

走査プローブ顕微鏡シミュレータ  
*ver.β*  
リファレンスマニュアル

2017年1月27日

株式会社 Advanced Algorithm & Systems

東北大学 WPI-AIMR

# 目次

はじめに .....	2
<b>1 高速相互予測 AFM シミュレータ .....</b>	<b>3</b>
概要 .....	3
探針・試料・測定 AFM 像高速相互予測シミュレータのパラメータ設定 .....	3
<b>2 連続弾性体 AFM シミュレータ .....</b>	<b>5</b>
概要 .....	5
連続弾性体 AFM シミュレータのパラメータ設定 .....	5
<b>3 液中ソフトマテリアル AFM 像シミュレータ .....</b>	<b>10</b>
概要 .....	10
入力パラメータ .....	10
<b>4 原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータ .....</b>	<b>20</b>
構造最適化 AFM 像シミュレータの入力パラメータ .....	20
分子動力学 AFM 像シミュレータの入力パラメータ .....	26
代表的なエラーメッセージとその対処法 .....	31
<b>5 量子論的 SPM 像シミュレータ .....</b>	<b>32</b>
Setup タブの入力パラメータに関する注意 .....	32
DFTB タブの入力パラメータ .....	33
代表的なエラーメッセージとその対処法 .....	40

## はじめに

---

本書は、弊社、走査プローブ顕微鏡（SPM）シミュレータのリファレンスマニュアルです。本ソフトウェアの初期パラメータ設定に関する説明書です。各シミュレータに対応した各種パラメータの詳細な説明がされています。別紙、チュートリアルとあわせてご使用ください。

# 1 高速相互予測 AFM シミュレータ

## 概要

「探針・試料・測定 AFM 像高速相互予測シミュレータ」は、探針の立体的な形状データ、試料表面の凹凸を表現した形状データ、測定 AFM 像データ、の三種類のデータのうち、二種類のデータから、残り一種類のデータを高速に予測するシミュレーションを実行します。

本シミュレータの計算では、カンチレバーは常に試料に接していると仮定しており、AFM のコンタクトモード測定に対応しています。

以下に、シミュレーション実行の際、設定されるパラメータについて説明します。

## 探針・試料・測定 AFM 像高速相互予測シミュレータのパラメータ設定

探針・試料・測定 AFM 像高速相互予測シミュレータ(以下、GeoAFM と略する)の使い方として、以下の三種類が考えられます。

1. 探針形状データ、試料表面形状データを元にして、測定 AFM 像データを求める。
2. 探針形状データ、測定 AFM 像データを元にして、試料表面形状データを求める。
3. 試料表面形状データ、測定 AFM 像データを元にして、探針形状データを求める。

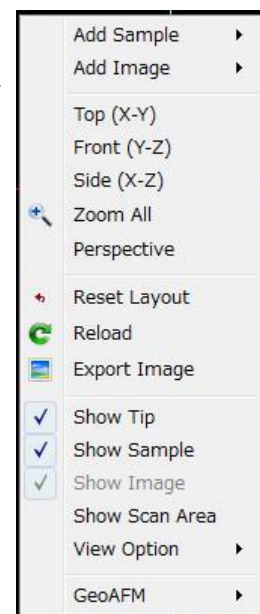
これら三種類のシミュレーションでは、それぞれ、シミュレーションを実行する前に、[Project Editor]→[Setup]→[Component]において、以下の二つのデータを読み込みます。

1. [Tip]および[Sample]
2. [Tip]および[Image]
3. [Sample]および[Image]

GeoAFM を実行するには、これら、二つのデータを読み込んだ後、ウィンドウ内の画像データが表示されている部分にカーソルを置き、右クリックを行います。すると、右図のような細長いコンテキストメニューが表示されます。

GeoAFM の操作に直接かわる部分は、このコンテキストメニューの一番下の欄に配置されている[GeoAFM]です。これにカーソルを合わせると、以下の三つの項目が選択できます。

- [Show Simulated Image]
- [Set GeoAFM Resolution]



- **[Export Simulated Data]**

上記の項目で提供される機能は、以下の通りです。

**[Show Simulated Image]**

GeoAFM で出力されるデータを、ウィンドウの画面内に表示します。

なお、シミュレーションの元となる二種類の入力データの画像を、ウィンドウ内から消し去りたい場合は、上の図で示された細長いコンテキストメニュー内の、[Show Tip], [Show Sample], [Show Image]のいずれかのチェックマークを外します。

**[Set GeoAFM Resolution]**

GeoAFM のシミュレーション計算の解像度を設定できます。解像度の設定可能最小値は 0.1[Å]です。解像度は、[Å]を単位として 0.1 刻みで増える実数値しか設定できません。解像度の最大値は、10[Å]です。なお、デフォルトでは、2[Å]に設定されています。

**[Export Simulated Data]**

GeoAFM によって得られた出力画像データを、ファイルとして保存できます。なお、この項目は、上の[Show Simulated Image]が ON になっている時しか、有効になりません。出力される画像データファイルは、cube 形式となります。

## 2 連続弾性体 AFM シミュレータ

### 概要

「連続弾性体 AFM シミュレータ(FemAFM)」は、古典力学に基づき、探針および試料が弾性方程式に従って変形することを仮定して、AFM 測定像をシミュレーションする点に特徴があります。FemAFM は、探針形状データおよび試料表面形状データを入力として、シミュレーション計算を実行します。探針-試料間の相互作用として、非接触時にはファンデルワールス力、接触時には JKR(Johnson, Kendall, Roberts)理論によって引き起こされる凝着力を考慮します。探針・試料を格子分割し、有限要素法によって弾性方程式を数値的に解きます。

本シミュレータの計算では、カンチレバーの先端の探針および試料は、それぞれ、単一の材質から成る連続弾性体として取り扱われます。従って、探針・試料のミクロな原子・分子の構造は、一切考慮されません。ですので、本シミュレータは、数百 Å 程度の構造を AFM で調べる実験を再現するのに適しています。

本シミュレータには、以下の三つのモードが用意されています。

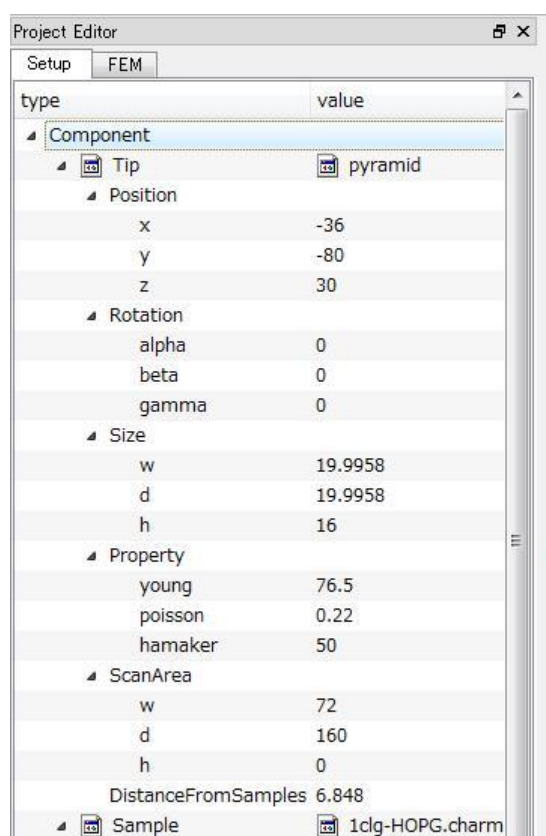
- [ノンコンタクトモード]
- [周波数シフト像モード]
- [粘弾性接触解析モード]

以下に、シミュレーション実行の際、設定されるパラメータについて説明します。

### 連続弾性体 AFM シミュレータのパラメータ設定

FemAFM によるシミュレーションを実行するには、まず、[Project Editor]→[Setup]→[Component]において、[Tip]および[Sample]の二つのデータを読み込みます。これら二つのデータ、[Tip]および[Sample]のそれぞれにおいて、以下のパラメータが設定可能です。

まず、[Tip]について、以下の図に示すパラメータが設定可能です。



[Position]の[x], [y], [z]は、初期時刻での探針先端部の位置座標を表します。単位は[Å]です。座標の原点は、試料(Sample)の表面(xy平面)中央の底面(高さゼロ)の位置に取られています。この[Position]で示した位置から、探針は走査(スキャン)を開始します。

[Rotation]の[alpha], [beta], [gamma]は、ウィンドウ画面内の探針のx軸、y軸、z軸回りの回転角を表しています。回転方向は時計回りで、単位は一回転を360°とする[degree]で表示されます。

[Size]の[w], [d], [h]は、ウィンドウ画面内で表示されている探針の、x方向、y方向、z方向の大きさを表しています。

[Property]の[young], [poisson], [hamaker]は、それぞれ、探針材質の、ヤング率[GN/m<sup>2</sup>] (G = 10<sup>9</sup>)、ポアソン比[無次元数]、ハーメーカー定数[zJ] (z = zepto = 10<sup>-21</sup>)を表しています。参考例として、以下に、典型的な物質の各物性値を示しておきます。

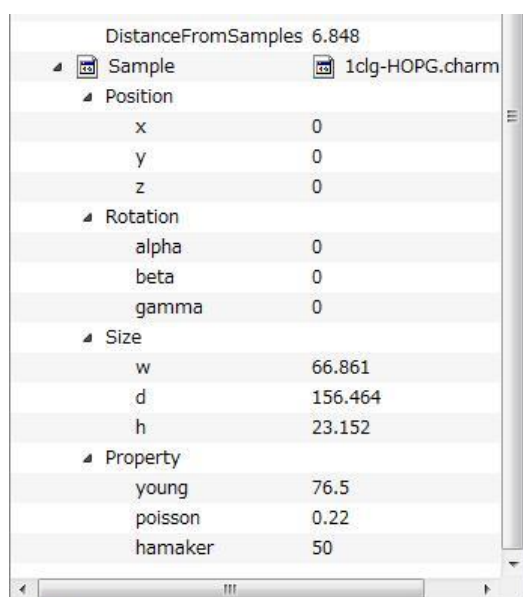
物質名	ヤング率[GN/m <sup>2</sup> ]	ポアソン比	ハーメーカー定数[zJ]
SiO <sub>2</sub>	76.5-97.2	0.22	50-60
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	250-350	0.24	110-150
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	320	0.29	140-220
Au	78	0.44	300-400
Ag	82.7	0.367	400-500

Cu	129.8	0.343	300-400
----	-------	-------	---------

[ScanArea]の[w], [d], [h]は、探針先端部の走査(スキャン)する領域を表しています。単位は[Å]です。前に定義した[Position]の位置座標を始点として、[ScanArea]の[w], [d]で与えられる二次元平面上の長方形領域を、探針は走査(スキャン)します。

