times 10^{-10}$, $-1.0 \times 10^{-7} \leq F \leq 0$ を拡大する必要がある。グラフのカーブは、赤い矢印に従って時間発展するとする。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る。

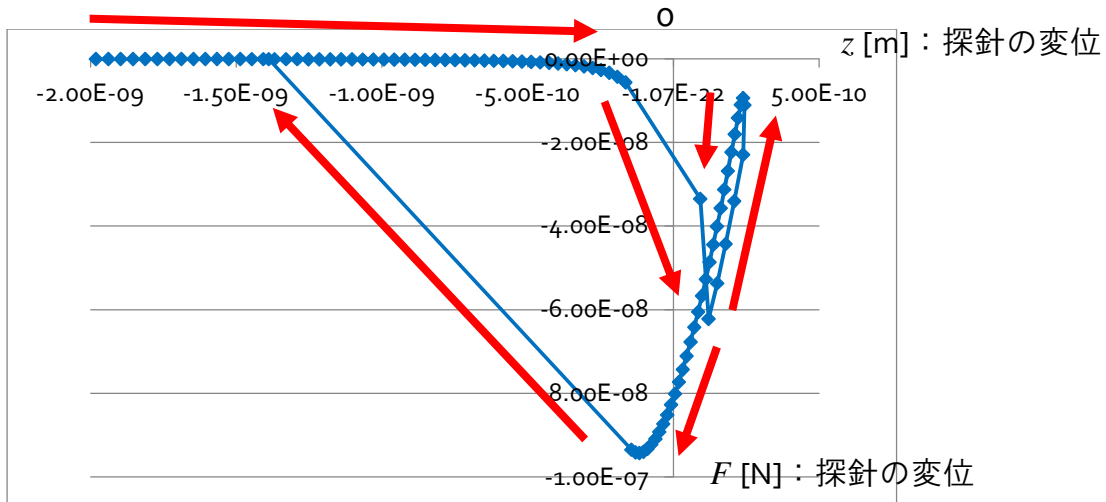


図 132 液体中、ばね定数が大きなカンチレバーで粘弾性のある試料との接触をシミュレーションした際の、探針先端の変位と、探針にかかる外力をプロットしたグラフ

7.4 LiqAFM 使用法の実例 —使用手引—

この節では、LiqAFMを実際に使用する際、物性値、パラメータ値をどのように設定すれば良いかについて説明する。

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

まず、7.2節で行った多数の孔を開けたカンチレバーを液体中で振動させるシミュレーションの実行方法について説明する。シミュレーションで実際に使用したprojectファイルを下に示す。

```
<Project>
  <Setup headers="type,value">
    <Component>
      <Tip charge="" radius="0" type="model" free="" angle="32">pyramid
        <Position><x>0</x>
          <y>0</y>
          <z min="0">1</z>
        </Position>
        <Rotation><alpha min="-180" max="180">0</alpha>
          <beta min="-180" max="180">0</beta>
          <gamma min="-180" max="180">0</gamma>
        </Rotation>
        <Size><w ctrl="label">19.9958192610985</w>
          <d ctrl="label">19.9958192610985</d>
          <h ctrl="label">16</h>
        </Size>
        <Property><density unit="a.u.">1.0</density>
          <young unit="a.u.">2.666666</young>
    </Component>
  </Setup>
</Project>
```

```

        <poisson>0.333333</poisson>
        <hamaker unit="a.u.">1.0</hamaker>
    </Property>
    <ScanArea><w min="-1000" max="1000">0.0</w>
        <d min="-1000" max="1000">0.0</d>
        <h min="-1000" max="1000">0.0</h>
    </ScanArea>
    <DistanceFromSamples unit="nm">0.8</DistanceFromSamples>
</Tip>
    <Sample charge="" type="grid" free="">cubic.cube
    <Position><x>0</x>
        <y>0</y>
        <z min="0">0</z>
    </Position>
    <Rotation><alpha min="-180" max="180">0</alpha>
        <beta min="-180" max="180">0</beta>
        <gamma min="-180" max="180">0</gamma>
    </Rotation>
    <Size><w ctrl="label">0.9</w>
        <d ctrl="label">0.9</d>
        <h ctrl="label">0.2</h>
    </Size>
    <Property><density unit="a.u.">1.0</density>
        <young unit="a.u.">2.666666</young>
        <poisson>0.333333</poisson>
        <hamaker unit="a.u.">1.0</hamaker>
    </Property>
</Sample>
</Component>
</Setup>
<LIQ headers="name,value,unit,descriptions">
    <fluid>
<material><kviscosity unit="m^2/s" unitgrp="m^2/s">0.25e-06</kviscosity>
        <density unit="kg/m^3" unitgrp="kg/m^3, g/cm^3">200.0</density>
        <impulse unit="N/ms" unitgrp="N/ms">0.0e-06</impulse>
    </material>
    </fluid>
    <bar>
<material><density unit="kg/m^3" max="10000.0">2330.0</density>
        <young unit="GPa" max="1000.0">130.0</young>
        <poisson>0.28</poisson>
    </material>
    <structure><length unit="um" max="1000.0">400.0</length>
        <width unit="um" max="1000.0">100.0</width>
        <depth unit="um">4.0</depth>
        <angle unit="degree" max="89.9">0.0</angle>
        <twist unit="degree" min="-89.9" max="89.9">0.0</twist>
        <sections>17</sections>
        <tip><position unit="um" max="1000.0">400.0</position>
            <width unit="um">0.0</width>
            <radius unit="nm">1.0</radius>
        </tip>
