

SPMイノベーター Prologue

日本発・世界初「実験－計算」画像比較型の世界標準仕様SPMシミュレータは、東北大学 特任教授 理学博士・塚田 捷先生監修の下、多数の有識者の方々のご協力を頂き、開発されました。

「PHASE/0 の入力データ」を SPM シミュレータの DFTB 計算を独立実施し作成する、
連携運用ご案内

今後、東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 特任教授 塚田捷先生と
物質・材料研究機構 大野隆央先生との間で検討されていく事が決まりました。

PHASE/0 は NIMS(物質材料研究機構)によって開発された、
密度汎関数理論に基づいた第一原理分子動力学法計算のためのソフトウェアシステム
です。

詳しくは、以下のホームページをご参照ください。

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/event/event.php?id=77>

<https://azuma.nims.go.jp/events/semi2015/semi20160119>

“夢のシミュレータ”のコンセプト

理論的計算シミュレータ機能
有限要素法、分子動力学法、密度汎関数法に基づく強結合法(DFTB法)の採用

実験画像データの3D処理機能
世界主要SPMメーカーのデータを直接読み込み可能
データ画像のデジタル補正機能、探針先端形状の推定機能、グラフィック機能全体の強化、etc

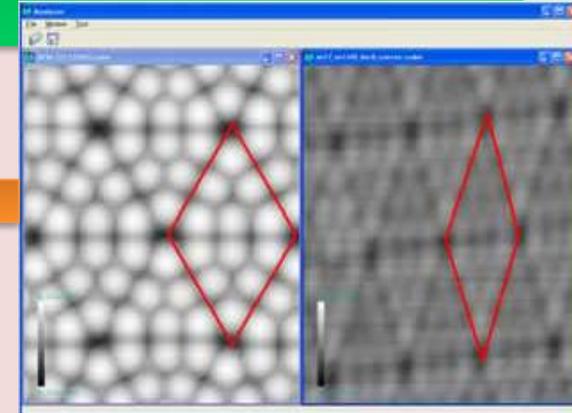
粘弾性接触力学の導入による、
バイオ・ソフトマテリアル・シミュレーション(逆問題含む)への挑戦

DFTBシミュレーションで69種類の元素
パラメータを完備することで、あらゆる無機・有機化合物のシミュレーションに対応

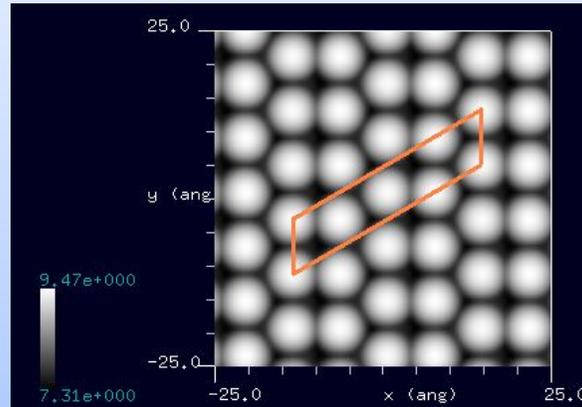
SPM実験画像とシミュレーション画像の
比較機能の実装により、試料表面の原子の真の状態を特定可能

* PHASE/O:物質材料研究機構
で開発されたフリーの第一原理計算ソフトウェアです。

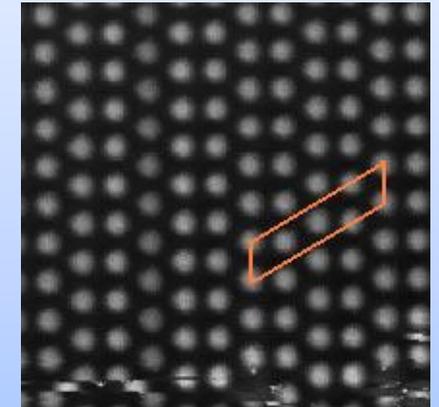
シミュレーション画像と実験画像データの比較を同一のプラットフォーム上で実現する



【DFTB】Ge(111)-c(2×8)のconstant current STMシミュレーション



DFTBソルバによるシミュレート結果



実測. D. Sawada et al., Materials Transactions 50, 940–942 (2009).

SPMシミュレータはPHASE/Oのプリプロセッサとしても運用可能です

SPMシミュレータの特徴・メリット

世界標準仕様・粘弾性接触解析機能 及び 逆問題へのアプローチ

周波数シフト、位相シフトの値を実験結果により既知として、それらの値から、試料のヤング率、表面張力等の物性値を逆算することができます。

SPMシミュレータDFTBソルバ用計算パラメータ・データベース保有し、DFTB計算元素69種類適用可能となる。これにより、ほぼ全ての(無機・有機)化合物のDFTB計算による、STM/STS, AFM, KPFMシミュレーションが可能となります

これまで、様々なSPM実験画像データ処理ソフトの代表例として、Image Metrology社のSPIPが有名でしたが、画像から何が見えるのか判別が困難という事実が常に存在していました。SPMシミュレータは、見かけのSPM実験画像から、原子の真の配置を特定できる、従来とは一線を画すイノベーションです。

実験データ画像と理論的に得られたシミュレーション画像をPC上で簡単に比較・検討する事が出来ます。量子力学的なシミュレーション計算をパソコンで従来計算時間の半分程度で実行します。

SPM装置据付現場のSPM実験担当者が作成するSPM実験画像の精度が向上する、「実験－計算」画像比較型・(検討)画面を出力できる。

分かりやすい“システムの使い方説明と解説”(オンラインヘルプ)

SPM初心者ユーザ補助機能(活用ガイド)

SPMシミュレータの使い方(説明・解説)

3. 「SPMシミュレータ操作ナビシステム」(初心者、不慣れな方々のSPM必須知識を補うツール)を経由して、ユーザとAASRIは協議し、ユーザへの指示項目となる。(使用法を運用指示にて、ユーザは自立的にシミュレーション出来ます)

- (1) SPM構成ソルバ8本の使用順序、選択の方法など使用者への導き手が必要(標準)
- (2) 使用者 初心者～不慣れな方々の自立的使用支援ツール(質問・指示繰り返し)
- (3) 使用者とAASRIの間のSPMシミュレーション実行 GO/STOP指示に活用
- (4) SPM計算課題提案後、ユーザとAASRIは「SPMシミュレータ操作ナビシステム」を通して見積書を作成

GO/STOP指示工数 コンサル見積
→ コンサル費+価格
→ 見積額の予算化
→ 検証計算
→ 支払い

SPMシミュレータ操作ナビシステム→計算実行指示→8本ソルバから構成されるSPMシミュレータの稼働の過程は、SPM初心者ユーザ補助機能が「2システム」に具備されており、誰方にも容易にお使い頂けます。

SPMシミュレータ操作ナビシステム・併用型SPMシミュレーション手法

ご自身による購入前の「無料お試し計算」を、SPM計算課題を共有化条件で、SPMシミュレータ購入前検証計算に置き換えることとなります。

(1) (2) (3) (4)の内容は「SPMシミュレータ操作ナビシステム」を経由してのユーザとAASRIの間で相互補完的協議の結果、合意される

SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ プロローグ



SPMシミュレータは、あらゆる産業分野で威力を発揮する、未来のシミュレータです

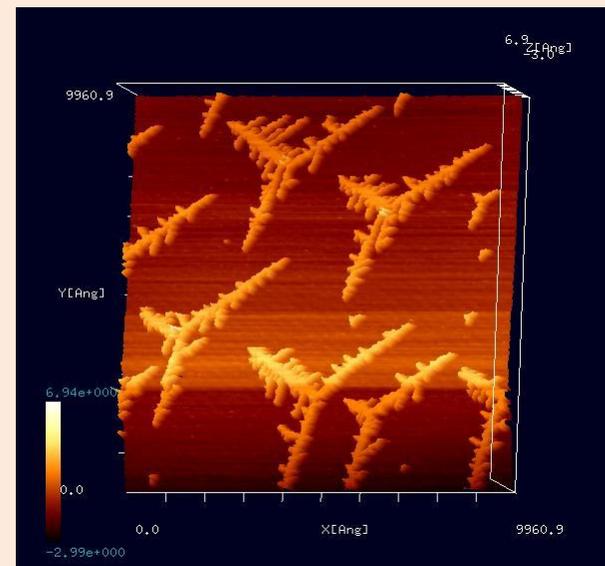
日常の実験・検査業務を強力にサポートします

- ミクロなスケールでの新素材開発を加速します
- 分子・原子レベルでの材料観察を可能にします
- あらゆる無機・有機化合物が分析できます

[東京大学生産技術研究所 福谷研究室提供
(Ir結晶表面上にAuを蒸着、
アニーリングしてフラクタル島状構造を自己形成)

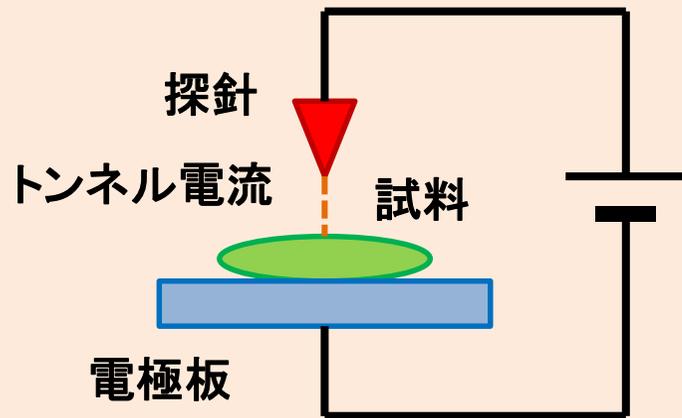
S. Ogura et al., Phys. Rev. B 73, 125442 (2006);

S. Ogura and K. Fukutani, J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 474210.]



SPM(走査型プローブ顕微鏡)とは?

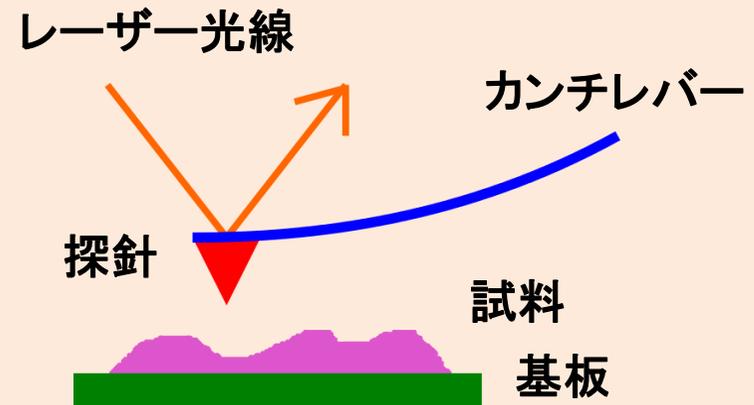
走査型トンネル顕微鏡



半導体物性

探針・試料間に電圧をかけてトンネル電流を発生させる

原子間力顕微鏡



ソフトマテリアル・バイオ

探針・試料間に働くファンデルワールス力(原子間力)を検出する

原子レベルの画像が得られる(Åオーダー)

SPMシミュレータは、あらゆるSPM実験画像を理論シミュレーションします

実験サンプルがどのような物質でも構いません

あらゆる業種の実験研究に対応できます

Windowsのパソコンにインストールするだけで、誰でもすぐに使えます

購入前に、無料お試し計算の特典が付いています



SPM実験装置

SPM実験装置のすぐそばのPCにSPMシミュレータをインストール

SPMシミュレータを使えば、SPM実験装置で得られた生データが、お手元のWindowsパソコン上でデジタル処理可能です

シミュレーション初心者でも、すぐに使える、充実のナビシステム

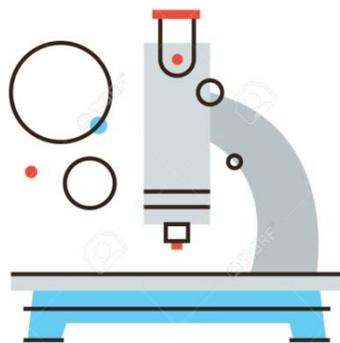
[SPMシミュレータ操作ナビシステム](#)

[SPMシミュレータ・オンラインヘルプ](#)

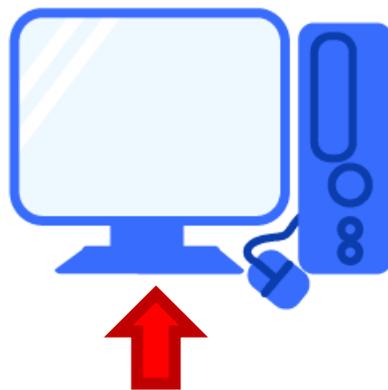
SPMシミュレータのバンドル販売方法について

- SPM実験装置をお買い上げの顧客に、SPMシミュレータの実行ファイルを収めたDVD-ROMを同時提供します
- SPM実験装置ユーザーは、すぐに、お手元のWindowsパソコンにSPMシミュレータをインストールして使用できます
- ライセンスもインターネットで簡単に登録できます

- SPMシミュレータを使えば、SPM実験装置で得られた生データを、お手元のWindowsパソコン上でデジタル処理できます
- シミュレーション計算もWindowsパソコン上で簡単操作できます



SPM実験装置



GPUにも対応しています

SPM実験装置のすぐそばのPCにSPMシミュレータをインストール

SPM実験画像処理手法イノベーション

これまで、様々なSPM実験画像データ処理ソフトの代表例として、Image Metrology社のSPIPが有名でしたが、画像から何が見えるのか判別が困難という事実が常に存在していました

SPMシミュレータは、このSPIPを超えるソフトウェアを目指して、実測画像とシミュレーション計算画像を直接比較できるシミュレータとして開発が進められてきました

AFM実験画像が、そのまま試料の形状を反映しているとは限りません

- 探針の形状が、AFM実験画像に影響を与える場合が考えられます
- 探針と試料の間に、水分子が作る薄い被膜が入り込んでいるかもしれません
- 高分子の試料がコロイド溶液中にある場合、電解質の効果が影響します



SPMシミュレータは、実験画像とシミュレーション画像を比較することにより、実際の試料の形状がどのようなものであるかの、ヒントを与えてくれます
8種類の用意されたシミュレーションソルバを、上手く使い分ければ、試料の真の形状を推定することが出来ます

SPMシミュレータは、見かけのSPM実験画像から、原子の真の配置を特定できる、従来とは一線を画すイノベーションです

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料

[SPMシミュレータの具体的な計算事例が、用途別に紹介されています。]

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 全体

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part1: 高分子の単分子観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part2: 液中環境下での高分子の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part3: バイオ関連試料の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part4: 繊維状高分子の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part5: 有機半導体の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part6: 金属・無機半導体の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part7: 触媒物質の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part8: リチウム電池・透明電極等の特殊な用途のための材料の観察

日本発・世界標準仕様版SPMシミュレータ

SPMシミュレータ・ユーザ補助機能ページ

[SPMシミュレータ初心者ユーザの方は、まずこのページからご覧下さい]

SPMシミュレータ・初心者のための参考計算事例検索ページ

SPMシミュレータが初めてのユーザの方は、これらのシミュレーション計算例の中から、ご自分がやってみたいシミュレーションと似た例を探して下さい。

計算事例用Projectファイル・ダウンロードページ

[具体的な計算例の入力データがダウンロードできます]

調べたい探針・試料のデータをお持ちのユーザの方のためのページ

[自分が用意した探針・試料のデータを元に、シミュレーションを行いたいとお考えのユーザの方のためのページです]

統合化カタログ・SPMイノベーター

SPMイノベーター(世界標準仕様シミュレータ)活用ご案内

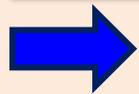
SPMシミュレータ販売価格リスト

SPMシミュレータはPHASE/0の計算速度をアップさせます

PHASE/0は物質材料研究機構で開発されたフリーの第一原理計算ソフトウェアです

PHASE/0は半導体や金属などの性質を求めることができ、新素材の開発に役立ちます

PHASE/0の問題点：
精密な計算ができるが、計算時間が長い



DFTBソルバで、PHASE/0の入力データを作成



PHASE/0の繰り返し計算回数を減らせます

DFTB(密度汎関数法)ソルバはSPMシミュレータに含まれているモジュールの一つです

SPMシミュレータはPHASE/0のプリプロセッサとして運用

PHASE/0の入力データのうち、次の二つにデータを、DFTBソルバで計算します

- initial_wavefunctions(初期波動関数)
- initial_charge_density(初期電荷密度)

DFTBソルバは、適切な初期データを作成し、計算速度をアップしてくれます

メリットは?

