

高分子・ソフトマテリアル等の材料分野での活用が期待されます

AFM周波数シフト像、位相シフト像を求める機能

- 試料形状データからAFM周波数シフト像、位相シフト像を求めます
- 探針—試料間のフォースカーブにおいて、ヒステリシスを考慮します
- 粘弾性接触力学が、探針—試料間の相互作用に適用されます
- 探針が試料表面から離れているときは、van der Waals力が仮定されます
- 探針が試料表面に接触しているときは、JKR(Johnson, Kendall, and Roberts)モデルが仮定されます
- 探針—試料表面間の接触・離脱の状態遷移は確率モデルが適用されます

周波数シフト、位相シフトから物性値を逆算する機能(逆問題)

- 周波数シフト、位相シフトの観測値から、試料表面のヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めることができます
- 物性値パラメータを逆算する際、最適なパラメータの組を大局的に求めるglobal modeと、局所的な最適解を求めるlocal modeの、二種類のモードが用意されています

AFM周波数シフト像、位相シフト像を求める機能

AFM(原子間力顕微鏡)における、探針—試料間の粘弾性接触

ファンデルワールス
相互作用

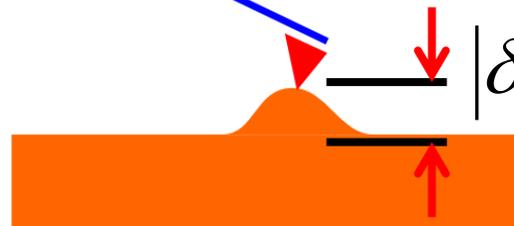


JKR(Johnson, Kendall, and
Roberts)モデル

探針と試料を弾性体と見なし、探針
と試料の接触において、凝着力の効
果を考慮する



探針が試料に接触
していないときは、
探針—試料間で
ファンデルワール
ス力が働くと仮定



探針が試料に接触す
る瞬間、試料表面は