        <spotlight display="false"><position display="false" unit="um">400.0</position>
            <distance display="false" unit="um">1000.0</distance>
            <angle display="false" unit="degree">0.0</angle>
        </spotlight>
        <body display="false"><section display="false">0.0 1.0 1.0</section>
            <section display="false">1.0 1.0 1.0</section>
        </body>
        <split display="false"><section display="false">0.125 0.0 0.1</section>
            <section display="false">0.25 0.0 0.1</section>
        </split>
        <split display="false"><section display="false">0.125 0.2 0.4</section>
            <section display="false">0.25 0.2 0.4</section>
        </split>
        <split display="false"><section display="false">0.375 0.0 0.1</section>
            <section display="false">0.5 0.0 0.1</section>

```

```

        </split>
        <split display="false"><section display="false">0.375 0.2 0.4</section>
            <section display="false">0.5 0.2 0.4</section>
        </split>
        <split display="false"><section display="false">0.625 0.0 0.1</section>
            <section display="false">0.75 0.0 0.1</section>
        </split>
        <split display="false"><section display="false">0.625 0.2 0.4</section>
            <section display="false">0.75 0.2 0.4</section>
        </split>
        <split display="false"><section display="false">0.875 0.0 0.3</section>
            <section display="false">0.9375 0.0 0.3</section>
        </split>
    </structure>
    <motion><frequency unit="kHz" max="1000.0">5.0</frequency>
        <amplitude unit="nm">5.0</amplitude>
        <baseheight unit="um">50</baseheight>
    </motion>
</bar>
<sample>
<material>
    <point><young unit="GPa" max="1000000000.0">1.0e+05</young>
        <dampner unit="Ns/um">0.0</dampner>
        <tension unit="uN">0.0</tension>
        <touch unit="nm">1.5</touch>
        <detach unit="">1.0</detach>
    </point>
</material>
<structure>
<surface display="false">
    <section display="false" unit="um">0.0 0.0</section>
    <section display="false" unit="um">1.0 0.0</section>
</surface>
</structure>
</sample>
<simulation><resolution display="false" unit="nm">0.1</resolution>
    <time><steps_per_cycle max="2048.0">1024</steps_per_cycle>
        <cycles_per_resolution step="smooth">8</cycles_per_resolution>
    </time>
    <convergence>
    <criteria>0.0</criteria>
    </convergence>
</simulation>
<Output>
<Directory ctrl="label">.\output
    <height where="head" interval="32" displaytype="2D" ctrl="label">height.dat</height>
    <height_amplitude where="head" interval="32" displaytype="2D"
ctrl="label">height_amplitude.dat</height_amplitude>
    <twist where="head" interval="32" displaytype="2D" ctrl="label">twist.dat</twist>
    <tipforce where="head" interval="32" displaytype="2D" ctrl="label">tipforce.dat</tipforce>
    <Movie displaytype="movie" ctrl="label">movie1.mvc</Movie>
    <bar_motion displaytype="movie" ctrl="label">barmotion.bar</bar_motion>
</Directory>
</Output>
</LIQ>
</Project>

