



(19)대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(51) Int. Cl. (11) 공개번호 10-2007-0057237
G01N 13/10 (2006.01) (43) 공개일자 2007년06월04일

(21) 출원번호	10-2007-7008210	(87) 국제공개번호	WO 2006/049120
(22) 출원일자	2007년04월11일	(43) 공개일자	2007년06월04일
심사청구일자	2007년04월11일		
번역문 제출일자	2007년04월11일		
(86) 국제출원번호	PCT/JP2005/019985	(87) 국제공개번호	WO 2006/049120
국제출원일자	2005년10월31일	국제공개일자	2006년05월11일

(30) 우선권주장 JP-P-2004-00321591 2004년11월05일 일본(JP)

(71) 출원인 도꾸리쓰교세이호징 가가꾸 기쥬쓰 신키 기꼬
일본 사이따마켄 가와구찌시 혼쵸 4쵸메 1방 8고

(72) 발명자 사사키, 나루오
일본 도쿄 1800023, 무사시노-시, 사카미미나미마찌, 2-5-12-302
타카하시, 타다타카
일본 도쿄 1500012, 시부야-구, 히로오, 4-1-18-303

(74) 대리인 최덕규
이혜진

전체 청구항 수 : 총 21 항

(54) 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법, 프로그램, 기록매체, 진동 시뮬레이터

(57) 요약

동적 AFM 탐침의 진동특성을 시뮬레이트한다. 임의의 동작 파라미터(예를 들어, 탐침의 변위 u_0 , 캔틸레버의 스프링 정수 k , 탐침의 곡률반경 R_1)에 대하여, 탐침이 선단에 설치된 판스프링 형상의 캔틸레버를 기계적으로 공진시키면서 상하 움직여, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경(AFM) 탐침의 진동특성을 시뮬레이트하고, 탐침의 초기위치 u_0 마다의 정상상태의 진동정보를 기록하여(변위 u -시각 τ)(S103, S104), 기록된 진동정보에 기초하여 GUI로 탐침의 운동을 가시화한다. 한편, AFM에서 얻어지는 주요한 스펙트로스코피, 예를 들어 진폭 a -탐침 초기위치 u_0 관계나, 상호작용력 F -탐침 초기위치 u_0 관계를 구하고, 탐침(캔틸레버)의 표면에의 접근 및 분리 운동에 대응시켜 그래프화한다.

특허청구의 범위

청구항 1.

돌기가 붙은 탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법으로서,

처리부는, 캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 탐침에 붙어 있는 돌기의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 입력부로부터 입력하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경, 돌기의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계와,

[수1]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u_0) - \frac{1}{k}F(R2, u + u_0 - 2R2) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(1)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3} \pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(2)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침의 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단 및 돌기에 작용하는 반데르발스 힘 또는 상호작용력, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, R2: 돌기의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

처리부는, 구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하는 단계와,

처리부는, 다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대해서, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계를 실행하는 것을 반복하는 단계

를 포함하는 상기 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 2.

탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법으로서,

처리부는, 캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 입력
부로부터 입력하는 단계와,

처리부는 탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계와,

[수2]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u0) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(11)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(12)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침 초기위치 u0으로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침 위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단에 작용하는 반데르발스 힘, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진 폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

처리부는, 구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하는 단계와,

처리부는, 다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정되니 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대하여, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계를 실행하는 것을 반복하는 단계

를 포함하는 상기 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 3.

제1항 또는 제2항에 있어서, 처리부는, 설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 출발위치의 값 이상이 될 때까지 또는 출발 위치의 값보다 커질 때까지, (c) 입력된 반환위치에 이동 폭을 순차 더하거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에 이동 폭을 더하여, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (d) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대해서, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계를 실행하는 것을 반복하는 단계

를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 4.

제1항 또는 제2항에 있어서, 처리부는, 구해진 탐침의 변위에 기초하여, 탐침의 변위의 진폭, 탐침과 시료 표면 간의 상호작용 에너지, 탐침과 시료 표면 간의 상호작용력 및 탐침의 평균적 역학적 에너지의 어느 하나 또는 복수를 구하는 단계와,

처리부는, 구해진 진폭, 상호작용 에너지, 상호작용력 및 탐침의 평균적 역학적 에너지의 어느 하나 또는 복수를, 설정된 탐침의 초기위치에 대응시켜 기억부에 기억하는 단계

를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 5.

제1항 또는 제2항에 있어서, 처리부는 구해진 탐침의 속도 또는 변위에 기초하여 탐침의 변위의 위쪽 전회점 및 아래쪽 전회점을 각각 최소화한 하나 구하는 단계와,

구해진 위쪽 및 아래쪽 전회점에 대응하는 탐침의 변위의 차를 취하여, 탐침의 변위의 진폭을 구하는 단계와,

처리부는, 구해진 진폭을 설정된 탐침의 초기위치에 대응시켜 기억부에 기억하는 단계

를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 6.

제1항에 있어서, 처리부는, 다음 식에 따라, 탐침 및 돌기와 시료 표면과의 사이의 상호작용 에너지 V 를 구하는 단계와,

처리부는, 구해진 상호작용 에너지 V 를 설정된 탐침의 초기위치에 대응시켜 기억부에 기억하는 단계

를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법:

[수3]

$$V = V(R1, u + u0) + V(R2, u + u0 - 2R2) \quad \dots\dots\dots(5)$$

$$V(R, z) = \frac{2}{3} \pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^5 R \left[\frac{1}{210} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^7 - \frac{\sigma}{z} \right] \quad \dots\dots\dots(6)$$

여기에서, ρ : 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ : 원자 반경에 관한 파라미터, ϵ : 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, $R1$: 탐침의 곡률반경, $R2$: 돌기의 곡률반경, $u0$: 탐침의 초기위치.

청구항 7.

제1항에 있어서, 처리부는, 다음 식에 따라, 탐침 및 돌기와 시료 표면과의 사이의 상호작용력 F 를 구하는 단계와,

처리부는, 구해진 상호작용력 F 를 설정된 탐침의 초기위치에 대응시켜 기억부에 기억하는 단계

를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법:

[수4]

$$F = F(R_1, u + u_0) + F(R_2, u + u_0 - 2R_2)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3} \pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^2 \right] \dots\dots\dots(2)$$

여기에서, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, R2: 돌기의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치.

청구항 8.

제1항 또는 제2항에 있어서, 처리부는, 다음 식에 따라, 탐침의 1주기의 평균 역학적 에너지 E를 구하는 단계와,

처리부는, 구해진 평균 역학적 에너지 E를 설정된 탐침의 초기위치에 대응시켜 기억부에 기억하는 단계

를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법:

[수5]

$$E = \frac{1}{T} \int_0^T \left(\frac{1}{2} m \dot{u}^2 + \frac{1}{2} k u^2 + V \right) d\tau \dots\dots\dots(7)$$

여기에서, E: 1주기 평균의 탐침의 역학적 에너지(nJ), T: 1주기의 길이(무차원 시간), u: 시간 τ에서의 탐침의 변위(nm), τ: 계산의 시간의 흐름 폭(무차원 시간), m: 규격화한 캔틸레버와 탐침의 질량 1(kg), k: 캔틸레버의 스프링 정수(N/m).

청구항 9.

제1항 또는 제2항에 있어서, 처리부는, 구해진 탐침의 속도가 음에서 양으로 이동할 때의, 상기 음의 속도에 대응하는 제1 시각과, 상기 양의 속도에 대응하는 제2 시각의 조(組)를 구하는 단계와,

처리부는, 구해진 탐침의 속도가 양에서 음으로 이동할 때의, 상기 양의 속도에 대응하는 제3 시각과, 상기 음의 속도에 대응하는 제4 시각의 조를 구하는 단계와,

처리부는, 구해진 제1 시각과 제2 시각 사이에서, 탐침의 속도의 절대값이 미리 정해진 역치 이하로 될 때까지 시간 흐름을 작게 하여, 속도의 절대값이 미리 정해진 역치 이하로 되거나 또는 최소로 되는 아래쪽 전회점에서의 시각을 구하는 단계와,

처리부는 구해진 제3 시각과 제4 시각의 사이에서, 탐침의 속도의 절대값이 미리 정해진 역치 이하로 될 때까지 시간 흐름을 작게 하여, 속도의 절대값이 미리 정해진 역치 이하로 되거나 또는 최소가 되는 위쪽 전회점에서의 시각을 구하는 단계와,

처리부는, 대응하여 기억부에 기억된 탐침의 변위와 시각을 참조하여, 구해진 아래쪽 전회점에서의 시각에 대응하는 제1 탐침의 변위와, 구해진 위쪽 전회점에서의 시각에 대응하는 제2 탐침의 변위를 읽어내는 단계와,

처리부는, 읽어내어진 제1 및 제2 탐침의 변위의 차를 취하여, 탐침의 변위의 진폭을 구하는 것과, 제1 탐침의 변위에 기초하여 아래쪽 전회점에서의 탐침과 시료 표면 간의 상호작용 에너지를 구하는 것, 그리고 제1 탐침의 변위에 기초하여 아래쪽 전회점에서의 탐침의 상호작용력을 구하는 것 중 어느 하나 또는 복수를 구하는 단계와,

처리부는, 구해진 진폭, 상호작용 에너지 및 상호작용력의 어느 하나 또는 복수를 기억부에 기억하는 단계
 를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 10.

제9항에 있어서, 처리부는, 취득된 제1 및/또는 제2 탐침의 변위에 기초하여, 다음 식에 따라, 탐침의 변위의 진폭 a, 아래
 쪽 전회점에서의 탐침과 시료 표면 간의 상호작용 에너지 V, 및 아래쪽 전회점에서의 탐침의 상호작용력 F의 어느 하나 또
 는 복수를 구하는 것을 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법:

[수6]

$$\text{진폭 } a = (u_{\max} - u_{\min}) / 2$$

$$V = V(R1, u_{\min} + u0) + V(R2, u_{\min} + u0 - 2R2)$$

$$V(R, z) = \frac{2}{3} \pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^5 R \left[\frac{1}{210} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^7 - \frac{\sigma}{z} \right] \dots\dots\dots(6)$$

$$F = F(R1, u_{\min} + u0) + F(R2, u_{\min} + u0 - 2R2)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3} \pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^2 \right] \dots\dots\dots(2)$$

여기에서, u_{\min} : 제1 탐침의 변위, u_{\max} : 제2 탐침의 변위, ρ : 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ : 원자 반경에 관한 파라미터,
 ϵ : 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, R2: 돌기의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치.

청구항 11.

제1항 또는 제2항에 있어서, 처리부는, 기억부를 참조하여, 기억된 시각과, 상기 시각에 대응하는 탐침의 변위와, 상기 시
 각에 대응하는 탐침의 속도를 읽어내는 단계와,

읽어내어진 탐침의 변위와 탐침의 속도에 기초하여, 탐침의 운동 또는 시료 표면 부근의 탐침의 운동을 표시부에 애니메이
 션 표시하는 단계

를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 12.

제11항에 있어서, 처리부는, 기억부를 참조하여, 운동 방정식을 풀 때에 구해져 기억된 상호작용력 F를 읽어내는 단계와,

읽어내어진 상호작용력 F의 크기에 따른 길이, 그리고 상호작용력 F의 부호에 따른 방향의 화살표를, 표시부에 애니메이
 션 표시된 탐침 표면에 표시하는 단계

를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 13.

제1항 또는 제2항에 있어서, 처리부는, 기억부를 참조하여, 기억된 시각과 탐침의 변위를 읽어내는 단계와,
 읽어내어진 시각과 탐침의 변위를 표시부에 그래프 표시하는 단계
 를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 14.

제1항 또는 제2항에 있어서, 처리부는, 기억부를 참조하여, 기억된 탐침의 속도와, 대응하는 탐침의 변위를 읽어내는 단계와,
 읽어내어진 탐침의 속도와, 대응하는 탐침의 변위를 플롯함으로써, 위상 평면 내에서의 트라젝토리를 표시부에 표시하는 단계
 를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 15.

제4항에 있어서, 처리부는, 기억부를 참조하여, 기억된 탐침의 변위의 진폭과 탐침의 초기위치, 기억된 상호작용 에너지와 탐침의 초기위치, 기억된 상호작용력과 탐침의 초기위치, 및 기억된 평균 역학적 에너지와 탐침의 초기위치의 조합의 어느 하나 또는 복수를 읽어내는 단계와,
 읽어내어진 상기 조합에 대해서, 스펙트로스코피를 표시부에 표시하는 단계
 를 더 포함하는 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법.

청구항 16.

돌기가 붙은 탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램으로서,
 처리부는, 캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 탐침에 붙어 있는 돌기의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 입력부로부터 입력하는 단계와,
 처리부는, 탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 단계와,
 처리부는, 탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 단계와,
 처리부는, 설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경, 돌기의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계와,

[수7]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u_0) - \frac{1}{k}F(R2, u + u_0 - 2R2) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(1)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(2)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침의 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단 및 돌기에 작용하는 반데르발스 힘 또는 상호작용력, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, R2: 돌기의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

처리부는, 구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하는 단계와,

처리부는, 다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대해서, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계를 실행하는 것을 반복하는 단계

를 컴퓨터에 실행시키기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램.

청구항 17.

탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램으로서,

처리부는, 캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 입력부로부터 입력하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계와,

[수8]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R, u + u_0) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(11)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2 \rho^2 \varepsilon \sigma^4 R \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(12)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단에 작용하는 반데르발스 힘, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

처리부는, 구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하는 단계와,

처리부는, 다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대해서, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계를 실행하는 것을 반복하는 단계

를 컴퓨터에 실행시키기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램.

청구항 18.

돌기가 붙은 탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체로서,

처리부는, 캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 탐침에 붙어 있는 돌기의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 입력부로부터 입력하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경, 돌기의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계와,

[수9]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u0) - \frac{1}{k}F(R2, u + u0 - 2R2) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(1)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(2)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침의 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단 및 돌기에 작용하는 반데르발스 힘 또는 상호작용력, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, R2: 돌기의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

처리부는, 구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하는 단계와,

처리부는, 다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대해서, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계를 실행하는 것을 반복하는 단계

를 컴퓨터에 실행시키기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽어 들일 수 있는 기록매체.

청구항 19.

탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트 하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽어 들일 수 있는 기록매체로서,

처리부는, 캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 입력부로부터 입력하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않은 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으므로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계와,

[수10]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u0) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(11)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2\rho^2\varepsilon\sigma^4R \left[\frac{1}{30}\left(\frac{\sigma}{z}\right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(12)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단에 작용하는 반데르발스 힘, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률 반경, u0: 탐침의 초기위치]

처리부는, 구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하는 단계와,

처리부는, 다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하로 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대해서, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계를 실행하는 것을 반복하는 단계

를 컴퓨터에 실행시키기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽어들일 수 있는 기록매체.

청구항 20.

돌기가 붙은 탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이터로서,

파라미터를 입력하기 위한 입력장치와,

상기 입력장치로부터 입력된 파라미터에 기초하여, 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하는 처리부와,

상기 처리부에 의해 구해진 데이터를 기억 또는 표시하기 위한 기억 또는 출력장치

를 갖추고,

상기 처리부는,

캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 탐침에 붙어 있는 돌기의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 상기 입력장치로부터 입력하는 수단과,

탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 수단과,

탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 수단과,

설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경, 돌기의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단과,

[수11]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u0) - \frac{1}{k}F(R2, u + u0 - 2R2) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(1)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2\rho^2\varepsilon\sigma^4R \left[\frac{1}{30}\left(\frac{\sigma}{z}\right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(2)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침의 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단 및 돌기에 작용하는 반데르발스 힘 또는 상호작용력, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, R2: 돌기의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 상기 기억 또는 출력장치에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 상기 기억 또는 출력장치에 기억하는 수단과,

다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 수단과,

설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대해서, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 수단을 실행하는 것을 반복하는 수단

을 갖는 상기 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이터.

청구항 21.

탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이터로서,

파라미터를 입력하기 위한 입력장치와,

상기 입력장치로부터 입력된 파라미터에 기초하여, 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하는 처리부와,

상기 처리부에 의해 구해진 데이터를 기억 또는 표시하기 위한 기억 또는 출력장치

를 갖추고,

상기 처리부는,

캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 상기 입력장치로부터 입력하는 수단과,

탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 수단과,

탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 수단과,

설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단과,

[수12]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u0) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(11)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2\rho^2\varepsilon\sigma^4R \left[\frac{1}{30}\left(\frac{\sigma}{z}\right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(12)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단에 작용하는 반데르발스 힘, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 상기 기억 또는 출력장치에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 상기 기억 또는 출력장치에 기억하는 수단과,

다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단에서 구해진 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 수단과,

설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대하여, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 수단을 실행하는 것을 반복하는 수단

을 갖는 상기 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이터.

명세서

기술분야

본 발명은, 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법, 시뮬레이션 프로그램, 시뮬레이션 프로그램을 기억한 기록매체 및 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이터에 관한 것으로, 특히 나노 테크놀로지에 있어서의 유력한 계측방법인 주사 프로브 현미경의 시뮬레이터 기술 중, 나노 스케일 비선형 진동 해석을 지원하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법·프로그램, 그 프로그램을 기억한 기록매체 및 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이터에 관한 것이다.

배경기술

동적 모드 원자간력 현미경(동적 AFM, 동적 Atomic Force Microscopy)은, 탐침을 선단에 설치한 캔틸레버라 불리는 판 스프링을 기계적으로 공진시켜, 표면의 구조를 나노~마이크로 스케일로 관찰하는 프로브 현미경이다. 그러나 탐침과 표면과의 사이에 작용하는 상호작용력은 비선형이기 때문에, 측정량인 진폭의 변화나 주파수 쉬프트의 물리적 의미를 이해하는 것이 곤란한 일이 많다. 이 경향은 탐침이 표면과 충돌하는 경우에 현저해진다.

종래, 동적 AFM의 탐침(또는 캔틸레버)의 다이내믹스의 시뮬레이션은, 각 실험 그룹이 행한 AFM 측정의 결과를 설명하기 위해 행해져 왔다. 기본적으로는, 탐침의 운동 방정식을 수치적으로 풀고 진폭 a 의 스펙트로스코피(spectroscopy)나, 위상공간 내의 트라젝토리(trajec-tory)와 비교하여 그 이론적 해석을 행한다는 것이다(예를 들어, 비특허문헌 1 및 2 참조). 예를 들어, 비특허문헌 1의 Fig. 2에는, 진폭 a 의 스펙트로스코피가 나타나 있다. 또 비특허문헌 2의 Fig. 2에는 변위 u -시간미분 $du/d\tau$ 관계가 나타나 있다.

비특허문헌 1: B. Anczykowski, D. Kruger and H. Fuchs, Phys. Rev. B53, 15485-15488, 1996.

비특허문헌 2: N. Sasaki et al., Appl. Phys. A66, S287-291, 1998.

발명의 개시

발명이 해결하려는 과제

또한, 본 발명에서는 탐침의 다이내믹스를 생각하지만, 나중에 서술하는 바와 같이 탐침은 캔틸레버의 선단에 부착해 있기 때문에, 탐침의 다이내믹스와 캔틸레버의 다이내믹스는 본질적으로 등가이다. 그래서, 본 명세서에서는 「탐침」의 다이내믹스라 부르기로 한다.

탐침의 다이내믹스는 한정된 파라미터의 범위 내에서 의논되어 왔지만, 파라미터의 미소(微小)한 변화에 의해, 캔틸레버의 다이내믹스에 극히 현저한 변화가 생겨 동작이 불안정해질 가능성이 있다. 이것은, 탐침과 표면과의 사이에 작용하는 상호작용력의 비선형성에 유래하여, 히스테리시스(hysteresis)와 같은 이력구조가 출현하기 때문이다. 또한, 여기에서 말하는 파라미터란, 예를 들어 캔틸레버의 진동 진폭 a , 탐침의 초기위치 u_0 , 캔틸레버 기저부(基底部)의 여기진동수 Ω , 및 여기(勵起)진폭 l , Q 값, 스프링 정수 k , 탐침의 곡률반경 R , 탐침-표면간 상호작용력 등을 가리킨다.

그 때문에, 동적 AFM을 안정하게 제어하거나, 최적의 분해능을 얻기 위한 파라미터 영역(예를 들어, 캔틸레버의 진동 진폭 a , 탐침의 초기위치 u_0 , 캔틸레버 기저부의 여기진동수 Ω , 및 여기진폭 l , Q 값, 스프링 정수 k , 탐침의 곡률반경 R , 탐침-표면간 상호작용력 등)을 탐색하는 일이 필요하지만, 팽대한 파라미터군(群)의 데이터를 계통적이고 효율적으로 정리하는 것은 곤란한 작업이다.

본 발명은 이상의 점에 감안하여, 임의의 동작 파라미터에 대한 동적 AFM 탐침의 진동특성을 시뮬레이트하고, 특정 파라미터의 조(組)에 대한 진동특성의 해석을 행하는 것을 목적으로 한다. 특히 본 발명은, 동작 파라미터로서의 탐침의 초기위치 u_0 , 캔틸레버의 스프링 정수 k , 탐침의 곡률반경 R 에 대한 동적 AFM 탐침의 진동특성을 시뮬레이트하고, 해석하는 것을 목적의 하나로 한다. 또, 본 발명의 다른 목적의 하나는, 광범위한 파라미터 영역에 대한 진동특성의 해석을 계통적이고 효율적으로 행하는 수단을 제공하는 것도 있다. 또, 본 발명은 충돌 시 나타나는 비선형성 진동을 시뮬레이트하고, 효율적으로 해석하기 위한 나노 스케일 비선형 진동 해석 지원 소프트웨어를 제공하는 것을 목적으로 한다.

본 발명은, 동적 모드 AFM의 레버 진동에 있어서, 탐침 선단의 돌기 효과가 중요한 것에 발명자는 처음 착안하여, 이 아이디어를 기초로 한 시뮬레이터를 제공하는 것을 목적으로 한다.

탐침 선단의 돌기 효과란 하기와 같은 것이다. 즉,

[a] 탐침의 선단 형상은 나노 사이즈로 요철(凹凸)이 있다. 본 발명은 그 요철 효과를 돌기로 이상화하여 의논할 수 있게 하는 것을 목적의 하나로 한다.

[b] 탐침이 시료 표면과 충돌할 때, 표면의 원자가 탐침 선단에 부착하는 일이 있다. 또, 원래 탐침 선단에 부착해 있는 원자·분자가 존재하는 일이 있다. 본 발명은, 그 부착 원자·분자를 돌기로서 이상화하여 의논할 수 있게 하는 것을 목적의 하나로 한다.

본 발명은, 상기 [a][b]의 탐침 선단의 돌기의 사이즈 효과를 의논함과 동시에, 탐침 자체의 사이즈 효과를 의논할 수 있는 시뮬레이터를 제공하는 것을 목적으로 한다.

또 본 발명은, 표시부에 예를 들어, 좌: 캔틸레버+ 탐침+ 표면의 전체도, 중앙: 탐침+ 표면의 확대도, 오른쪽 위: 레버의 진동 파형, 오른쪽 아래: 탐침 진동의 트라젝토리를 각각 표시하였다(후술하는 도11~도13 등 참조). 유저가 비선형 진동을 알기 쉽고, 보기 쉽도록, 결과를 해석하는 지원 툴을 제공하는 것을 목적으로 한다.

게다가, 본 발명은 이하를 목적으로 한다.

- (1) 동적 AFM 탐침의 나노 사이즈의 비선형 운동의 해석에 특화된 시뮬레이터를 제공한다. 구체적으로는, 실험의 캔틸레버 동작에 대응하는 시뮬레이션에서 진동특성의 해석까지, 동적 AFM의 탐침의 진동 해석을 퍼스널컴퓨터 상에서 계통적이고 효율적으로 행한다. 그 의미로 나노 사이즈의 AFM 비선형 진동의 시뮬레이터 & 해석 지원 소프트웨어를 제공한다.
- (2) 동적 AFM의 탐침 사이즈, 및 탐침 선단의 돌기 구조의 사이즈 효과를, 곡률반경 R1, R2를 줌으로써 해석한다.
- (3) 임의의 파라미터 영역으로부터, 원하는 탐침 진동(u-t의 관계)의 데이터 조(組)를 자유롭게 꺼내어, 애니메이션으로 가시화할 수 있기 때문에, 비선형 진동의 특징을 시각적으로 이해시키는 것을 목적으로 한다. 특히, 탐침 선단이 시료 표면으로부터 받는 상호작용력(인력 또는 척력)을 도시함으로써, 탐침과 표면의 「비접촉」과 「접촉」을 비주얼(visual)로 구별하는 것을 목적으로 한다. 결국, 「충돌」 현상을 나노 사이즈로 가시화하는 것을 목적으로 한다.
- (4) 임의의 파라미터 영역의 AFM의 비선형 특성의 데이터를 효율적으로 정리하여, 해석하는 것을 목적으로 한다. 이 때문에, 이론 측면에서 동적 AFM을 가동하는데 최적의 파라미터 세트를 제시하는 것을 목적의 하나로 한다. 진폭 a-탐침위치 u0, 에너지 E-탐침위치 u0 등, 각종 스펙트럼 정보를 도시하는 것을 목적으로 한다.
- (5) 임의의 파라미터를 계산에 넣는 것이 가능하여, 확장성이 있는 시뮬레이터를 제공한다.
- (6) 묘화(描畵)는 임의의 프리웨어, 셰어웨어의 소프트웨어를 사용하여 용이하게 행할 수 있는 시뮬레이터를 제공한다.

이와 같이, 본 발명은 종래는 해석이 곤란했던 나노 사이즈의 비선형 진동 및 그 나노 구조와의 관계를 시뮬레이트하고 해석하는 연구를 추진할 수 있고, 이후 역학적 프로브법의 해석법의 기초로서 중요한 기술이 될 것이 기대되는 시뮬레이터를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제를 해결하기 위한 수단

본 발명은, 임의의 동작 파라미터(u0, k, R)에 대하여 시뮬레이션을 행한 후, 탐침의 초기위치 u0 마다의 정상상태의 진동 정보를 기록한(변위 u-시각 τ) 파일을 GUI(그래픽 유저 인터페이스)로 표시된 파일 리스트로부터 선택하여 실행함으로써, 특정 파라미터(u0, k, R)에 대한 탐침의 운동을 가시화한다. 이에 의해, 표시를 보고, 진동특성을 눈 깜짝할 사이에 이해시키고, 해석시키는 것이 가능하다. 한편, AFM에서 얻어지는 중요한 스펙트로스코피(예를 들어, 진폭 a-탐침 초기위치 u0 관계나, 상호작용력 F-탐침 초기위치 u0 관계)를 탐침(캔틸레버)의 표면에의 접근 및 분리 운동에 대응시켜 그래프화한다.

본 발명의 제1 해결수단에 의하면,

돌기가 있는 탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법, 이들 각 처리를 컴퓨터에 실행시키기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램, 및 그 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체로서,

처리부는, 캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 탐침에 부착해 있는 돌기의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 입력부로부터 입력하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경, 돌기의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타낸 운동 방정식을 풀으로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계와,

[수1]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u_0) - \frac{1}{k}F(R2, u + u_0 - 2R2) = l \cos \tau \quad \dots\dots(1)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2\rho^2\varepsilon\sigma^4R \left[\frac{1}{30}\left(\frac{\sigma}{z}\right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 \right] \quad \dots\dots(2)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침의 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단 및 돌기에 작용하는 반데르발스 힘 또는 상호작용력, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, R2: 돌기의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

처리부는, 구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하는 단계와,

처리부는, 다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대해서, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계를 실행하는 것을 반복하는 단계

를 포함하는 상기 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법, 이들 각 처리를 컴퓨터에 실행시키기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램, 및 그 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체가 제공된다.

본 발명의 제2 해결수단에 의하면,

탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법, 이들 각 처리를 컴퓨터에 실행시키기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램, 및 그 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체로서,

처리부는, 캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 입력부로부터 입력하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 단계와,

처리부는, 탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계와,

[수2]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u0) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(11)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2\rho^2\varepsilon\sigma^4R \left[\frac{1}{30}\left(\frac{\sigma}{z}\right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(12)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단에 작용하는 반데르발스 힘, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

처리부는, 구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 기억부에 기억하는 단계와,

처리부는, 다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계와,

처리부는, 설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대해서, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 단계 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 단계를 실행하는 것을 반복하는 단계

를 포함하는 상기 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법, 이들 각 처리를 컴퓨터에 실행시키기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램, 및 그 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체가 제공된다.