盛り上がる



探針が試料に接触
しているときは、
JKRモデルを仮定

Van der Waals力とJKRモデル間の遷移

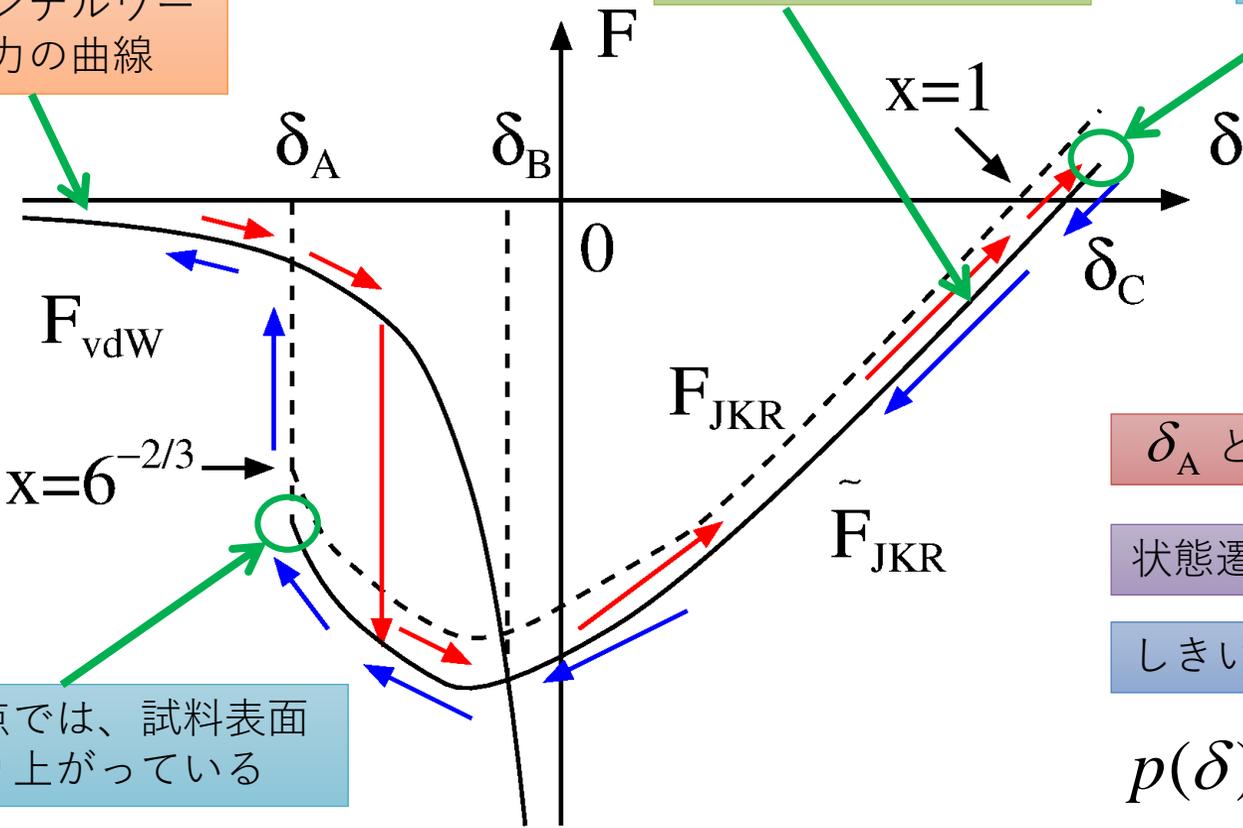


フォースカーブにヒステリシスが生じる

ファンデルワールス力の曲線

JKRモデルから得られるフォースカーブ

この点では、探針は試料内部奥深くに押し込まれている



この点では、試料表面は盛り上がっている

δ_A と δ_B の間で遷移は起こる

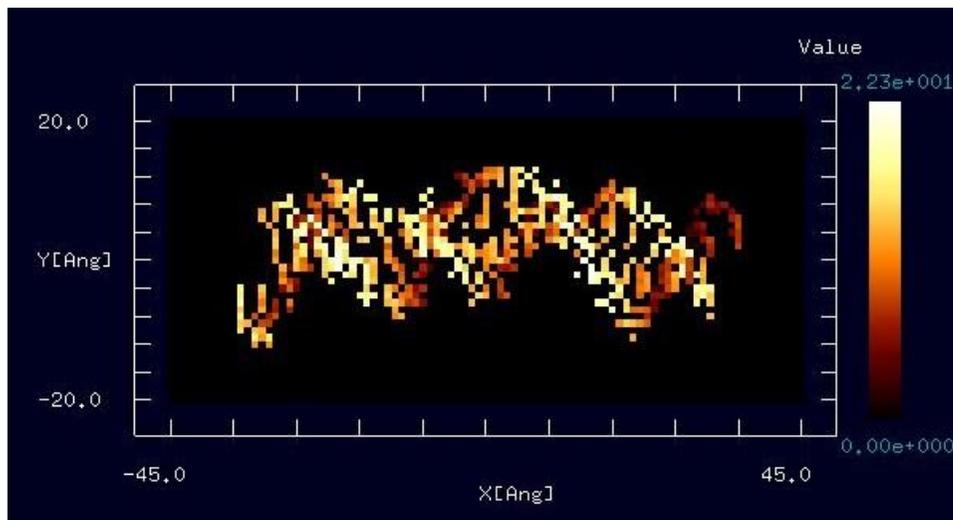
状態遷移は確率的に起こると仮定

しきい値確率:

$$p(\delta) = \exp\left(-\frac{\delta_B - \delta}{\delta_B - \delta_A}\right)$$

→ : 探針が試料表面に接近するプロセス

→ : 探針が試料表面から遠ざかるプロセス

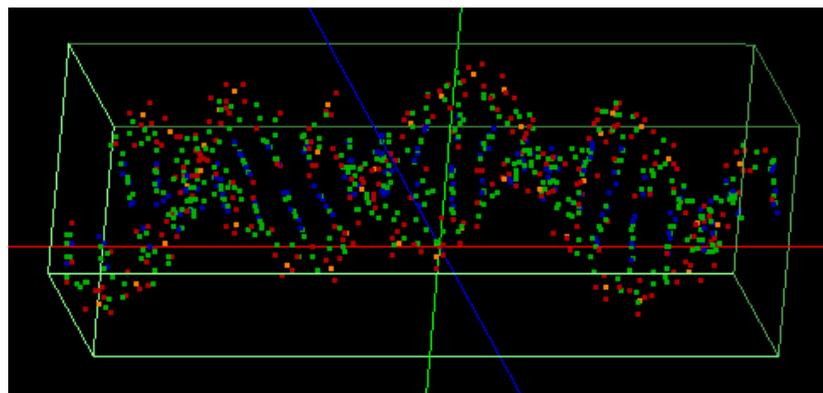


カンチレバーの振動:
周波数: 20.0[kHz]
振幅: 30.0[nm]

試料:
ヤング率: 76.5[GPa]
ポアソン比: 0.22
ハーメーカー定数: 5.0e-20[J]
表面張力: 0.4[N/m]
粘性抵抗: 10.0[Pa s]

流体:
動粘性係数: 0.25e-6[m²/s]
密度: 200.0[kg/m³]

カンチレバー:
密度: 2200.0 [kg/m³]
ヤング率: 6000.0[GPa]
ポアソン比: 0.22
長さ、幅、深さ:
400.0, 50.0, and 4.0[μ m]
ばね定数: 75.0[N/m]
探針のハーメーカー定数: 5.0e-20[J]