[DistanceFromSamples]は、探針先端部と試料表面の間の、最小距離を表します。単位は[Å]です。

次に、[Sample]について、以下の図に示すパラメータが設定可能です。



[Position]の[x], [y], [z]は、初期時刻で試料の位置をずらす場合に使われます。単位は[Å]です。最初の画面内で表示された試料(Sample)の、表面(xy平面)中央の底面(高さゼロ)の位置を原点として、原点から試料をずらしたい三次元ベクトル(x, y, z)を、この[Position]で与えます。このパラメータは、基板上に置かれている試料の高さを調節したい際、等において、便利です。

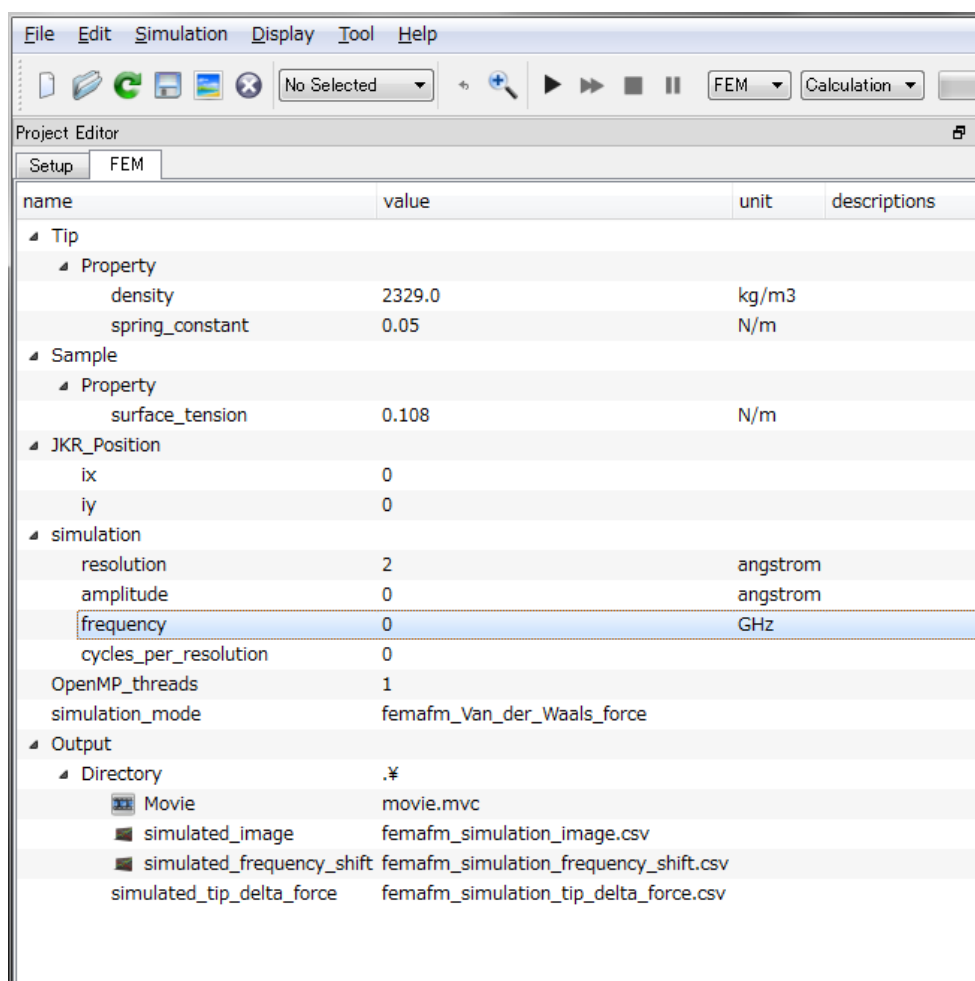
[Rotation]の[alpha], [beta], [gamma]は、ウィンドウ画面内の試料のx軸、y軸、z軸回りの回転角を表しています。回転方向は時計回りで、単位は一回転を360°とする[degree]で表示されます。

[Size]の[w], [d], [h]は、ウィンドウ画面内で表示されている試料の、x方向、y方向、z方向の大きさを表しています。

[Property]の[density], [young], [poisson], [hamaker]は、それぞれ、試料材質の、ヤング率[GN/m<sup>2</sup>] (G = 10<sup>9</sup>)、ポアソン比[無次元数]、ハーメーカー定数[zJ] (z (zepto) = 10<sup>-21</sup>)を表しています。



さらに、[Project Editor]→[FEM]において、以下の図に示すパラメータが設定可能です。



項目[Tip]では、[Property]として、[density]と[spring\_constant]の二つの値が設定できるようになっています。[density]は、探針材質の密度を表します。[spring\_constant]は、カンチレバーのばね定数を表します。

項目[Sample]では、[Property]として、[surface\_tension]が設定できるようになっています。[surface\_tension]は、試料の表面張力を表します。

上記の三つの値、すなわち、[Tip]の[density]と[spring\_constant]、[Sample]の[surface\_tension]は、JKR 理論を記述する際に必要で、そのため、[周波数シフト像モード]と[粘弾性接触解析モード]で使われます。

項目[JKR\_Position]の[ix]と[iy]は、指定したスキャン(走査)エリアを、この後で定義する解像度[resolution]で分割した際の格子点を意味します。左下隅から数えて x 方向に[ix]番目、y 方向に[iy]番目というように指定します。ここで指定された xy 平面上の点において、[粘弾

性接触解析モード]の計算が行われます。

項目[simulation]の下で、次の三つのパラメータが設定されます。

- [resolution] : FemAFM シミュレーションにおける、解像度を表す定数です。具体的には、探針および試料の変形を記述する、(古典的)弾性方程式を有限要素法で数値的に解く際の、格子間隔に相当します。解像度の設定可能最小値は 0.1[Å]です。解像度は、[Å]を単位として 0.1 刻みで増える実数値しか設定できません。解像度の最大値は、10[Å]です。なお、デフォルトでは、2[Å]に設定されています。
- [amplitude] : 探針で試料表面を走査(スキャン)している際、カンチレバーが縦方向(z 軸方向)に振動する様子をシミュレーションするためのパラメータです。具体的には、カンチレバーの最大振幅を表します。この値は、[周波数シフト像モード]と[粘弾性接触解析モード]で使われます。
- [cycles\_per\_resolution] : 探針で試料表面を走査(スキャン)している際、カンチレバーが縦方向(z 軸方向)に振動する様子をシミュレーションするためのパラメータです。具体的には、カンチレバーの振動周期を表します。この値は、[周波数シフト像モード]と[粘弾性接触解析モード]で使われます。

項目[OpenMP\_threads]は、並列化計算を行う際の、CPU のコア数を表します。

項目[simulation\_mode]は、シミュレーション・モードを指定するパラメータです。[ノンコンタクトモード]による計算を行う際は、[femafm\_Van\_der\_Waals\_force]という文字列を指定します。[周波数シフト像モード]による計算を行う際は、[femafm\_frequency\_shift]という文字列を指定します。[粘弾性接触解析モード]による計算を行う際は、[femafm\_JKR]という文字列を指定します。

項目[Output]以下の[Directory]は、デフォルトで".%"に設定されています。これは、シミュレーションの計算結果ファイルが、現在使用している project ファイルの収められるプロジェクト・フォルダをカレント・ディレクトリとして、そのフォルダ内に出力されることを意味しています。

その下の、movie.mvc は、探針が試料表面上をスキャンする様子を記録した動画データのファイル名を表しています。また、femafm\_simulation\_image.csv は、[ノンコンタクトモード]による数値計算シミュレーション結果として得られる、予測 AFM 像のデータファイル名を表しています。さらに、femafm\_simulation\_frequency\_shift.csv は、[周波数シフト像モード]による数値計算シミュレーション結果として得られる、予測周波数シフト AFM 像のデータファイル名を表しています。最後に、femafm\_simulation\_tip\_delta\_force.csv は、[粘弾性接触解析モード]による数値計算シミュレーション結果として得られる、探針の変位と外力の時間変化予想のデータファイル名を表しています。

## 3 液中ソフトマテリアル AFM 像シミュレータ

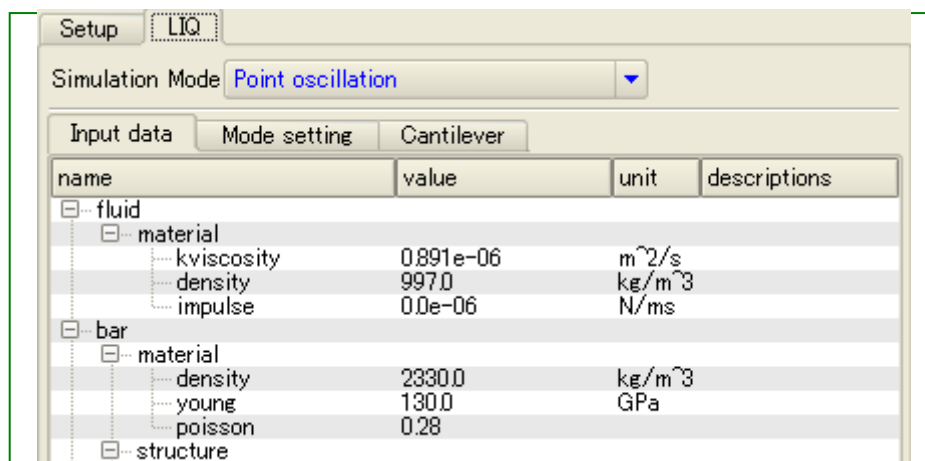
### 概要

「液中ソフトマテリアル AFM 像シミュレータ」は、カンチレバーの形状、物性データ、流体および試料の物性データを入力として、カンチレバーの振動運動の様子を計算するシミュレータです。本シミュレータでは、液中での AFM 測定のインターミittent コンタクトモードに対応しています。

以下に、シミュレーション実行の際、設定するパラメータについて説明します

### 入力パラメータ

「液中ソフトマテリアル AFM 像シミュレータ」によるシミュレーションのための入力パラメータは、下図にありますように、Project Editor の LIQ タグを選択することで、設定ができるようになります。



以下では、各パラメータの詳しい内容についての説明を行います。大きく分けて5つのパラメータ設定を行います。

#### (1) 流体に関するパラメータ

まず、流体に関する設定を行います。動粘性率、密度を指定します。さらには、液体分子の撃力も考慮して計算することもできます。

fluid			
material			
kviscosity	0.891e-06	m <sup>2</sup> /s	
density	500.0	kg/m <sup>3</sup>	
impulse	0.0e-6	N/ms	

**fluid** : 流体に関する各種設定

**material** : 流体の物性に関する設定

**viscosity**

動粘性率。単位は[m<sup>2</sup>/s]。粘性率とは異なりますのでご注意ください。

**density**

密度。単位は[kg/m<sup>3</sup>]。

**impulse**

分子のランダムな撃力の大きさ。単位長さ単位時間あたり。単位は[N/ms]。

25℃における水の動粘性率は  $0.891 \times 10^{-6}$  [m<sup>2</sup>/s]、密度は 997.0 [kg/m<sup>3</sup>]です。