- PHASE/0の繰り返し計算の回数を減らし、収束する速度を上げることが可能です
- 結果として、PHASE/0の計算時間を短縮できます

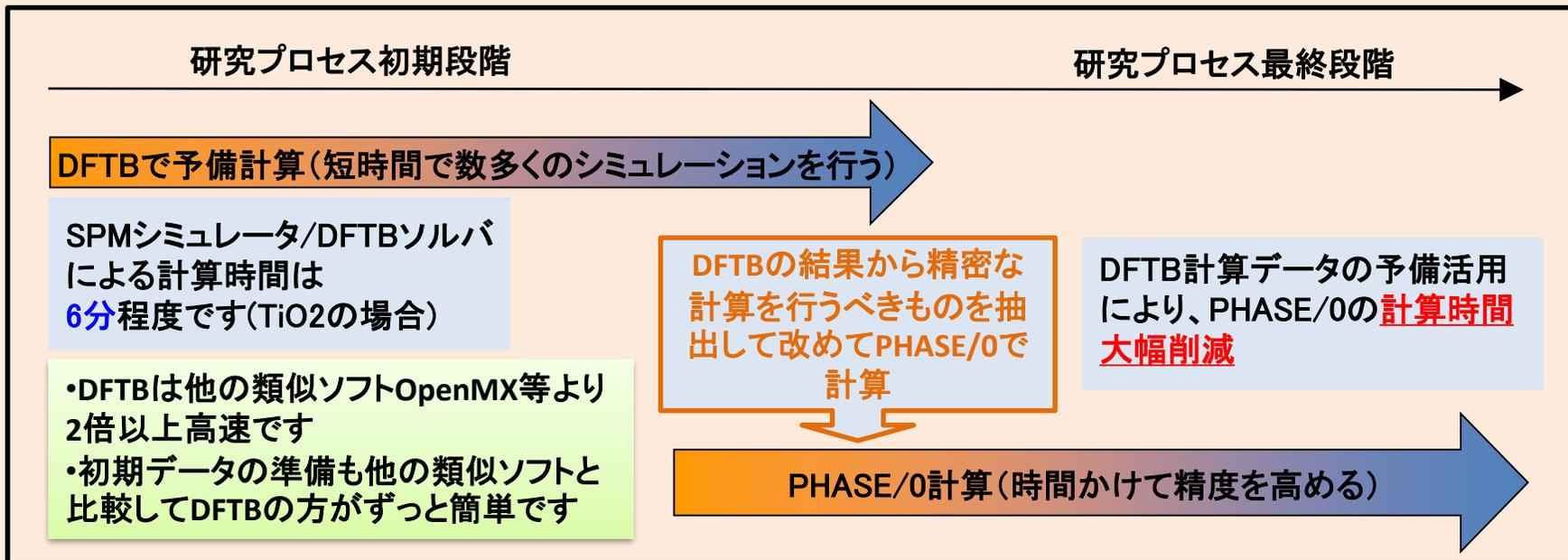
作業の流れ

DFTBソルバで
初期データを準備



PHASE/0で
本格的な計算

SPMシミュレータに付属のDFTB(量子力学的密度汎関数法)ソルバを使って、
第一原理計算PHASE/0の計算時間を大幅短縮



SPMシミュレータのDFTBソルバに付属している**バンド構造計算機能**を利用すれば、PHASE/0をさらにお使い易くなります

ユーザは、PHASE/0での本格的な計算に先立って、SPMシミュレータDFTBソルバで、あらかじめ予備的なバンド構造計算を行うことができます

メリットは?

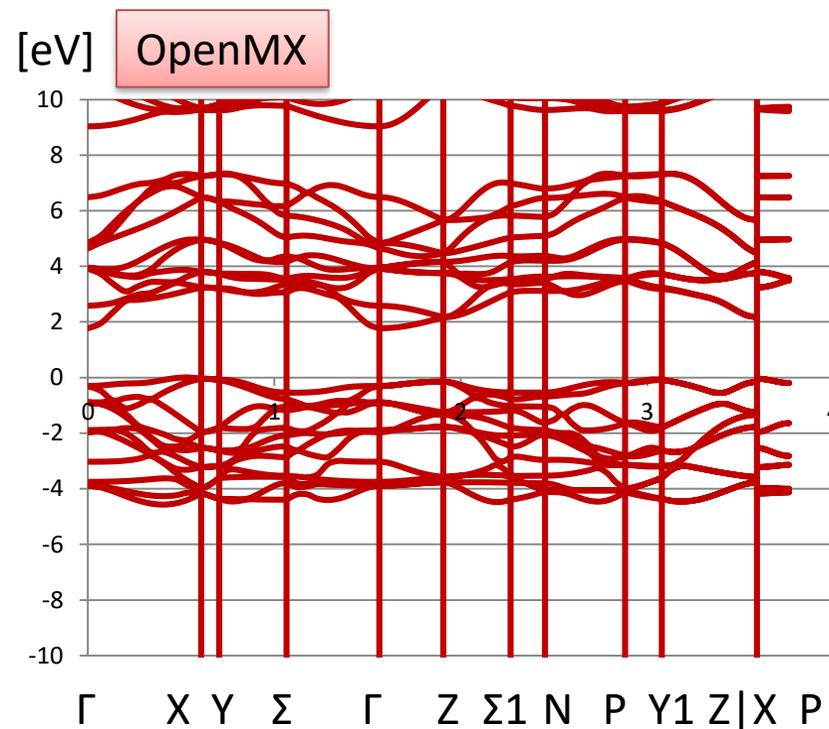
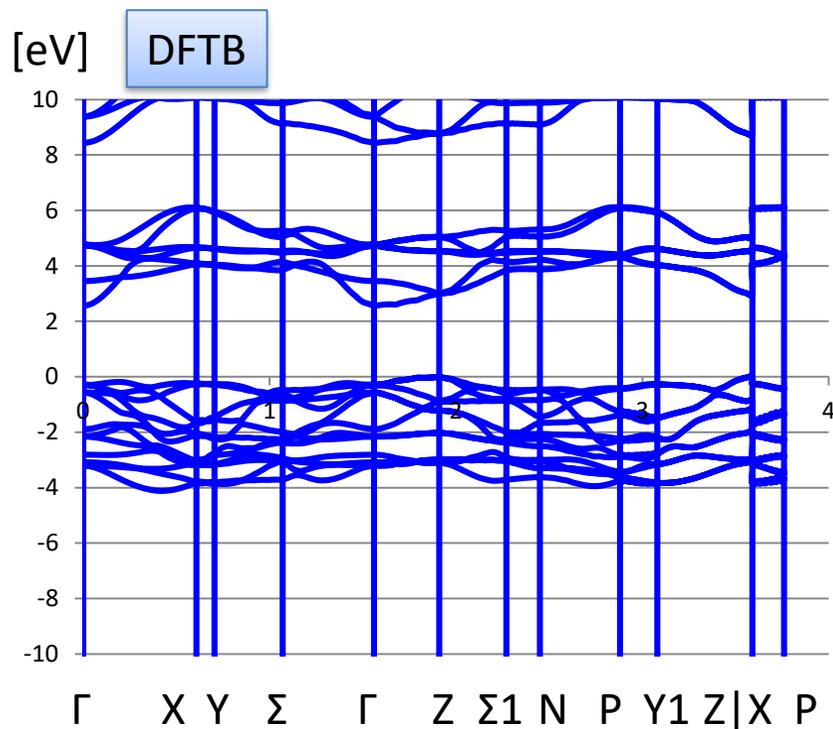
- ユーザは小規模なDFTB計算を高速で行えます
- ユーザは、DFTBソルバで得られるバンド図を参照して、PHASE/0の計算を行えます
- 調べようとしている化合物の第一原理によるバンド構造計算が、易しい問題か、難しい問題かが、DFTBソルバの結果を参照することで予測できます

技術的な観点から見た長所

- 計算速度が比較的早く、計算結果も信頼できます
- Linux上でも動作可能です
- 69種類の元素の量子力学的パラメータが用意されており、事実上、あらゆる化合物のバンド構造が計算可能です

DFTBソルバのベンチマークテスト

DFTBソルバとOpenMXで、酸化チタン(TiO_2)のバンド構造を計算した結果の比較



DFTBソルバは、本来、走査型プローブ顕微鏡画像のシミュレーションを行うためのソフトですが、計算途中の過程で密度汎関数法によるバンド構造計算を行います。このDFTBのバンド計算機能と、OpenMXによるバンド計算の結果を比較したのが上の図です。両者は良く一致していることが分かります。DFTBソルバは、バンド構造出力機能も備えています。

OpenMXは、東京大学物性研究所の尾崎泰助教授が中心となって開発された、フリーの第一原理計算ソフトです。信頼性の高いソフトであることが、広く認められています。

世界初SPM「実験—計算」画像比較型・世界標準仕様(計算機能)、粘弾性接触解析手法新規適用、及びDFTB計算元素69種活用に依り、あらゆる(有機・無機)化合物に対してシミュレーションが、各研究テーマ及び用途区分に対して、実行可能です。

各研究テーマ

バイオ・ソフトマテリアル

バイオ・ソフトマテリアル1

バイオ・ソフトマテリアル2

バイオ・ソフトマテリアル3

繊維状高分子

有機半導体

金属・無機半導体

触媒

リチウム電池・透明電極

用途区分

食品

製薬

化粧品

バイオ

合成ゴム

医療用品

繊維

化学合成

炭素素材

プラスチック

電子デバイス

有機EL

半導体素子

ハードディスク

金属材料

セラミックス

情報通信機器

自動車

化学プラント

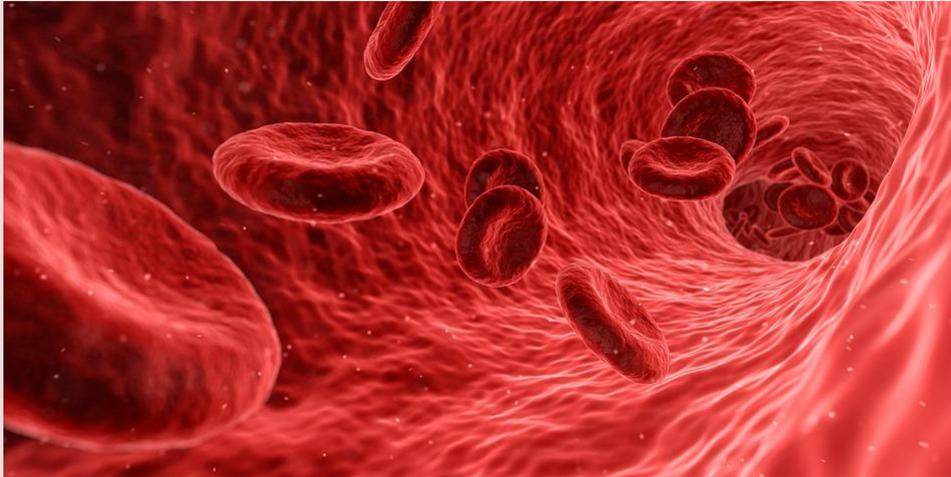
バッテリー

液晶

SPMシミュレータはPHASE/0のプリプロセッサとして運用

SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ

バイオ・
ソフトマテリアル分野



美しく健やかな
未来のために

Advanced Algorithm & Systems
<https://www.aasri.jp/>

医薬品開発をサポートし、先進医療の実現をお手伝いします

食品開発に貢献し、安全な食の未来を約束します

SPMシミュレータは、バイオ・ソフトマテリアル分野での新素材開発を応援します



先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

長寿社会を支える
画期的な薬品を開発したい

安全なダイエット食品を作ってみたい

アルツハイマー症の特効薬を開発したい

地球温暖化でも大丈夫な作物を
品種改良したい

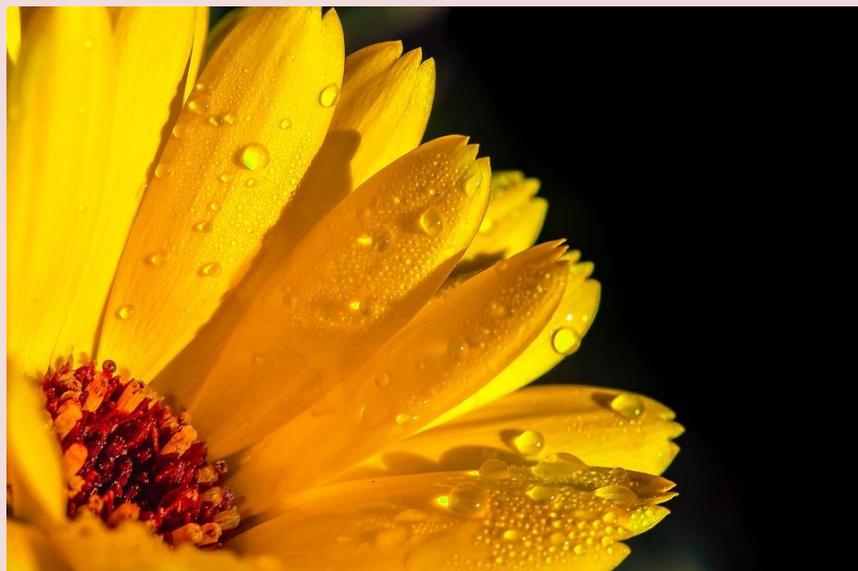


難病の特効薬を開発したい

安価なジェネリック医薬品を開発したい

新食感の食品を作ってみたい

付加価値の高いゴム・プラスチック素材を
開発したい

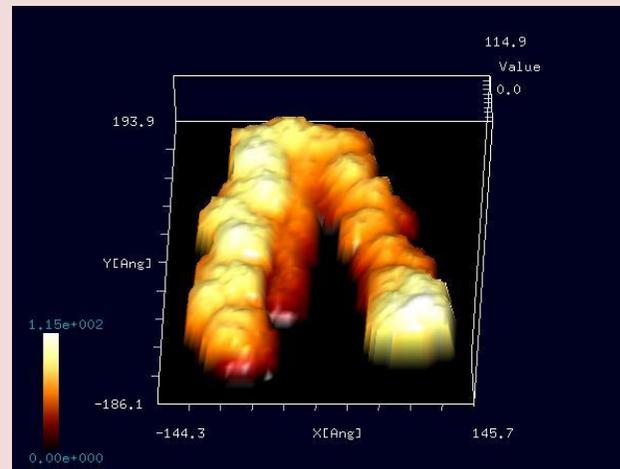


実験現場での様々なニーズにお応えします

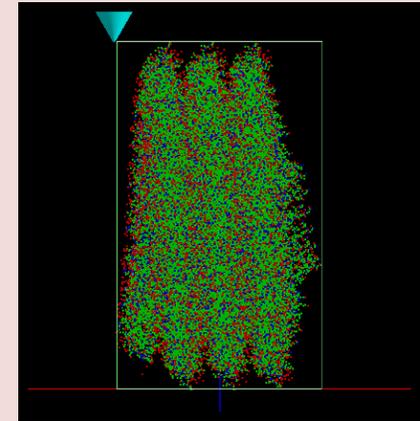
- 生理的溶液中のDNAの振る舞いを調べたい
- 高分子の粘性を調べたい
- 表面張力を伴う材料の界面を調べたい
- 巨大タンパク質の実験画像をシミュレーションしたい
- ゴム分子のような弾性を持つ材料の変形を調べたい
- 実験画像をデジタル処理したい