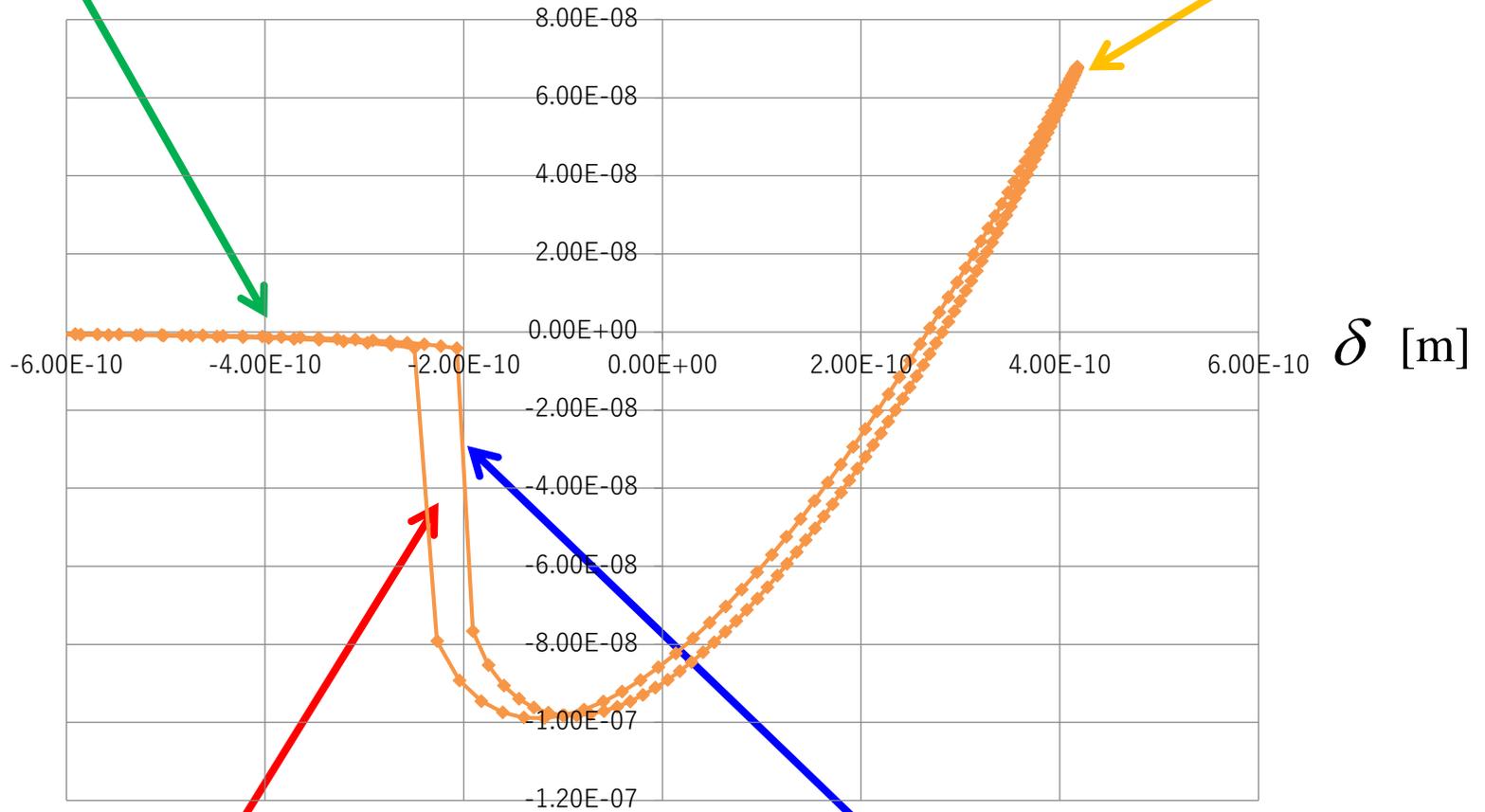
DNAの分子構造図

実際のシミュレーションでのフォースカーブ

ファンデルワールス力

F [N]

