

Liquid AFM simulator (液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ)

AdvancedAlgorithm & Systems Inc.
中目黒court

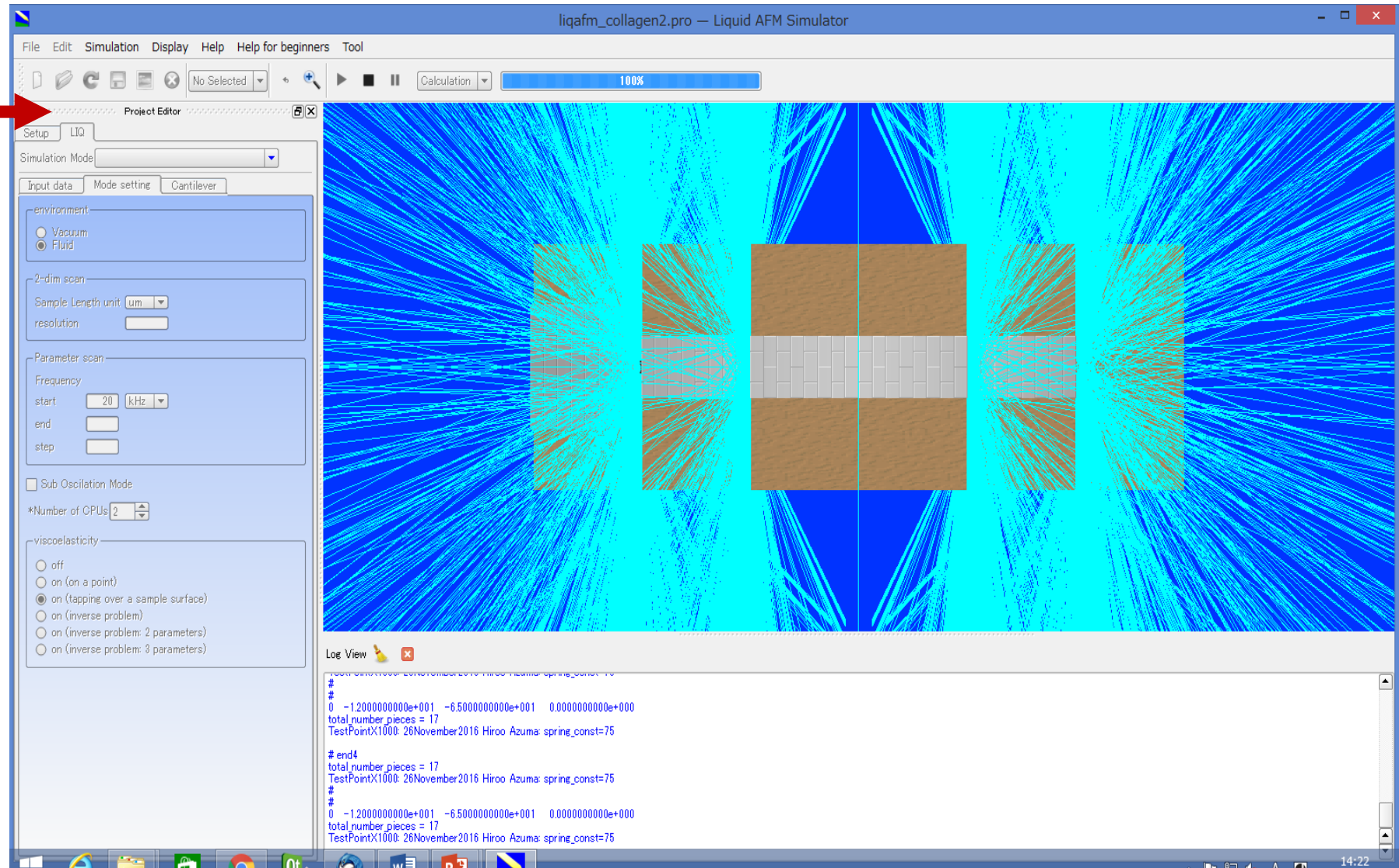
会社URL <https://www.aasri.jp/> メールアドレス r_k@aasri.jp

このソルバーでシミュレーションできる事は.....