```

上記のprojectファイルは、拡張子が.proのテキストファイルとして作成・編集する。SPMシミュレータの実行ファイル等が収められているフォルダ内には、SampleProjectsという名前のフォルダが用意されている。そのフォルダ内に、projectファイルのサンプルが含まれているので、これを参考にすると良い。

上記のprojectファイルにおいて、重要と思われる部分を以下に説明する。

まず、カンチレバーの形状は、<bar><structure>というタグの下にある、以下の記述により指定される。

```

<body display="false"><section display="false">0.0 1.0 1.0</section>
<section display="false">1.0 1.0 1.0</section>
</body>
<split display="false"><section display="false">0.125 0.0 0.1</section>
<section display="false">0.25 0.0 0.1</section>
</split>
<split display="false"><section display="false">0.125 0.2 0.4</section>
<section display="false">0.25 0.2 0.4</section>
</split>
<split display="false"><section display="false">0.375 0.0 0.1</section>
<section display="false">0.5 0.0 0.1</section>
</split>
<split display="false"><section display="false">0.375 0.2 0.4</section>
<section display="false">0.5 0.2 0.4</section>
</split>
<split display="false"><section display="false">0.625 0.0 0.1</section>
<section display="false">0.75 0.0 0.1</section>
</split>
<split display="false"><section display="false">0.625 0.2 0.4</section>
<section display="false">0.75 0.2 0.4</section>
</split>
<split display="false"><section display="false">0.875 0.0 0.3</section>
<section display="false">0.9375 0.0 0.3</section>
</split>

```

上記の記述で指定されるカンチレバー形状は、図 133 のようになる。

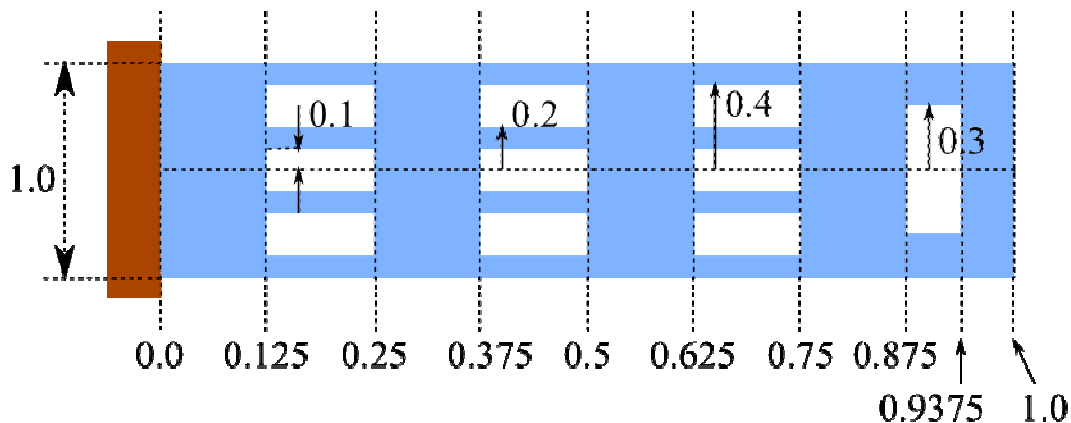


図 133 孔が 10 個開いたカンチレバーの形状

Project ファイルに記入される重要な項目のリストは以下の通りである。

表 12 LiqAFM の Project ファイルに記入される重要な項目

<LIQ><fluid><material><kviscosity>	流体の動粘性係数(unit="m ² /s")
<LIQ><fluid><material><density>	流体の密度(unit="kg/m ³ ")
<LIQ><fluid><material><impulse>	流体が受ける分子のランダムな撃力 (unit="N/ms")