また、**fluid** の指定がない場合は、液体中ではなく真空中として計算されます。

## (2) カンチレバーに関するパラメータ

ここでは、カンチレバーの材料に関する物性と、基本形状の設定を行ないます。

bar			
material			
density	2200.0	kg/m <sup>3</sup>	
young	76.5	GPa	
poisson	0.22		
friction	0.		
hamaker	5.0e-20	J	
material			
density	2330.0	kg/m <sup>3</sup>	
young	130	GPa	
poisson	0.28		

**bar** : カンチレバーに関する各種パラメータ

**material** : カンチレバーの材料物性に関するパラメータ

**density**

密度。単位は[kg/m<sup>3</sup>]。

**young**

ヤング率、縦弾性率。単位は[GPa]。

**poisson**

ポアソン比、横弾性率と縦弾性率の比（横弾性率／縦弾性率）

**friction**

カンチレバー材質の摩擦係数(無次元量)。(※)

**hamaker**

カンチレバー材質のハーメーカー定数。単位は[J]。(※)

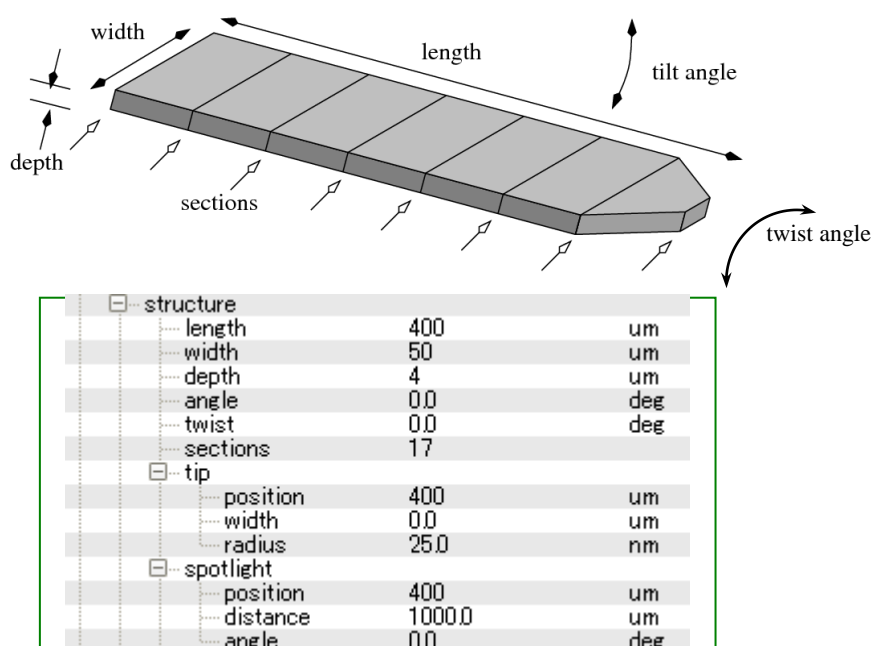
(※) 粘弾性接触力学を考慮したシミュレーションを行う場合に使用。

サンプルプロジェクトファイルにはシリコンの密度 2330 [kg/m<sup>3</sup>]、ヤング率 130 [GPa]、ポアソン比 0.28 が指定されています。

次に、カンチレバーの長さ、幅、厚さなどの形状と、取付けた探針に関して指定します。

以下に、カンチレバーの概念図を示します。各設定パラメータとの対応関係はこのように

なります。



**structure** : カンチレバーの基本形状に関する指定

**length**

全長。単位は[ $\mu\text{m}$ ]。

**width**

全幅。単位は[ $\mu\text{m}$ ]。

**depth**

全厚。単位は[ $\mu\text{m}$ ]。

**angle**

下向きの傾き角度。単位は[degree]。レバー先端が基盤に衝突しないように角度に注意してください。

**twist**

先端の捩じれ角度。単位は[degree]。

**sections**

差分計算のためのカンチレバーの分点（断面）の数。レバーを等間隔に分断した断面で流体を計算します。

**tip** : 探針に関する指定

**position**

探針の取付け位置の長さ方向。単位は[ $\mu\text{m}$ ]。カンチレバーの先端に取付ける場合は、**structure-length** と同じを入力してください。

**width**

探針の取付け位置の横幅方向。単位は[ $\mu\text{m}$ ]。カンチレバーの中心軸上にある場合は 0.0 を、軸からずれている場合はその幅を入力してください。

**radius**

探針先端の曲率半径。単位は[nm]。探針の先端が球形だと仮定しています。

**spotlight** : レーザー光線に関する指定

**position**

レーザー光線のスポット位置、基盤部からの距離、通常はカンチレバーの全長とします。

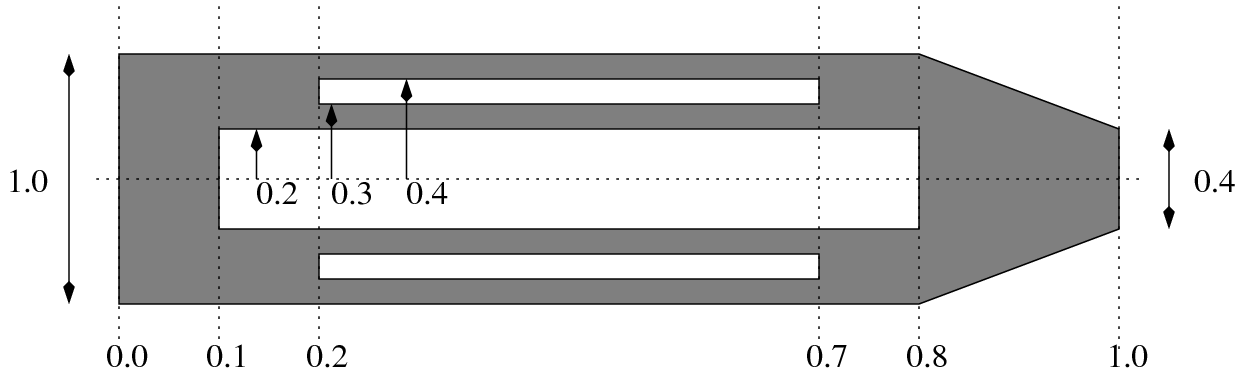
**distance**

スポット位置からの反射光を測定する装置までの距離。

**angle**

レーザー光線の入射角度。鉛直軸からの角度。

さらに、カンチレバーの上面形状に関する設定ができます。例えば下図のようにカンチレバーの上面形状が単純な長方形ではない場合や、穴が単数あるいは複数あいている場合にはカンチレバーの長さ方向のいくつかの位置でのレバーの幅と穴の幅を指定します。



長さ方向の位置や幅は全体の割合で指定します。

```
<body>
  <section> 0.0 1.0 1.0 </section>
  <section> 0.8 1.0 1.0 </section>
  <section> 1.0 0.4 1.0 </section>
</body>
<split name="inside split">
  <section> 0.1 0.0 0.2 </section>
  <section> 0.8 0.0 0.2 </section>
</split>
<split name="outside split">
  <section> 0.2 0.3 0.4 </section>
  <section> 0.7 0.3 0.4 </section>
</split>
```

<body> カンチレバー本体の上面形状をいくつかの断面を用いて指定します。

<section> この断面の位置の全長に対する割合、  
この断面位置での幅の全幅に対する割合  
この断面位置での厚さの全厚に対する割合。

<split> 穴の形状をいくつかの断面を用いて指定します。複数指定可能です。

<section> この断面の位置の全長に対する割合、  
この断面位置での穴の開始位置の全幅に対する割合  
この断面位置での穴の終了位置の全幅に対する割合

最後にカンチレバーの振動に関する設定を行いません。根元を正弦波で単振動させる際の振動数、振幅等を指定します。カンチレバーの根元が次式で振動しているとします。

$$H(z=0,t) = H_o + A \sin(2\pi f t) + A_{sub} \sin(2\pi f_{sub} t)$$

motion		
frequency	2	kHz
amplitude	30.0	nm
baseheight	30.0	nm
DistanceFromSamples	30.0	nm

**motion** : カンチレバーの根元の振動に関する設定。

**frequency**

振動数  $f$  [kHz]。

**amplitude**

振幅  $A$  [nm]。

**baseheight**

床からカンチレバーの中心までの高さ  $H_o$  [nm]。

**subfrequency**

(必要があれば) 二重加振の場合のサブ振動の振動数  $f_{sub}$  [kHz]。

**subamplitude**

(必要があれば) 二重加振の場合のサブ振動の振幅  $A_{sub}$  [nm]。

**DistanceFromSamples**

baseheight と等しい値を入れる。

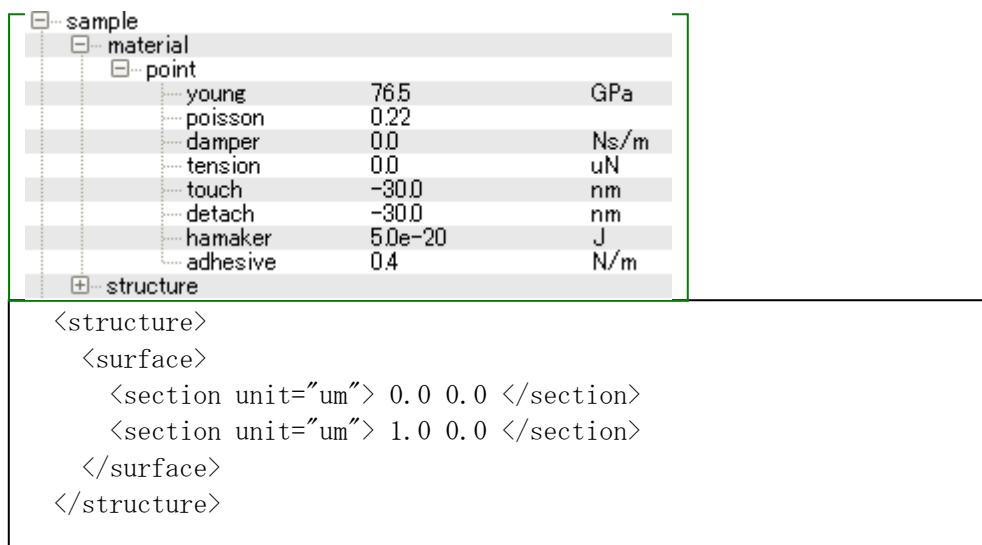
これらのパラメータには単一の値だけではなく、複数の値を指定して、それらを個別に用いて数値計算を行わせる「走査(scan)」を行えます。各パラメータについて走査範囲の最小値・最大値と走査点数を指定してください。例えば次のように指定することができます。

```
<motion>
  <frequency unit="kHz"> 5.0 15.0 11 </frequency>
  <amplitude unit="nm"> 3.0 </amplitude>
  <amplitude unit="nm"> 4.0 </amplitude>
  <amplitude unit="nm"> 5.0 </amplitude>
  <baseheight unit="um"> 50.0 </baseheight>
</motion>
```