- ・流体抗力、試料との接触応力を受けて稼働するカンチレバーの振動・変形
- ・探針が試料に接触した際に働く力・周波数シフト像・位相シフト像
- ・周波数シフト・位相シフトの値が観測値としてあたえられているとして、逆問題を解く事によりヤング率、表面張力等の物性値の計算

Liq AFMの操作方法

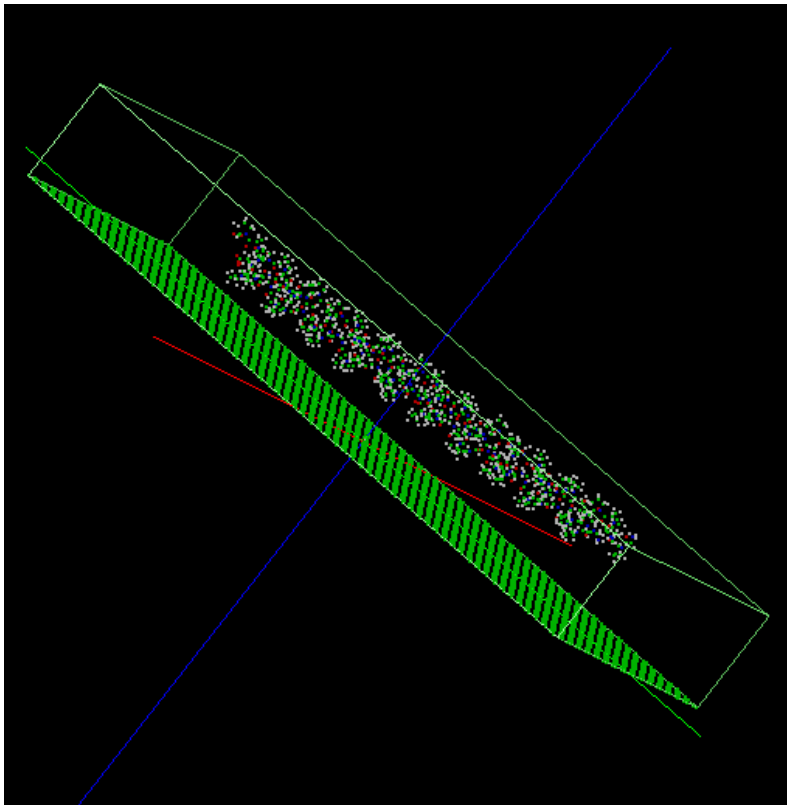
画面左側にある
Project Editorにパラ
メータを入力するだけ
で、計算が開始されま
す。また**File**ボタンから
Sample Projectフォル
ダの**.Pro file**を開き、
LIQのMode settingで
計算モードを設定すれ
ば、何もパラメータを
調整せずとも計算を開
始することができます。



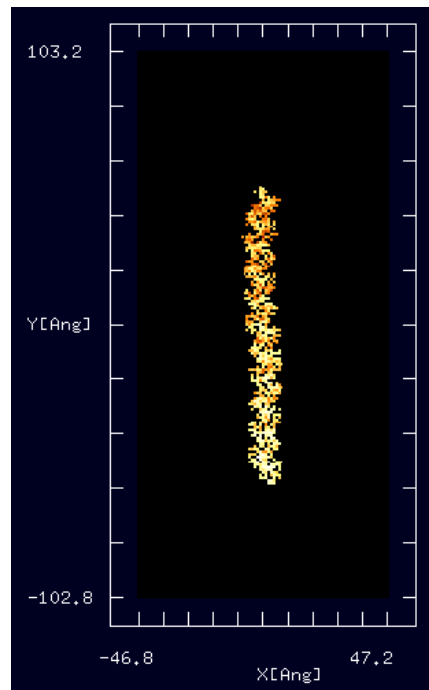
液中下でのコラーゲン分子のAFM tapping mode simulation

LiqAFMタッピング機能

コラーゲン分子の周波数シフト・位相シフトAFM像



HOPG上のコラーゲンの分子構造図 (Geo AFM によって計算した.cube fileを利用する)