<LIQ><bar><material><density>	カンチレバー材質の密度(unit="kg/m ³ ")
<LIQ><bar><material><young>	カンチレバー材質のヤング率(unit="GPa")
<LIQ><bar><material><poisson>	カンチレバー材質のポアソン比(無次元量)
<LIQ><bar><material><friction>	カンチレバー材質の摩擦係数(無次元量)
<LIQ><bar><material><hamaker>	カンチレバー材質のハーマーカー定数 (unit="J")
<LIQ><bar><structure><tip><radius>	カンチレバー先端探針半径(unit="nm")
<LIQ><bar><motion><frequency>	カンチレバーを外力で振動させる際の周波数 (unit="kHz")
<LIQ><bar><motion><amplitude>	カンチレバーを外力で振動させる際の振幅 (unit="nm")
<LIQ><bar><motion><baseheight>	試料表面から静止時のカンチレバー中心までの高さ(unit="nm")[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と、ほぼ等しい値が望ましい]
<LIQ><bar><DistanceFromSamples>	baseheightと等しい値を入れる (unit="nm")
<LIQ><sample><material><point><young>	試料のヤング率(unit="GPa")
<LIQ><sample><material><point><poisson>	試料のポアソン比(無次元量)
<LIQ><sample><material><point><dampen>	ダンパー定数(unit="Ns/m")[探針の速度に比例した抵抗力を生成させたい場合に使用する]
<LIQ><sample><material><point><tension>	探針-試料接触時の張力(unit="uN")
<LIQ><sample><material><point><touch>	静止時の探針から試料表面に接触するまでの距離(負の値となる)[baseheightの反対符号の値を入れる](unit="nm")
<LIQ><sample><material><point><detach>	静止時の探針と、探針が試料表面から離脱する点までの距離(負の値となる)[touchと等しい値を入れる](unit="nm")
<LIQ><sample><material><point><hamaker>	試料のハーマーカー定数(unit="J")

<LIQ><sample><material><point><adhesive>	試料の表面張力(unit="N/m")
<LIQ><simulation><time><max_cycles step="smooth">1.6	カンチレバーが外力によって振動する際の、シミュレーションの開始から終了までの周期(無次元量)[1.6程度とすると良い]
<LIQ><Output><Directory><delta_tipforce where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">delta_tipforce.csv	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・斥力の時間変化を得る事が出来る

7.4.b 真空中での、ばね定数が大きなカンチレバーのシミュレーション

7.3.a節で行った「真空中、ばね定数が大きなカンチレバーの場合」のシミュレーションのためのprojectファイルは以下の通りである。

```

<Project>
  <Setup headers="type,value">
    <Component>
      <Tip charge="" radius="0" type="model" free="" angle="32">pyramid
        <Position><x>0</x>
          <y>0</y>
          <z min="0">0</z>
        </Position>
        <Rotation><alpha min="-180" max="180">0</alpha>
          <beta min="-180" max="180">0</beta>
          <gamma min="-180" max="180">0</gamma>
        </Rotation>
        <Size><w ctrl="label">19.9958192610985</w>
          <d ctrl="label">19.9958192610985</d>
          <h ctrl="label">16</h>
        </Size>
        <Property><density unit="a.u.">1.0</density>
          <young unit="a.u.">2.666666</young>
          <poisson>0.333333</poisson>
          <hamaker unit="a.u.">0.0</hamaker>
        </Property>
        <ScanArea><w min="-1000" max="1000">0.0</w>
          <d min="-1000" max="1000">0.0</d>
          <h min="-1000" max="1000">0.0</h>
        </ScanArea>
        <DistanceFromSamples unit="nm">30.0</DistanceFromSamples>
      </Tip>
      <Sample charge="" type="grid" free="">cubic.cube
        <Position><x>0</x>
          <y>0</y>
          <z min="0">0</z>
        </Position>
        <Rotation><alpha min="-180" max="180">0</alpha>
          <beta min="-180" max="180">0</beta>
          <gamma min="-180" max="180">0</gamma>
        </Rotation>
        <Size><w ctrl="label">0.0</w>
          <d ctrl="label">0.0</d>
          <h ctrl="label">0.0</h>
        </Size>
        <Property><density unit="a.u.">1.0</density>
          <young unit="a.u.">2.666666</young>