以下の研究分野を
サポートします

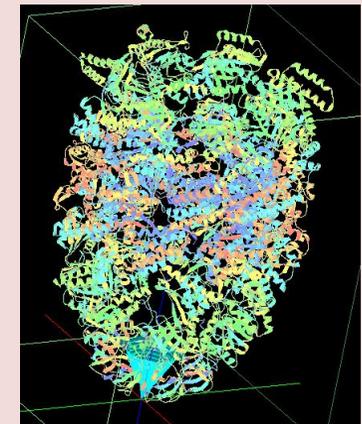
- バイオ
- ソフトマテリアル
- 高分子
- ゴム・プラスチック材料
- 薬品



生体高分子ミオシンVの
AFM像シミュレーション

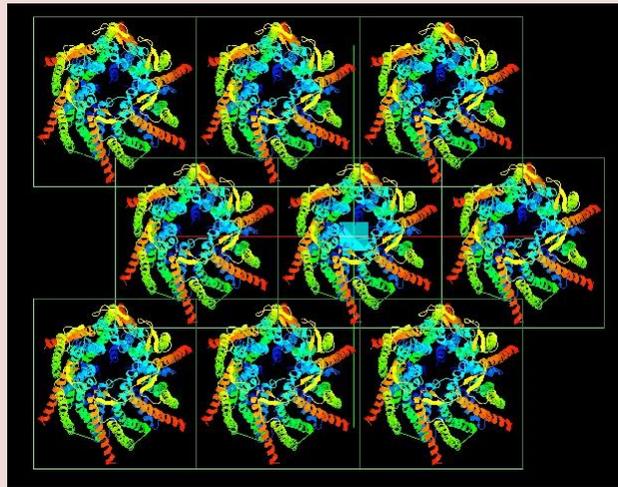


タバコモザイクウィルスの
ような原始的な生物でもシミュ
レーションが可能です

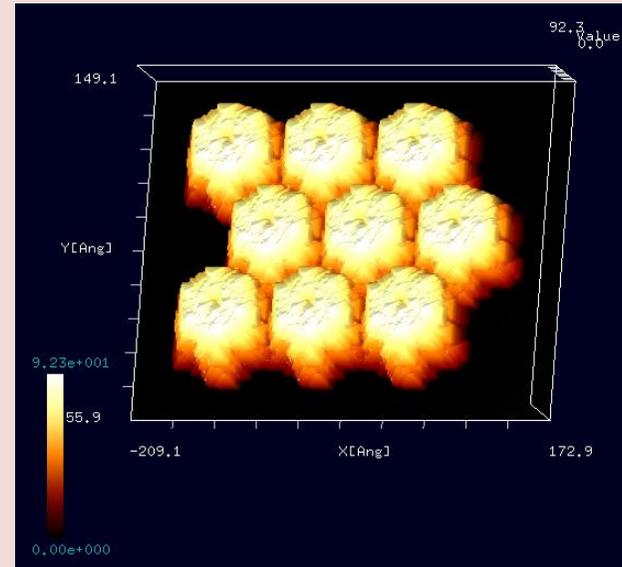
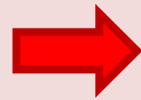


原子数が数万個の巨大タン
パク質でもシミュレーション
が可能です

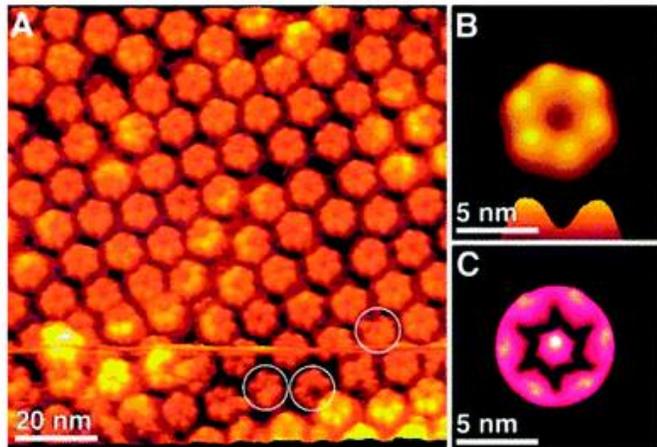
整列したコネクソンのAFM(原子間力顕微鏡)シミュレーション画像
(connexon:タンパク質の複合体で細胞間のチャンネルの働きをする)



分子構造データ



シミュレーション画像



実験画像

実験データ画像と、
理論的に得られたシミュレーション画像を、
パソコン上で簡単に比較検討することができます

F. Variola, 'Atomic force microscopy in biomaterials surface science',
Phys.Chem.Chem.Phys., 2015, 17, 2950.



新素材で
未来を築く

Advanced Algorithm & Systems
<https://www.aasri.jp/>

繊維材料の開発に貢献し、住み良い暮らし作りを約束します

SPMシミュレータは、高分子繊維分野での新素材開発を応援します

高機能繊維の開発をサポートし、豊かな社会の実現をお手伝いします



先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

肌に優しい衣料品を開発したい

丈夫な繊維素材を開発したい

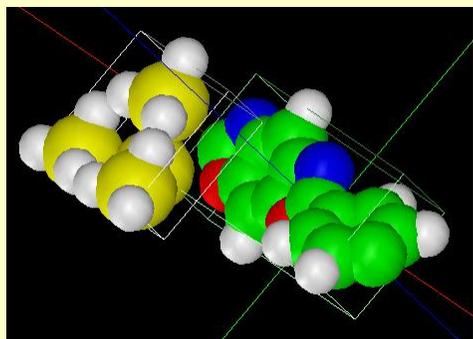
海水から真水を作る高機能をろ過膜を開発したい

人体に安全な人工血管を作りたい

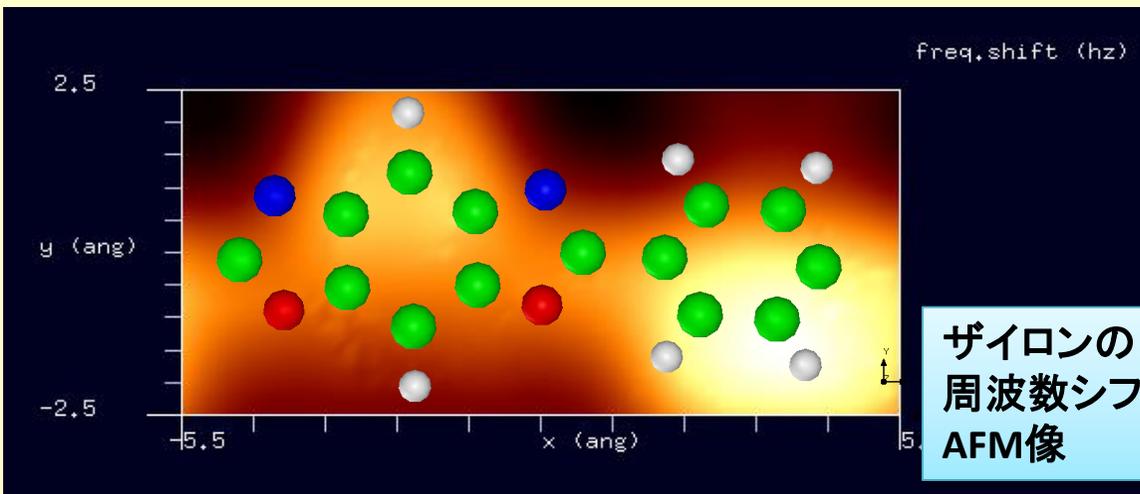


実験現場での様々なニーズにお応えします

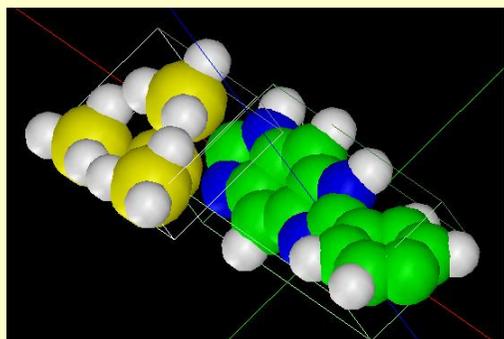
- AFM(原子間力顕微鏡)測定によって得られた実験画像が真の分子形状を反映しているか確かめたい
- AFM測定で繊維分子に探針を押し付けたときの変形を調べたい
- 探針が受ける試料からの反発力を見積もりたい
- 高分子の緩和過程による変形を調べたい



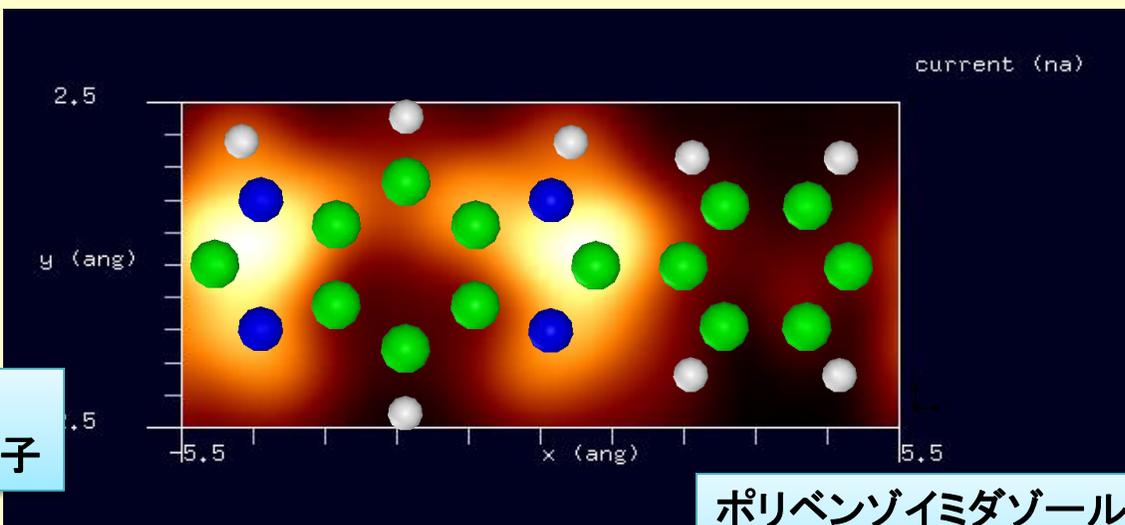
合成繊維ザイロン(Zylon)にシリコン探針を近づけた様子



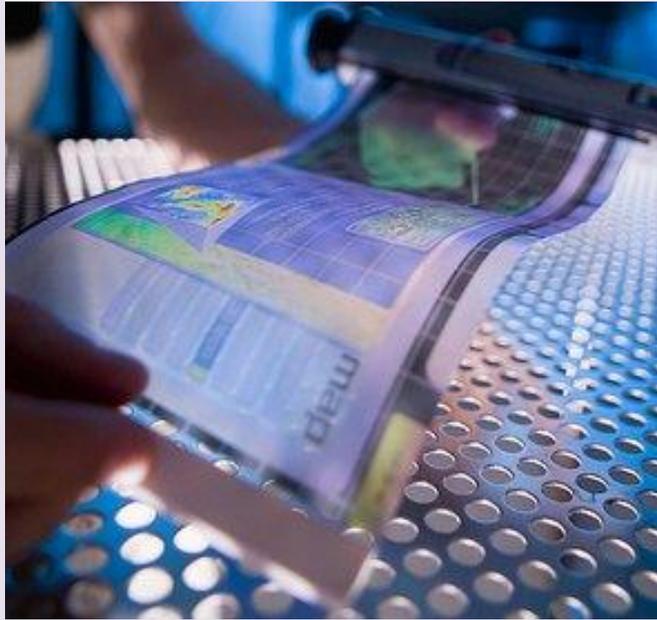
ザイロンの周波数シフトAFM像



合成繊維ポリベンゾイミダゾール(PBI)にシリコン探針を近づけた様子



ポリベンゾイミダゾールの周波数シフトAFM像



創造性あふれる
社会を実現

Advanced Algorithm & Systems
<https://www.aasri.jp/>

有機半導体の開発を通して、クリーンエネルギーの発達に貢献します

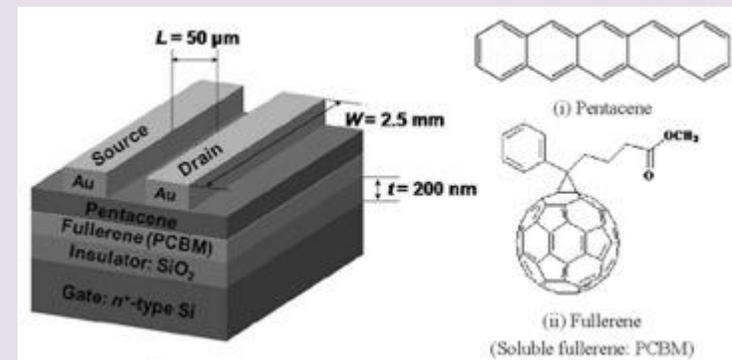
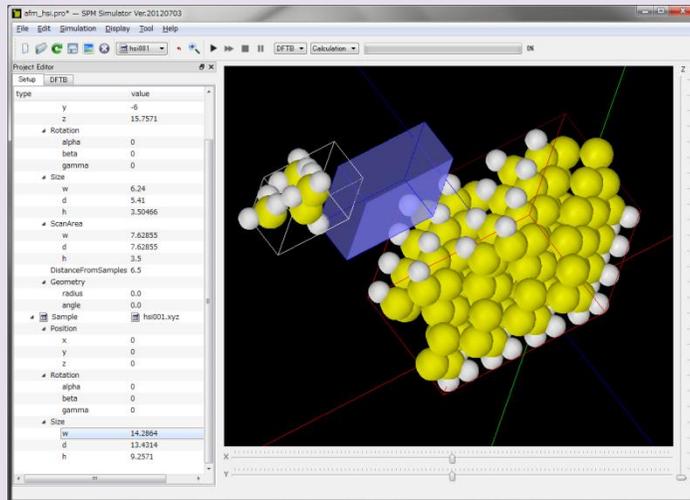
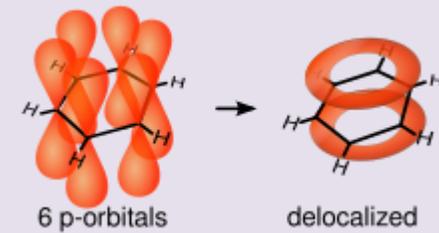
SPMシミュレータは、有機半導体分野での新素材開発を応援します