JKRモデル



ヒステリシスが生じている

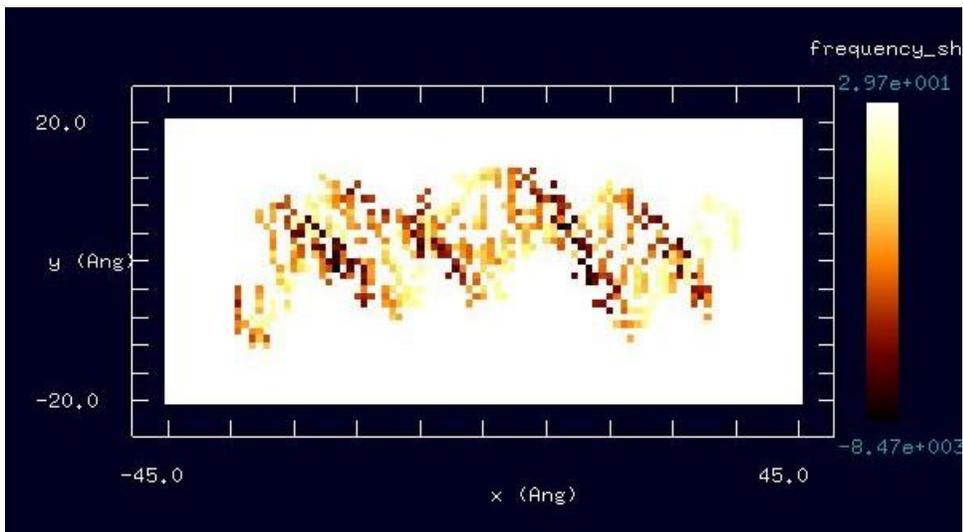
確率的状態遷移

液中環境下でのシミュレーション

周波数シフト

最大値: 0.0297[kHz]

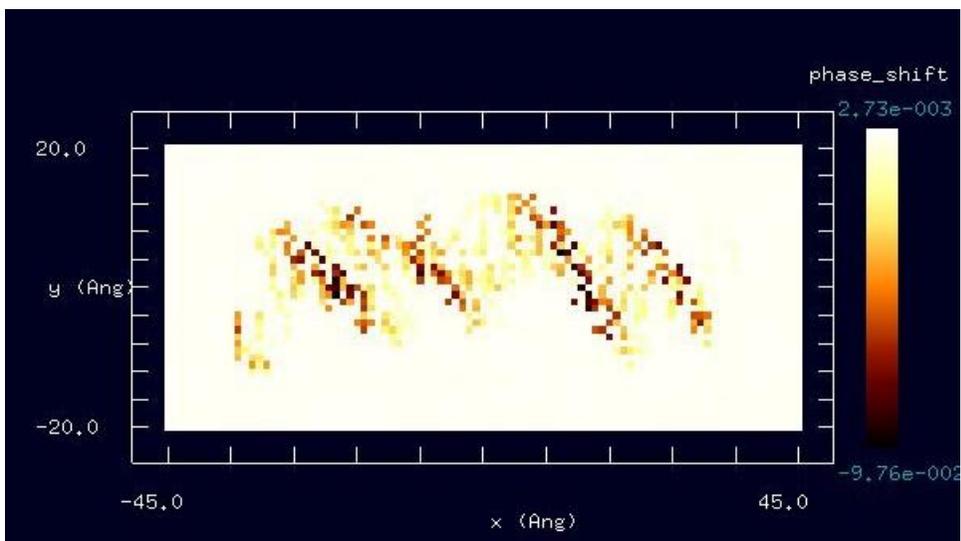
最小値: -8.47[kHz]



位相シフト

最大値: $2.73e-3$ [radian]

最小値: $-9.76e-2$ [radian]

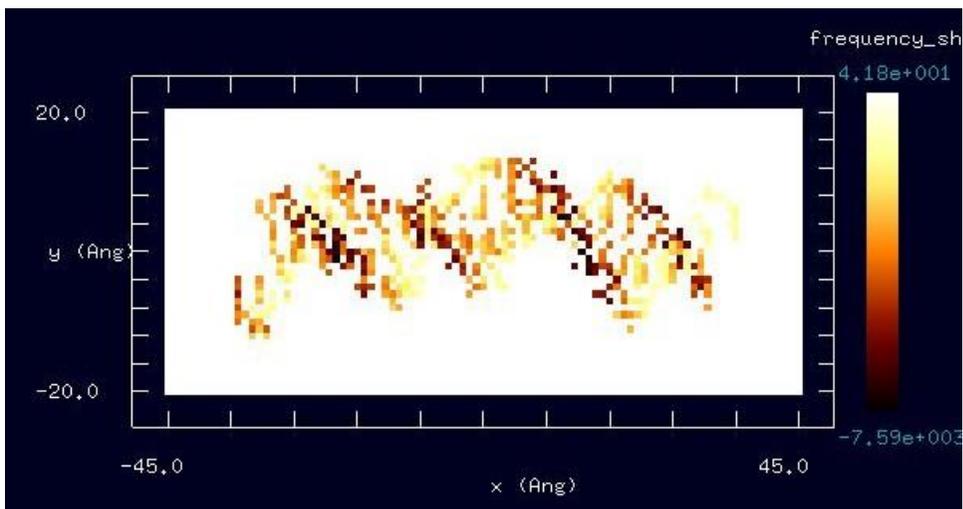


真空中でのシミュレーション

周波数シフト

最大値: 0.0418[kHz]