```

```

        <poisson>0.333333</poisson>
        <hamaker unit="a.u.">0.0</hamaker>
    </Property>
</Sample>
</Component>
</Setup>
<LIQ headers="name,value,unit,descriptions">
<!--
    <fluid>
        <material><kviscosity unit="m^2/s">0.25e-06</kviscosity>
            <density unit="kg/m^3">200.0</density>
            <impulse unit="N/ms">0.0e-6</impulse>
        </material>
    </fluid>
-->
    <bar>
<material><density unit="kg/m^3" unitgrp="kg/m^3" max="10000.0">2200.0</density>
        <young unit="GPa" unitgrp="GPa,MPa,kPa,Pa" max="1000.0">6000.0</young>
        <poisson>0.22</poisson>
        <friction>0.</friction>
        <hamaker unit="J">5.0e-20</hamaker>
    </material>
    <structure><length unit="um" unitgrp="um,nm" max="1000.0">400</length>
        <width unit="um" unitgrp="um,nm" max="1000.0">50</width>
        <depth unit="um" unitgrp="um,nm">4</depth>
        <angle unit="deg" max="89.9">0.0</angle>
        <twist unit="deg" min="-89.9" max="89.9">0.0</twist>
        <sections max="500">17</sections>
        <tip><position unit="um" max="1000.0">400</position>
            <width unit="um">0.0</width>
            <radius unit="nm">25.0</radius>
        </tip>
        <spotlight><position unit="um" max="1000.0">400</position>
            <distance unit="um" max="10000.0">1000.0</distance>
            <angle unit="deg">0.0</angle>
    </spotlight>
        <body><section display="false">0.0 1.0 1.0</section>
            <section>1.0 1.0 1.0</section>
        </body>
    </structure>
    <motion><frequency unit="kHz" unitgrp="kHz,MHz,Hz">1.0</frequency>
        <amplitude unit="nm" unitgrp="nm,um,ang">30.0</amplitude>
        <baseheight unit="nm" unitgrp="nm,um,mm,ang">30.0</baseheight>
    </motion>
    <DistanceFromSamples unit="nm" unitgrp="nm,um,ang,mm">30.0</DistanceFromSamples>
</bar>
<sample unit="">
<material>
    <point><young unit="GPa" unitgrp="GPa,MPa,kPa,Pa" max="100000.0">76.5</young>
        <poisson>0.22</poisson>
        <dampner unit="Ns/m" unitgrp="Ns/um,Ns/m">0.0</dampner>
        <tension unit="uN" unitgrp="uN,nN,N">0.0</tension>
        <touch unit="nm" unitgrp="um,nm,ang">-30.0</touch>
        <detach unit="nm">-30.0</detach>
        <hamaker unit="J">5.0e-20</hamaker>
        <adhesive unit="N/m">0.4</adhesive>
    </point>
</material>
<structure>
    <surface display="false">
        <section display="false" unit="um">0.0 0.0</section>
        <section display="false" unit="um">1.0 0.0</section>
    </surface>
</structure>
</sample>
<simulation>
<time><steps_per_cycle max="2048.0">2048</steps_per_cycle>

```

```

        <max_cycles step="smooth">1.6</max_cycles>
    </time>
    <convergence>
    <criterion min="0.0" max="0.99">0.0</criterion>
    </convergence>
</simulation>
<Output>
<Directory ctrl="label">.\output
    <resonance_curve displaytype="1D" ctrl="label">resonance.csv</resonance_curve>
        <height where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">height.csv</height>
        <height_amplitude where="head" interval="8" displaytype="1D"
ctrl="label">height_amplitude.csv</height_amplitude>
        <tipforce where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">tipforce.csv</tipforce>
        <bending where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">bending.csv</bending>
        <delta_tipforce where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">delta_tipforce.csv</delta_tipforce>
        <Movie interval="8" displaytype="movie" ctrl="label">movie1.mvc</Movie>
        <bar_motion interval="8" displaytype="movie" ctrl="label">barmotion.bar</bar_motion>
    </Directory>
</Output>
</LIQ>
</Project>

```

なお、projectファイル内において、「<!-->」と「-->」で囲まれた部分は読み飛ばされる規則となっている。上のprojectファイルにおいては、<fluid>の部分が無効となっており、よって、真空中のシミュレーションが実行されることとなる。