創造性にあふれた社会の実現のお手伝いをします

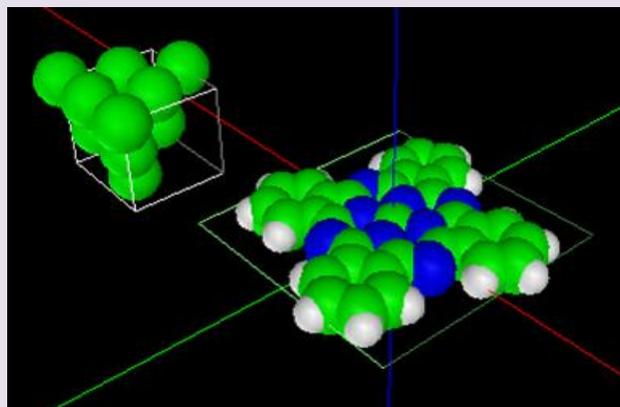


実験現場での様々なニーズにお応えします

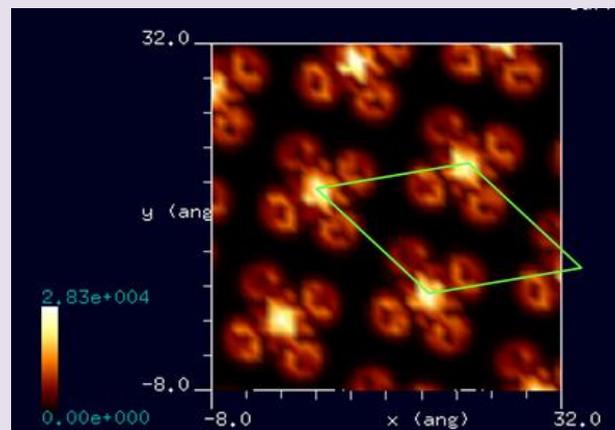
- 実験画像とシミュレーション画像を比較したい
- 有機半導体の電気的な性質を調べたい
- ドープによる効果を調べたい
- 状態密度の分布について調べたい
- 接触電位差について調べたい



銅フタロシアニンのトンネル電流像シミュレート

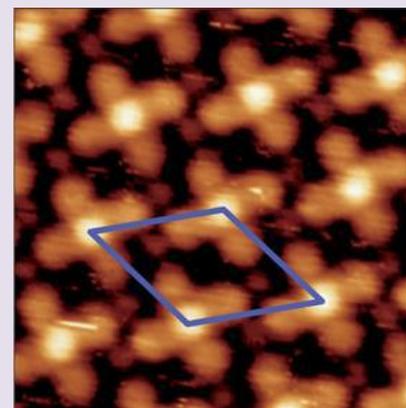


分子構造データ



シミュレーション画像

実験データ画像と、理論的に得られたシミュレーション画像を、パソコン上で簡単に比較検討することができます



実験画像

F. Sedona et al., Nature Materials 11, 970–977 (2012).

SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ



材料開発で
社会に貢献する

Advanced Algorithm & Systems
<https://www.aasri.jp/>

金属・無機半導体などの材料開発
をお手伝いします

新デバイスの開発による新たなテ
クノロジーの発達を応援します

SPMシミュレータは、エコロジー社
会の実現に貢献します



先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

丈夫で軽量な新素材を開発したい

高効率のデバイスを開発し、社会の省エネ化に貢献したい

車の軽量なボディーを開発し、 CO_2 の削減に貢献したい

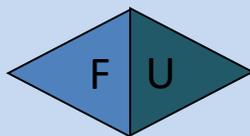
太陽電池の開発を通して、エネルギー問題に取り組みたい



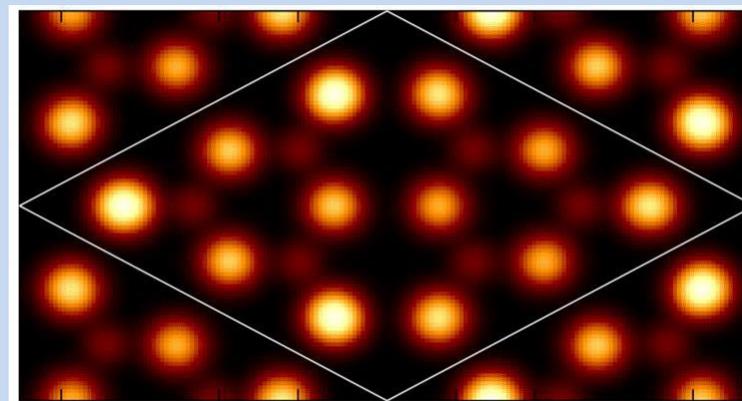
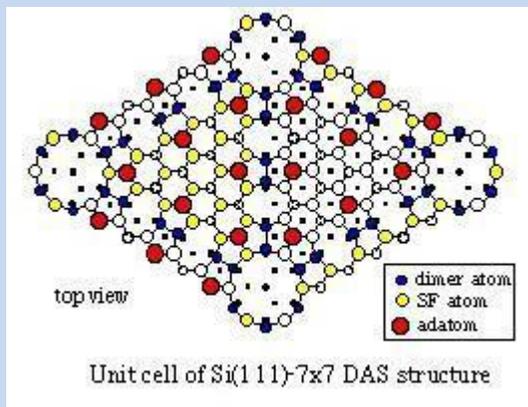
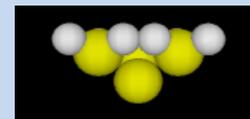
実験現場での様々なニーズにお応えします

- 金属・無機半導体等の材料の表面のSTM像をÅオーダーで求めたい
- 半導体のドーピングによる電気的な性質の変化を調べたい
- 金属表面の付着物質による電荷の移動を調べたい
- 半導体薄膜の電気的な性質を調べたい

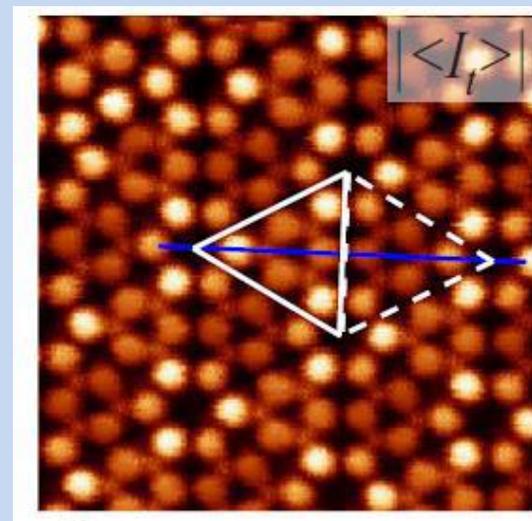
Si(111)-7x7 DAS構造のSTM画像



STMシミュレーション
シリコン探針、高さ 4.0 Å



F領域とU領域の明るさの違いを再現
レストアトムがわずかに見えることを再現



実験 Sawada et al. (2009)



明日の世界の
エコロジーを実現

Advanced Algorithm & Systems
<https://www.aasri.jp/>

触媒材料の開発に貢献し、地球規模
の環境保護を約束します

SPMシミュレータは、触媒分野での新
素材開発を応援します

化学触媒の研究・開発をサポートし、
エコロジーの実現をお手伝いします



先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

自動車排気ガスを無害化する化学触媒を開発したい

化学薬品を効率的に生産するための触媒を開発したい

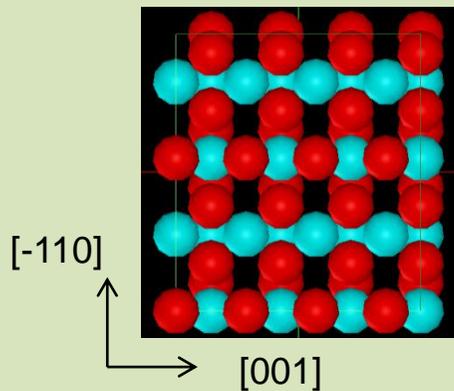
触媒開発でエコロジーに貢献したい

光触媒を環境浄化に役立てたい

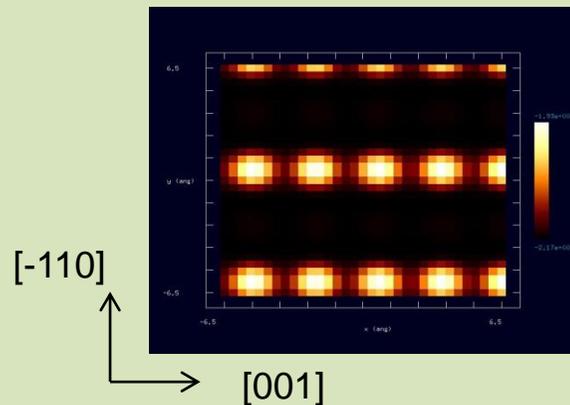


実験現場での様々なニーズにお応えします

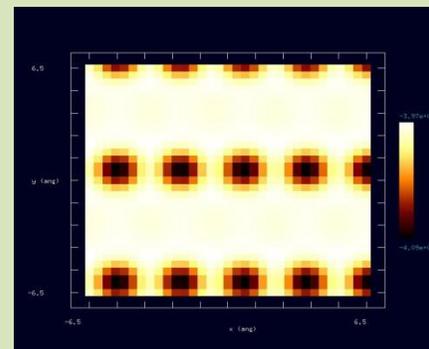
- STM(走査型トンネル顕微鏡)測定によって触媒表面に吸着した分子の様子を調べたい
- 触媒表面の分子が吸着する位置を特定したい
- 触媒表面で単位面積あたりに吸着する分子の個数を求めたい
- 触媒表面に吸着した分子の安定性を調べたい



光触媒TiO₂

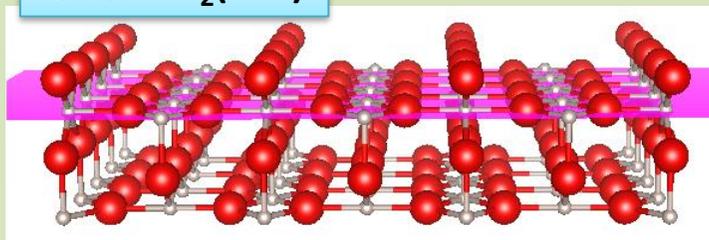


周波数シフトAFM像

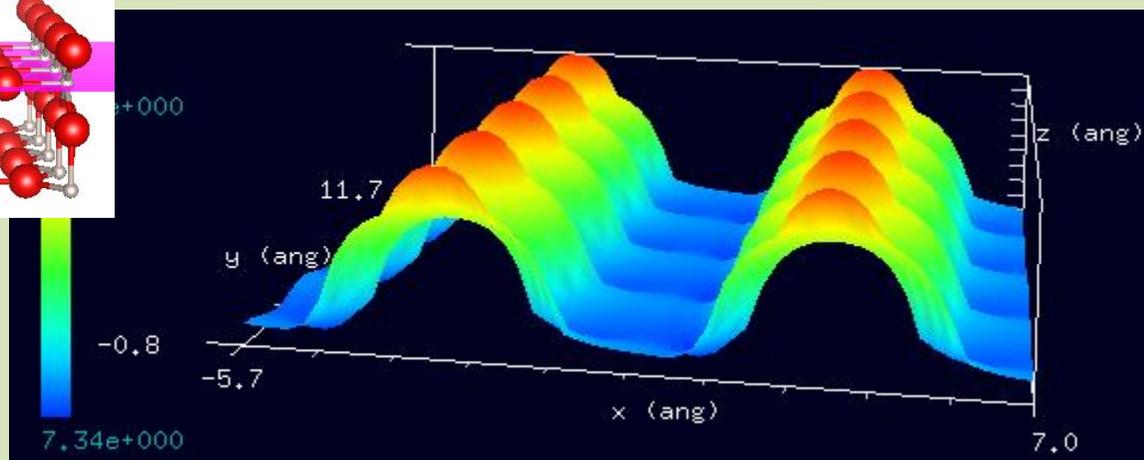


KPFM像

触媒RuO₂(110)