본 발명의 제3 해결수단에 의하면,

돌기가 붙은 탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이터로서,

파라미터를 입력하기 위한 입력장치와,

상기 입력장치로부터 입력된 파라미터에 기초하여, 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하는 처리부와,

상기 처리부에 의해 구해진 데이터를 기억 또는 표시하기 위한 기억 또는 출력장치

를 갖추고,

상기 처리부는,

캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 탐침에 붙어 있는 돌기의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 상기 입력장치로부터 입력하는 수단과,

탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 수단과,

탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 수단과,

설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경, 돌기의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단과,

[수3]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u0) - \frac{1}{k}F(R2, u + u0 - 2R2) = l \cos \tau \quad \dots\dots(1)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2\rho^2\varepsilon\sigma^4R \left[\frac{1}{30}\left(\frac{\sigma}{z}\right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 \right] \quad \dots\dots(2)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하지 않은 때의 탐침의 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단 및 돌기에 작용하는 반데르발스 힘 또는 상호작용력, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, R2: 돌기의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 상기 기억 또는 출력장치에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 상기 기억 또는 출력장치에 기억하는 수단과,

다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 수단과,

설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대하여, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 수단을 실행하는 것을 반복하는 수단

을 갖는 상기 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이터가 제공된다.

본 발명의 제4 해결수단에 의하면,

탐침이 선단에 설치된 캔틸레버를, 기계적으로 공진시키면서 시료 표면에 접근 및/또는 분리시켜, 시료 표면의 구조를 관찰하는 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이터로서,

파라미터를 입력하기 위한 입력장치와,

상기 입력장치로부터 입력된 파라미터에 기초하여, 동적 모드 원자간력 현미경의 진동특성을 시뮬레이트하는 처리부와,

상기 처리부에 의해 구해진 데이터를 기억 또는 표시하기 위한 기억 또는 출력장치

를 구비하고,

상기 처리부는,

캔틸레버의 접근 및/또는 분리의 출발위치 및 반환위치와, 탐침의 곡률반경과, 캔틸레버의 스프링 정수를 상기 입력장치로부터 입력하는 수단과,

탐침의 초기위치에 대한 변위의 초기값과, 탐침의 속도의 초기값을 각각 설정하는 수단과,

탐침의 초기위치를 입력된 출발위치로 설정하는 수단과,

설정된 탐침의 초기위치와, 설정된 탐침의 변위 및 속도의 초기값과, 입력된 탐침의 곡률반경 및 캔틸레버의 스프링 정수에 기초하여, 캔틸레버의 탐침이 설치되어 있지 않는 쪽을 진동시킨 경우의 탐침의 다음 식으로 나타내는 운동 방정식을 풀으므로써, 시각마다의 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단과,

[수4]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R1, u + u0) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(11)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2\rho^2\varepsilon\sigma^4R \left[\frac{1}{30}\left(\frac{\sigma}{z}\right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z}\right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(12)$$

[여기에서, u: 캔틸레버가 신축하고 있지 않은 때의 탐침 초기위치 u0로부터의 탐침의 변위, τ: 시각, z: 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ), F(R, z): 곡률반경 R의 구형 탐침 선단에 작용하는 반데르발스 힘, Q: 캔틸레버의 Q값, k: 스프링 정수, l: 여기진폭, ρ: 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ: 원자 반경에 관한 파라미터, ε: 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터, R1: 탐침의 곡률반경, u0: 탐침의 초기위치]

구해진 탐침의 변위와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 상기 기억 또는 출력장치에 기억하고, 그리고 탐침의 속도와 시각을 대응시켜 탐침의 초기위치마다 상기 기억 또는 출력장치에 기억하는 수단과,

다음의 반복 처리에서의 탐침의 변위의 초기값 및 탐침의 속도의 초기값을 각각, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단에서 구해진 탐침의 변위 및 탐침의 속도의 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 수단과,

설정된 탐침의 초기위치의 값이, 입력된 반환위치의 값 이하가 될 때까지 또는 반환위치의 값보다 작아질 때까지, (a) 입력된 출발위치에서 미리 정해진 캔틸레버의 이동 폭을 순차 빼거나, 또는 설정된 탐침의 초기위치에서 이동 폭을 빼, 새로운 탐침의 초기위치를 설정하는 것과, (b) 설정된 새로운 탐침의 초기위치에 대해서, 상기 탐침의 변위와 탐침의 속도를 구하는 수단 내지 상기 최종 시각에서의 값, 또는 미리 정해진 시각에서의 값으로 설정하는 수단을 실행하는 것을 반복하는 수단

을 갖는 상기 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이터가 제공된다.

발명의 효과

본 발명에 의하면, 임의의 동작 파라미터에 대한 동적 AFM의 진동특성을 시뮬레이트하고, 특정의 파라미터의 조(組)에 대한 진동특성의 해석을 행할 수 있다. 특히, 본 발명에 의하면, 동작 파라미터로서의 탐침의 초기위치 u0, 캔틸레버의 스프링 정수 k, 탐침의 곡률반경 R에 대한 동적 AFM의 진동특성을 시뮬레이트하고, 해석할 수 있다. 또 본 발명에 의하면, 광범위한 파라미터 영역에 대한 진동특성의 해석을 계통적이고 효율적으로 행하는 수단을 제공할 수 있다. 또, 본 발명에 의하면, 충돌 시 나타나는 비선형성 진동을 시뮬레이트하고, 효율적으로 해석하기 위한 나노 스케일 비선형 진동 해석 지원 소프트웨어를 제공할 수 있다.

동적 모드 AFM의 레버 진동에 있어서, 탐침 선단의 돌기 효과가 중요한 것에 발명자는 처음 착안하고, 본 발명에 의하면, 이 아이디어를 기초로 한 시뮬레이터를 제공할 수 있다.

탐침 선단의 돌기 효과란 하기와 같은 것이다. 즉,

[a] 탐침의 선단 형상은 나노 사이즈로 요철(凹凸)이 있다. 본 발명은 그 요철 효과를 돌기로 이상화하여 의논하는 것이 가능하다.

[b] 탐침이 시료 표면과 충돌할 때, 표면의 원자가 탐침 선단에 부착하는 일이 있다. 또, 원래 탐침 선단에 부착해 있는 원자·분자가 존재하는 일이 있다. 본 발명은 그 부착 원자·분자를 돌기로서 이상화하여 의논하는 것이 가능하다.

본 발명은, 상기 [a][b]의 탐침 선단의 돌기의 사이즈 효과를 의논함과 동시에, 탐침 자체의 사이즈 효과를 의논할 수 있는 시뮬레이터를 제공할 수 있다.

또 본 발명에 의하면, 표시부에 예를 들어, 좌: 캔틸레버+ 탐침+ 표면의 전체도, 중앙: 탐침+ 표면의 확대도, 오른쪽 위: 레버의 진동 파형, 오른쪽 아래: 탐침 진동의 트라젝토리를 각각 표시할 수 있고(후술하는 도11~도13 등 참조), 알기 쉽고, 보기 쉽게 결과를 해석하는 지원 툴을 제공할 수 있다.

게다가, 본 발명은 하기의 효과를 갖는다.

(1) 동적 AFM 탐침의 나노 사이즈의 비선형 운동의 해석에 특화된 시뮬레이터이다. 구체적으로는, 실험의 캔틸레버 동작에 대응하는 시뮬레이션에서 진동특성의 해석까지, 동적 AFM의 탐침의 진동 해석을 퍼스널컴퓨터 상에서 계통적이고 효율적으로 행할 수 있다. 그 의미로 나노 사이즈의 AFM 비선형 진동의 시뮬레이터 & 해석 지원 소프트웨어이다.

(2) 동적 AFM의 탐침 사이즈, 및 탐침 선단의 돌기 구조의 사이즈 효과를, 곡률반경 R1, R2를 줌으로써 해석할 수 있다.

(3) 임의의 파라미터 영역으로부터, 원하는 탐침 진동(u-t의 관계)의 데이터의 조(組)를 자유롭게 꺼내어, 애니메이션으로 가시화할 수 있기 때문에, 비선형 진동의 특징을 시각적으로 이해시킬 수 있다. 특히, 탐침 선단이 시료 표면으로부터 받는 상호작용력(인력 또는 척력)을 도시함으로써, 탐침과 표면의 「비접촉」과 「접촉」을 비주얼로 구별할 수 있다. 결국, 「충돌」 현상을 나노 사이즈로 가시화할 수 있다.

(4) 임의의 파라미터 영역의 AFM의 비선형 특성의 데이터를 효율적으로 정리하고, 해석할 수 있다. 이 때문에, 이론 측면에서 동적 AFM을 가동하는데 최적의 파라미터 세트를 제시할 수 있다. 진폭 a-탐침위치 u0, 에너지 E-탐침위치 u0 등, 각종 스펙트럼 정보를 도시할 수 있다.

(5) 임의의 파라미터를 계산에 넣을 수 있어, 확장성이 있다.

(6) 묘화는 임의의 프리웨어, 셰어웨어의 소프트웨어를 사용하여 용이하게 행할 수 있다.

이와 같이 본 발명에 의해, 종래는 해석이 곤란하였던 나노 사이즈의 비선형 진동 및 그 나노 구조와의 관계를 시뮬레이트하고 해석하는 연구를 추진할 수 있고, 이후 역학적 프로브법의 해석법의 기초로서 중요한 기술이 될 것이 기대된다.

도면의 간단한 설명

도1은 동적 AFM 시뮬레이터의 하드웨어 구성도이다.

도2는 동적 AFM의 시스템 구성도이다.

도3은 동적 AFM 시스템의 방정식 중에 포함되는 변수, 정수를 정리한 도면이다.

도4는 출력 데이터 파일의 구성도이다.

도5는 동적 AFM 시뮬레이터의 처리 프로우(1)이다.

도6은 동적 AFM 시뮬레이터의 처리 프로우(2)이다.

도7은 단계 S104의 상세 프로우이다.

도8은 단계 S209의 상세 프로우이다.

도9는 표시되는 메뉴 항목의 예이다.

도10은 파라미터의 설정 화면의 예이다.

도11은 탐침 운동의 애니메이션의 예(1)이다.

도12는 탐침 운동의 애니메이션의 예(2)이다.

도13은 탐침 운동의 애니메이션의 예(3)이다.

도14는 데이터 파일 리스트의 표시예이다.

도15는 진폭 a를 탐침위치 u0의 함수로서 묘화한 진폭의 스펙트로스코피의 예이다.

도16은 돌기가 없는 동적 AFM의 시스템 구성도이다.

도17은 돌기가 없는 경우와 돌기가 있는 경우의 수치 계산예이다.

도18은 단계 S307의 상세 프로우이다.

발명을 실시하기 위한 최선의 형태

1. 제1 실시형태

(하드웨어 구성)

도1은, 본 실시형태의 시뮬레이터 환경을 실현하는 하드웨어 구성도이다.

동적 AFM 시뮬레이터는, 예를 들어 주제어부(CPU)(1)와, 실행파일 프로그램이 기억되는 메모리(2)와, 입출력 제어부(3)와, 입력장치(입력부)(4)와, 표시장치(표시부)(5)와, 출력장치(기억부, 기억 또는 출력장치)(6)를 구비한다.

주제어부(CPU)(1)는, 메모리에 기억된 실행파일 프로그램에 따라, 처리를 실행한다. 또한 실행파일 프로그램은, 예를 들어 Fortran 등의 언어로 써질 수 있지만, 이에 한정되지 않고, C, Visual Basic(이하, VB라 표기한다) 등 적절한 언어여도 좋다. 입출력 제어부(3)는, 화상처리를 행한다. 예를 들어, GUI(VB)에 의해 파일 리스트의 표시, 파일의 선택, 실행 등을 행한다. 또한, GUI는 VB 이외에도 적절한 GUI를 이용할 수 있다.

입력장치(4)는, 예를 들어 키보드, 마우스, 포인팅 디바이스 등 적절한 입력수단을 이용할 수 있다. 또한, 표시장치(5)는, 예를 들어 디스플레이를 이용할 수 있다. 출력장치(6)는, 예를 들어 하드디스크 등의 기억장치나, 외부장치와의 인터페이스 등을 이용할 수 있다. 또한 입력장치(4), 표시장치(5), 출력장치(6)는 이 이외에도 적절한 수단을 이용할 수 있다.

본 도면에 나타내어져 있듯이, 상기 동적 AFM 시뮬레이터에서는, 주제어부(CPU)(1)와 Fortran 실행파일 프로그램(2)이 AFM 탐침위치별 진동파형 파일(61) 및 스펙트로스코피 파일(62)을 텍스트 형식의 출력 파일로서 하드디스크(6) 상에 작성한다.

상기 파일(61, 62)의 리스트는, VB의 GUI 환경(3)을 이용하여 표시된다. 임의의 탐침위치 u0에 대응하는 진동파형 파일(61)을 GUI에서 선택·실행하면, 탐침의 진동운동의 애니메이션이 디스플레이(5) 상에 표시된다. 탐침의 비선형 진동의 해석을 행하는 경우는 스펙트로스코피 파일(62)을 선택·실행하면, GUI를 통하여 임의의 묘화 소프트웨어가 기동하여 스펙트로스코피의 그래프가 디스플레이(5) 상에 표시된다.

(동적 AFM 시스템의 운동 방정식, 및 사용하는 파라미터)

계속해서, 본 시뮬레이터가 대상으로 하는 동적 AFM의 시스템 및 탐침의 운동 방정식의 도출에 대해서 설명한다.

도2는, 동적 AFM의 시스템 구성도이다. 도2(a)에는, 캔틸레버-탐침-표면계의 위치관계 및 탐침의 위치 u_0 의 정의의 설명도를 나타낸다. 도2(b)는, 탐침의 변위 u 의 정의와 탐침-표면간 상호작용력의 설명도이다. 도2(c)는, 동적 AFM의 구동 모드를 나타낸다. 동적 AFM은, 진폭 1로 강제 진동시키면서 캔틸레버 기저부를 $y_{01} + 2R_1$ 과 $y_{02} + 2R_1$ 의 사이에서 한번 왕복시킨다.