### (3) 試料に関するパラメータ

ここでは、試料基盤の形状とその上に置かれたソフトマテリアル試料のミクロ的な物性値

を指定します。



parameter	value	unit
young	76.5	GPa
poisson	0.22	
damper	0.0	Ns/m
tension	0.0	uN
touch	-30.0	nm
detach	-30.0	nm
hamaker	5.0e-20	J
adhesive	0.4	N/m

```
<structure>
  <surface>
    <section unit="um"> 0.0 0.0 </section>
    <section unit="um"> 1.0 0.0 </section>
  </surface>
</structure>
```

**sample** : 試料基盤の形状とその上に置かれたソフトマテリアル試料に関する設定

**structure** : 試料基盤の形状に関する設定。

**surface** : 試料基盤の表面のマクロ的な高さ形状の変化をカンチレバー形状と同様の方法で指定する。

**section**

断面位置のカンチレバー全長に対する割合、

その断面位置での基盤の盛り上がり高さ

これらの高さはカンチレバーと基盤表面の間の流体の計算に用いられます。上の例では基盤が平坦であることを示しています。

**material** : ソフトマテリアル試料の物性に関する設定

**point** : 探針が試料の1点で接触することを仮定した設定

**young**

ヤング率。単位は[GPa]。

**poisson**

試料のポアソン比(無次元量)。<sup>(※)</sup>

**damper**

ダンパー定数。単位は[Ns/μm]。

**tension**

接触時の張力。単位は[μN]。

**touch**

接触高さ。探針の最初の位置から低さで指定。単位は[nm]。

**detach**

かい離高さ。探針の最初の位置から低さで指定。単位は[nm]。

**hamaker**

試料のハーメーカー定数。単位は[J]。<sup>(※)</sup>



### adhesive

試料の表面張力。単位は[N/m]。(※)

(※) 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に使用。

カンチレバーの先の探針をなくしてシミュレートを行うためには、ここの設定で young, poisson, damper, tension, hamaker, adhesive をゼロにし、また touch, detach の値をどちらも DistanceFromSamples を負にした値に設定して下さい。

<material>タグの利用方法に関して、物性値の指定方法には以下の3通りがあります。

- 試料のただ1点に探針が接触することを想定してその1点での物性値を指定する方法
- 物性の異なる試料の複数の点に探針が順番に接触することを想定して、それらの点での物性値を指定する方法
- 二次元的に広がりを持つ試料を探針がジグザグに走査しながら接触することを想定して、試料の物性の2次元分布を指定する方法

試料の物性値を1点で指定するには以下のように指定します。

```
<material>
  <point>
    <spring unit="uN/nm" > 100.0 </spring>
    <damper unit="Ns/um" > 0.0 </damper>
    <tension unit="uN" > 0.0 </tension>
    <touch unit="nm" > -2.5 </touch>
    <detach unit="nm" > -2.5 </detach>
  </point>
</material>
```

この<point>タグを複数指定することで、複数の点での試料の物性値を指定します。

各点での振動の計算が終わると次の点での振動の計算に移ります。

試料の物性値を2次元分布で指定するには以下のようにそれぞれの物性値が記録された cube 形式のファイルを指定します。

```

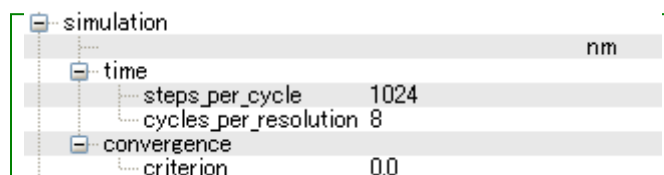
<material>
  <field>
    <spring lengthunit="um" unit="uN/nm"> spring.cube </spring>
    <damper lengthunit="um" unit="Ns/um"> damper.cube </damper>
    <tension lengthunit="um" unit="uN"> tension.cube </tension>
    <touch lengthunit="um" unit="nm"> touch.cube </touch>
    <detach lengthunit="um" unit="nm"> detach.cube </detach>
  </field>
</material>

```

ファイル名のかわりに数値を指定した場合はその値が一様に用いられます。

#### (4) 計算精度に関するパラメータ

ここでは、時間ステップや収束判定に関する指定を行います。



**simulation** : シミュレーションに関する設定

**resolution** : 解像度に関する指定

試料の物性を 2 次元分布で指定している場合は試料上を探針がジグザグに走査するので、その走査線の解像度を指定してください。

```
<resolution unit="um"> 0.10 </resolution>
```

探針が接触する試料を用いない、もしくは 1 点のみ、あるいは複数点の場合は指定不要です。

**time** : 時間ステップに関する設定

**steps\_per\_cycle**

振動 1 周期あたりの時間ステップ数。計算が発散・不安定な場合にはこのステップ数を多くしてください。

**cycles\_per\_resolution**

カンチレバーの振動の周期数。

試料の物性を 2 次元分布で指定している場合は 1 解像度あたりの振動の周期数。探針が接触する試料を用いない、もしくは 1 点のみの場合はこの周期数を上限として計算が終了します。複数点の場合はこの周期数を上限として次の点での計算に移ります。

**convergence** : 収束判定に関する設定

**criterion**

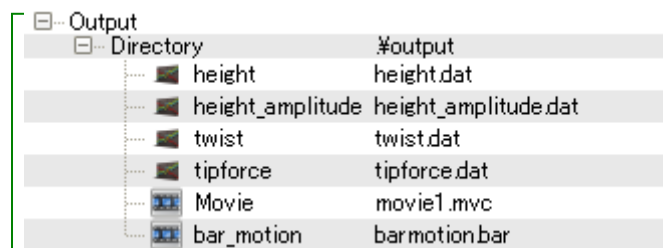
定常振動と判定する振幅の変化の割合。1周期の平均振幅と前回計算時の振幅を比較して、変化の割合が指定した基準値以内、すなわち

$$\frac{|A - A_{\text{prev}}|}{A} \leq \text{criterion}$$

であれば、計算が終了します。ここで、 $A$  は現ステップで計算された振幅、 $A_{\text{prev}}$  は前ステップ時の振幅です。もし、 $\text{criterion} = 0.0$  を指定した場合は、収束判定はせず、上記[cycles\_per\_resolution]で指定した回数だけ振動して計算が終了します。

## (5) 出力ファイルに関する設定

ここでは、計算結果ファイルに関して指定します。※現在、出力先フォルダ、ファイルの名前を変更することはできません。



Directory	Output
height	height.dat
height_amplitude	height_amplitude.dat
twist	twist.dat
tipforce	tipforce.dat
Movie	movie1.mvc
bar_motion	barmotion.bar

**Output** : 出力に関する設定

**Directory** : ファイル出力先フォルダ

**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**

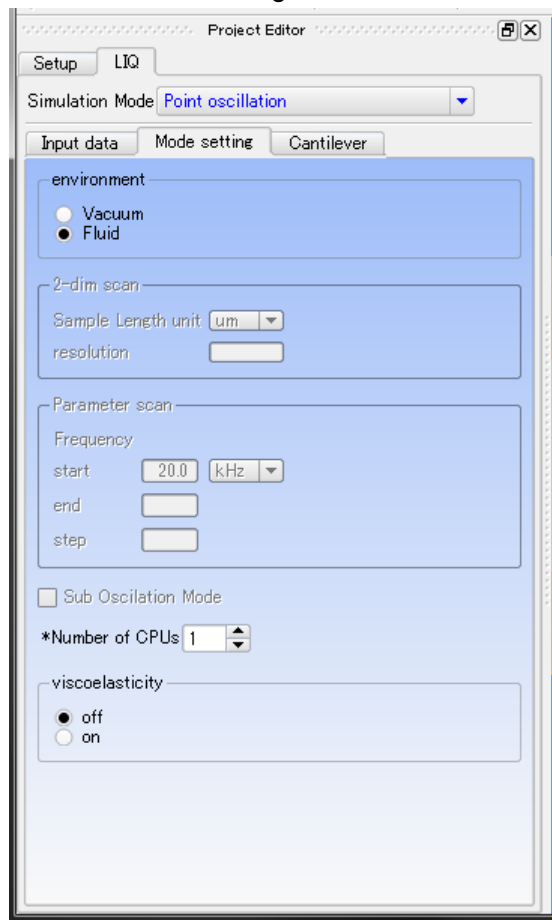
探針のみ動きに関する動画。

**bar\_motion**

カンチレバー全体の動作に関する動画。

## (6) その他の設定

Project Editor の LIQ タグの下の Mode setting において、以下の設定が行えます。



[Number of CPUs]で、並列化計算を実行する際の CPU コア数を指定できます。

また、項目[viscoelasticity]を off から on に切り替えることによって、探針－試料間の粘弾性接触力学を考慮する計算にスイッチすることが可能です。

## 4 原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータ

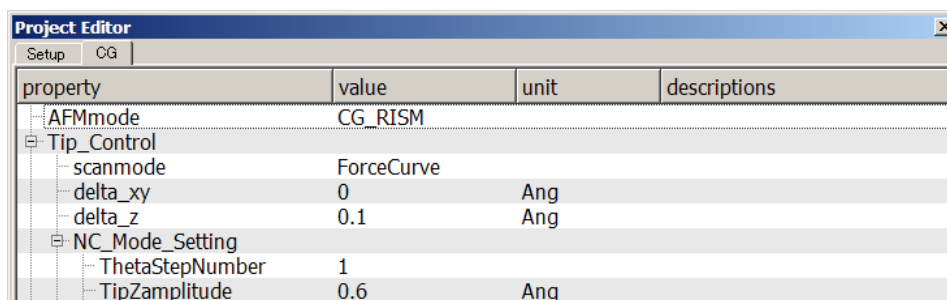
### 構造最適化 AFM 像シミュレータの入力パラメータ

このシミュレータでは AFM 測定像の計算を行うために、探針の走査と共に試料分子の構造変化の計算を行います。その計算手順は大まかに次の通りになります。

- ① 探針をある位置に配置する
  - ② エネルギーが安定になるように試料分子の構造を変化させる
  - ③ 探針に作用する力を計算する
  - ④ 探針を次の位置に移動する
- 以下②-④の繰り返し

以下で説明する入力パラメータを設定することによって、この計算手順の行い方を制御することができます。

「構造最適化 AFM 像シミュレータ」によるシミュレーションのための入力パラメータは、Project Editor の CG タグを選択することで、設定ができるようになります。このタグでは 4 つのカラムが存在します。



property	value	unit	descriptions
AFMmode	CG_RISM		
Tip_Control			
scanmode	ForceCurve		
delta_xy	0	Ang	
delta_z	0.1	Ang	
NC_Mode_Setting			
ThetaStepNumber	1		
TipZamplitude	0.6	Ang	