コラーゲン分子表面の高さ情報を表した図

流体:
動粘性係数:
 $0.25e-6 [m^2/s]$
密度:
 $200.0 [kg/m^3]$

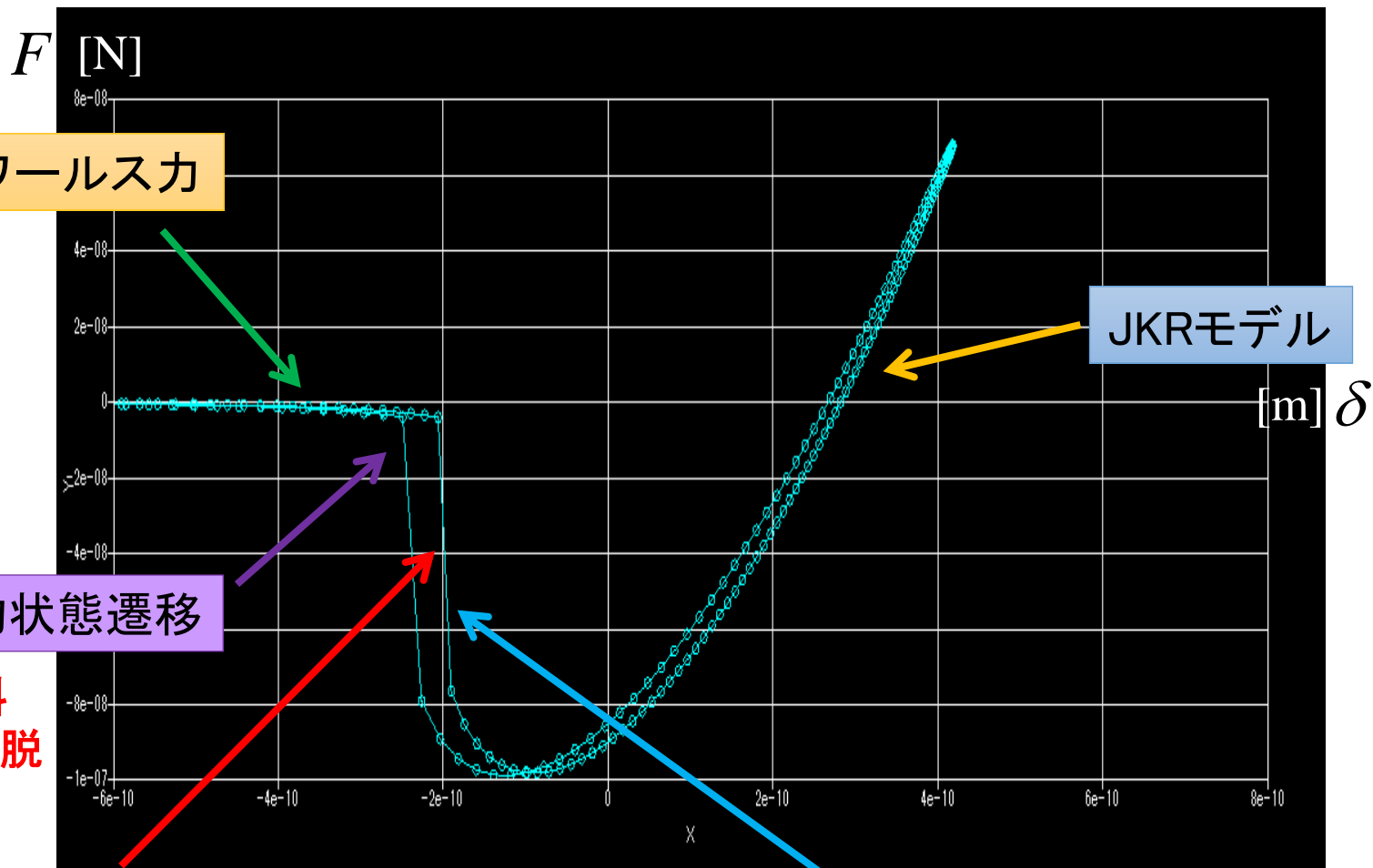
試料(コラーゲン分子):
ヤング率: $76.5 [GPa]$
ポアソン比: 0.22
ハーマーカ一定数:
 $5.0e-20 [J]$
表面張力: $0.4 [N/m]$
粘性抵抗: $10.0 [Pa \cdot s]$