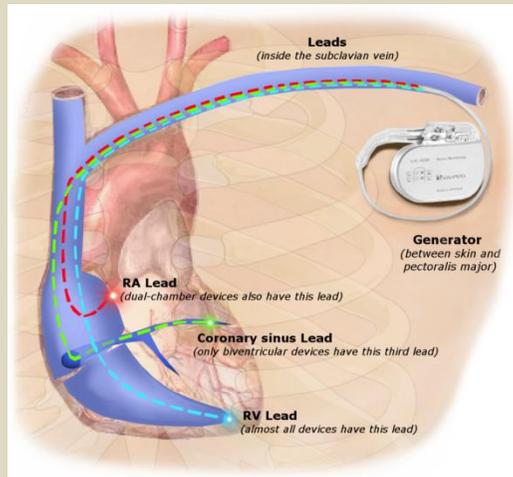


トンネル電流値0.46 nAのSTM像



SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ

リチウム電池・
透明電極分野



便利で豊かな
明日のために

Advanced Algorithm & Systems
<https://www.aasri.jp/>

リチウム電池・透明電極の開発を
サポートし、新製品を産み出すお
手伝いをします

SPMシミュレータは、新しいテクノロ
ジの発達により、より便利で豊か
な社会になることを応援します



先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

安全で長持ちするリチウム電池を開発したい

高効率の透明電極を開発し、太陽電池の開発に活かしたい

リチウム電池の開発を通して医療分野に貢献したい

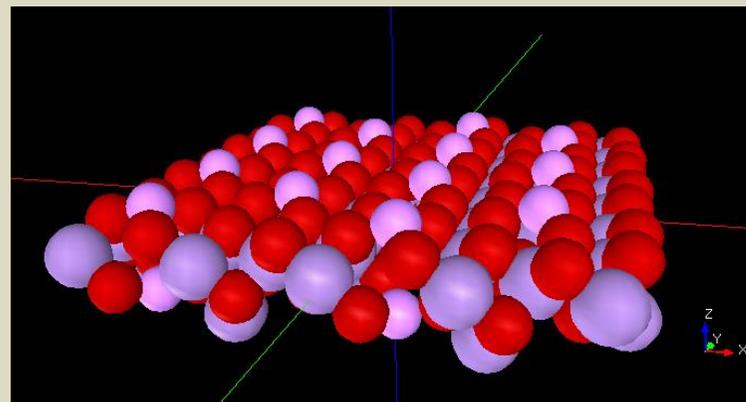
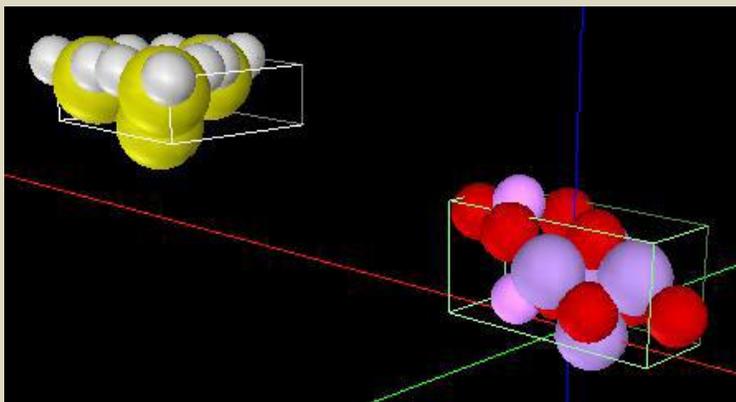
電気自動車の開発に役に立てたい



実験現場での様々なニーズにお応えします

- リチウム電池、透明電極等の材料の結晶のSTM像をÅオーダーで求めたい
- リチウムイオン電池の電極上に、別の金属原子や化合物分子が付着した様子を、シミュレーションしたい
- グラファイト層間にリチウム原子が配置された様子を調べたい
- デバイスの電気的性質を調べたい

リチウムイオン電池の正極活物質 LiMn_2O_4 粒子のSTM画像

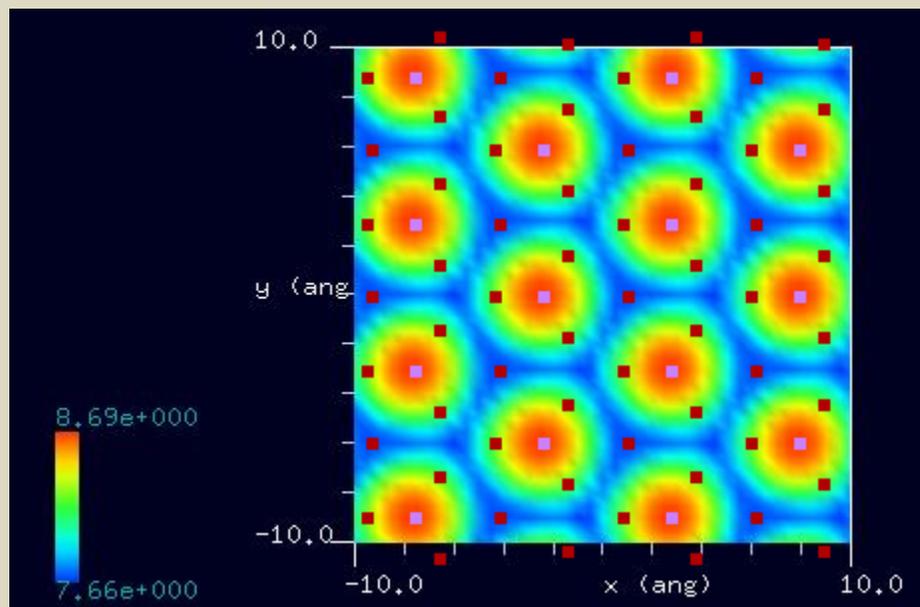


- : 酸素、 ● : リチウム、
- : マンガン、
- : シリコン、 ● : 水素

周期的境界条件を課した
Li 終端モデル

探針: Si_4H_9 探針
試料: LiMn_2O_4 (111) 表面 (Li 終端)
スキャンエリア: $20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$
スキャンモード:
Constant current STM
探針バイアス: +1.0 V
電流値: 10 nA

計算結果



SPMシミュレータDFTBソルバ用計算パラメータ・データベース構築

一般に流通しているDFTBソルバでは、通常、原子間相互作用パラメータを提供しません

一方、

Advanced Algorithm & Systemsでは、SPMシミュレータのDFTBソルバにおいて、原子間相互作用パラメータを、**[区分1]:12元素、[区分2]:27元素、[区分3]:69元素(平成28年9月完成)**の条件でご提供の方針です

区分1:12元素 H, C, N, O, P, Al, Si, Ti, Ru, W, Pt, Au

区分2:27元素 S, F, Cl, Br, I, Ge, Ga, As, Na, Ag, Bi, Mg, Cu, Li, B

区分3:69元素

遷移金属 V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zr, Nb, Mo, Tc, Re, Rh, Pd, Ir, Y, Sc

ランタノイド系 La, Ce, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb

半金属 Se, Sb, Te

アルカリ金属 K, Cs, Rb

アルカリ土類金属 Ca, Ba, Sr

卑金属 Be, Zn, In, Sn, Cd, Hg, Pb

アクチノイド系 U

これにより、ほぼ全ての、無機・有機化合物のDFTB計算による、STM/STS, AFM, KPFMシミュレーションが可能となります

DFTB原子間作用パラメータ preliminary DB 開発状況

DFTB計算 使用可能元素 (2015/12/25更新)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*1	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	*2	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	113	Fl	115	Lv	117	118

*1 ランタノイド	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
*2 アクチノイド	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

27元素 使用可能 (2015/09/26)

	12 H, C, N, O, Al, Si, P, Ti, Ru, W, Pt, Au
	15 Li, B, F, Na, Mg, S, Cl, Cu, Ga, Ge, As, Br, Ag, I, Bi

32元素 追加開発

	17 Sc, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zn, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Rh, Pd, Re, Ir (遷移金属)
	8 La, Ce, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm (ランタノイド)
	4 Se, In, Sb, Te (半金属)
	3 K, Rb, Cs (アルカリ金属)

10元素追加

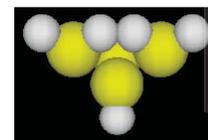
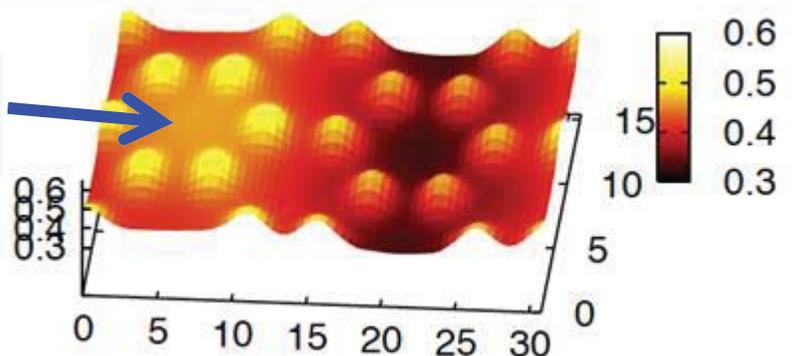
	10 Be, Ca, Sr, Ba, Cd, Sn, Hg, Pb, Yb, U
--	--

2016年9月
までに
69元素完了

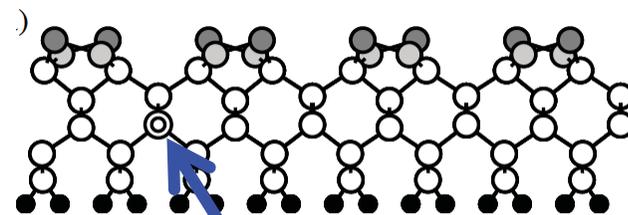
SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ用パラメータ・データベース構築

DFTBシミュレーション:
Si(001)-c(4x2)表面に埋め込まれた不純物(Al原子)のKPFM像
(局所接触電位差の分布像)

不純物の
影響



探針高さ 0.4nm



不純物(Al原子)

A.Masago et al, Phys. Rev. B 82 (2010)195433

DFTBソルバの有効性は確認されている

対象試料・探針の適用原子種の拡大が必要

DFTBパラメータ・データベースの構築

SPM(走査型)

8個のソルバの

Analyzer

SetModel

GeoAFM

FemAFM

LiqAFM

CG

構造最

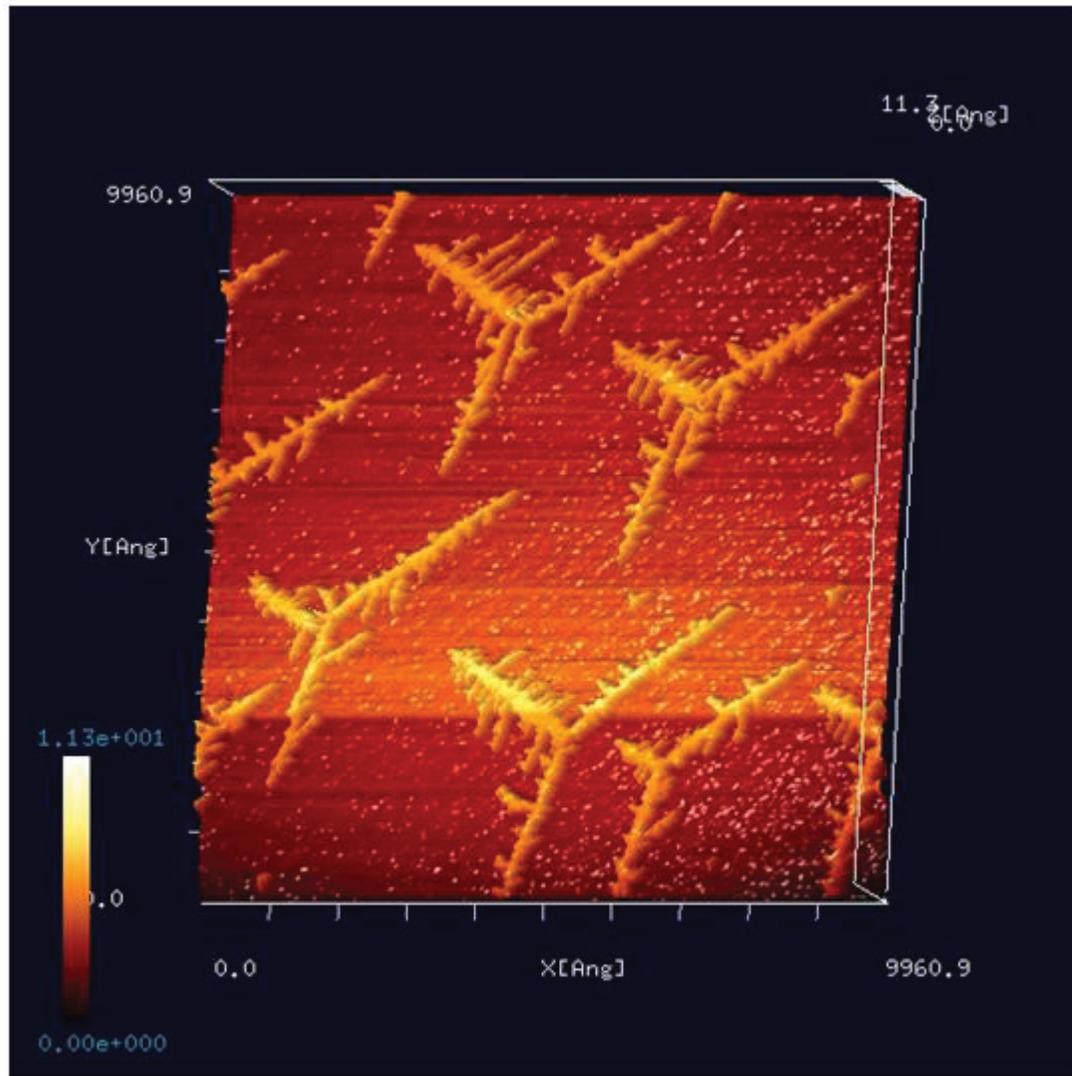
MD

分子動

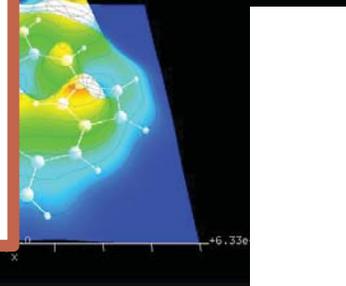
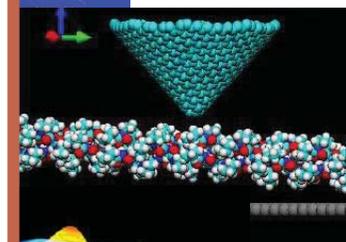
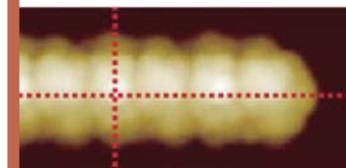
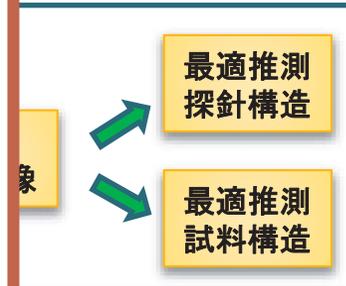
DFTB

量子

STM, AI
によって行う。DFTBのハフナーがまだ不足。



Analyzer: 実験画像表示機能(Ir結晶表面上に蒸着されたAuのフラクタル島状構造)



SPM(走査型)

8個のソルバの

Analyzer 実

SetModel 計

GeoAFM 高

FemAFM 速

LiqAFM 液

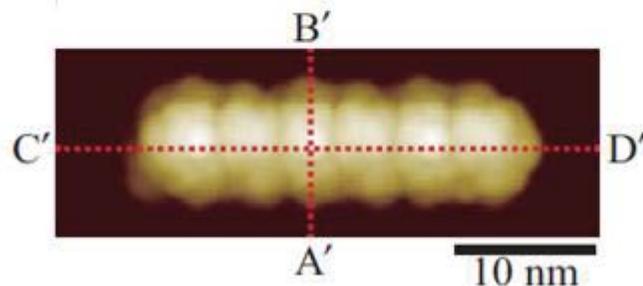
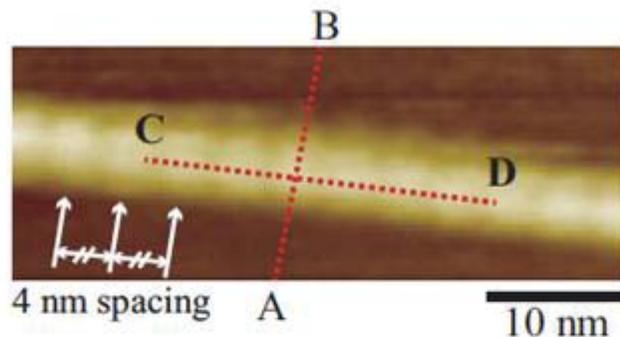
CG 構造最適