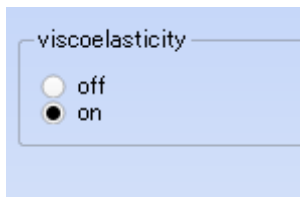


図 134 LIQ→Mode setting タブの、viscoelasticity ボタン

さらに、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、図 134に示す、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ボタンをonにすることに注意する。(このボタンは、デフォルトではoffとなっている。)

7.4.c 真空中での、ばね定数が小さなカンチレバーのシミュレーション

7.3.b節で行った「真空中、ばね定数が小さなカンチレバーの場合」のシミュレーションのためのprojectファイルは以下の通りである。

```
<Project>
<Setup headers="type,value">
<Component>
<Tip charge="" radius="0" type="model" free="" angle="32">pyramid
  <Position><x>0</x>
    <y>0</y>
    <z min="0">0</z>
  </Position>
  <Rotation><alpha min="-180" max="180">0</alpha>
    <beta min="-180" max="180">0</beta>
    <gamma min="-180" max="180">0</gamma>
  </Rotation>
  <Size><w ctrl="label">19.9958192610985</w>
    <d ctrl="label">19.9958192610985</d>
    <h ctrl="label">16</h>
  </Size>
  <Property><density unit="a.u.">1.0</density>
    <young unit="a.u.">2.666666</young>
    <poisson>0.333333</poisson>
    <hamaker unit="a.u.">0.0</hamaker>
  </Property>
  <ScanArea><w min="-1000" max="1000">0.0</w>
    <d min="-1000" max="1000">0.0</d>
    <h min="-1000" max="1000">0.0</h>
  </ScanArea>
  <DistanceFromSamples unit="nm">30.0</DistanceFromSamples>
</Tip>
<Sample charge="" type="grid" free="">cubic.cube
<Position><x>0</x>
  <y>0</y>
  <z min="0">0</z>
</Position>
<Rotation><alpha min="-180" max="180">0</alpha>
  <beta min="-180" max="180">0</beta>
  <gamma min="-180" max="180">0</gamma>
</Rotation>
<Size><w ctrl="label">0.0</w>
```

```

        <d ctrl="label">0.0</d>
        <h ctrl="label">0.0</h>
    </Size>
    <Property><density unit="a.u.">1.0</density>
        <young unit="a.u.">2.666666</young>
        <poisson>0.333333</poisson>
        <hamaker unit="a.u.">0.0</hamaker>
    </Property>
</Sample>
</Component>
</Setup>
<LIQ headers="name,value,unit,descriptions">
<!--
    <fluid>
        <material><kviscosity unit="m^2/s">0.25e-06</kviscosity>
            <density unit="kg/m^3">200.0</density>
            <impulse unit="N/ms">0.0e-6</impulse>
        </material>
    </fluid>
-->
    <bar>
        <material><density unit="kg/m^3" unitgrp="kg/m^3" max="10000.0">2200.0</density>
            <young unit="GPa" unitgrp="GPa,MPa,kPa,Pa" max="1000.0">76.5</young>
            <poisson>0.22</poisson>
            <friction>0.</friction>
            <hamaker unit="J">5.0e-20</hamaker>
        </material>
        <structure><length unit="um" unitgrp="um,nm" max="1000.0">400</length>
            <width unit="um" unitgrp="um,nm" max="1000.0">50</width>
            <depth unit="um" unitgrp="um,nm">4</depth>
            <angle unit="deg" max="89.9">0.0</angle>
            <twist unit="deg" min="-89.9" max="89.9">0.0</twist>
            <sections max="500">17</sections>
            <tip><position unit="um" max="1000.0">400</position>
                <width unit="um">0.0</width>
                <radius unit="nm">25.0</radius>
            </tip>
            <spotlight><position unit="um" max="1000.0">400</position>
                <distance unit="um" max="10000.0">1000.0</distance>
                <angle unit="deg">0.0</angle>
            </spotlight>
            <body><section display="false">0.0 1.0 1.0</section>
                <section>1.0 1.0 1.0</section>
            </body>
        </structure>
        <motion><frequency unit="kHz" unitgrp="kHz,MHz,Hz">1.0</frequency>
            <amplitude unit="nm" unitgrp="nm,um,ang">30.0</amplitude>
            <baseheight unit="nm" unitgrp="nm,um,mm,ang">30.0</baseheight>
        </motion>
        <DistanceFromSamples unit="nm" unitgrp="nm,um,ang,mm">30.0</DistanceFromSamples>
    </bar>
    <sample unit="">
    <material>
        <point><young unit="GPa" unitgrp="GPa,MPa,kPa,Pa" max="100000.0">76.5</young>
            <poisson>0.22</poisson>
            <dampner unit="Ns/m" unitgrp="Ns/um,Ns/m">0.0</dampner>
            <tension unit="uN" unitgrp="uN,nN,N">0.0</tension>
            <touch unit="nm" unitgrp="um,nm,ang">-30.0</touch>
    </material>