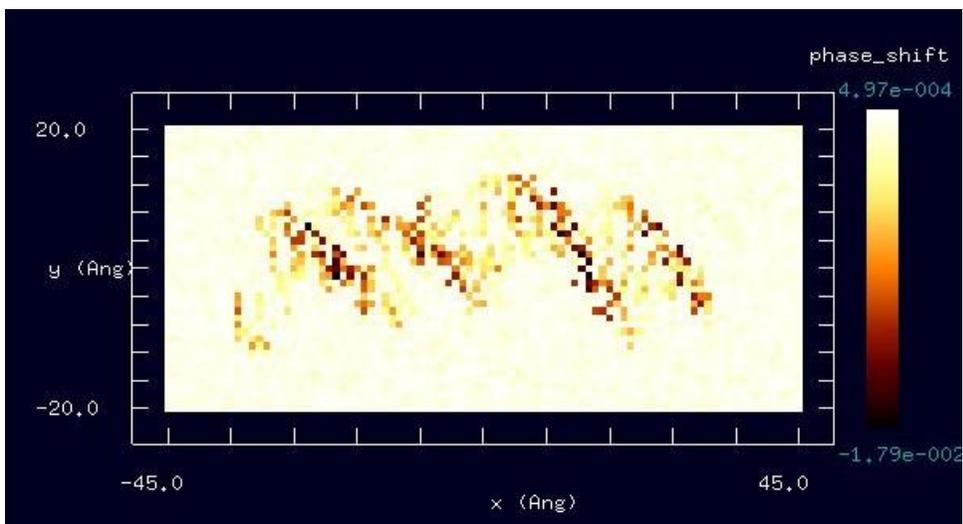
最小値: -7.59[kHz]



位相シフト

最大値: 4.97e-4[radian]

最小値: -1.79e-2[radian]



周波数シフト、位相シフトから物性値を逆算する機能(逆問題)

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

$$f = \sqrt{\left(\frac{\Delta\nu - \Delta\nu_{\text{obs}}}{\omega_0 / (2\pi)}\right)^2 + \left(\frac{\Phi - \Phi_{\text{obs}}}{\pi}\right)^2}$$

$\Delta\nu$: シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\text{obs}}$: 観測値として得られた周波数シフト

ω_0 : カンチレバーの共鳴振動周波数

Φ : シミュレーション計算で得た位相シフト

Φ_{obs} : 観測値として得られた位相シフト

逆問題を解くには、以下の二つのプロセスを組み合わせる。

(1) global_mode

表面張力、ヤング率、高さの中から2種類のパラメータを選び、二つのパラメータに対して、ずれ関数の値の分布を求める。この分布図から、ずれ関数の値を最小にするパラメータの値を求める。

(2) local_mode

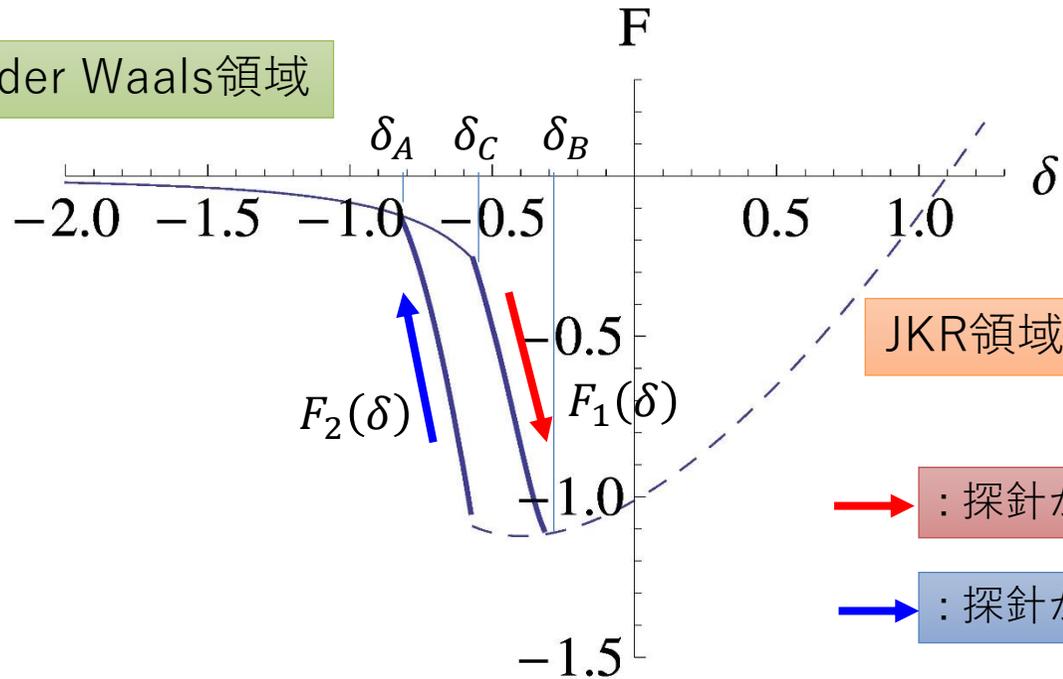
上の(1)のプロセスで求めたパラメータ値を初期値として、より正確な極小値を与えるパラメータ値を、局所的に探索する。