- ◆ property カラムはパラメータの名前を表します
- ◆ value カラムはパラメータの入力値(設定値)を表します
- ◆ unit カラムはパラメータの単位(存在する場合のみ)を表します
- ◆ descriptions カラムは注意事項を表します

以下では、各 property の詳しい意味についての説明を行います。

AFMmode	CG_RISM	
Tip_Control		
scanmode	ForceCurve	
delta_xy	0	Ang
delta_z	0.1	Ang
NC_Mode_Setting		
ThetaStepNumber	1	
TipZamplitude	0.6	Ang
SpringConst	200	N/m
ResoFreq	23.165	kHz
FreqShift	5	Hz
ForceConst	0.5	nN
resetStruct_atZmax	No	
OneWayForceCurve	Yes	
ForceField		

## 計算全般に関わるパラメータ

### 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

#### 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(図 1 を参照)。各スキャンモードの意味は次の通りです。

**ConstZ** : 高さ一定モード。探針を高さ一定で平面上を走査し、探針に作用する力を計算します。

**ConstForce** : 力一定モード。平面上の各位置において、探針に作用する力が設定した値と近くなる探針高さを探し出します。高さを探査する範囲は探針の初期位置から"scanarea - h"で設定した範囲になり、この間に適切な高さが見つからない場合には探査範囲内の最下点が出力されます。水中計算の場合、このモードの計算は行えません。

**ncAFM-ConstZ** : 高さ一定・ノンコンタクトモード。探針を振動させながら高さ一定で平面上を走査し、探針に作用する力を計算します。探針に作用する力の他に、周波数シフトやエネルギー散逸量も出力されます。

**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。

**MinForceHeight** : 力最小モード。平面上の各位置において、探針に作用する力の値が最小になる探針高さを探し出します。高さを探査する範囲は探針の初期位置から"scanarea - h"で設定した範囲になります。水中計算の場合、このモードの計算は行えません。

			スキャンモード				
			ConstZ	Const Force	ncAFM-ConstZ	Force Curve	MinForce Height
入力	Tip_Control	scanarea – w scanarea – d	○	○	○	-	○
		scanarea – h	-	○	○	○	○
		delta_xy	○	○	○	-	○
	delta_z	-	-	-	○	-	
	NC_Mode_Setting	ThetaStepNumber	-	-	○	-	-
		TipZamplitude	-	-	○	-	-
		SpringConst	-	-	○	-	-
		ResoFreq	-	-	○	-	-
	ForceConst	-	○	-	-	-	
	OneWayForceCurve	-	-	-	○	-	
nonElectroStatic	○	○	○	○	○		
出力	Output	Fx	○	○	※1	○	○
		Fy	○	○	※1	○	○
		Fz	○	○	※1	○	○
		FrequencyShift_2D	-	-	○	-	-
		EnergyDissipation_2D	-	-	○	-	-
		TipPositionZ	-	○	-	-	○
		Movie	○	○	○	○	○
		Log	○	○	○	○	○

※1 計算結果は出力されますが、ソフトウェア上では正しく表示されません。

図1 スキャンモードに対応する設定可能パラメータと出力ファイル。○が記載されていない項目は無視されるため、設定しても計算結果には影響しません。

delta\_xy

xy 方向スキャンのピクセルサイズ。Å 単位。

delta\_z

探針の z 方向の移動変化量。Å 単位。

NC\_Mode\_Setting - ThetaStepNumber

ncAFM-Const Z モードでデータ取得点数を  $N = 2n + 1$  としたときの n の値(図 2 の n に対応)。この値が大きいほど精度が増します。

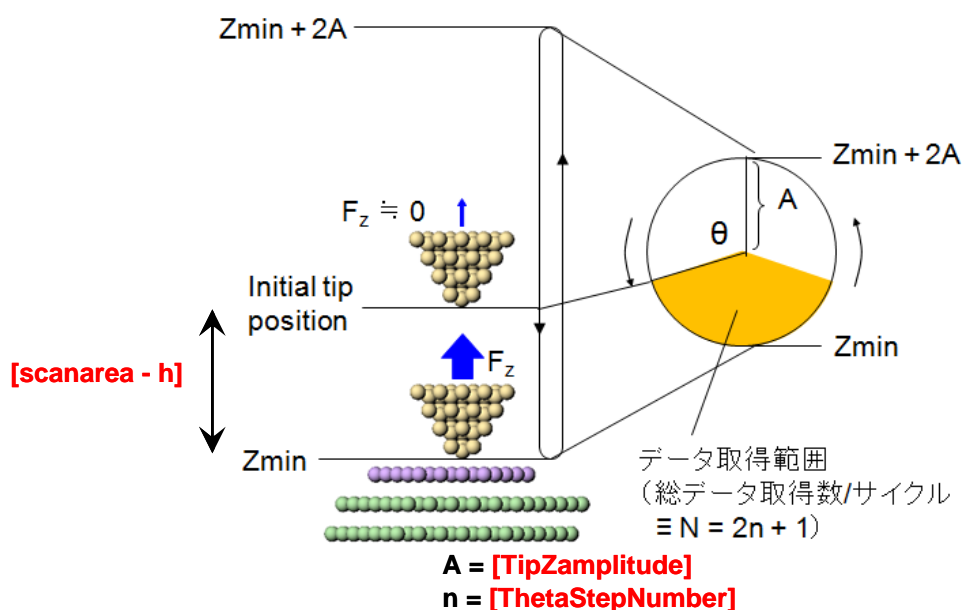


図2 nc-AFM モードの計算方法概略図

NC\_Mode\_Setting - TipZamplitude

カンチレバー先端の振動振幅。Å 単位。

NC\_Mode\_Setting - SpringConst

カンチレバーのばね定数。N/m 単位。

NC\_Mode\_Setting - ResoFreq

カンチレバーの共鳴周波数。kHz。

NC\_Mode\_Setting - FreqShift

nc-AFM-ConstFshft モードでの周波数シフト。Hz 単位。

ForceConst

Const Force モードでの力。

resetStructure\_atZmax

探針の各 x,y 位置において、計算が終わったあと、試料分子の構造を元に戻すかどうかの設定を行います。yes に設定する場合は構造を元に戻し、no に設定する場合はそのままの構造で探針を移動します。

OneWayForceCurve

ForceCurve モードで測定する際、Yes に設定する場合は上から下への一方向の測定となり、No に設定する場合は上から下方向と下から上方向への二方向の測定となります。

OneWayForceCurve	Yes
ForceField	
nonElectroStatic	6-exp_LJ_noCutoff
ElectroStatic	Yes
RISM	

ForceField : 探針と試料との間の相互作用計算に関するパラメータ

nonElectroStatic

探針 - 試料間に作用するファンデルワールス力の関数。MM3 カ場で採用され



ている、6-exp 型ポテンシャル関数および 6-12 型レナードジョーンズポテンシャル関数を使用することができます。さらに長い距離の原子間相互作用力を計算するかどうかの違いにより、以下から選択することが可能です。

#### 6-exp\_LJ\_noCutoff

6-exp 型 MM3 ファンデルワールスポテンシャル関数を用いて、全ての原子対について相互作用力を計算します。

#### 6-exp\_LJ\_withCutoff

6-exp 型 MM3 ファンデルワールスポテンシャル関数を用いて相互作用力を計算しますが、特徴距離の 2.3 倍より原子間距離が大きい原子対については相互作用力の計算を行いません。これによって、計算時間を短縮することが可能です。

#### 6-12\_LJ\_noCutoff

6-12 型レナードジョーンズポテンシャル関数を用いて、全ての原子対について相互作用力を計算します。

#### 6-12\_LJ\_withCutoff

6-12 型レナードジョーンズポテンシャル関数を用いて相互作用力を計算しますが、特徴距離の 2.3 倍より原子間距離が大きい原子対については相互作用力の計算を行いません。これによって、計算時間を短縮することが可能です。

### ElectroStatic

探針 – 試料間に作用するクーロン力を考慮するかどうかの指定です。

ElectroStatic	Yes		
[-] RISM			
TypeOfFourierTransform	log		linear/log
Temperature	298.0	K	
NumberOfRadiusBin	512		
LogRadiusMin	-4.37	ln(rmin/Ang)	log Fourier Trans. only
DeltaLogRadius	0.021	delta ln(r/Ang)	log Fourier Trans. only
VolumeRadius	10	Ang	linear Fourier Trans. only
[-] Solvent			
Molecule	water		water only
NumberDensity	0.03334	Ang <sup>(-3)</sup>	
[-] Solvent_Solvent			
InitialBroadening	1.4	Ang	
Tolerance	0.0001		
RISMStepMax	1000		
[-] Solute_Solvent			
InitialBroadening	1.5	Ang	
Tolerance	0.0001		
RISMStepMax	1000		
[-] Output			

RISM : 水中計算に関するパラメータ。

#### TypeOfFourierTransform

フーリエ変換を数値的に行う際のデータ点を線形距離で等間隔に取るか対数距離で等間隔に取るかの指定。

#### Temperature

水の温度。K 単位。

#### NumberOfRadiusBin

フーリエ変換を数値的に行う際のデータ点の総数。2 の累乗が望ましい。

#### LogRadiusMin

フーリエ変換を数値的に行う際のデータ点を対数距離で等間隔に取る場合の、距離の最小値。ln(線形距離での最小値/Å)の値で指定する。

#### DeltaLogRadius

フーリエ変換を数値的に行う際のデータ点を対数距離で等間隔に取る場合の、対数距離での間隔。

#### VolumeRadius

フーリエ変換を数値的に行う際のデータ点を線形距離で等間隔に取る場合の、距離の最大値。Å 単位。

#### Solvent - Molecule

溶媒の種類。現在は水だけに対応しており、変更不可。

#### Solvent - NumberDensity

溶媒（水）の数密度。Å<sup>-3</sup> 単位。

#### Solvent\_Solvent - InitialBroadening

溶媒間分布関数を計算する際の直接相関関数の初期関数形を決定するパラメータ： $\sigma$ 。Å<sup>-1</sup> 単位。この関数形は、相互作用点  $\alpha$  と  $\gamma$  に対して、 $c_{\alpha\gamma}^{(0)}(r) = -\beta q_{\alpha} q_{\gamma} [1 - \exp(-\sigma r)]/r$  と設定される。ここで  $\beta = 1/k_B T$  は逆温度、 $q_{\alpha}$  と  $q_{\gamma}$  は相互作用点の電荷であり、ここでの入力が必要無い。また  $r$  は相互作用点間の距離である。