```

```

    <detach unit="nm">-30.0</detach>
    <hamaker unit="J">5.0e-20</hamaker>
    <adhesive unit="N/m">0.4</adhesive>
  </point>
</material>
<structure>
<surface display="false"><section display="false" unit="um">0.0 0.0</section>
    <section display="false" unit="um">1.0 0.0</section>
  </surface>
</structure>
</sample>
<simulation>
<time><steps_per_cycle max="2048.0">2048</steps_per_cycle>
  <max_cycles step="smooth">1.6</max_cycles>
</time>
<convergence>
<criteria min="0.0" max="0.99">0.0</criteria>
</convergence>
</simulation>
<Output>
<Directory ctrl="label">.\output<resonance_curve displaytype="1D" ctrl="label">resonance.csv</resonance_curve>
  <height where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">height.csv</height>
  <height_amplitude where="head" interval="8" displaytype="1D"
ctrl="label">height_amplitude.csv</height_amplitude>
  <tipforce where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">tipforce.csv</tipforce>
  <bending where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">bending.csv</bending>
  <delta_tipforce where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">delta_tipforce.csv</delta_tipforce>
  <Movie interval="8" displaytype="movie" ctrl="label">movie1.mvc</Movie>
  <bar_motion interval="8" displaytype="movie" ctrl="label">barmotion.bar</bar_motion>
</Directory>
</Output>
</LIQ>
</Project>

```

7.4.d 液体中での、ばね定数が大きなカンチレバーのシミュレーション

7.3.c節で行った「液体中、ばね定数が大きなカンチレバーの場合」のシミュレーションのためのprojectファイルは以下の通りである。

```

<Project>
  <Setup headers="type,value">
    <Component>
      <Tip charge="" radius="0" type="model" free="" angle="32">pyramid
      <Position><x>0</x>
        <y>0</y>
        <z min="0">0</z>
      </Position>
      <Rotation><alpha min="-180" max="180">0</alpha>
        <beta min="-180" max="180">0</beta>
        <gamma min="-180" max="180">0</gamma>
      </Rotation>
      <Size><w ctrl="label">19.9958192610985</w>
        <d ctrl="label">19.9958192610985</d>
        <h ctrl="label">16</h>
    </Component>
  </Setup>
</Project>