van der Waals力とJKRモデル間の遷移



フォースカーブにヒステリシスが生じる

van der Waals領域



JKR領域

→ : 探針が試料表面に接近するプロセス

→ : 探針が試料表面から遠ざかるプロセス

δ_A : 試料表面が最も盛り上がって探針に接触する位置

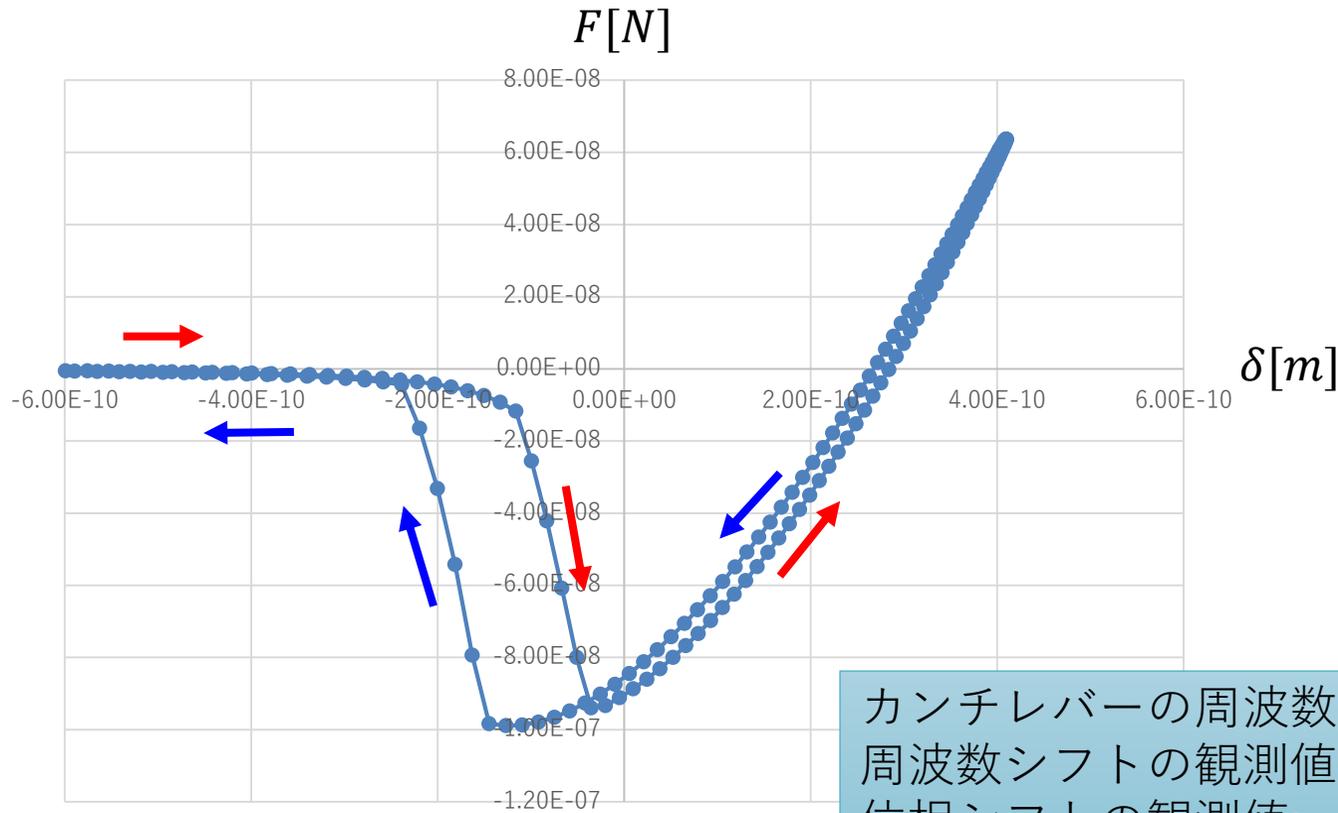
δ_B : van der Waals力とJKR力が交差する点

δ_C : δ_A と δ_B の中点

$F_1(\delta)$: δ_C と δ_B の間での、van der Waals力からJKR力への遷移

$F_2(\delta)$: δ_A と δ_C の間での、van der Waals力からJKR力への遷移

実際の数値計算でのフォースカーブ



カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: 24.888Hz
位相シフトの観測値: -0.00123181(radian)