도2(a)에 나타낸 바와 같이, 캔틸레버라 불리는 선단에 탐침을 부착시킨 판상의 스프링과, 시료 표면으로 이루어지는 시스템을 생각한다. 탐침의 형상으로는, 예를 들어 구체(球體) 또는 구체를 모의(模擬)한 형상을 생각하고, 사이즈의 파라미터로서 곡률반경 R_1 을 준다. 게다가 탐침의 선단에 구체 또는 구체를 모의한 형상의 돌기가 붙은 경우를 다루도록 하고, 돌기의 곡률반경 R_2 를 가정한다. 이 돌기를 가정하는 것이, 본 실시형태의 특징의 하나이다. 상기 돌기는 동적 AFM에 있어서, 예를 들어 탐침 표면의 요철에 의해 만들어지는 것이어도 좋고, 시료 표면으로부터 공급되는 원자라도 좋다. 곡률반경 R_2 는 탐침 선단의 요철의 정도, 흡착 원자의 크기의 기준을 주는 것이다.

여기에서, 캔틸레버가 늘어나거나 줄거나 하지 않은 때의 탐침 선단의 초기위치를 u_0 이라 두면, 캔틸레버의 기저부는 $u_0 + 2R_1$ 로 쓸 수 있다. 상기 기저부를 중심으로 진폭 1로 캔틸레버를 기계적으로 공진시키면, 탐침의 운동 방정식은 하기와 같이 시각 τ 에 관한 2단의 비선형 상미분 방정식으로서 쓸 수 있다.

[수5]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R_1, u + u_0) - \frac{1}{k}F(R_2, u + u_0 - 2R_2) = l \cos \tau \quad \dots\dots(1)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^2 \right] \quad \dots\dots(2)$$

즉,

$$F(R_1, u + u_0) = \frac{2}{3}\pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R_1 \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{u + u_0} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{u + u_0} \right)^2 \right]$$

$$F(R_2, u + u_0 - 2R_2) = \frac{2}{3}\pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R_2 \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{u + u_0 - 2R_2} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{u + u_0 - 2R_2} \right)^2 \right]$$

여기에서, u 는 도2(b)에 나타낸 바와 같이, 캔틸레버가 늘어나거나 줄거나 하지 않은 때의 탐침 초기위치 u_0 로부터의 탐침의 변위 $u = z - u_0$ 이다. 또한 도2(b)는, 탐침이 초기위치 u_0 에서 변위 u 만큼 이동한 경우의 도면이다. z 는 시각 τ 에서의 탐침위치 $z(\tau)$ 이다. 또 $F(R, z)$ 는, 곡률반경 R 의 구형 탐침 선단 및 돌기에 작용하는 반데르발스 힘을 나타낸다. 여기에서는 도2(b)에 나타낸 바와 같이 탐침 선단에 작용하는 힘 $F(R_1, z) (=F(R_1, u + u_0))$ 와 돌기 선단에 작용하는 힘 $F(R_2, z - 2R_2) (=F(R_2, u + u_0 - 2R_2))$ 의 합을 생각한다. 또 Q, k, l 은 각각 캔틸레버의 Q 값, 스프링 정수, 여기진폭을 나타낸다. ρ 는 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ 는 원자 반경에 관한 파라미터, ϵ 는 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터를 나타내고 있다.

식(1)로 나타내어지는 동적 AFM 시스템을 도2(c)에 나타낸 바와 같이 동작시키는 경우를 생각한다. 이것은, 실험에서 진폭 a 의 스펙트로스코피를 측정하는 경우에 대응한다. 즉, 캔틸레버 기저부를 여기진폭 1로 기계적으로 공진시키면서, 출발점 $y_{02} + 2R_1$ 와 반환점 $y_{01} + 2R_1$ 과의 사이에서 한번 왕복시킨다.

이 때, 탐침의 진폭 a 를 수치 계산하여 탐침의 초기위치 $u_0 (y_{01} < u_0 < y_{02})$ 의 함수로서 플롯(plot)하면, 탐침위치 u_0 의 함수로서의 진폭 a 의 그래프, 즉 진폭의 스펙트로스코피가 얻어진다. 또, 진폭 a 대신에, 진동의 에너지 E 나 상호작용력 F 나 상호작용 에너지 V 를 플롯하면 이들의 스펙트로스코피가 얻어진다.

한편, 일정한 탐침위치 u_0 에 대하여, 탐침의 진동변위 u 를 시각 τ 의 함수로서 플롯하면 운동의 파형이 얻어지고, u 와 그 시간 미분을 플롯하면 위상평면 내에서의 트라젝토리가 얻어진다.

도3은, 본 실시형태에서의 동적 AFM 시스템의 방정식 중에 포함되는 변수, 정수를 정리한 도면이다. 본 도면에 나타나 있는 대로, 상술한 파라미터 중 u, τ 는 계산의 과정에서 정해지는 변수이다.

또, $Q, l, \rho, \sigma, \varepsilon$ 는 정수로서 주어진다. 여기에서는 일례로서, $Q=5, l=0.5$ 를 상정해 두고, 이들은 용액 중의 대진폭 모드에 대응한다. 또, 일례로서 $\varepsilon=0.01$ 로 해두고, 이것은 화학적으로 불활성 상호작용(원자 사이에서 강한 결합이 생기지 않는 레벨)을 상정하고 있다.

한편, 입력이 필요한 파라미터로서, $u_0=y_02$ (탐침의 스타트 위치), $u_0=y_01$ (탐침의 반환위치), k (캔틸레버의 스프링 정수 [N/m]), R_1 (탐침의 곡률반경[nm]), R_2 (탐침 선단에 부착한 돌기의 곡률반경[nm]), 정상상태를 샘플하는 개시 시각을 들 수 있다. 입력에 관한 상세는 후술한다.

(출력 데이터 파일의 구성)

도4는, 본 실시형태의 출력 데이터 파일의 구성을 나타낸다. 출력 폴더에는, 데이터 파일이 텍스트 형식으로 출력된다. 크게 분류하면 진동파형 파일(61)과 스펙트로스코피 파일(62)로 나누어져 있다.

진동파형 파일(61)은, 각 탐침위치($y_01 < u_0 < y_02$)에 대한 데이터 파일을 더 포함한다. 즉 출발위치 y_02 와 반환위치 y_01 의 사이를 예를 들어 이동 폭 $\Delta=0.01$ [nm]으로 움직이는 경우를 상정하고, 각각의 u_0 에 대하여, 탐침변위 u -시각 τ 관계를 기록한다. 이 파일에는 동시에 변위의 시간 미분 $du/d\tau$ 도 시각 τ 에 대응하여 기록되어 있다. 또, 상호작용력 F 와 시각 τ 가 대응하여 기억될 수도 있다. 도4에 나타낸 진동파형 파일은, 탐침이 y_02 에서 y_01 로 움직이는 경우의 데이터 파일을 나타내고 있지만, 탐침위치를 낮추어 가는 경우와 올려가는 경우의 쌍방 또는 한쪽의 파일을 포함할 수 있다. 이들의 하나를 선택하여, 애니메이션 실행하면, 탐침 운동의 애니메이션이 보인다.

스펙트로스코피 파일(62)은, 탐침의 초기위치 u_0 의 함수로서, 예를 들어 각 u_0 에 대응한, 진폭 a , 상호작용력 F_1 (탐침이 받는 힘), F_2 (돌기가 받는 힘), 탐침의 진동 에너지 E , 상호작용 에너지 V 등을 격납한 데이터 파일이다. 이들은 동적 AFM의 비선형 특성을 해석하는데 중요한 데이터군(群)이다.

(동적 AFM 시뮬레이터의 동작)

도5 및 도6은, 동적 AFM 시뮬레이터의 처리 프로우(1) 및 (2)이다. 또, 도9 내지 도15에, 동적 AFM 시뮬레이터의 표시예를 나타낸다. 동적 AFM 시뮬레이터의 처리 프로우(1) 및 (2)에 따라, 본 시뮬레이터의 구체적인 동작에 대해서 설명한다. 우선, CPU(1)는, GUI를 통하여 「파라미터를 설정하고 계산 출력」, 「시뮬레이트한다」, 「해석한다(그래프 소프트웨어)」 등의 메뉴 항목을 표시장치(5)에 표시한다(S101). 도9에, 표시되는 메뉴 항목의 예를 나타낸다. 이 중에서 조작자에 의해 적절한 항목이 선택되고, CPU(1)는 입력장치(4)로부터 선택 지시를 입력한다.

애니메이션이나 해석의 대상이 되는 계산 데이터가 없는 경우, 데이터를 작성할 필요가 있다. 조작자에 의해, 예를 들어 도9의 「파라미터를 설정하고 계산 출력」이 선택되면(S102), CPU(1)는, 단계 S103의 처리로 이동한다. 한편, 그 이외가 선택된 경우(S101), CPU(1)는, 단계 S106의 처리로 이동한다. 또한, 단계 S102, S106, S110은 단계 S101의 아래에, 조작자의 선택에 의해, 패러렐(parallel)로 처리되는 프로우로 해도 좋다.

단계 S103에서는, CPU(1)는, 계산에 필요한 파라미터 값의 입력을 구하기 위한 설정 화면을 표시한다(S103). 도10(a)에, 표시되는 파라미터의 설정 화면의 예를 나타낸다. CPU(1)는, (a) 탐침의 출발위치 y_02 와 반환위치 y_01 , (b) 탐침의 곡률반경 R_1 과 돌기의 곡률반경 R_2 , (c) 캔틸레버의 스프링 정수 k , 정상상태를 샘플하는 개시 시각을 입력장치(4)로부터 입력한다. 또한, CPU(1)는 캔틸레버의 근원의 출발위치 및 반환위치를 입력하고, 입력한 각 위치에서 탐침의 직경 $2R_1$ 을 빼, 탐침의 출발위치 y_02 와 반환위치 y_01 를 설정해도 좋다. 또, 초기위치 u_0 , 변위 u , 속도 $du/d\tau$ 를 돌기의 선단에서의 것으로 정의하고, 적절히 운동 방정식을 수정해도 좋다.

게다가, CPU(1)는 데이터를 출력하는 폴더명을 입력장치(4)로부터 입력하면(S103), 예를 들어 도10(b)에 나타낸 바와 같이 DOS 프롬프트를 표시하고 계산을 시작한다(S104). 또한 폴더명은, 입력장치(4)로부터 입력하는 이외에도, 일련번호, 일자로 하는 등의 미리 정해진 규칙에 따라 CPU(1)가 적절한 이름을 붙여도 좋다. 계산은, 상술한 식(1)의 탐침의 운동 방정식을, 예를 들어 4차의 Runge-Kutta(룬게쿠타)법이라 불리는 수치적분법으로 풀어서 행한다. 또한 CPU(1)는, DOS 프롬프트 이외에도 계산 중인 것이나 계산 경과를 나타내는 표시를 적절히 해도 좋고, 또 어떤 표시도 하지 않아도 좋다. 또, 운동 방정식의 해법으로는, 4차의 룬게쿠타법 이외에도 6차의 룬게쿠타법, 오일러법 등 적절한 방법을 이용할 수 있다.

도7은 단계 S104의 상세 프로우이다.

우선, CPU(1)는, 초기 설정을 행한다(S201). 예를 들어, CPU(1)는, 탐침의 변위의 초기값을 $u=0$, 탐침의 속도의 초기값을 $du/d\tau=0$, $i=0$, $j=0$ 으로 한다. 여기에서, i , j 는 반복 계산을 위한 파라미터이다. 또, CPU(1)는, 예를 들어 u_0 의 이동 폭 Δ 를 $\Delta=0.01$ 로 한다. 또한, 이동 폭 Δ 의 값은 적절한 값을 설정할 수 있다.

계속해서, CPU(1)는, 탐침의 초기위치 u_0 을 설정한다(S203). 예를 들어 CPU(1)는, $u_0=y_0-2i\Delta$ 로 설정한다. 계산 개시 시에는, $i=0$ 이기 때문에, 탐침의 초기위치 u_0 =입력된 출발위치 y_0 가 된다.

CPU(1)는, 입력된 각 파라미터 및 설정된 탐침의 초기위치 u_0 및 초기값에 기초하여, 상술한 식(1)을 예를 들어 룬계쿠타법에 의해 풀어, 시각 τ 마다의 탐침의 변위 u 와 탐침의 속도 $du/d\tau$ 를 구한다(S205). CPU(1)는, 구해진 탐침의 변위 u 와 시각 $\tau(u-\tau$ 관계)를 대응시켜 진동파형 파일(61)에 출력(기억)하고, 탐침의 속도 $du/d\tau$ 와 시각 $\tau(du/d\tau-\tau$ 관계)를 대응시켜 진동파형 파일(61)에 출력(기억)한다(S207). 또한, $u-\tau$ 관계, $du/d\tau-\tau$ 관계는, 탐침의 초기위치 u_0 마다 진동파형 파일(61)에 기억된다. 또, CPU(1)는, 입력된, 정상상태를 샘플하는 개시 시각보다 큰 시각 τ 에 대해서, 진동파형 파일(61)에 탐침의 변위 u , 탐침의 속도 $du/d\tau$, 시각 τ 을 출력해도 좋다. 또 구해진 변위 u , 속도 $du/d\tau$ 로부터 정상상태를 판단하고, 정상상태 이후의 시각에 대해서, 진동파형 파일(61)에 u , $du/d\tau$, τ 를 출력해도 좋다.

계속해서, CPU(1)는, 전회점(轉回点)을 구하고, 대응하는 변위 u 로부터 진폭 a 와, 탐침의 상호작용 에너지 V 와, 상호작용력 F 를 구한다(S209). 또한 CPU(1)는, 진폭 a , 상호작용 에너지 V , 상호작용력 F 모두를 구해도 좋고, 하나 또는 복수의 원하는 값을 구해도 좋다. 예를 들어, CPU(1)는, 구해진 u 의 극대값(위쪽 전회점에서의 변위에 상당) u_{max} 와 극소값(아래쪽 전회점에서의 변위에 상당) u_{min} 을 구하고, 극대값 u_{max} 와 극소값 u_{min} 의 차에 기초하여 진폭 a 를 구한다. 또, CPU(1)는, 아래쪽 전회점(또는 충돌시)의 탐침의 상호작용 에너지 V 와 상호작용력 F 를 구한다. 전회점에서의 탐침-표면간 상호작용 에너지 V 는, 예를 들어 다음 식에 따라 구해질 수 있다.

[수6]

$$V = V(R1, u + u_0) + V(R2, u + u_0 - 2R2) \quad \dots\dots(5)$$

다만, $V(R, z)$ 는, 탐침-표면간 상호작용력이고, 다음 식으로 나타내어진다.