#### Solvent\_Solvent - Tolerance

溶媒間分布関数の計算における収束条件許容量。データ点での分布関数の変化量の平均値がこの値以下になるまで繰り返し計算を行う。無次元量。

#### Solvent\_Solvent - RISMStepMax

溶媒間分布関数の計算における繰り返し数の最大値。上記許容量に達しなくとも繰り返し計算の回数がこの値を超えた場合に、分布関数の推定を終了する。

#### Solute\_Solvent - InitialBroadening

溶質 – 溶媒分布関数を計算する際の直接相関関数の初期関数形を決定するパラメータ。Å<sup>-1</sup> 単位。関数形は溶媒間分布関数の場合と同型。

#### Solute\_Solvent - Tolerance

溶質 – 溶媒分布関数の計算における収束条件許容量。データ点での分布関数の変化量の平均値がこの値以下になるまで繰り返し計算を行う。無次元量。

#### Solute\_Solvent - RISMStepMax

溶質 – 溶媒分布関数の計算における繰り返し数の最大値。上記許容量に達しなくとも繰り返し計算の回数がこの値を超えた場合に、分布関数の推定を終了する。

RISMStepMax	1000
Output	
Directory	./
Fx	test_fx.csv
Fy	test_fy.csv
Fz	test_fz.csv
PotentialEnergy	test_pot_ene.csv
FrequencyShift_2D	test_freq.csv
EnergyDissipation_2D	test_eng.csv
TipPositionZ	tipz.csv
Movie	test_mvc.mvc

Output : 出力されるファイルに関するパラメータ。Directory 以下の項目は出力されるファイル名を表わします。各ファイルに出力されるデータは以下のとおりです。

- Fx  
探針に作用する力の x 方向成分。Newton 単位。
- Fy  
探針に作用する力の y 方向成分。Newton 単位。
- Fz  
探針に作用する力の z 方向成分。Newton 単位。
- PotentialEnergy  
系の全エネルギー（水中計算のときは全自由エネルギー）。eV 単位。
- FrequencyShift\_2D  
周波数シフト像。Hz 単位。
- EnergyDissipation\_2D  
エネルギー散逸像。原子単位。
- TipPositionZ  
探針高さ像。ConstForce、ncAFM-ConstFshft、MinForceHeight モードの時に出力される。Å 単位。
- Movie  
分子変形のアニメーションファイル

【代表的なエラーとその対処法】

- ◆ did not find vdw parameter.  
MM3 力場に対応していない元素が含まれています。その場合、シミュレーションを行うことはできません。「チュートリアル」第 4 章「2. 分子モデリング」を参照ください。
- ◆ did not find force field parameter.  
MM3 力場に対応していない分子構造が含まれており、シミュレーションを行うことができません。

**分子動力学 AFM 像シミュレータの入力パラメータ**

このシミュレータでは AFM 測定像の計算を行うために、探針の走査と共に試料分子の構造変化の計算を行います。その計算手順は大まかに次の通りになります。

- ① 探針をある位置に配置する

- ② 設定した計算ステップ数だけ時間を進めつつ、探針に作用する力を計算する
  - ③ 探針を次の位置に移動する
- 以下②-③の繰り返し

以下で説明する入力パラメータを設定することによって、この計算手順の行い方を制御することができます。

「分子動力学 AFM 像シミュレータ」によるシミュレーションのための入力パラメータは、Project Editor の MD タグを選択することで、設定ができるようになります。このタグでは 4 つのカラムが存在します。

property	value	unit	descriptions
Tip_Control			
scanmode	relaxation		
delta_x	0.5	Ang	
delta_y	0.5	Ang	
delta_z	1	Ang	
xy_scanning	zigzag		
NC_Mode_Setting			
ThetaStepNumber	3		
TipZamplitude	2	Ang	
SpringConst	700	N/m	
MD_Setting			
TimeStep	1.0	fs	

- ◆ property カラムはパラメータの名前を表します
- ◆ value カラムはパラメータの入力値(設定値)を表します
- ◆ unit カラムはパラメータの単位(存在する場合のみ)を表します
- ◆ descriptions カラムは注意事項を表します

以下では、各 property の詳しい意味についての説明を行います。

Tip_Control			
scanmode	relaxation		
delta_x	0.5	Ang	
delta_y	0.5	Ang	
delta_z	1	Ang	
xy_scanning	zigzag		
NC_Mode_Setting			
ThetaStepNumber	3		
TipZamplitude	2	Ang	
SpringConst	700	N/m	

Tip\_Control : 探針(カンチレバー)に関するパラメータ

scanmode

探針のスキャンモード。ForceCurve、ConstZ、NC-ConstZ、relaxation 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(図 1 を参照)。

各スキャンモードの意味は次の通りです。

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。

ConstZ : 高さ一定モード。探針を高さ一定で平面上を走査し、探針に作用する力を計算します。

NC-ConstZ : 高さ一定・ノンコンタクトモード。探針を振動させながら高さ一定で平面上を走査し、探針に作用する力を計算します。探針に作用する力の他に、周波数シフトやエネルギー散逸量も計算することが可能です。

relaxation : 緩和計算。シミュレーションの前準備として試料分子の構造の緩和計算を行います。計算された分子構造のファイルは"Directory"(下記"Output"の項を参照)で指定した場所に出力されます。

※1 計算結果は出力されますが、ソフトウェア上では正しく表示されません。

			スキャンモード				
			ForceCurve	ConstZ	NC-ConstZ	relaxation	
入力		delta_x	-	○	○	-	
		delta_y	-	○	○	-	
		delta_z	○	-	-	-	
		xy_scanning	-	○	○	-	
	Tip_Control	NC_Mode_Setting	ThetaStepNumber	-	-	○	-
			TipZamplitude	-	-	○	-
			SpringConst	-	-	○	-
	MD_Setting	TimeStep		○	○	○	○
		StepNumber		○	○	○	○
		Temperature		○	○	○	○
		Safety_mode		○	○	○	○
		Initial_Velocity		任意	任意	任意	任意
	出力	Output	Fx	○	○	※1	-
Fy			○	○	※1	-	
Fz			○	○	※1	-	
FrequencyShift_2D			-	-	○	-	
Energy			○	○	○	○	
energy_freq			○	○	○	○	
Movie			○	○	○	○	
movie_freq			○	○	○	○	

図1 スキャンモードに対応する設定可能パラメータと出力ファイル。○が記載されていない項目は無視されるため、設定しても計算結果には影響しません。

- delta\_x  
x 方向スキヤンのピクセルサイズ。Å 単位。
- delta\_y  
y 方向スキヤンのピクセルサイズ。Å 単位。
- delta\_z  
探針の z 方向の移動変化量。Å 単位。
- xy\_scanning  
xy 方向のスキヤン方法の指定。
- NC\_Mode\_Setting - ThetaStepNumber  
NC-ConstZ モードでデータ取得点数を  $N = 2n + 1$  としたときの  $n$  の値(図 2 の  $n$  に対応)。この値が大きいほど精度が増します。

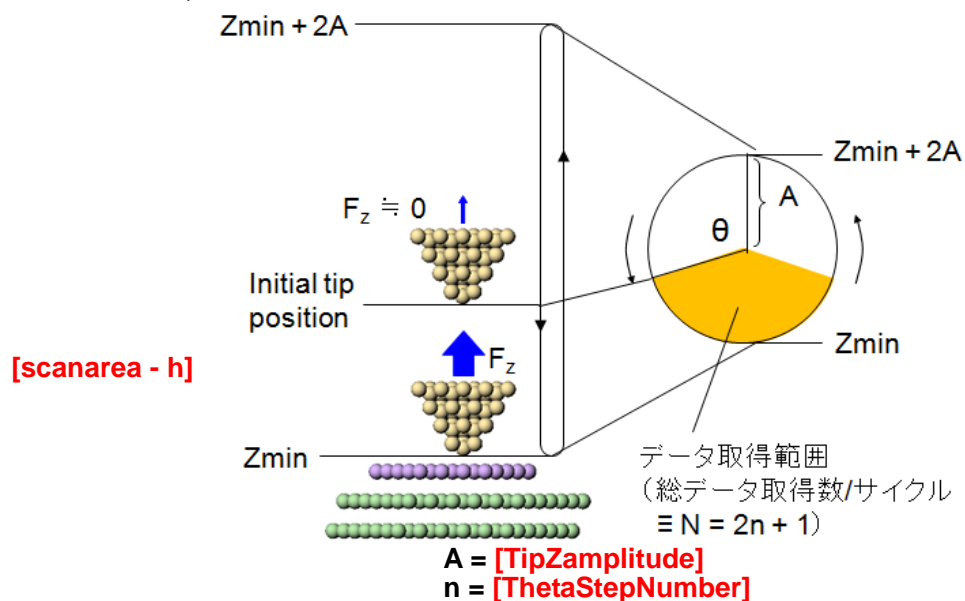


図 2 nc-AFM モードの計算方法概略図

- NC\_Mode\_Setting - TipZamplitude  
カンチレバー先端の振動振幅。Å 単位。
- NC\_Mode\_Setting - SpringConst  
カンチレバーのばね定数。N/m 単位。

MD_Setting		
TimeStep	1.0	fs
StepNumber	10000	
Temperature	300	K

MD\_Setting : 分子動力学計算に関するパラメータ

- TimeStep  
1 ステップあたりの時間刻み幅。fs 単位。
- StepNumber  
1 探針位置あたりの計算ステップ数。
- Temperature  
温度。K 単位。

ForceField_Parameter	prm/mm3.prm
Safety_mode	stopCalc

ForceField : 探針と試料との間の相互作用計算に関するパラメータ

#### Safety\_mode

力場パラメータファイル内にパラメータが存在しない場合の処置。

stopCalc : エラーにより計算を実行しない。

setZeroParam : 存在しないパラメータについて、値を 0 に設定して計算を実行します。(非推奨)

fixMolecule : 分子の変形を考慮せずに計算を実行します。

Input	
Initial_Velocity	

Input : 入力ファイルに関するパラメータ。

#### Initial\_Velocity

各原子の初期速度の入力ファイル。指定しなくても計算実行は可能です。(注)

無償版では使用できません

Output	
Directory	output#octane_four¥
Fx	fx.csv
Fy	fy.csv
Fz	fz.csv
FrequencyShift_2D	FS.csv
EnergyDissipation_2D	ED.csv
Energy	Energy.csv
energy_freq	500
movieFile	MDout.mvc
movie_freq	100

Output : 出力されるファイルに関するパラメータ。Directory 以下の項目は、出力されるファイル名を表します。各ファイルに出力されるデータは以下のとおりです。