MD 分子動

DFTB 量子力学的SPM像シミュレータ

液中のtubulinのFM-AFM実験観察画像

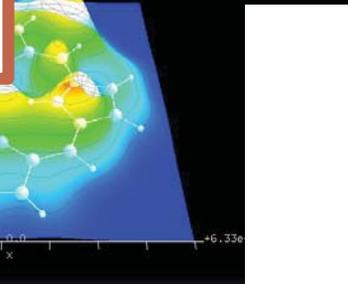
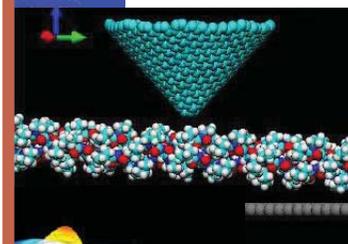
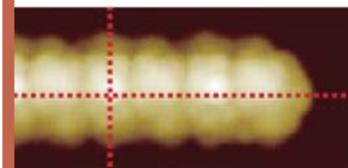
H.Asakawa, et al. Biophys J. 101(5), 1270-8 (2011)



GeoAFMシミュレーション画像

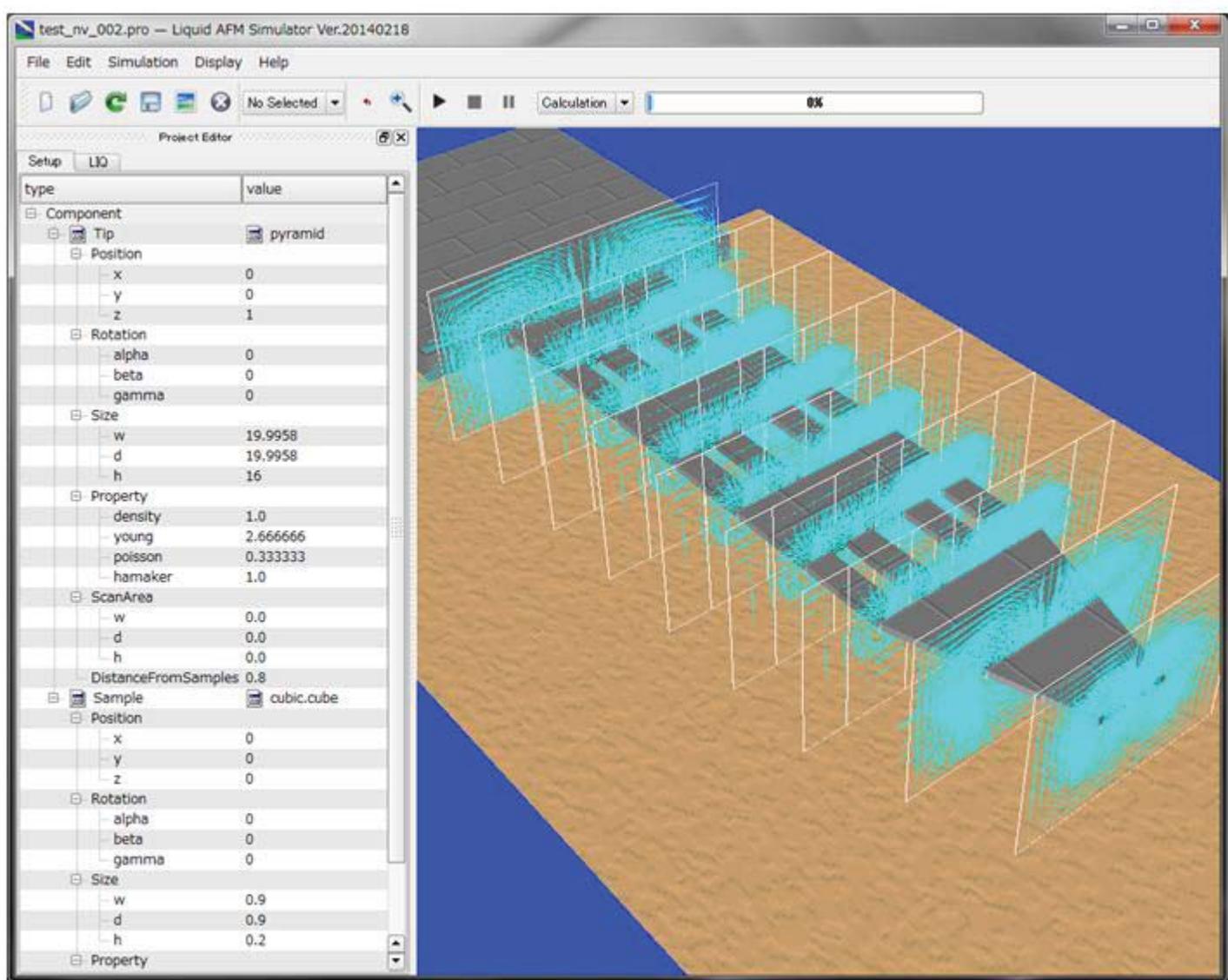
最適推測
探針構造

最適推測
試料構造



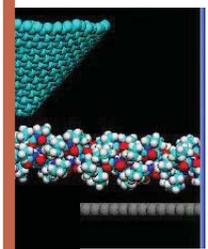
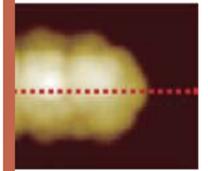
STM, AFM, KPFMのシミュレーションを量子力学によって行う。DFTBのパラメータがまだ不足。

- SPM
- 8個の
- Analy
- SetM
- GeoA
- FemA
- LiqAF
- CG
- MD
- DFTE



最適推測
探針構造

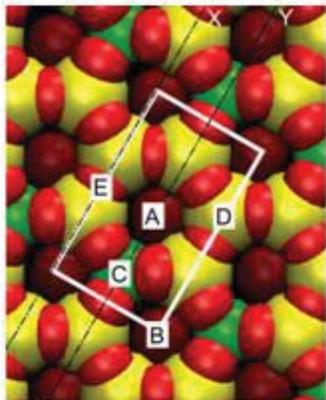
最適推測
試料構造



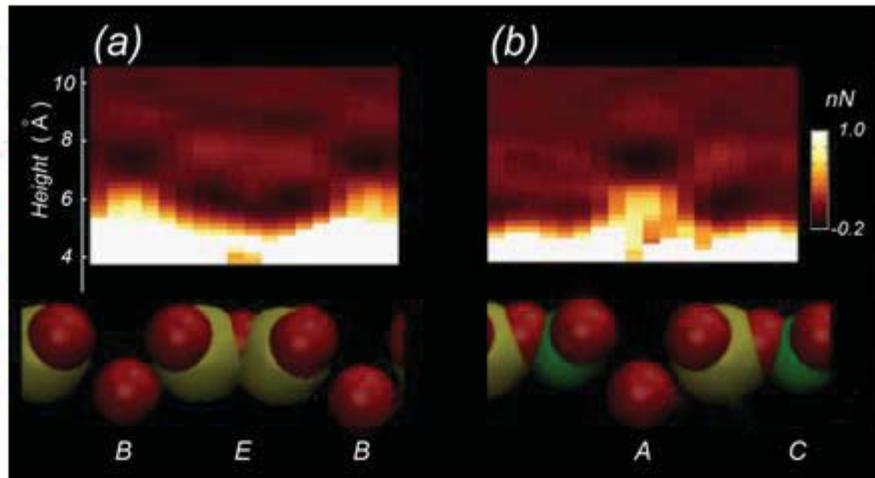
LiqAFMで、多数の孔の開いたカンチレバーの水中での動きをシミュレーションしている様子

によって行う。DFTEのハブ機能がまた不足。

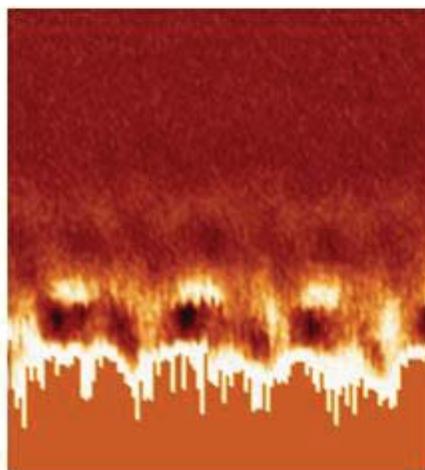
MDによる、水とマイカ(白雲母)表面の界面シミュレーション



Al(緑)、Si(黄)、O(赤)の原子から成るマイカ単層表面



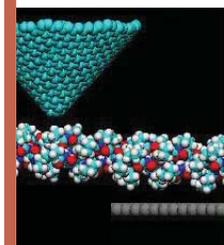
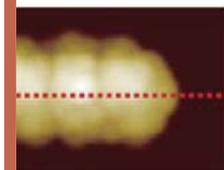
マイカ表面に垂直な面の各位置で探針モデルが感じる力を可視化した図[M. Tsukada, et al., J. Vac. Sci. Technol. B 28, C4C1 (2010)]



AFM実験画像
山田啓文准教授
(京都大学工学研究科)

最適推測
探針構造

最適推測
試料構造



SPM(赤)

8個のソ

Analyz

SetMo

GeoAF

FemAF

LiqAFM

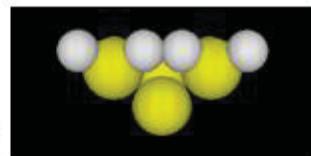
CG

MD

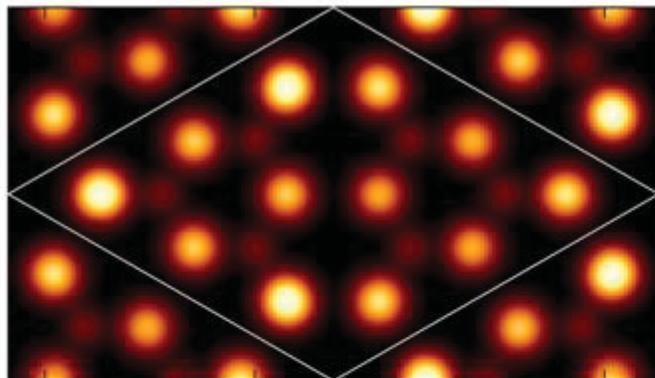
DFTB

→ S
によって行う。DFTBのパラメータがまだ不足。

DFTBによるSi(111)-7x7 DAS構造のSTMシミュレーション結果

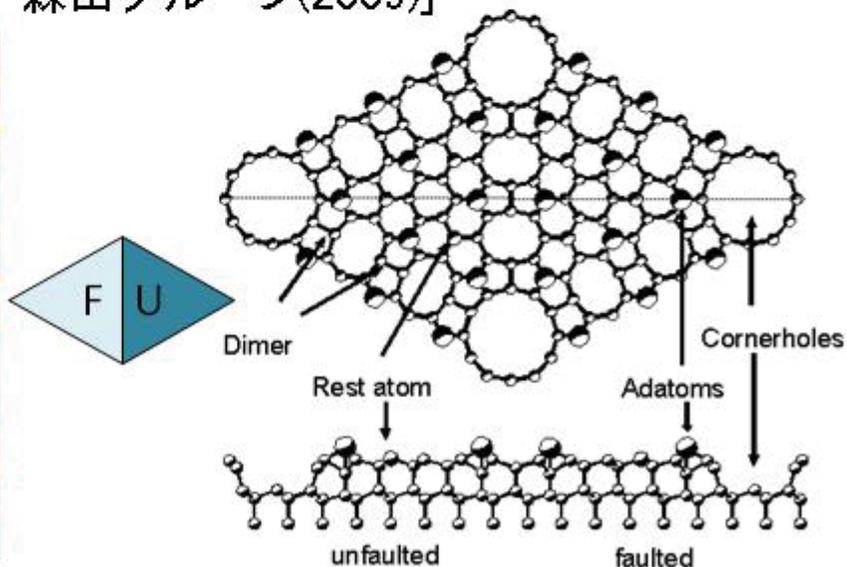
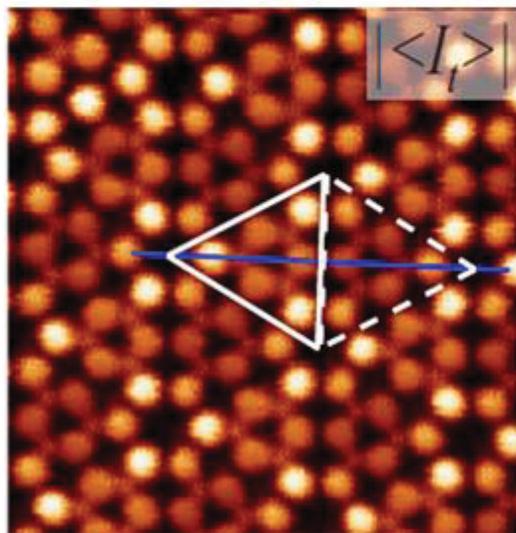


Si4H9 tip
探針高さ: 4.0[Å]



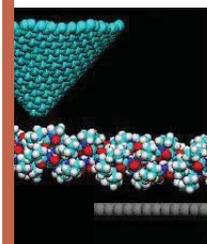
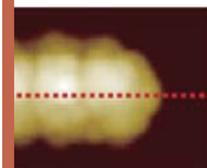
F領域とU領域の明るさの違い、
および、レストアトムがわずかに見えることを再現

STM実験画像[大阪大学 森田グループ(2009)]