[수7]

$$V(R, z) = \frac{2}{3} \pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^5 R \left[\frac{1}{210} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^7 - \frac{\sigma}{z} \right] \quad \dots\dots\dots(6)$$

또, 탐침과 표면간의 상호작용력 F 는, 다음 식에 따라 구해질 수 있다.

$$F = F(R1, u + u_0) + F(R2, u + u_0 - 2R2)$$

여기에서 $F(R, z)$ 는 상술한 식(2)에 의해 구할 수 있다.

또, CPU(1)는, u 의 위쪽 전회점과 아래쪽 전회점을, 예를 들어 근사적으로 $du/d\tau=0$ 이 되는 점(τ 와 u 의 조(組))을 찾음으로써 구할 수 있다. 단계 S209의 처리는 나중에 상세하게 서술한다.

이어서, CPU(1)는, 탐침의 1주기의 평균 역학적 에너지 E 를 구한다(S211). 예를 들어, CPU(1)는, 다음 식에 따라 평균 역학적 에너지 E 를 구한다.

[수8]

$$E = \frac{1}{T} \int_0^T \left(\frac{1}{2} m \dot{u}^2 + \frac{1}{2} k u^2 + V \right) d\tau \quad \dots\dots(7)$$

여기에서, E: 1주기 평균의 탐침의 역학적 에너지(nJ), T: 1주기의 길이(무차원 시간), u: 시간 τ 에서의 탐침의 변위(nm), τ : 계산의 시간의 흐름 폭(무차원 시간), m: 규격화한 캔틸레버와 탐침의 질량 1(kg), k: 캔틸레버의 스프링 정수(N/m)이다. 또한, 1주기의 길이 T는, 예를 들어 $T=2 \times |\tau_{\max} - \tau_{\min}|$ 으로 구할 수 있다. 여기에서, τ_{\max} 는, u의 위쪽 전회점에 대응하는 시각이고, τ_{\min} 은, u의 아래쪽 전회점에 대응하는 시각이다.

CPU(1)는, 진폭 a와 탐침의 초기위치 $u_0(a-u_0)$, 평균 역학적 에너지 E와 탐침의 초기위치 $u_0(E-u_0)$, 상호작용 에너지 V와 탐침의 초기위치 $u_0(V-u_0)$ 를 스펙트로스코피 파일의, 대응하는 파일에 출력한다(S213). 예를 들어, CPU(1)는, 구해진 진폭 a와 설정된 u_0 를 대응시키고, 스펙트로스코피 파일(62)의 a- u_0 관계를 기억하기 위한 파일에, 추기(追記)한다. 반복 처리에 있어서, 설정되는 각 탐침의 초기위치 u_0 과 진폭 a를, 순서대로 기억해 감으로써, 진폭 a와 탐침의 초기위치 u_0 의 관계의 스펙트로스코피 파일이 얻어진다. 또, 평균 역학적 에너지 E, 상호작용 에너지 V에 대해서도 동일하다.

CPU(1)는, 탐침의 변위 u, 탐침의 속도 $du/d\tau$ 의 최후의 출력을, $i=i+1$ 의 루프(loop)에서의 처리를 위해, 탐침의 변위 u, 탐침의 속도 $du/d\tau$ 의 초기값으로 되돌린다(S215). 결국, 상기 루프(i)의 최종값(예를 들어, 최종 시각의 값)을 다음 루프($i+1$)의 초기값으로 한다. 이 설정이 캔틸레버를 연속적으로 다운 및 업시키는 순서로 대응한다. 또한 루프(i)의 최종값 이외에도, 미리 정해진 시각에서의 변위 u, 속도 $du/d\tau$ 의 값을 이용해도 좋다.

CPU(1)는, 설정된 탐침의 초기위치 u_0 이 입력된 반환위치 y_{01} 이하($u_0 \leq y_{01}$)인지 판단한다(S217). 또한, 탐침의 초기위치 u_0 이 반환위치 y_{01} 미만($u_0 < y_{01}$)인지를 판단해도 좋다. CPU(1)는, 설정된 탐침의 초기위치 u_0 이 반환위치 y_{01} 이하(또는 미만)이면(S217), 단계 S221로 이동하고, 한편, 설정된 탐침의 초기위치 u_0 이 반환위치 y_{01} 이하(또는 미만)가 아니면(S217), 파라미터 i를 예를 들어 하나 증가하고($i=i+1$)(S219), 단계 S203의 처리로 되돌아간다.

이상의 처리에 의해, 캔틸레버가 $y_{02} + 2R_1$ 에서 $y_{01} + 2R_1$ 로 내려가는 경우의 시뮬레이션 결과가 얻어진다. 또한 본 실시 형태에서는, 캔틸레버를 상하 움직이게 하고 있지만, 올라가는 경우, 또는 올라가는 경우만을 시뮬레이트할 수도 있다. 계속해서, CPU(1)는, 캔틸레버가 $y_{01} + 2R_1$ 에서 $y_{02} + 2R_1$ 로 올라가는 경우에 대해서, 시뮬레이트한다.

우선, CPU(1)는, 탐침의 초기위치 u_0 을 설정한다(S221). 여기에서는, CPU(1)는, 예를 들어 $u_0 = y_{01} + j\Delta$ 로 설정한다. 또한 반복 처리의 최초에서는 $j=0$ 이기 때문에 $u_0 = y_{01}$ 이 된다. 또, 이 이외에도 예를 들어 CPU(1)는, 설정된 탐침의 초기위치 u_0 에, 이동 폭 Δ 를 더하여, 새로운 탐침의 초기위치로 해도 좋다. 계속해서, CPU(1)는, 단계 S223~S233의 처리를 실행한다. 또한, 단계 S223~S233의 각 처리는 상술한 단계 S205~S215의 각 처리와 동일하므로 설명을 생략한다.

CPU(1)는, 설정된 탐침의 초기위치 u_0 이 입력된 출발위치 y_{02} 이상($u_0 \geq y_{02}$)인지 판단한다(S235). 또한, 탐침의 초기위치 u_0 이 출발위치 y_{02} 보다 크지($u_0 > y_{02}$)를 판단해도 좋다. CPU(1)는 설정된 탐침의 초기위치 u_0 이 출발위치 y_{02} 이상인 경우(또는 출발위치 y_{02} 보다 큰 경우)(S235), 처리를 종료하고 도5의 단계 S105로 이동하고, 한편 설정된 탐침의 초기위치 u_0 이 출발위치 y_{02} 이상이 아닌 경우(또는 출발위치 y_{02} 보다 크지 않은 경우)(S217), 파라미터 j를 예를 들어 하나 증가하고($j=j+1$)(S237), 단계 S221의 처리로 되돌아간다.

또한, CPU(1)는, 전회점을 구하고, 대응하는 변위 u로부터 진폭 a와, 탐침의 상호작용 에너지 V와, 상호작용력 F를 구하는 단계(S209, S227), 및 탐침의 1주기의 평균 역학적 에너지 E를 구하는 단계(S211, S229) 등을 실행할 때, 사용하는 데이터를 출력장치(기억부)(6)로부터 읽어내도 좋고, CPU(1) 내에 넣어두고 그것을 이용해도 좋다. 그 외, 필요에 따라, CPU(1)는 출력장치(기억부)(6)를 참조하여, 처리에 필요한 데이터를 읽어내어 이용할 수 있다.

도8은, 단계 S209의 상세 프로우이다. 여기에서, 단계 S209의 처리의 상세에 대해서 설명한다.

우선, CPU(1)는, 진동파형 파일을 읽어 들인다(S301). 계속해서, CPU(1)는, 읽어 들여진 진동파형 파일을 참조하여, 탐침의 속도가 음($du/d\tau < 0$)에서 탐침의 속도가 양($du/d\tau > 0$)으로 이동하는 시각 τ 의 조(組)를 찾는다(S303). CPU(1)는, 이때의 $du/d\tau < 0$ 에 대응하는 τ 를 제1 시각 τ_1 , $du/d\tau > 0$ 에 대응하는 τ 를 제2 시각 τ_2 라고 한다. 여기에서 $\tau_2 - \tau_1$ 은 시각 τ 의 흐름 폭(S104)에 대응한다. $u - \tau$ 의 관계를 그래프로 나타낸 경우, τ_1 과 τ_2 는 아래쪽 전회점의 양측에 위치한다. 또, CPU(1)는, 읽어 들여진 진동파형 파일을 참조하여, 탐침의 속도가 양($du/d\tau > 0$)에서 탐침의 속도가 음($du/d\tau < 0$)으로 이동하는 시각 τ 의 조(組)를 찾는다(S305). CPU(1)는, 이때의 $du/d\tau > 0$ 에 대응하는 τ 를 제3 시각 τ_3 , $du/d\tau < 0$ 에 대응하는 τ 를 제4 시각 τ_4 라 한다. $u - \tau$ 의 관계를 그래프로 나타낸 경우, τ_3 과 τ_4 는 위쪽 전회점의 양측에 위치한다. 또한 CPU(1)는, 위쪽 전회점 및 아래쪽 전회점을, 최소한 각각 하나 구할 수 있다. 또, 위쪽 및 아래쪽 전회점은 1주기 내의 각 점을 구할 수 있다.

CPU(1)는, $\tau_1 < \tau < \tau_2$ 의 사이에서, 예를 들어 탐침의 속도의 절대값이 미리 정해진 역치 이하 또는 미만(예를 들어, $|du/d\tau| < 10^{-5}$)이 될 때까지 시간 흐름을 작게 하여, 속도 $du/d\tau = 0$ 이 근사(近似)적으로 성립하는 아래쪽 전회점의 시각 τ_{min} 을 찾는다(S307). 또, CPU(1)는 $\tau_3 < \tau < \tau_4$ 의 사이에서, 예를 들어 탐침의 속도의 절대값이 미리 정해진 역치 이하 또는 미만(예를 들어, $|du/d\tau| < 10^{-5}$)이 될 때까지 시간 흐름을 작게 하여, 속도 $du/d\tau = 0$ 이 근사적으로 성립하는 위쪽 전회점에서의 시각 τ_{max} 를 찾는다(S309).

여기에서, 도18에, 단계 S307의 상세 프로우를 나타낸다. 구체적으로는, 도8의 단계 S307에서는, 도18과 같이 CPU(1)는, 흐름 폭 $\Delta\tau$ 를 예를 들어 10분의 1로 하고, 다시 한번 $\tau_1 < \tau < \tau_2$ 로 수치 계산(문계쿠타법)을 행한다(S401~407). CPU(1)는, 이때의 진동파형 파일을 읽어 들이고, $du/d\tau < 0(\tau_1)$, $du/d\tau > 0(\tau_2)$ 의 조(組)를 찾는다(S409, S411). CPU(1)는, 이 처리를 $du/d\tau(\tau_1) < 10^{-5}$ 가 될 때까지 반복하여, $\tau_{min} = \tau_1$ 을 구한다(S413, S415). 단계 S309에서도 동일하게 하여 $\tau_{max} = \tau_3$ 을 구한다.

또한, 10^{-5} 이외에도 적절한 값에 기초하여 근사적으로 속도 $du/d\tau = 0$ 이 성립하는 τ_{min} 및 τ_{max} 를 구할 수 있다. 여기에서, 속도 $du/d\tau = 0$ 이 근사적으로 성립하는 시각이란, 예를 들어 탐침의 속도의 절대값이 미리 정해진 역치 이하 또는 미만(예를 들어, $|du/d\tau| < 10^{-5}$)이 되는 시각, 또는 탐침의 속도의 절대값이 최소가 되는 시각으로 할 수 있다.

예를 들어, CPU(1)는, 단계 S303 및 S305에서는, 단계 S205의 문계쿠타법에서 이용된 계산 흐름 폭보다도 큰 시간 흐름 폭으로 대국적으로 $\tau_1 \sim \tau_4$ 를 찾고, $\tau_1 \sim \tau_2$ 사이, $\tau_3 \sim \tau_4$ 사이에 대해서는, 보다 작은 시간 흐름 폭으로 진동파형 파일(61)을 참조하여, 속도 $du/d\tau = 0$ 이 근사적으로 성립하는 시각 τ_{min} 및 τ_{max} 를 구해도 좋다.

CPU(1)는, 진동파형 파일을 참조하여, 구해진 아래쪽 전회점의 시각 τ_{min} 에 대응하는 제1 탐침의 변위 u_{min} 과, 구해진 위쪽 전회점의 시각 τ_{max} 에 대응하는 제2 탐침의 변위 u_{max} 를 취득하고, 진폭 a 를 구한다(S311). 진폭 a 는, 예를 들어 다음 식에 의해 구할 수 있다.

$$a = (u_{max} - u_{min}) / 2$$

또, CPU(1)는, 아래쪽 전회점에서의(충돌 시의) 탐침의 상호작용 에너지 V 와, 상호작용력 F 를 다음 식에 따라 구한다(S313).

$$V = V(R1, u_{min} + u0) + V(R2, u_{min} + u0 - 2R2)$$

$$F = F(R1, u_{min} + u0) + F(R2, u_{min} + u0 - 2R2)$$

여기에서, $V(R, z)$ 는 상술한 식(6)으로 구할 수 있고, $F(R, z)$ 는 상술한 식(2)로 구할 수 있다.

도5로 되돌아가, CPU(1)는, 계산이 끝나면, DOS 프롬프트를 소실한다(S105). 이 시점에서 출력 폴더에 모든 데이터 파일이 텍스트 형식으로 출력되어 있다.

계속해서, CPU(1)는, 메뉴를 표시하고(또는 표시된 메뉴에 의해), 탐침 운동의 애니메이션을 볼지 여부의 선택을 지시한다. 도9의 메뉴로부터 「시뮬레이트한다」가 선택되면(S107), CPU(1)는 단계 S108로 이동한다. 그 이외의 경우, 예를 들어, 단계 S110으로 이동한다. 단계 S108에서는, CPU(1)는, 출력 폴더의 파일 리스트를 GUI를 통하여 표시한다. 조작자에 의해, 예를 들어 임의의 탐침위치 u_0 (다만 $y_{01} < u_0 < y_{02}$)에 대한 파형 데이터(예를 들어, 탐침위치 u -시각 τ 관계)가 선택되면(S108), CPU(1)는 입출력 제어부(3)에 의해, 선택된 파형 데이터에 기초하여 탐침 운동의 애니메이션을 실행한다(S109). 예를 들어, CPU(1)는, 선택된 파형 데이터 또는 표시하기 위한 적절한 데이터를 출력장치(기억부)(6)로부터 읽어내고, 읽어내어진 파형 데이터에 기초하여 표시부에 애니메이션 표시할 수 있다. 도11, 도12 및 도13은, 탐침위치 $u_0=2.64$ 일 때의 탐침 운동의 애니메이션의 예(1)~(3)을 나타낸다. 도11은 탐침이 표면으로부터 매우 먼 곳에 있을 때, 도12는 표면에 조금 다가갔을 때, 도13은 표면과 접촉(충돌)해 있을 때의 화면을 나타내고 있다. 어떤 경우에도, 가장 왼쪽 도면(a)가 동적 AFM 시스템 전체의 애니메이션, 중앙의 도면(b)가 표면 부근을 확대한 애니메이션이다.