カンチレバー:
密度: $2200.0 [kg/m^3]$
ヤング率:
 $6000.0 [GPa]$
ポアソン比: 0.22
長さ、幅、深さ:
 $400.0, 50.0, \text{ and } 4.0 [\mu m]$
ばね定数:
 $75.0 [N/m]$
探針のハーマー
カ一定数:
 $5.0e-20 [J]$

必要なパラメータは上記の値を入力すればよい。

JKR理論を考慮したTapping modeによる δ - f 曲線

フォースカーブ: 探針-試料間の距離 vs 探針の感じる力



ファンデルワールス力

JKRモデル

決定論的状態遷移

探針が試料表面から離脱する過程

ヒステリシスが生じている

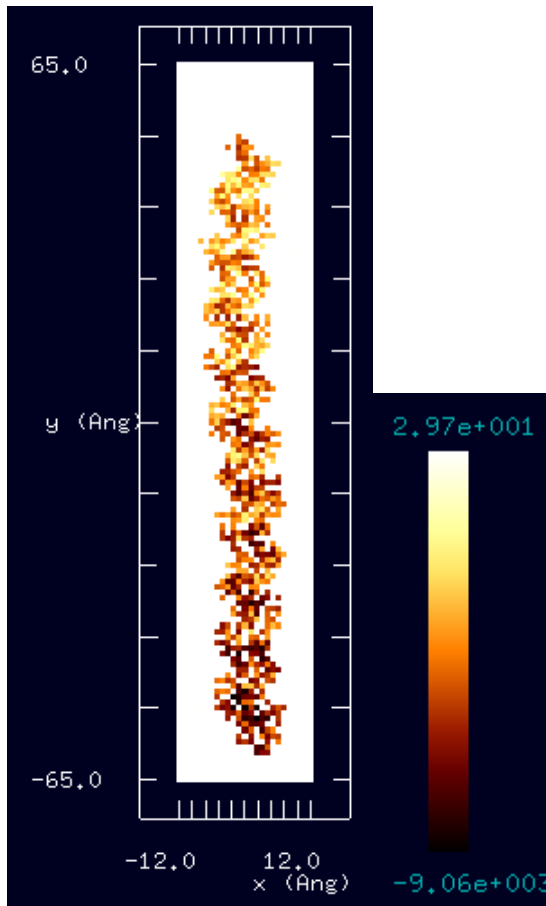
確率的状態遷移

探針が試料表面に接触する過程

液中環境下でのシミュレーション画像

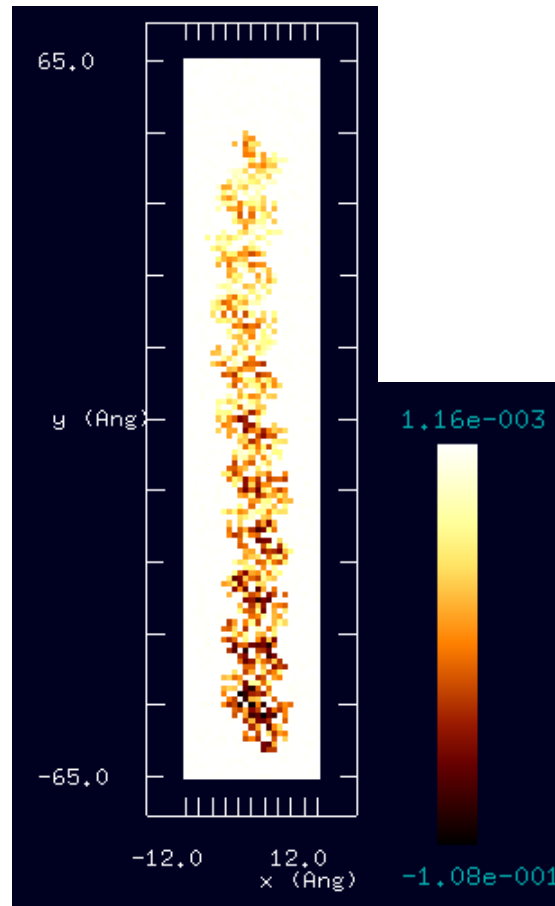
周波数シフト像

最大値: 0.0297[kHz]
最小値: -9.06[kHz]