#### Directory

計算結果のファイルを出力する場所

#### Fx

探針に作用する力の x 方向成分。Newton 単位。

#### Fy

探針に作用する力の y 方向成分。Newton 単位。

#### Fz

探針に作用する力の z 方向成分。Newton 単位。

#### FrequencyShift\_2D

周波数シフト像。共振周波数値で規格化された値が出力されます。

#### Energy

計算ステップに伴う系のエネルギー変化。kcal/mol 単位

#### Movie

分子変形のアニメーションファイル

## 代表的なエラーメッセージとその対処法

- ◆ cannot open FF parameter file.  
MM3 力場パラメータファイルを適切に設定されていない可能性があります。「チュートリアル」第1章「2. パラメータファイルの準備」を参照ください。
- ◆ "TipZamplitude" must be smaller than "scanarea.z/2."  
NC モードで"TipZamplitude"が"scanarea.z/2."より大きいときに出るエラーです。"TipZamplitude"の値を小さくする、もしくは"scanarea.z"の値を大きく設定してください。
- ◆ Atom mass is not defined properly.  
◆ did not find vdw parameter.  
MM3 力場に対応していない元素が含まれています。その場合、シミュレーションを行うことはできません。「チュートリアル」第4章「2. 分子モデリング」を参照ください。
- ◆ did not find Force Field Parameter.  
"Safety\_mode"を"stopCalc"に設定している場合に、MM3 力場に対応していない分子構造が含まれていると発生します。この場合、分子の変形を考慮したシミュレーションを行うことができません。"Safety\_mode"を"setZeroParam"もしくは"fixMolecule"に設定してシミュレーションを行ってください。
- ◆ warning: atom[ID] is unstable.  
分子動力学計算が不安定になっています。"TimeStep"の値を小さくする、もしくは探針を試料に無理に接近しすぎないように注意してパラメータの設定を行ってください。



## 5 量子論的 SPM 像シミュレータ

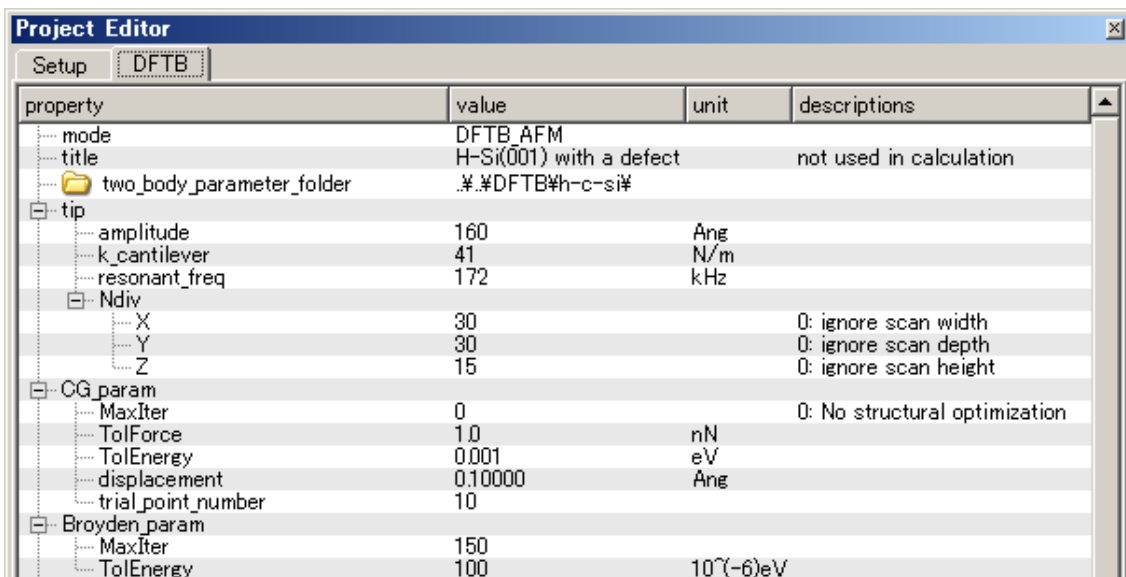
### Setup タブの入力パラメータに関する注意

「量子論的 SPM 像シミュレータ」を用いる際には、Setup タブの入力パラメータについて以下の制限がありますので、ご注意ください。

- ◆ Component タグ下に Tip タグが 1 つ、Sample タグが 1 つ以上存在している必要があります。また Image タグが存在している場合には計算することはできません。
- ◆ Tip タグに設定できる探針データには、
  - 拡張子が txyz、および、xyz のファイル
  - それらのうち、原子の組に関するパラメータのデータが存在しているものを指定して計算することができます。それ以外のものでは計算することができません。
- ◆ Sample タグに設定できるデータでも同様に、
  - 拡張子が txyz、および、xyz のファイル
  - それらのうち、原子の組に関するパラメータのデータが存在しているものを指定して計算することができます。それ以外のものでは計算することができません。
- ◆ 総原子数の制限値はお使いの PC に搭載されているメモリ量で決定されます。
- ◆ 計算に影響する値は Position, Rotation, ScanArea, DistanceFromSamples タグ内の値です。Property タグ内の値は「量子論的 SPM 像シミュレータ」での計算には影響しません。
- ◆ (AFM 計算の場合)ScanArea-h タグの値は次節で説明する DFTB タブの tip-amplitude タグの 2 倍より小さくなければなりません。また、周波数シフト値を計算する場合には 0 より大きい値に設定する必要があります。
- ◆ (STM 電流一定モード計算の場合)ScanArea-h タグにより、フィードバックループにおける探針の初期位置から見た最も低い位置を指定する必要があります。電流のセットポイントに対応する探針高さを見いだせない場合、トポグラフィ像に於いて探針の高さは(探針の初期高さ) - ("ScanArea-h") となります。

## DFTB タブの入カパラメータ

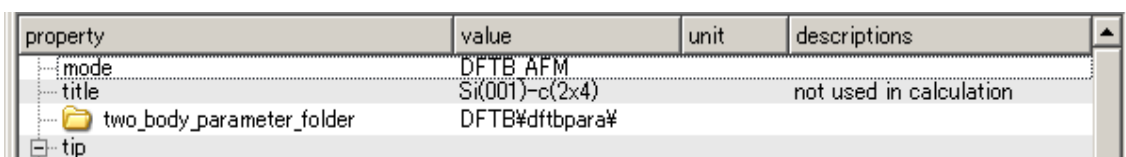
「量子論的 SPM 像シミュレータ」のための入力パラメータは、Project Editor の DFTB タグを選択することで、設定ができるようになります。このタグでは 4 つのカラムが存在します。



property	value	unit	descriptions
mode	DFTB_AFM		
title	H-Si(001) with a defect		not used in calculation
two_body_parameter_folder	.\$DFTB#h-c-si#		
tip			
amplitude	160	Ang	
k_cantilever	41	N/m	
resonant_freq	172	kHz	
Ndiv			
X	30		0: ignore scan width
Y	30		0: ignore scan depth
Z	15		0: ignore scan height
CG_param			
MaxIter	0		0: No structural optimization
TolForce	1.0	nN	
TolEnergy	0.001	eV	
displacement	0.10000	Ang	
trial_point_number	10		
Broyden_param			
MaxIter	150		
TolEnergy	100	$10^{(-6)}\text{eV}$	

- ◆ property カラムはパラメータの名前を表わします
- ◆ value カラムはパラメータの入力値(設定値)を表わします
- ◆ unit カラムはパラメータの単位(存在する場合のみ)を表わします
- ◆ descriptions カラムは注意事項を表わします

以下では、各パラメータの詳しい意味についての説明を行います。



property	value	unit	descriptions
mode	DFTB_AFM		
title	Si(001)-c(2x4)		not used in calculation
two_body_parameter_folder	DFTB#dftbpara#		
tip			

### 計算全般に関わるパラメータ

#### mode

「量子論的 SPM 像シミュレータ」での計算モード。DFTB\_AFM, DFTB\_STM, DFTB\_STS, DFTB\_KPFM, DFTB\_BAND が選択できます。それぞれ、原子間力顕微鏡像計算、トンネル電流顕微鏡像計算、トンネル電流分光計算、ケルビンプローブ力顕微鏡像計算、試料のバンド構造計算に対応します。

#### title

このプロジェクトファイルのタイトル。任意の文字列が記入できます。計算には影響しません。

#### two\_body\_parameter\_folder

原子間相互作用パラメータを包含しているフォルダ名。ファイル名は固定されています。

#### stm\_mode

STM の計算モード。ConstantHeight と ConstantCurrent の中から選ぶことが出来ます。ConstantHeight は探針の高さ一定モードに対応し、ConstantCurrent は電流一定モードに対応します。この項目は DFTB\_STM モードを選択したときにしか意味をなしません。

Parameter	Value	Unit
amplitude	160	Ang
k_cantilever	41	N/m
resonant_freq	172	kHz
Ndiv - X	30	
Ndiv - Y	30	
Ndiv - Z	15	

tip : 探針(カンチレバー)に関するパラメータ

#### amplitude

探針(カンチレバー先端)の振動振幅。DFTB\_AFM モードで周波数シフトを計算するときに利用。Setup タグの Tip - ScanArea - h タグの 2 分の 1 よりも大きい値でなければなりません。

#### k\_cantilever

カンチレバーのバネ定数。DFTB\_AFM モードで周波数シフトを計算するときに利用。

#### resonant\_freq

探針(カンチレバー先端)の振動周波数。DFTB\_AFM モードで周波数シフトを計算するときに利用。

#### Ndiv - X

x 方向のスキャン範囲の分割数。0 を設定した場合、走査範囲の幅が 0 にリセットされます。また STS 計算の際は強制的に 0 となります。

#### Ndiv - Y

y 方向のスキャン範囲の分割数。0 を設定した場合、走査範囲の奥行きが 0 にリセットされます。また STS 計算の際は強制的に 0 となります。

#### Ndiv - Z

z 方向のスキャン範囲の分割数。0 を設定した場合、走査範囲の高さが 0 にリセットされます。DFTB\_AFM モードで周波数シフトを計算するときには 1 以上の値を設定してください。また STS 計算の際は強制的に 0 となります。

... Z	15		
[-] CG_param			
... MaxIter	0		0: No structural optimization
... TolForce	1.0	nN	
... TolEnergy	0.001	eV	
... displacement	0.10000	Ang	
... trial_point_number	10		
[-] Broyden_param			

CG\_param : 構造緩和計算に関わるパラメータ (一部の計算モードに対してのみ有効)

#### MaxIter

構造緩和の繰り返し計算回数の最大値。0 を設定した場合、構造緩和計算をしません。

#### TolForce

構造が収束したと判定する際の原子一個に働く力のしきい値。

#### TolEnergy

構造が収束したと判定する際の全エネルギーの変化量のしきい値。

#### displacement

緩和構造を探索する際の原子の最大変位量

#### trial\_point\_number

次の緩和構造を探索する際に考慮に入れる過去の探索結果の数。

... trial_point_number	10		
[-] Broyden_param			
... MaxIter	150		0: No structural optimization
... TolEnergy	100	$10^{-6}$ eV	
... output_eigenvalue	off		on/off
[-] Fvbw			