중앙의 도면(b)에서 연직 아래쪽의 화살표(도12)는 탐침과 시료 표면과의 사이에 작용하는 인력을 나타내고, 연직 위쪽의 화살표(도13)는 척력을 나타내고 있다. CPU(1)는 이 화살표를, 구해진 상호작용력 F 의 크기에 따른 길이로, 그리고, 상호작용력 F 의 부호에 따른 방향으로 표시할 수 있다. 따라서, 탐침과 표면이 나노 사이즈로 접촉(충돌)해 있는지, 또는 접촉하고 있지 않는지를 바로 알 수 있는 것이 본 시뮬레이터의 큰 메리트의 하나이다. 또한, 도11은 비접촉 상태이기 때문에 가장 왼쪽의 도면(a)에서 아래쪽으로 향하는 화살표로 되어 있고(인력을 받고 있고), 중앙의 도면(b)에서 표면 부근에 탐침이 다가가 있지 않는 것을 확인할 수 있다. 한편, 도13은 접촉 상태이기 때문에, 가장 왼쪽의 도면(a)에서 위쪽으로 향하는 화살표로 되어 있고(척력을 받고 있고), 중앙의 도면(b)에서 표면 부근에 탐침이 다가가 있는 것을 알 수 있다. 이와 같이 원자 레벨에서 충돌의 특징을 파악할 수 있는 것도 본 시뮬레이터의 특징의 하나이다.

CPU(1)는 애니메이션과 함께, 가장 오른쪽 도면의 상반분(c)에 탐침진동의 파형(변위 u -시각 τ 관계), 하반분(d)에 위상 공간 내에서의 트라젝토리(변위 u -속도 $du/d\tau$ 관계)를 묘화할 수 있다. 이에 의해, 진동의 특성을 한눈에 파악할 수 있다. 또한 도9~도12는, 복수의 도면(a)~(d)를 한 화면에 표시하고 있지만, 하나 또는 적절한 복수의 도면을 표시하도록 해도 좋다.

이어서, 계산한 데이터의 비선형 해석을 행하기 위해, 도9의 메뉴로부터 「해석한다(그래프 소프트웨어 기동)」가 선택되면(S110), CPU(1)는, 단계 S111의 처리로 이동한다. 한편, 이 이외의 경우, 예를 들어 처리를 종료한다. 단계 S111에서는, 도14에 나타낸 바와 같이 GUI로 데이터 파일 리스트가 표시된다. 조작자에 의해 스펙트로스코피의 데이터(예를 들어, a 와 u_0 의 관계를 나타내는 데이터)가 선택되면(S111), CPU(1)는 임의의 그래프 소프트웨어에 의해 선택된 데이터에 따라 $y_{01} < u_0 < y_{02}$ 의 영역의 각종 스펙트로스코피를 묘화한다(S112). 예를 들어, CPU(1)는 선택된 데이터 또는 표시하기 위한 적절한 데이터를 출력장치(기억부)(6)로부터 읽어내고, 읽어내어진 데이터에 기초하여 표시부에 스펙트로스코피를 표시할 수 있다. 도15에, 진폭 a 를 탐침위치 u_0 의 함수로서 묘화한 진폭의 스펙트로스코피의 예를 나타낸다.

2. 제2 실시형태

상술한 제1 실시형태에서는, 탐침에 돌기가 붙어 있는 경우에 대해서 설명하였지만, 탐침에 돌기는 붙어있지 않아도 좋다. 이하, 탐침에 돌기가 없는 경우에 대해서 설명한다.

하드웨어 구성, 사용하는 파라미터 및 출력 데이터 파일의 구성은 제1 실시형태와 동일하게 할 수 있다.

도16은, 돌기가 없는 동적 AFM의 시스템 구성도이다. 도16(a)에는, 캔틸레버-탐침-표면계의 위치 관계 및 탐침의 위치 u_0 의 정의의 설명도를 나타낸다. 도16(b)는, 탐침의 변위 u 의 정의와 탐침-표면간 상호작용력의 설명도이다. 도16(c)는 동적 AFM의 구동 모드를 나타낸다. 도16의 각각의 도면은 도2에서 돌기가 없어진 것이다.

여기에서, 캔틸레버가 늘어나거나 줄거나 하지 않은 때의 탐침 선단의 초기위치를 u_0 이라 두면, 캔틸레버의 기저부는 $u_0 + 2R_1$ 로 쓸 수 있다. 상기 기저부를 중심으로 진폭 1 로 캔틸레버를 기계적으로 공진시키면, 탐침의 운동 방정식은, 하기와 같이 시각 τ 에 관한 2단의 비선형 상미분 방정식으로서 쓸 수 있다.

[수9]

$$\ddot{u} + \frac{1}{Q}\dot{u} + u - \frac{1}{k}F(R, u + u_0) = l \cos \tau \quad \dots\dots\dots(11)$$

$$F(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^4 R \left[\frac{1}{30} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^8 - \left(\frac{\sigma}{z} \right)^2 \right] \quad \dots\dots\dots(12)$$

여기에서, u는 도16(b)에 나타낸 바와 같이, 캔틸레버가 늘어나거나 줄거나 하지 않은 때의 탐침 초기위치 u0으로부터의 탐침의 변위 u=z-u0이다. 또한, 도16(b)는, 탐침이 초기위치 u0에서 변위 u만큼 이동한 경우의 도면이다. z는, 시각 τ에서의 탐침위치 z(τ)이다. 또 F(R, z)는, 곡률반경 R의 구형 탐침 선단에 작용하는 반데르발스 힘을 나타낸다. 또 Q, k, l은 각각 캔틸레버의 Q값, 스프링 정수, 여기진폭을 나타낸다. ρ는 탐침과 표면의 원자의 수밀도, σ는 원자 반경에 관한 파라미터, ε는 원자의 결합 에너지에 관한 파라미터를 나타내고 있다.

이어서, 본 시뮬레이터의 구체적인 동작에 대해서 설명한다.

본 시뮬레이터의 프로우 차트는, 제1 실시형태와 동일하게 할 수 있다. 예를 들어, 곡률반경 R2의 입력을 생략하고, 또 R2에 대한 항(項)을 0으로 하여 계산할 수 있다. 이하, 제1 실시형태에서의 프로우 차트를 참조하여, 본 시뮬레이터의 구체적인 동작에 대해서 설명한다.

상술한 도5에 있어서, 단계 S101 및 S102는 제1 실시형태와 동일하다. 단계 S103에서는, CPU(1)는 계산에 필요한 파라미터 값의 입력을 구하기 위한 설정 화면을 표시한다(S103'). 여기에서, 표시되는 파라미터의 설정 화면은, 도10(a)와 동일하게 할 수 있지만, 돌기의 곡률반경 R2에 대해서는 생략할 수 있다. CPU(1)는, (a) 탐침의 출발위치 y02와 반환위치 y01, (b) 탐침의 곡률반경 R1, (c) 캔틸레버의 스프링정수 k, 정상상태를 샘플하는 개시 시각을 입력장치(4)로부터 입력한다. 게다가, CPU(1)는, 데이터를 출력하는 폴더명을 입력장치(4)로부터 입력하면(S103), 단계 S104의 처리를 실행한다.

도7이 나타내는 단계 S104의 상세 프로우에 있어서, 단계 S201 및 S203은 제1 실시형태와 동일하다. CPU(1)는, 입력된 각 파라미터 및 설정된 탐침의 초기위치 u0에 기초하여, 상술한 식(11)을 예를 들어 룬계쿠타법에 의해 풀고, 시각 τ마다의 탐침의 변위 u와 탐침의 속도 du/dτ를 구한다(S205'). 또, 단계 S207은 제1 실시형태와 동일하다.

계속해서, CPU(1)는 전회점을 구하고, 대응하는 변위 u로부터 진폭 a와, 탐침의 상호작용 에너지 V와, 상호작용력 F를 구한다(S209'). 또한 CPU(1)는, 진폭 a, 상호작용 에너지 V, 상호작용력 F 모두를 구해도 좋고, 하나 또는 복수의 원하는 값을 구해도 좋다. 예를 들어 CPU(1)는, 구해진 u의 극대값 u_max와 극소값 u_min을 구하고, 극대값 u_max와 극소값 u_min의 차에 기초하여 진폭 a를 구한다. 또, CPU(1)는, 아래쪽 전회점(또는 충돌 시)의 탐침의 상호작용 에너지 V와 상호작용력 F를 구한다. 전회점에서의 탐침-표면간 상호작용 에너지 V는, 예를 들어 다음 식에 따라 구해질 수 있다.

[수10]

$$V = V(R, u + u_0) \quad \dots\dots\dots(15)$$

다만, V(R, z)는 탐침-표면간 상호작용력이고, 다음 식으로 나타내어진다.

[수11]

$$V(R, z) = \frac{2}{3}\pi^2 \rho^2 \epsilon \sigma^5 R \left[\frac{1}{210} \left(\frac{\sigma}{z} \right)^7 - \frac{\sigma}{z} \right] \quad \dots\dots\dots(6)$$

또, 상호작용력 F는 다음 식에 따라 구해질 수 있다.

$$F=F(R1, u+ u0)$$

여기에서, $F(R, z)$ 는, 제1 실시형태의 식(2)에 의해 구할 수 있다. 또, CPU(1)는 탐침의 변위 u 의 극대값과 극소값을, 예를 들어 근사적으로 탐침의 속도 $du/dt=0$ 이 되는 점(τ 와 u 의 조(組))을 찾음으로써 구할 수 있다. 단계 S209'의 처리는, 나중에 상세하게 서술한다. 단계 S211~S237은, 제1 실시형태와 동일하다.

도8에 나타낸, 단계 S209의 상세 프로우에 있어서, 단계 S301~S311은 상술한 것과 동일하다. 또, CPU(1)는, 아래쪽 전 회점에서의(충돌시의) 탐침의 상호작용 에너지 V 와, 상호작용력 F 를 다음 식에 따라 구한다(S313').

$$V=V(R1, u_{\min} + u0)$$

여기에서, $V(R, z)$ 는 상술한 식(6)에 의해 구해진다.

$$F=F(R1, u_{\min} + u0)$$

여기에서, $F(R, z)$ 는 상술한 식(2)에 의해 구해진다.

도5로 되돌아가, 단계 S105 이후는, 제1 실시형태와 동일하다.

3. 데이터의 해석 및 고찰

도17은, 돌기가 없는 경우와 돌기가 있는 경우의 수치 계산예이다.

탐침위치 $u0$ 을 바꾸어, 정상상태의 탐침의 진동 진폭 a 를 계산하였다. 돌기가 없는 경우와(도17(a)), 있는 경우의(도17(b)) 관계를 구하였다. 도면에서는, 탐침의 위치를 낮추어 표면에 다가가는 경우를 down(실선), 올려서 표면으로부터 멀어져 가는 경우를 up(파선)이라 하고 있다. 비접촉 상태에서 접촉상태의 경계선 부근에서 히스테리시스가 출현하고, 돌기가 있는 경우는 히스테리시스가 작아지는 것을 알 수 있다. 이와 같이, 본 시뮬레이터에 의하면, 예를 들어 동적 AFM에서의 돌기의 효과를 조사할 수 있다. 돌기에 의해 히스테리시스가 작아지는 것을 발견하였다. 히스테리시스가 작아짐으로써 동적 AFM의 동작이 안정하고, 분해능이 향상한다고 생각된다.

4. 부기

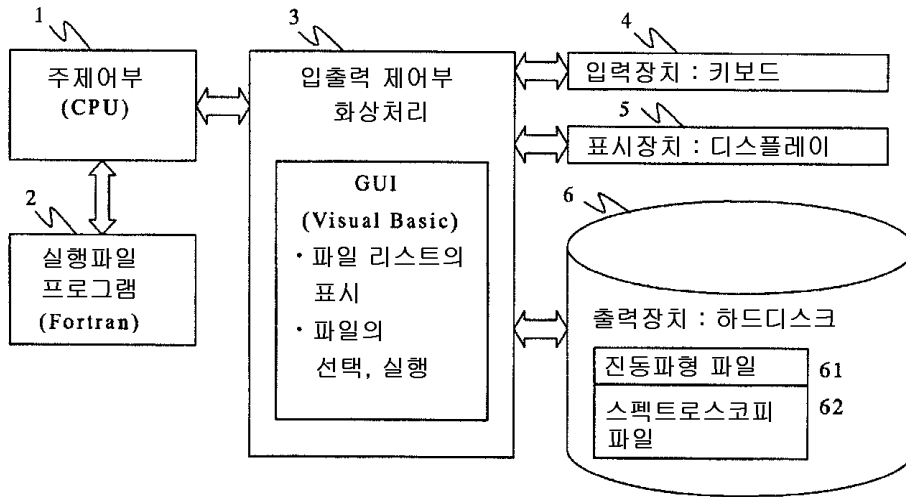
본 발명의 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 방법은, 그 각 순서를 컴퓨터에 실행시키기 위한 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램, 동적 모드 원자간력 현미경 탐침의 진동 시뮬레이션 프로그램을 기록한 컴퓨터로 읽을 수 있는 기록매체, 그 프로그램을 포함하고 컴퓨터의 내부 메모리에 로드 가능한 프로그램 제품, 그 프로그램을 포함하는 서버 등의 컴퓨터 등에 의해 제공될 수 있다.