位相シフト像

最大値: 1.16e-3[radian]
最小値: -1.08e-1[radian]



メソスケールでのコラーゲン分子のAFM像をシミュレーションによって再現できているのが分かった。

逆問題による物性値のシミュレーション

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$: 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

上記の**ずれ関数の値を最小**にするようなヤング率、表面張力を求めたいとする

最小二乗法による逆問題フィッティング

最小二乗法フィッティングのやり方

x : ヤング率

y : 表面張力

f : 周波数シフト、位相シフトのずれ関数

i 番目のサンプル: x_i, y_i, f_i

フィッティング直線: $y = ax + b$

$$S = \sum_i \frac{1}{f_i^2} [y_i - (ax_i + b)]^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial a} = \frac{\partial S}{\partial b} = 0 \text{ を要請する}$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{AC - B^2} \begin{pmatrix} C & -B \\ -B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

$$A = \sum_i \frac{x_i^2}{f_i^2}, \quad B = \sum_i \frac{x_i}{f_i^2}, \quad C = \sum_i \frac{1}{f_i^2}, \quad v = \sum_i \frac{y_i}{f_i^2}, \quad u = \sum_i \frac{x_i y_i}{f_i^2}$$

この計算をLiq AFMソルバーを使って簡単に物性値を求められる様にする。

逆問題 2パラメータ空間によるDNA分子のヤング率・表面張力の決定

液中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率: 80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比: 0.3
- 観測値を再現する表面張力: 0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率: 12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ: 0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -221.8349[Hz]
位相シフトの観測値: 0.0004840706[radian]

液中環境パラメータ
動粘性率: 0.25E-6[m²/s]
密度: 200[kg/m³]