最適推測
探針構造

最適推測
試料構造



SPM(

8個のソ

Analy

SetMe

GeoA

FemA

LiqAF

CG

MD

DFTB

によって行う。DFTBのパラメータがまだ不足。



SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ

8個のソルバの集合体

Analyzer 実験データ画像処理プロセッサ

SetModel 試料と探針の原子モデル作成

GeoAFM 高速相互予測AFMシミュレータ

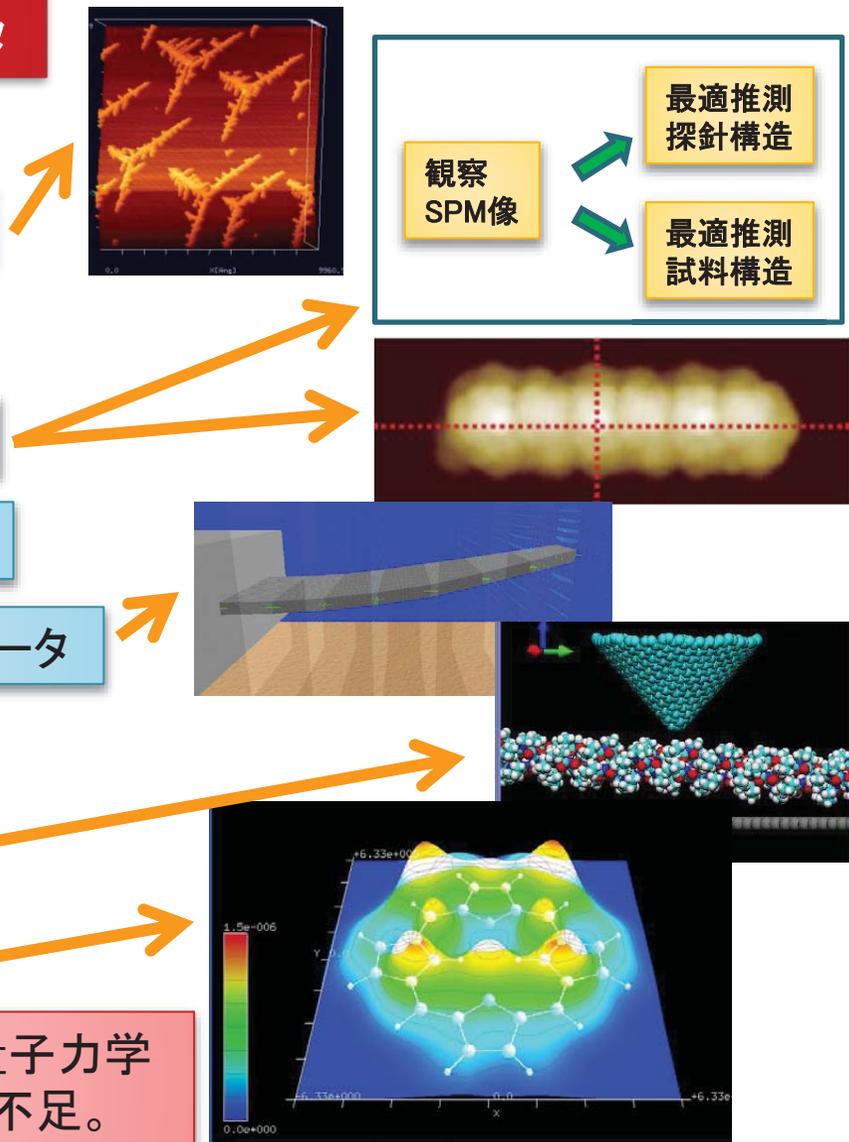
FemAFM 連続弾性体AFMシミュレータ

LiqAFM 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ

CG 構造最適化AFM像シミュレータ

MD 分子動力学AFM像シミュレータ

DFTB 量子力学的SPM像シミュレータ



STM, AFM, KPFMのシミュレーションを量子力学によって行う。DFTBのパラメータがまだ不足。

SPM観察では、実験画像解釈が自明でないことが多い

理論シミュレーション結果の参照が必要(SPM実験研究者のニーズ)

本SPMシミュレータは、以下の三つの機能を同一のプラットフォーム上で実現！

[1] 理論的シミュレーション計算機能

DFTB法(密度汎関数法に基づく強束縛法)の採用

→ STMトンネル電流像・AFM周波数シフト像を高精度で再現

[2] 実験画像データ処理機能

国内外の主要SPM装置メーカーのデータ出力形式をサポート

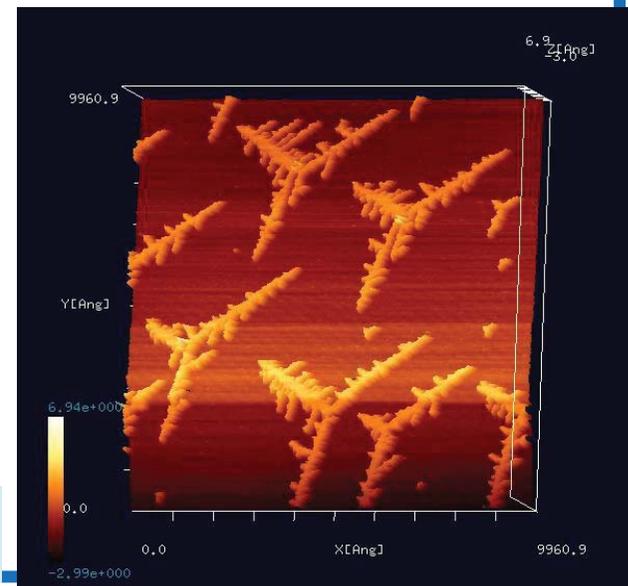
→ 実験画像の生データを直接読み込み可能

実験データ画像からの、探針形状推定機能、
フーリエ解析機能を装備

[3] 理論シミュレーション結果と実験画像
データの比較機能

→ 各種デジタル画像処理機能を用意
ユーザー自身が各種物理パラメータを
推定可能

[東京大学生産技術研究所 福谷研究室提供
(Ir結晶表面上にAuを蒸着したフラクタル島状構造)]



2. プロトタイプ機実用化の際、課題・問題点と、その解決策

DFTBソルバ: DFTB法(密度汎関数法に基づく強束縛法)の採用

- 最適化された原子軌道による重なり積分を**原子間相互作用パラメータ**としてデータベース化
- 電子状態を計算する際にパラメータを用いることで、第一原理計算と比較して、少ない計算時間・メモリで高精度の近似計算が可能

結晶のバンド構造は、電子状態を決めるための重要な指標

元素の原子軌道を最適化

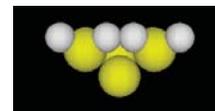
原子相互間作用パラメータの作成

実験結果
[大阪大学 森田グループ(2009)]

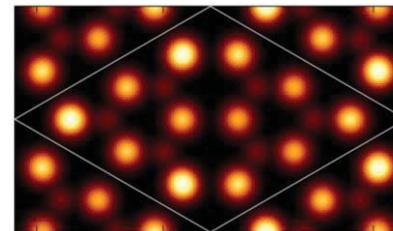
該当元素を含む典型的な単体・化合物結晶でバンド構造を出来るだけ良く再現

技術的課題:

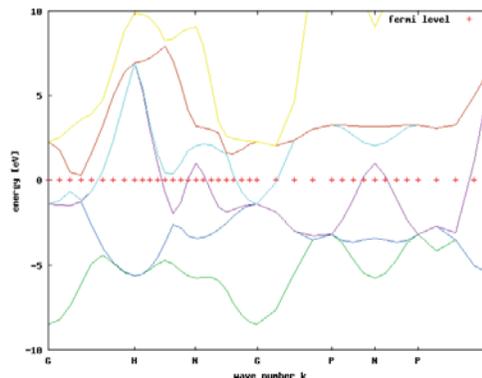
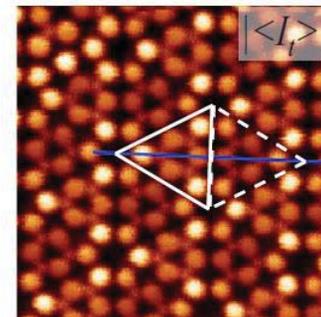
使用元素の原子間相互作用パラメータを準備することが必要(現時点で12種類のみ)



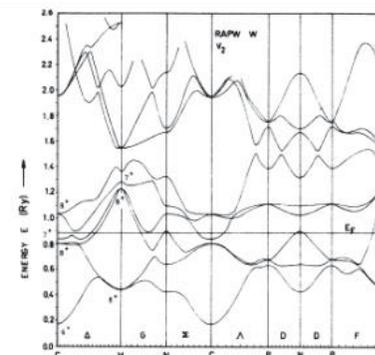
Si4H9探針



Si(111)7x7DAS構造のDFTBシミュレーション結果



最適化された軌道によるタングステン単結晶のバンド計算の結果



先行論文によるタングステン単結晶のバンド計算

本プロジェクトの目的

新たに43種類の元素を加え、原子間相互作用
パラメータのデータベースを構築する

対象元素

希土類	Y, La, Ce, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb
遷移金属	V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zr, Nb, Mo, Tc, Ag, Re
一般的な無機材料に含まれる元素	Li, Na, Mg, K, Ca, Zn, Ga, Ge, As, Se, In, Sn, Cs, Ba, U
有機半導体材料に含まれる元素	F, S, Cl, Br, I

パラメータ増強のニーズ

有機・無機半導体素子・特殊合金・触媒・バイオ系高分子など、様々な分野の研究者に使ってもらえる**実用性の高い魅力的なソフトウェア**へと充実させる

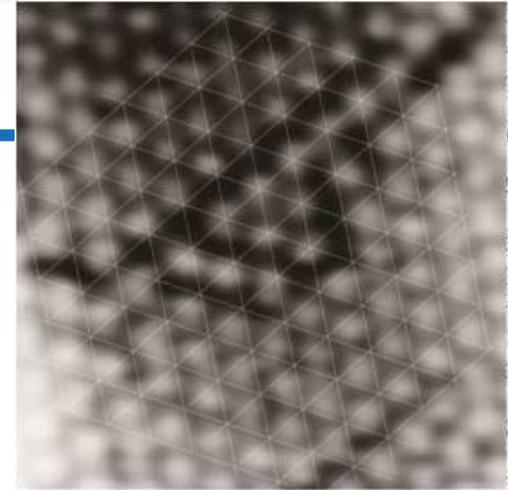
- [1] 無機材料研究における対象試料例
⇒ 遷移金属 Fe(鉄)、Cu(銅)、Mn(マンガン)
⇒ 希土類 Yb(イッテルビウム)、Y(イットリウム)
⇒ その他の元素 Ge(ゲルマニウム)、マグネシウム(Mg) など
- [2] 原子カプラント関連研究における対象試料例
⇒ U(ウラン)、Ce(セリウム) など
- [3] 有機半導体材料系研究における対象試料例
⇒ F(フッ素)、S(硫黄)、Cl(塩素)、Br(臭素) など
(例)コバルトフタロシアニン(CoPc)薄膜を、金(111)面上や銅(100)上に形成し、STM観察



ある有力国内SPMメーカーは、自社製品に本シミュレータをバンドルして販売することを検討しているが、それにはDFTBソルバで使用可能な元素の種類を多数取りそろえることが必須条件となっている

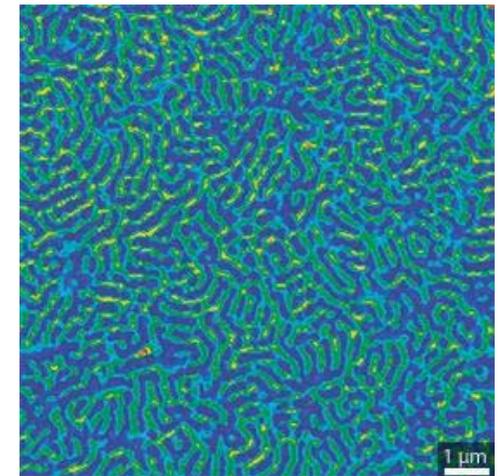
3. 実用化されたプロトタイプ機により解決できる課題・問題点

- STMによる特殊合金表面の構造解明
例) Mg3元合金のシンクロ型LPSO相
希土類元素と遷移金属を溶質原子に用いた
Mg合金は、軽量、高強度、高延性を示すため、
理論・実験両面からの構造解析、特に、
劈開面のSTM観察が求められている



LPSO (Synchronized Long Period Stacking Ordered)相のSTM観察[S. Kurokawa, A. Yamaguchi and A. Sakai, Materials Transactions 54, 1073-1076 (2013)]

- ソフトマテリアル系材料
ナノバイオ関連分野において、AFMによる
実験解析が増加傾向
DNAなどの生体物質のAFM実験画像を
時系列的に測定、高分子の粘弾性をAFM測定など



高分子薄膜をAFM観察し、粘弾性を可視化した図[D. Wang et al., Macromolecules 44, 8693-8697 (2011).]

- 有機半導体分野
有機半導体表面に金属薄膜を形成
界面の様子をSPM観察

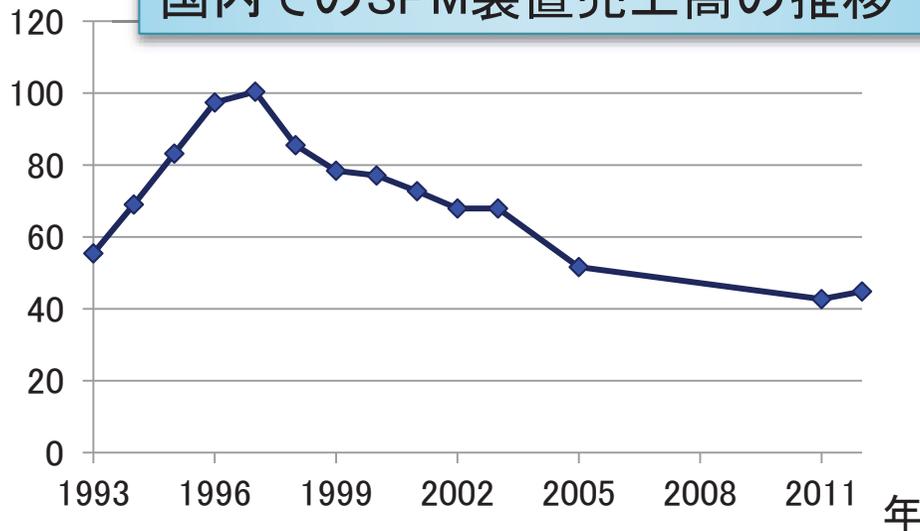
5. 実用化された機器の波及効果・市場規模

- 様々な分野でのSPM実験の普及に寄与
無機・有機材料、化学、薬学、バイオサイエンス分野など
シミュレーション結果を指針として、SPM実験を進めることが可能となる
→ 実験研究者にとって、理論シミュレーションの敷居を低くする
面倒な理論計算を、気軽に手が届く範囲に
- 薬学・バイオ分野でのSPM利用が著しく拡大
AFM(原子間力顕微鏡)を使って、タンパク質・DNAなどの生体物質を、
液体中でナノスケール観察
→ 将来的には、細胞の働きをAFM観察可能へ
- 世界標準化により、SPM装置の産業界での利用促進
「生産現場」においてSPMが、ナノスケール検査・製造装置として浸透
ナノデバイス製造業から、薬品・バイオ関連産業まで、幅広い需要

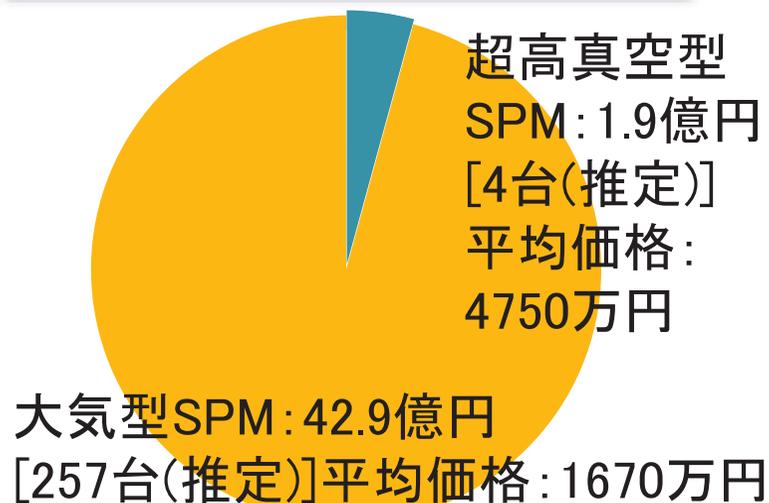
将来的には、スピン偏極STM(走査型トンネル顕微鏡)シミュレータの開発へ
→ さらなる展開が可能(局所的な磁場を計測することができるSPM)
ナノスケールでの磁化計測、スピン偏極の振動観察へ