산업상의 이용가능성

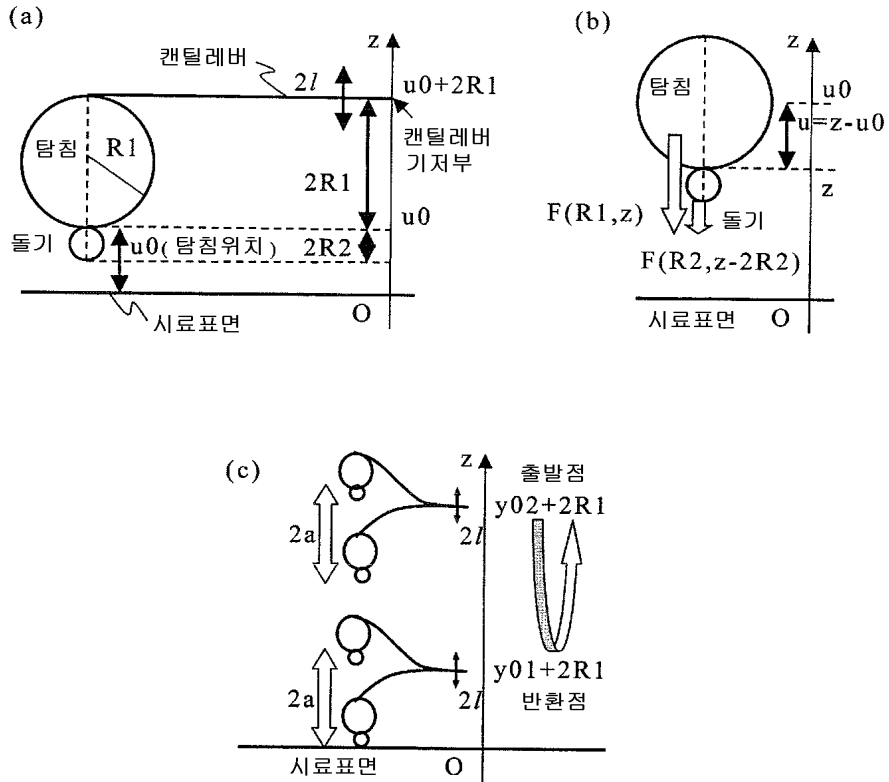
본 발명은, 예를 들어 나노 테크놀로지에서의 주사 프로브 현미경에 관한 산업에 이용 가능하다.

도면

도면1



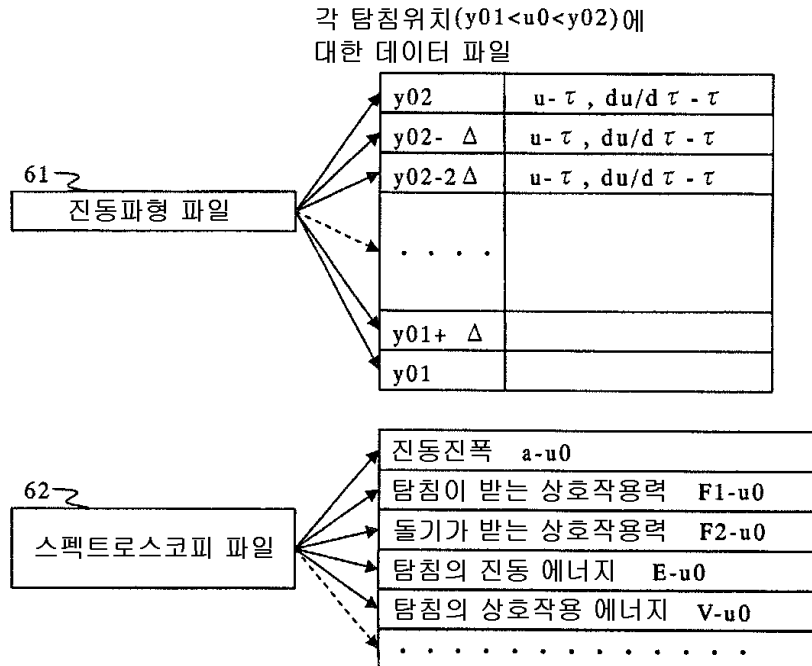
도면2



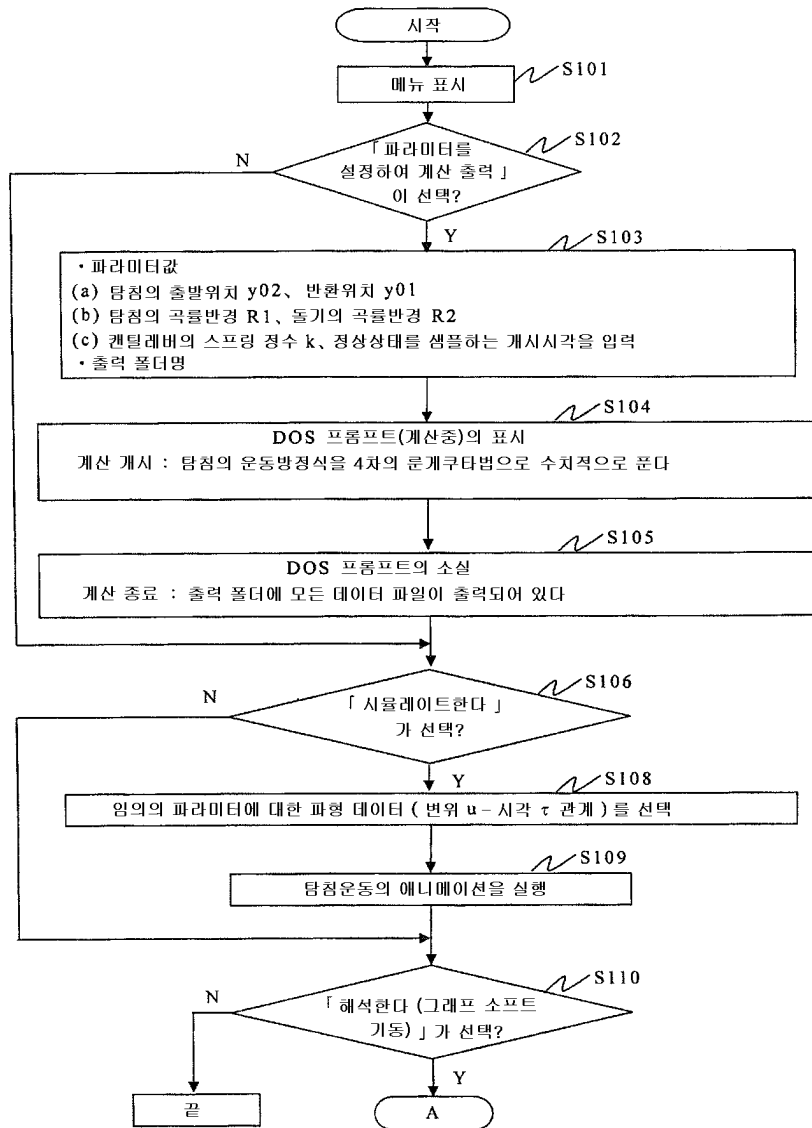
도면3

파라미터	문자	대입하는 값
변수		
탐침의 변위 [nm]	u	계산으로 구한다
시간	τ	
입력이 필요한 파라미터		
캔틸레버가 변형하고 있지 않는 경우의 탐침 선단 위치 [nm] 탐침의 스타트위치 탐침의 반환위치	($u0$) $y02$ $y01$	$u0 > 2R2$ 입력하여 설정한다
캔틸레버의 스프링 정수 [N/m]	K	
탐침의 곡률반경 [nm]	$R1$	
탐침 선단에 부착한 돌기의 곡률반경 [nm]	$R2$	
정상상태를 샘플하는 개시시각	—	
정수		
캔틸레버의 Q값	Q	5
캔틸레버의 여기진폭 [nm]	l	0.5
탐침과 표면의 원자의 수밀도 [nm^{-3}]	ρ	0.25
원자 반경에 관한 파라미터 [nm]	σ	0.25
에너지에 관한 파라미터 [eV]	ϵ	0.01

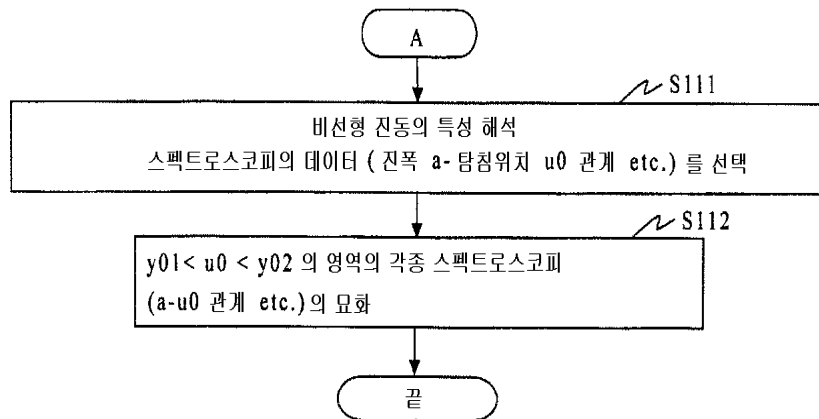
도면4



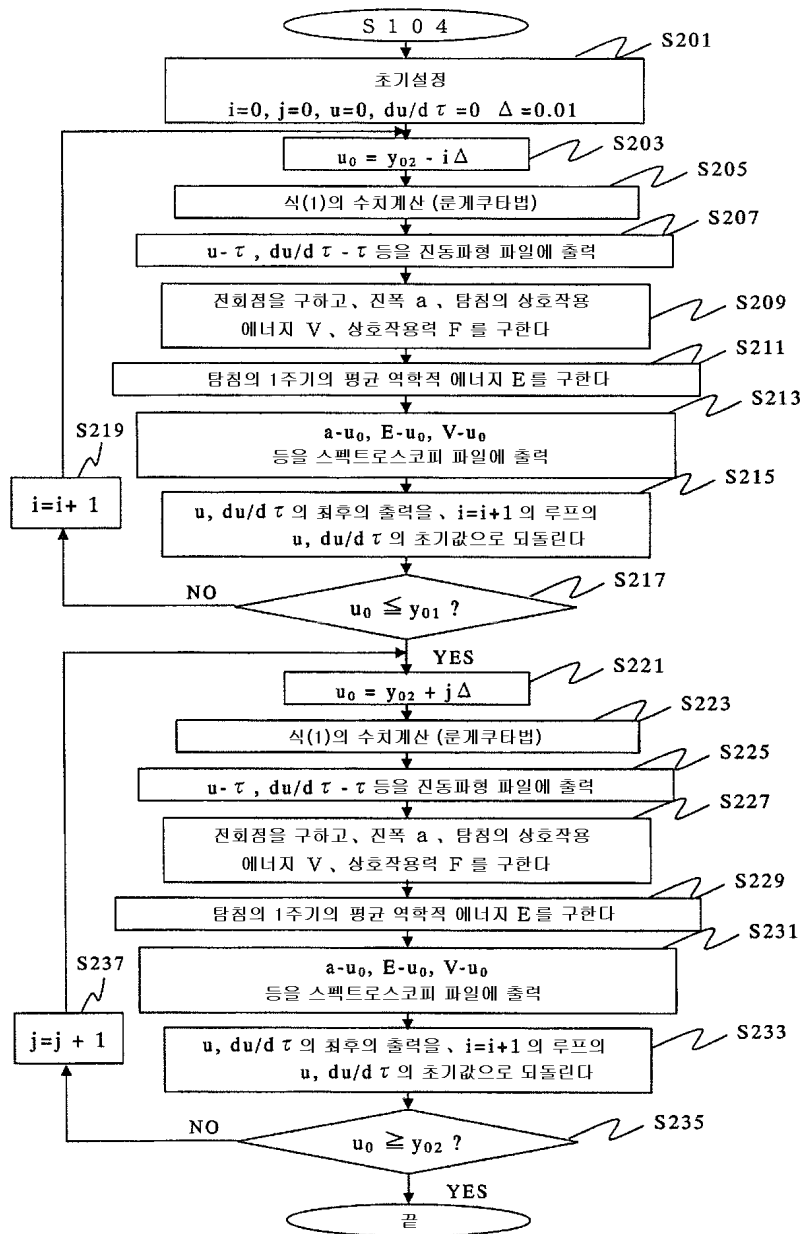
도면5



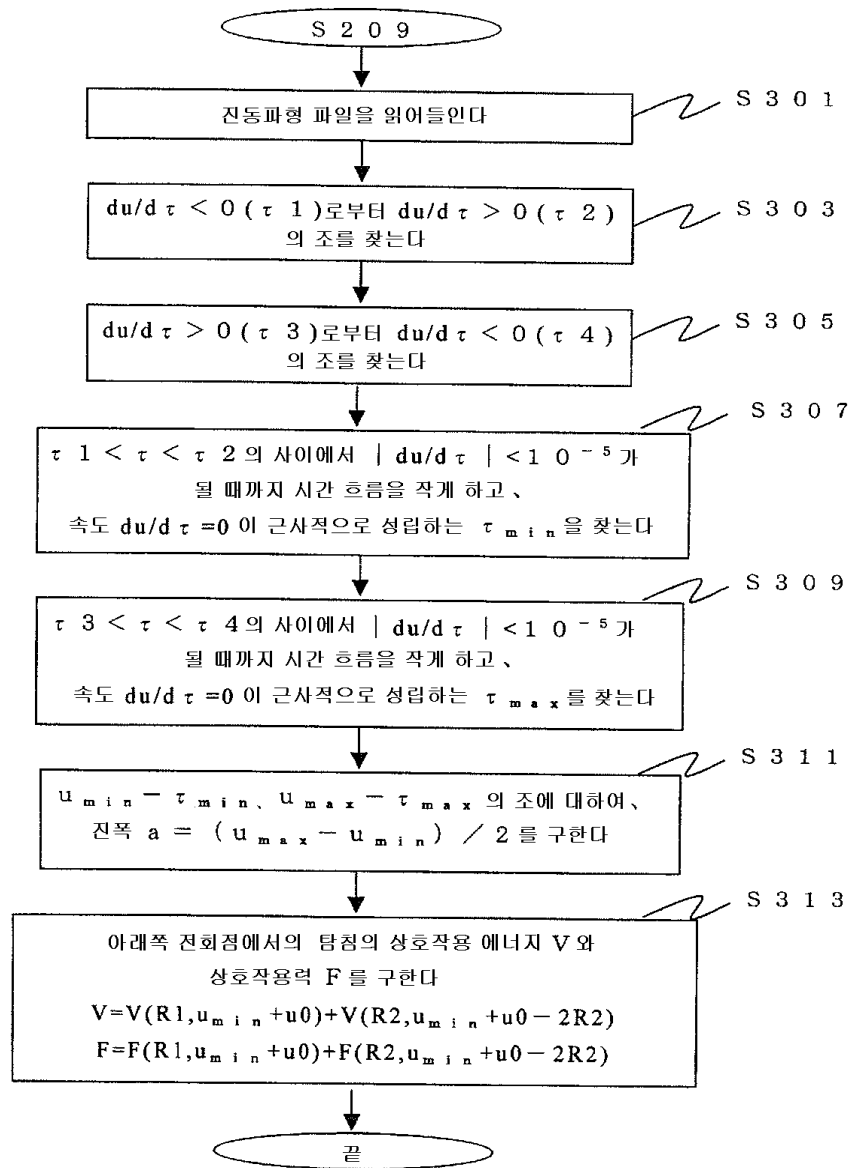
도면6



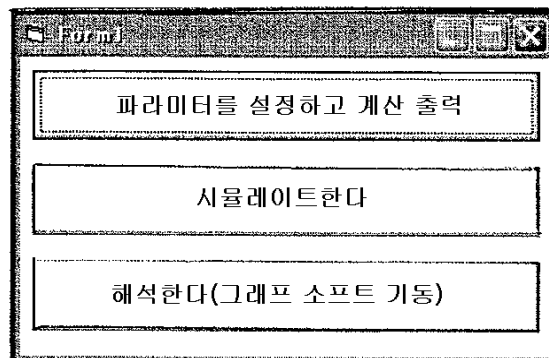
도면7



도면8



도면9



도면10

파라미터의 설정

근원의 위치(스타트)y02 3

근원의 위치(반환)y01 20

캔틸레버의 스프링정수k(N/m) 50

탐침의 곡률반경R1 10

탐침에 부착한 덩어리의 반경R2 0
(없을 때는 R2=0)