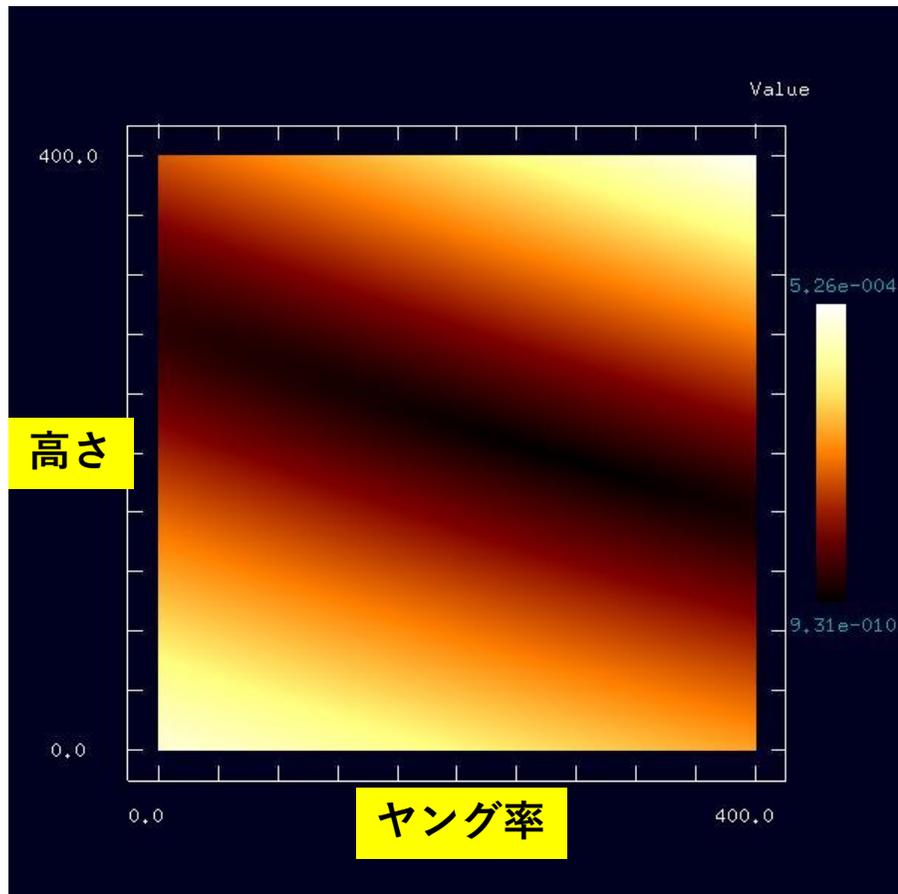
→ : 探針が試料表面に接近するプロセス

→ : 探針が試料表面から遠ざかるプロセス

(1)ヤング率と高さの2種類のパラメータによるずれ関数値の分布

カンチレバーの振動の1周期を2048分割した場合

ずれ関数を最小にするパラメータの組は、
ヤング率：76.5[Gpa]
高さ：0.0[nm]



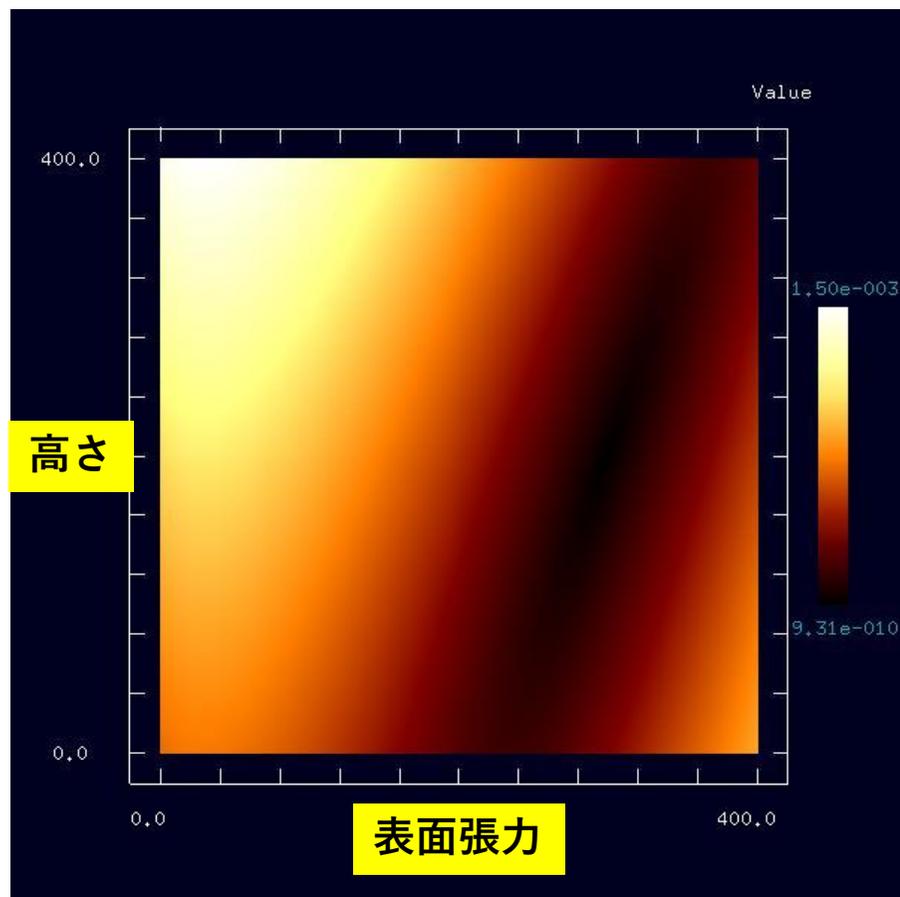
ヤング率と高さのパラメータ平面上に、
ずれ関数をプロットしたグラフ
ヤング率：70.0~80.0[GPa]
高さ：-0.05~0.05[nm]