Broyden\_param : 電子状態計算に関わるパラメータ

#### MaxIter

電子状態計算の繰り返し計算回数の最大値。0 を設定した場合、電子状態の収束計算を行いません。

#### TolEnergy

電子状態計算が収束したと判定する際の全エネルギーの変化量のしきい値。

#### output\_eigenvalue

系のエネルギー固有値の情報(ブリリアンゾーンのΓ点での値のみ)を出力するかどうか。on ならば出力します。off ならば出力しません。

... output_eigenvalue	off		on/off
[-] Fvbw			
... tip_shape	conical		
... height_of_highest_adsorbed_molecule	0.00000	Ang	
... Hamaker_const	0.22	aJ/mol	
... apex_angle	120	degree	
... tip_height	1000	Ang	
... radius_of_tip_apex	1.00000	Ang	
[-] tip_bias_voltage			

Fvbw : 探針にかかるファンデルワールスカのモデルに関するパラメータ

#### tip\_shape

探針のマクロな形状。pyramidal/parabolic/spherical/conical が選択可能。それ

それぞれ四角錐、回転放物面、球、円錐の表面形状に対応します。

height\_of\_highest\_adsorbed\_molecule

吸着分子の最大高さ

Hamaker\_const

探針のハマカー定数。単位のカラムにある aJ は  $10^{(-18)}$  J の意。

apex\_angle

探針の開き角。pyramidal と conical のときにのみ有効。

tip\_height

探針の高さ方向の大きさ。spherical のときは直径に対応。

radius\_of\_tip\_apex

探針先端の曲率半径。conical のときにのみ有効。spherical のときの半径はこの項目での指定値ではなく、tip\_height/2 の値が用いられます。

radius_of_tip_apex	1.00000	Ang
tip_bias_voltage		
minimum	-1.00000	V
maximum	1	V
Ndiv	0	
electron_temperature	50	K
tip_charge_neutrality		

feedback\_param

フィードバックループのパラメータ。これらのパラメータはフィードバックループが存在する計算モードでしか意味をなしません。

delta\_z

フィードバックループにおける、探針の z-方向への移動の最大値。

set\_point

フィードバックループにおける電流のセットポイント。この値は絶対値であり、正の値でなければなりません。使用している計算手法により、妥当な像をあるためには実験で用いている値と大きく違う値を入力する必要がある可能性があります(例えば、実験値 0.3nA に対し、2000nA という様に)。探針-試料間の距離を調節して得られた、高さ一定モードの妥当な像の電流値の範囲を見ることで、入力する電流のセットポイントとして妥当な値の範囲を推測することが出来ます。

TolCurr

'set\_point' の値と計算した電流値の差の閾値。差がこの値より小さければ、フィードバックループにおいて探針が正しい位置に到達したと判断します。この値は'set\_point' よりも小さくなければなりません。

MaxIter

フィードバックループの繰り返し計算回数の最大値。

tip\_bias\_voltage : 探針の電位に関するパラメータ。DFTB\_STM/DFTB\_STS のときにのみ有効。(試料の電位は 0 と仮定しています)

minimum

最小値

maximum

最大値

Ndiv

(DFTB\_STS モードで)最大値と最小値の間を分割して計算する場合の分割数。0 を設定した場合、minimum に設定した値が用いられます。また STM モードのときは強制的に 0 に設定されます。

Ndiv\_kpoints

(DFTB\_STM/DFTB\_STS のときにのみ有効。)試料の電子状態を計算する際の k 点の分割数。2 次元ブリルアンゾーン上で Ndiv\_kpoints × Ndiv\_kpoints 個の k 点を取って、試料の電子状態を求めます。正で偶数になる値を入力してください。

DoS

試料表面の状態密度計算のパラメータ。

output\_dos

試料表面の DoS 計算を行うかどうか。

minimum

DoS 計算のエネルギー範囲の最小値。

maximum

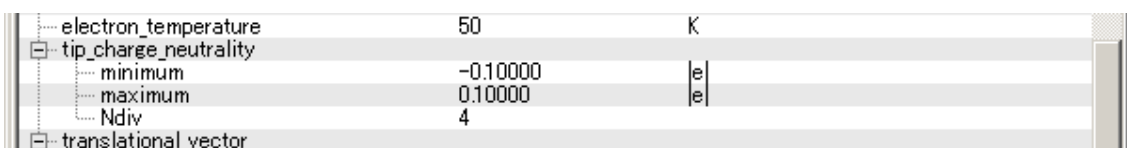
DoS 計算のエネルギー範囲の最大値。

Ndiv

'minimum' と 'maximum' の間の分割。

electron\_temperature

電子温度



electron_temperature	50	K
tip_charge_neutrality		
minimum	-0.10000	e
maximum	0.10000	e
Ndiv	4	
translational_vector		

tip\_charge\_neutrality : 探針の電気的中性度に関するパラメータ。DFTB\_KPFFM のときにのみ有効。試料の電気的中性度は探針の値と絶対値は等しく、符号が逆になります。(探針と試料を合わせた系は電気的に中性と仮定しています。) 電気的中性度がパラメータになっている理由は理論モデル説明書 (製作中) をご覧ください。

minimum

最小値。単位は電荷素量。

maximum

最大値。単位は電荷素量。

Ndiv

最大値と最小値の間を分割して計算する場合の分割数。0 を設定した場合、minimum に設定した値が用いられます。接触電位差像を計算する場合には 3 以上の値にしてください。

Ndiv	4	
translational_vector		
a		
X	15.35014	Ang
Y	0.00000	Ang
Z	0.00000	Ang
b		
X	0.00000	Ang
Y	15.35014	Ang
Z	0.00000	Ang
c		
X	0.00000	Ang
Y	0.00000	Ang
Z	100.00000	Ang
Output		

translational\_vector : 単位格子ベクトル

ベクトル c は DFTB\_BAND モードの三次元計算のみで使用されます。

Z	100.00000	Ang
Output		
Directory	/	
AtomPosition	atpos.mvf	
Force_x	force_x.csv	
Force_y	force_y.csv	
Force_z	force_z.csv	
Freq_shift	freq_shift.csv	
EnergyLevel	ene_lev.txt	
TunnelingCurrent	current.csv	
TunnelingSpectroscopy	current_spectro.csv	
CurrentVoltage	curr_volt.csv	
ContactPotential	LCPD.csv	

OpenMP\_threads

並列計算を行う際に使用する CPU のコア数

band\_calculation

バンド計算に対するパラメータ(DFTB\_BAND モードのみ)。

lattice\_type

結晶タイプの名前。'2D\_'という接頭詞がついているものは二次元の格子である。

band\_kpoints

試料のブリルアン領域における k 点の分割。N をこの値と見做したとき、k 点数は二次元のバンド計算では  $N \times N$  となり、三次元バンド計算では  $N \times N \times N$  となる。あなたが試みているバンド計算がメモリを多く消費しすぎる場合は、この値を減らすと良いです。

注意: このパラメータは偶数でなければならない。

band\_ndiv

計算されたバンド構造における、プロットされた線の分割数。

Output : 出力されるファイルに関するパラメータ。以下の項目は全て編集できません。

Directory

結果ファイルを出力するディレクトリ。プロジェクトが保存されるディレクトリに出力されます。

残りの項目は出力されるファイル名を表わします。Result ビューでの見出しラベルにも使われます。計算モードにふさわしいファイルのみが生成されます。各ファイルに出力されるデータは以下のとおりです。

**AtomPosition**

原子配置のアニメーションのためのデータ(バイナリ形式のファイルであり、データを見ることはできません)

**Force\_x, Force\_y, Force\_z**

各探針位置での、探針にかかる力の x, y, z 成分の値。可視化には対応していませんが、データを見ることはできます。(探針の位置座標、探針位置の位相、探針にかかる力の成分値、探針の電気的中性度(KPFM 計算のときのみ)が出力されています。)

**Freq\_shift**

各探針走査位置での、周波数シフト値(単位は Hz)。GUI の Result ビューで 2 次元マップを見ることができます。

**EnergyLevel**

エネルギー固有値の値。可視化には対応していませんが、データを見ることはできます。

**TunnelingCurrent**

各探針位置でのトンネル電流の値(単位は nA)。GUI の Result ビューで 2 次元マップを見ることができます。電流値の正負は、探針から試料へ電流が流れるときを正としています。

**STM\_topography**

STM 電流一定モードにおける探針の高さ(単位は Å)。GUI の Result ビューで 2 次元マップを見ることが出来ます。

**TunnelingSpectroscopy**

探針の電位(単位は V)に対する、トンネル電流分光の値(単位は無次元)。GUI の Result ビューで 1 次元グラフを見ることができます。

**CurrentVoltage**

トンネル電流分光計算のときの I - V カーブのデータ。GUI の Result ビューで 1 次元グラフを見ることができます。縦軸が電流(単位は nA)、横軸が探針の電圧(単位は V)です。電流値の正負は、探針から試料へ電流が流れるときを正としています。

**DoS**

エネルギーに対する試料表面の状態密度。エネルギーの単位は eV で、状態密度の単位は 1/eV です。GUI の Result ビューで 1 次元グラフを見ることが出来ます。

**ContactPotential**

各探針位置での局所接触電位差の値(単位は eV)。GUI の Result ビューで 2 次元マップを見ることができます。局所接触電位差の値の正負は、探針側が高



い場合を正としています。

BandStructure

試料のバンド構造。縦軸の単位は eV。

## 代表的なエラーメッセージとその対処法

アルファベット順に並んでいます。

- ◆ Array allocation error; ... : 計算時に使われる変数の量が、お使いの PC に搭載されているメモリ量を上回った際に表示されます。入力パラメータの数値等(特に、探針や試料の原子数)を減らしてください。
- ◆ Error: cannot open the following file. C:¥(フォルダ名)¥atoms : シミュレータが two\_body\_parameter\_folder の設定値に対応した入力データを見付けられずにあります。シミュレータをインストールしたディレクトリに対応して C:¥(フォルダ名)¥が存在しているかどうか確認してください。
- ◆ Error: tip data file not found. Stopped. : 探針モデルの設定が適切ではありません。
- ◆ Niter reaches Maxlter in BR process. : 電子状態の収束計算が収束目標値に達しなかった際に表示されます。収束目標値を緩くするか収束回数の最大値を大きくしてください。
- ◆ qionmax is out of range for input [cini:cfin]. (数字)、もしくは、Some qionmax are out of range for input [cini:cfin]. : 接触電位差の推定が適切に行われていない可能性があります。(2 次関数フィットでの極値の位置が、指定した minimum と maximum の間に入らなかったことを意味しています)。minimum/maximum の値を再度設定して計算をしてください。接触電位差の推定アルゴリズムにつきましては理論モデル説明書（製作中）をご覧ください。
- ◆ The eigenvalue equation cannot be solved. Stopped. It may be because some atoms are set too close. : 電子状態の計算時に、固有値方程式の解が得られなかった際に表示されます。入力された構造の原子間距離が小さいときに起こりやすいエラーです。探針や試料の構造ファイル、および、それらの位置関係をご確認ください。また、構造緩和計算を行っている場合、DFTB タブの CG\_param - displacement タグの値を小さくすることで回避できることがあります。

ここに挙げられている以外のメッセージについてご不明な点がございましたら、お問い合わせください。