무차원 시간 τ 범위 개시시간~(개시시간+50)
400

조작하는 폴더명

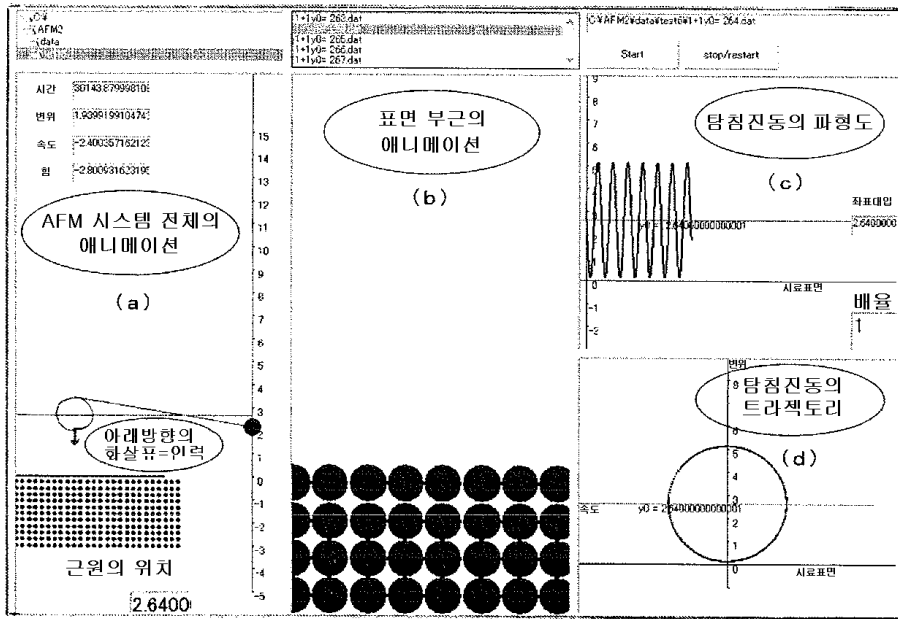
폴더 삭제 데이터 폴더 작성

(a) 파라미터의 설정

Please wait, until window close!
Now, calculating.

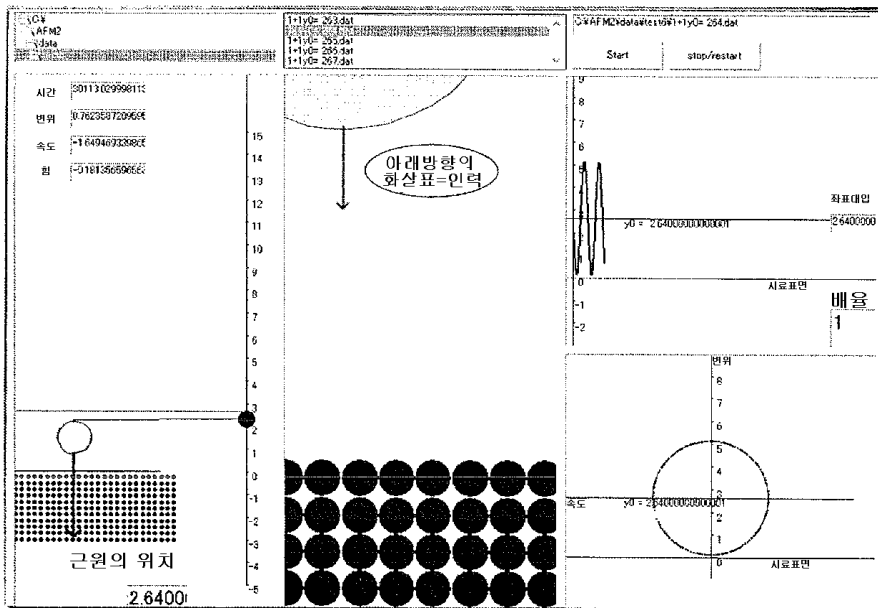
(b) DOS 프롬프트

도면11



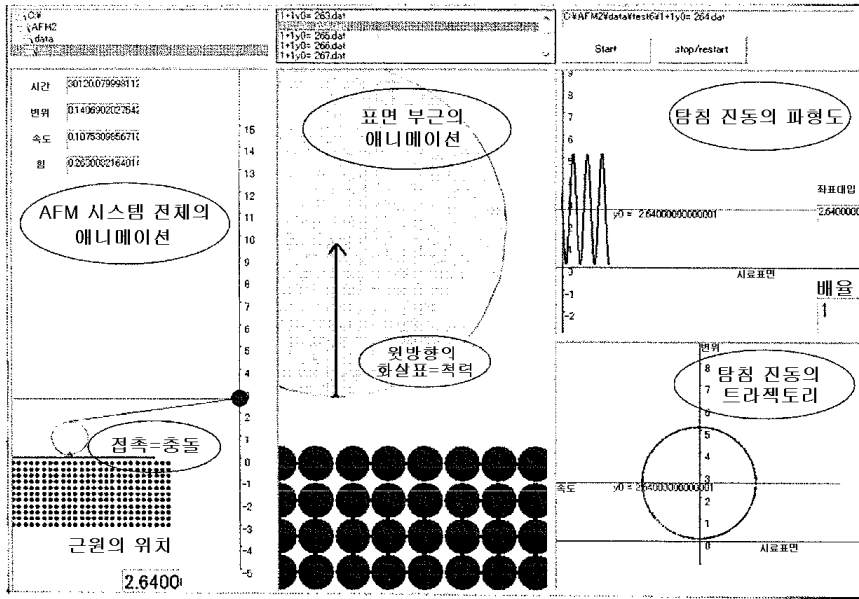
탐침이 표면으로부터 먼 곳에 있을 때(비접촉 상태)

도면12



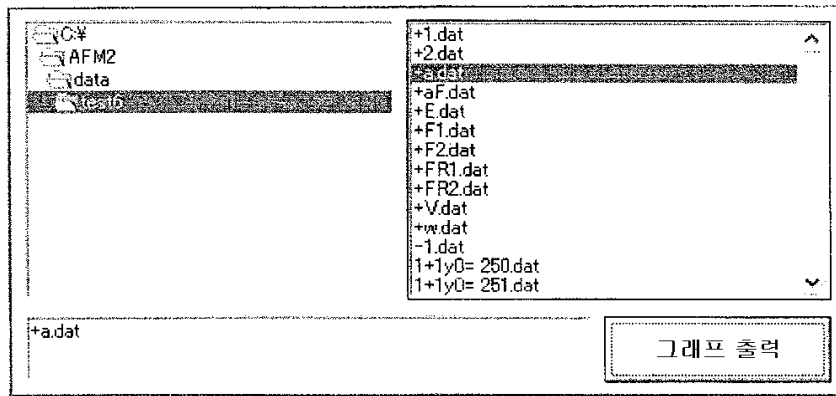
탐침이 표면에 조금 다가갔을 때(비접촉 상태)

도면13



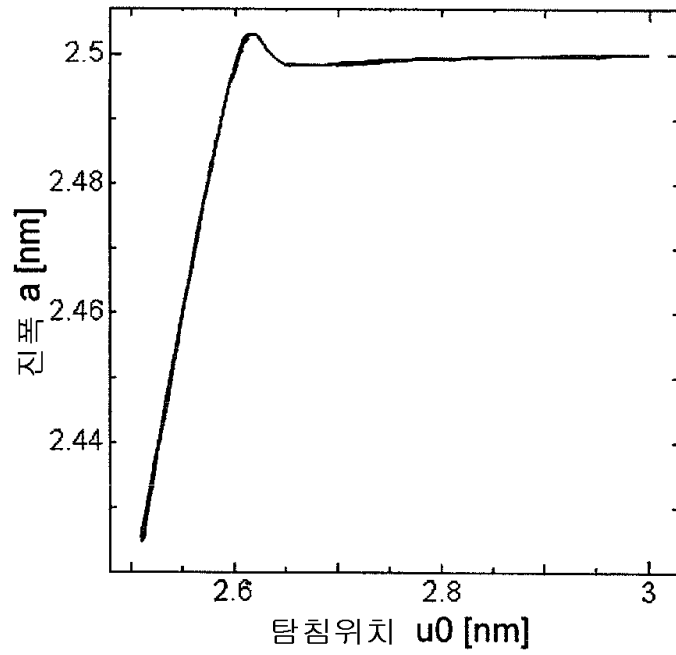
탐침이 표면과 접촉(충돌)해 있을 때

도면14



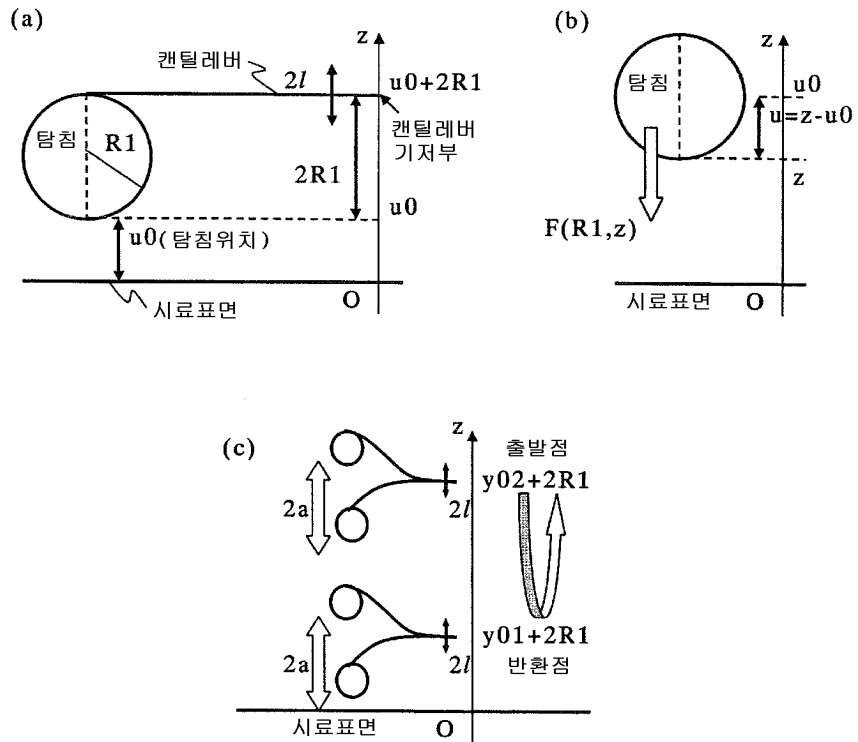
출력파일 리스트

도면15

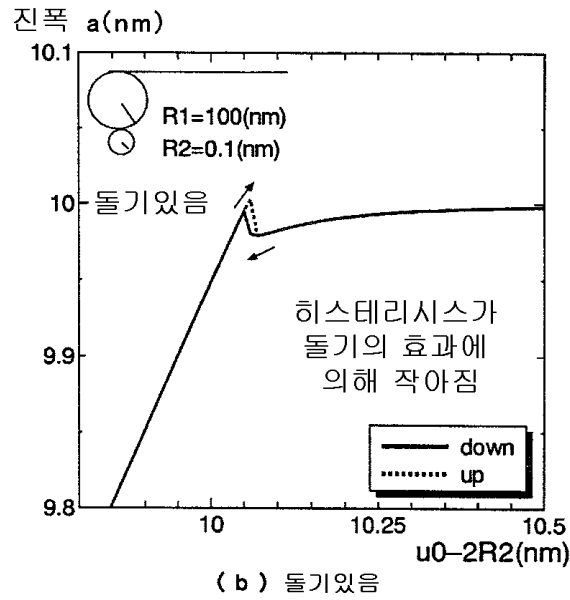
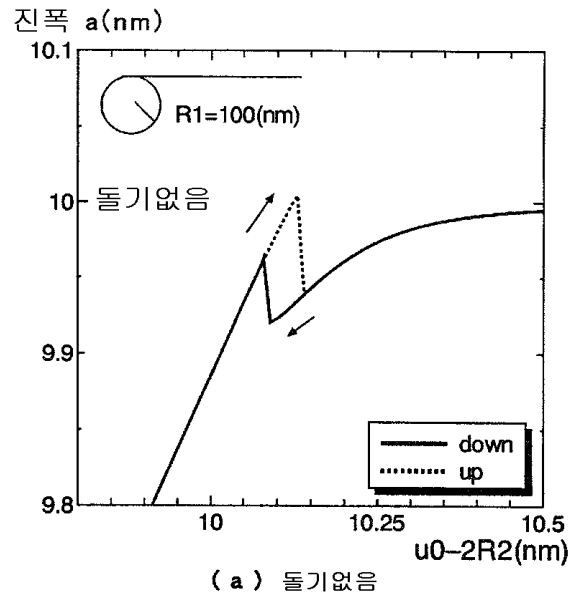


진폭 a 를 탐침위치 u_0 의 함수로서 묘화한
진폭의 스펙트로스코피

도면16



도면17



도면18