ずれ関数値の最も小さい値を与えるパラメータ値の組み合わせが求める解

(2)表面張力と高さの2種類のパラメータによるずれ関数値の分布

カンチレバーの振動の1周期を2048分割した場合

ずれ関数を最小にするパラメータの組は、
表面張力：0.4[N/m]
高さ：0.0[nm]



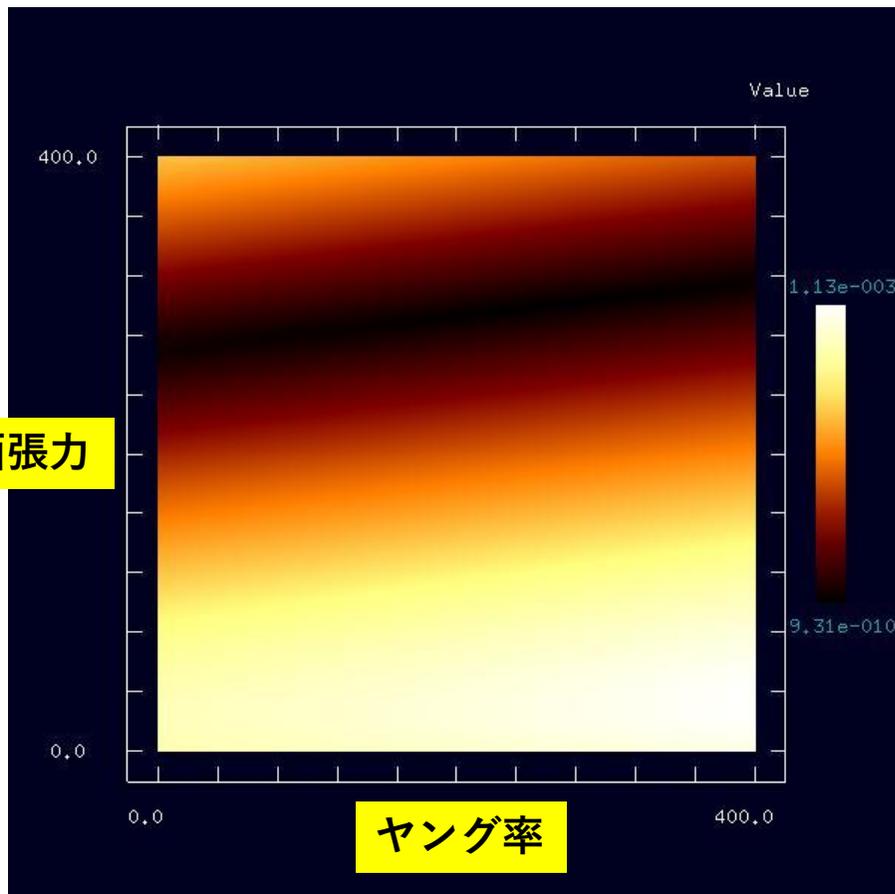
表面張力と高さのパラメータ平面上に、
ずれ関数をプロットしたグラフ
表面張力：0.1~0.5[N/m]
高さ：-0.05~0.05[nm]

ずれ関数値の最も小さい値を与えるパラメータ値の組み合わせが求める解

(3)表面張力とヤング率の2種類のパラメータによるずれ関数値の分布

カンチレバーの振動の1周期を2048分割した場合

ずれ関数を最小にするパラメータの組は、
表面張力：0.4[N/m]
ヤング率：76.5[Gpa]



表面張力とヤング率のパラメータ平面上に、
ずれ関数をプロットしたグラフ
表面張力：0.1~0.5[N/m]
ヤング率：70.0~80.0[GPa]

ずれ関数値の最も小さい値を与えるパラメータ値の組み合わせが求める解