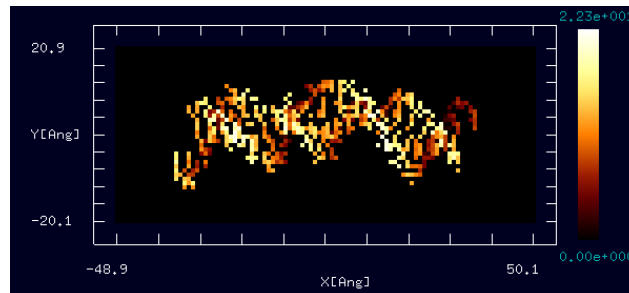
カンチレバーの振動の1周期を2048分割

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

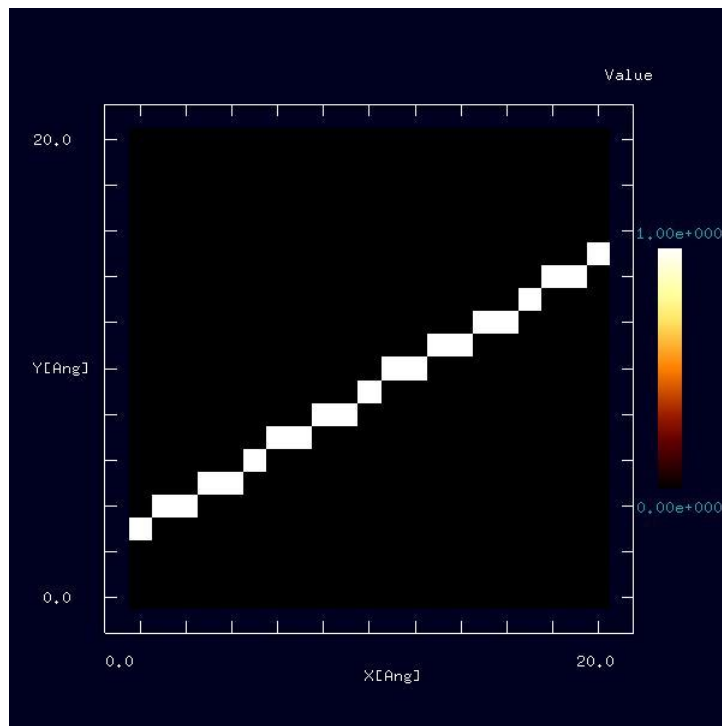
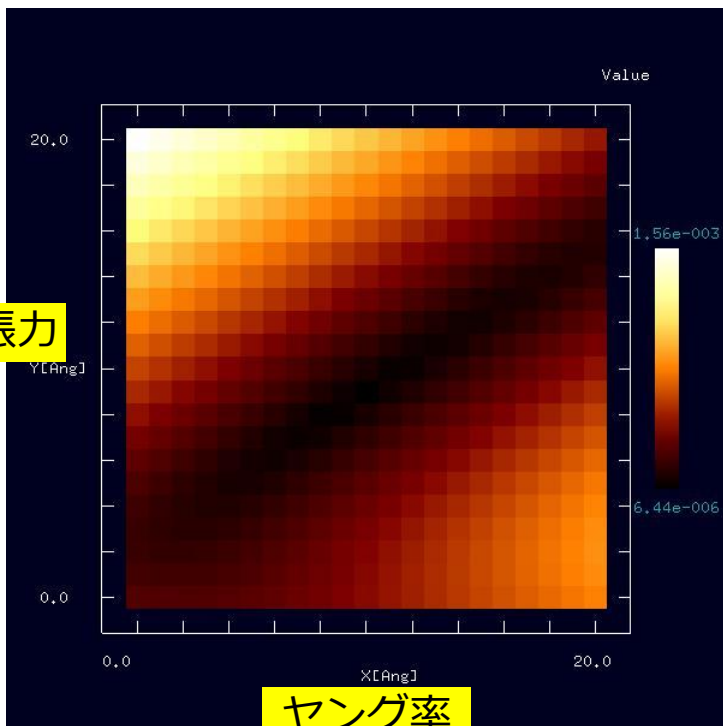
$$f = \sqrt{\left(\frac{\Delta\nu - \Delta\nu_{\text{obs}}}{\omega_0 / (2\pi)}\right)^2 + \left(\frac{\Phi - \Phi_{\text{obs}}}{\pi}\right)^2}$$

ヤング率: 69.0~92.0[GPa]
表面張力: 0.11~0.43[N/m]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、
ヤング率: 80.0[GPa]
表面張力: 0.25[N/m]
に近い値が得られたら合格



DNA分子構造



```

global_mode_2
minimumFunction = 5.13201e-006
young[Pa]      = 7.99250e+010
poisson       = 3.00000e-001
adhesive[N/m] = 2.48352e-001
viscosity[Pasec] = 1.20000e+001
height_sample[m] = 1.00000e-010
a_coefficient  = 8.17355e-003
b_coefficient  = -4.04918e-001
  
```

標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、
ずれ関数の値の分布を示したグラフ

最小二乗法で得られた直線を、
21×21の区画で表した図



フィッティング直線: $y = ax + b$

係数 $a=0.00817355$, $b=-0.404918$

inverse_problem_parameters.dat fileに計算結果が出力されている。

フィッティングで得られた直線を、400等分して、**ずれ関数が最小となる点を探す**

ヤング率: 79.925[GPa]、表面張力: 0.248352[N/m]

正解として、
ヤング率: 80.0[GPa]
表面張力: 0.25[N/m]
に近い値が得られたから合格!

Liq AFM 逆問題ソルバー今後の課題

- 試料全体のヤング率・表面張力等の物性値の分布をきちんとした数値でシミュレーション出来る様にしたい。(現在は試料1点のみで計算している)
- 現在は2次元パラメータ空間で計算しているが、それを3次元に拡張する方針。
- 並列化計算等のアルゴリズムの工夫をして、計算時間の短縮化を目指す方針。(現時点では数時間掛かる)