```

```

</Size>
<Property><density unit="a.u.">1.0</density>
    <young unit="a.u.">2.666666</young>
    <poisson>0.333333</poisson>
    <hamaker unit="a.u.">0.0</hamaker>
</Property>
<ScanArea><w min="-1000" max="1000">0.0</w>
    <d min="-1000" max="1000">0.0</d>
    <h min="-1000" max="1000">0.0</h>
</ScanArea>
<DistanceFromSamples unit="nm">30.0</DistanceFromSamples>
</Tip>
<Sample charge="" type="grid" free="">cubic.cube
<Position><x>0</x>
    <y>0</y>
    <z min="0">0</z>
</Position>
<Rotation><alpha min="-180" max="180">0</alpha>
    <beta min="-180" max="180">0</beta>
    <gamma min="-180" max="180">0</gamma>
</Rotation>
<Size><w ctrl="label">0.0</w>
    <d ctrl="label">0.0</d>
    <h ctrl="label">0.0</h>
</Size>
<Property><density unit="a.u.">1.0</density>
    <young unit="a.u.">2.666666</young>
    <poisson>0.333333</poisson>
    <hamaker unit="a.u.">0.0</hamaker>
</Property>
</Sample>
</Component>
</Setup>
<LIQ headers="name,value,unit,descriptions">
<fluid>
    <material><kviscosity unit="m^2/s">0.25e-06</kviscosity>
        <density unit="kg/m^3">200.0</density>
        <impulse unit="N/ms">0.0e-6</impulse>
    </material>
</fluid>
<bar>
<material><density unit="kg/m^3" unitgrp="kg/m^3" max="10000.0">2200.0</density>
    <young unit="GPa" unitgrp="GPa,MPa,kPa,Pa" max="1000.0">6000.0</young>
    <poisson>0.22</poisson>
    <friction>0.</friction>
    <hamaker unit="J">5.0e-20</hamaker>
</material>
<structure><length unit="um" unitgrp="um,nm" max="1000.0">400</length>
    <width unit="um" unitgrp="um,nm" max="1000.0">50</width>
    <depth unit="um" unitgrp="um,nm">4</depth>
    <angle unit="deg" max="89.9">0.0</angle>
    <twist unit="deg" min="-89.9" max="89.9">0.0</twist>
    <sections max="500">17</sections>
    <tip><position unit="um" max="1000.0">400</position>
        <width unit="um">0.0</width>
        <radius unit="nm">25.0</radius>
    </tip>
    <spotlight><position unit="um" max="1000.0">400</position>

```

```

        <distance unit="um" max="10000.0">1000.0</distance>
        <angle unit="deg">0.0</angle>
    </spotlight>
    <body><section display="false">0.0 1.0 1.0</section>
        <section>1.0 1.0 1.0</section>
    </body>
</structure>
<motion><frequency unit="kHz" unitgrp="kHz,MHz,Hz">20.0</frequency>
    <amplitude unit="nm" unitgrp="nm,um,ang">30.0</amplitude>
    <baseheight unit="nm" unitgrp="nm,um,mm,ang">30.0</baseheight>
</motion>
<DistanceFromSamples unit="nm" unitgrp="nm,um,ang,mm">30.0</DistanceFromSamples>
</bar>
<sample unit="">
<material>
    <point><young unit="GPa" unitgrp="GPa,MPa,kPa,Pa" max="100000.0">76.5</young>
        <poisson>0.22</poisson>
        <damper unit="Ns/m" unitgrp="Ns/um,Ns/m">0.0</damper>
        <tension unit="uN" unitgrp="uN,nN,N">0.0</tension>
        <touch unit="nm" unitgrp="um,nm,ang">-30.0</touch>
        <detach unit="nm">-30.0</detach>
        <hamaker unit="J">5.0e-20</hamaker>
        <adhesive unit="N/m">0.4</adhesive>
    </point>
</material>
<structure>
<surface display="false"><section display="false" unit="um">0.0 0.0</section>
        <section display="false" unit="um">1.0 0.0</section>
    </surface>
</structure>
</sample>
<simulation>
<time><steps_per_cycle max="2048.0">1024</steps_per_cycle>
    <max_cycles step="smooth">1.6</max_cycles>
</time>
<convergence>
<criteria min="0.0" max="0.99">0.0</criteria>
</convergence>
</simulation>
<Output>
<Directory ctrl="label">.\output<resonance_curve displaytype="1D" ctrl="label">resonance.csv</resonance_curve>
    <height where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">height.csv</height>
    <height_amplitude where="head" interval="8" displaytype="1D"
ctrl="label">height_amplitude.csv</height_amplitude>
    <tipforce where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">tipforce.csv</tipforce>
    <bending where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">bending.csv</bending>
    <delta_tipforce where="head" interval="1" displaytype="1D" ctrl="label">delta_tipforce.csv</delta_tipforce>
    <Movie interval="8" displaytype="movie" ctrl="label">movie1.mvc</Movie>
    <bar_motion interval="8" displaytype="movie" ctrl="label">barmotion.bar</bar_motion>
</Directory>
</Output>
</LIQ>
</Project>

```