億円

国内でのSPM装置売上高の推移



2012年国内販売SPMの比率



国内シェア主要メーカー(青:国内メーカー)

超高真空型SPM: アルバック・ファイ、ユニソク、日本電子

大気型SPM: 日本ビーコ、SIIナノテクノロジー、日本電子、島津製作所、東陽テクニカ

超高真空型SPM → 無機材料、有機半導体関連

大気型SPM → ソフトマテリアル、バイオ関連

国産SPM装置は国内シェア全体の約60%程度

国内で販売される国産SPM実験装置の台数は、年間約180台(推定)

国産SPM実験装置にSPMシミュレータをバンドルさせた場合、年間約180本程度の販売が見込める



海外SPM装置メーカーとの提携で、さらなる販売数の増加が期待できる

6. 知的財産の状況

SPMシミュレータでは、以下の二つの特許化された技術が使われている

- 特願2006-256169(H18.9.21): 特許番号第4866695号
発明者: 渡辺尚貴、塚田捷、田上勝規
探針形状データと、試料の原子配列データを元に、幾何学的な計算方法に従って、AFM画像データを高速シミュレーションする方法
SPMシミュレータGeoAFMソルバで採用されている
- 特願2007-279315(H19.10.26): 特許番号第5148969号
発明者: 渡辺尚貴、塚田捷
液体中でAFMによって試料を観察する際の、弾性体であるカンチレバーのたわむ様子などを、弾性体・流体方程式に従って数値計算シミュレーションする方法
SPMシミュレータLiqAFMソルバに採用されている

将来的には、以下の要素技術の権利化を検討したい考えである

- スピン偏極STMシミュレータ:
磁性薄膜をコーティングした探針で、磁性体試料表面を走査
スピン依存したトンネル電流を計測
- 原子間相互作用パラメータ・データベースそのものを、特許として権利化出来ないか?  DFTB数値計算の理論研究者にデータベースの需要はあるか?

SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ用パラメータ・データベース構築

質問時対応用資料

原子間相互作用パラメータの作成方法について

- DFTB法では、電子状態を展開する際に、原子の軌道を模した擬原子軌道を用いる
- 計算上は擬原子軌道を直接使用するのではなく、擬原子軌道から作成されるホッピング積分、重なり積分などを用いて計算を行う
- 電荷の移動を計算するため、エネルギーが収束するまで反復計算(自己無撞着計算)を行う

$$\langle i | H | j \rangle = H_{i,j} = H_{i,j}^0 + \frac{1}{2} S_{i,j} \sum_{a \in \text{atom}} (\gamma_{\alpha(i)a} + \gamma_{\alpha(j)a}) \Delta q_a$$

$$E = \sum_n f_n \langle \psi_n | H^0 | \psi_n \rangle + \frac{1}{2} \sum_{a,b \in \text{atom}} \gamma_{ab} \Delta q_a \Delta q_b$$

$H_{i,j}^0$: ホッピング積分、 $S_{i,j}$: 重なり積分

γ_{ab} : ハバードパラメータと原子 a, b の距離から算出される値

$\alpha(i)$: 基底 i が属する原子、 $\Delta q_a = q_a - q_a^0$: 原子 a の電荷の参照電荷からのずれ

f_n : n 番目の状態の占有数、 $|\psi_n\rangle$: n 番目の電子状態

元素と元素の組に対するホッピング積分、重なり積分、元素に対するハバードパラメータ、軌道のエネルギーをデータベース化したものが**原子間相互作用パラメータ**

結晶のバンド構造は、電子状態を決めるための重要な指標



該当元素を含む典型的な単体・化合物結晶でバンド構造を出来るだけ良く再現するよう原子間相互作用パラメータの元となる擬原子軌道を最適化

原子間相互作用パラメータの作成の手順(アルゴリズム)

価電子、カットオフ距離、軌道の電子数などの入力値を指定して擬原子軌道を作成 (OpenMXを使用)



作成した擬原子軌道を用いて重なり積分などを計算することで、原子間相互作用パラメータを作成する(「パラメータ作成ツール」を使用)



作成したパラメータを用い、DFTBソルバのバンド計算機能でバンド計算(「パラメータ作成ツール」を使用)



先行論文のバンド構造と比較 バンド構造を再現しているか？

YES

パラメータ完成



NO

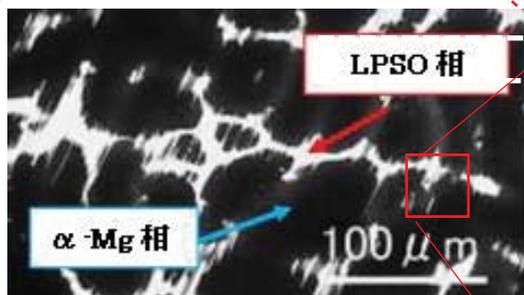
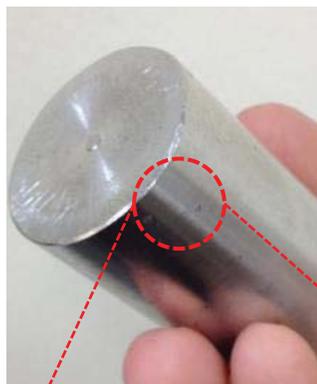
SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ用 パラメータ・データベース構築 補足資料

原子～ナノスケールの構造の重要性

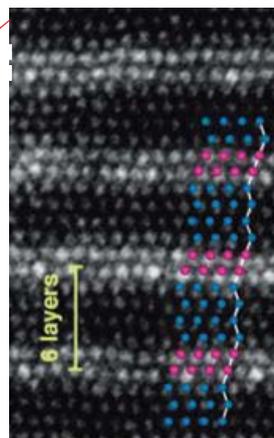
Mgを主成分としたMg—遷移金属—希土類三元系合金

特徴

- ・軽量 …… Alの約2/3(構造用金属材料で**最も軽量**)
- ・高強度 …… 降伏強度~512MPa(**超々ジュラルミンに匹敵**)
- ・高延性 …… 伸び率~6% → **良加工性**



Mg-LPSO型合金組織の電子顕微鏡像



希土類, 遷移金属濃化層

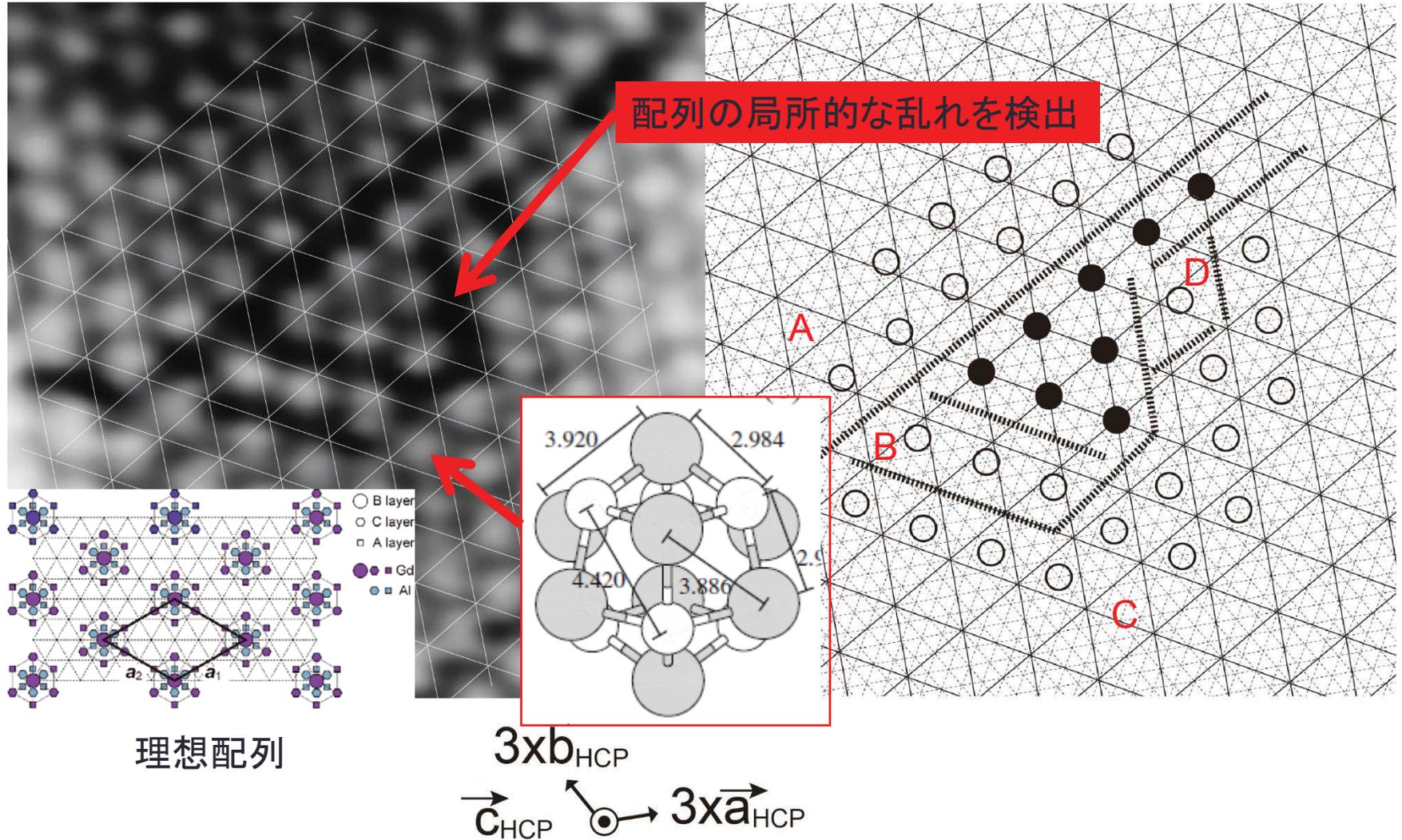
原子～ナノスケールの構造が機能発現の鍵

LPSO相の透過型電子顕微鏡像

単独で原子の配列を完全に明らかにできる手法は存在しない

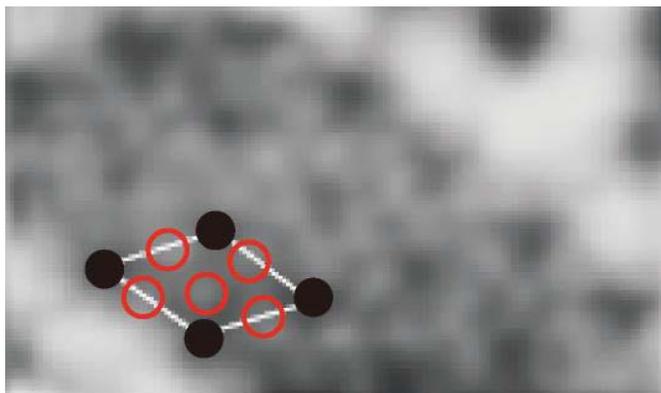
	空間分解能	元素識別能力	局所的な構造の検出
透過型電子顕微鏡 (TEM)	◎	○	△ 電子ビームの方向の 平均像
(3次元)アトムプローブ法 (AP)	△ サブナノメートルの分解能に 留まる	◎	○
走査プローブ顕微鏡	○～◎	△	◎◎

STM(走査トンネル顕微鏡)によるLPSO合金の観察例

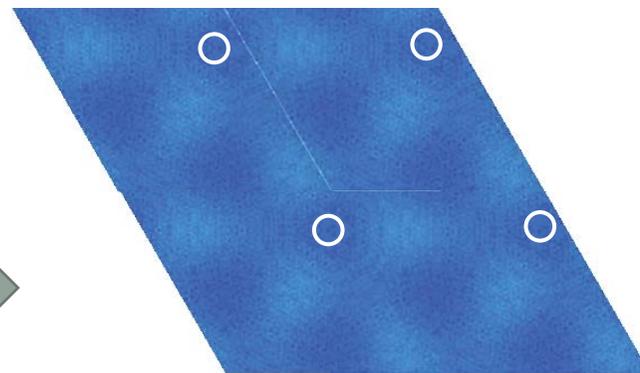
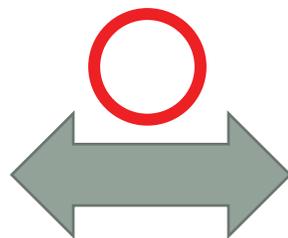


STM観察によって初めて明らかになった

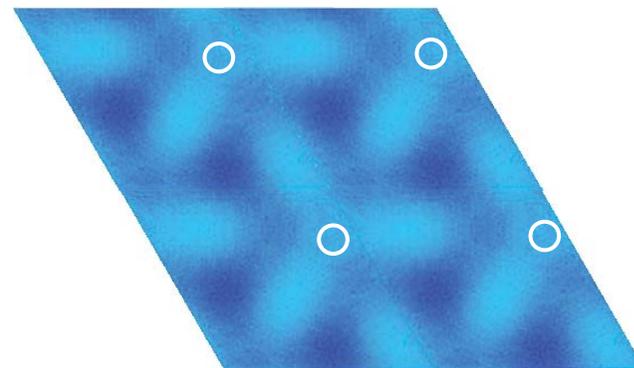
シミュレータの必要性



STM像

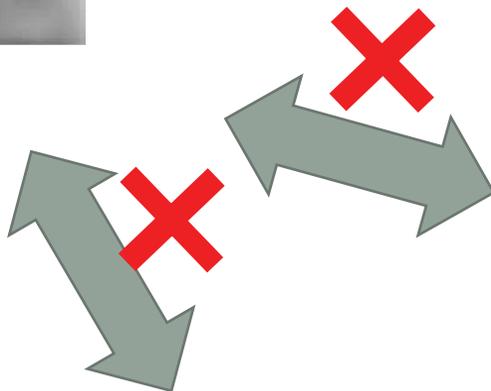


Mg 2層表面



Mg 1層表面

従来のシミュレーションは非常に時間がかかる



Outer Y-Zn 表面

走査プローブによる材料・構造評価

このサイクルを早く回すことが不可欠

走査プローブ (SPM) による材料評価

STMによる形状観察
&
局所状態密度測定

理論計算によるSPM像
の予測

試料表面作製技術
プローブの誘導手法

構造・組成情報

より高速な計算手法
DFTB法 (密度汎関数法に基づく
強束縛法)

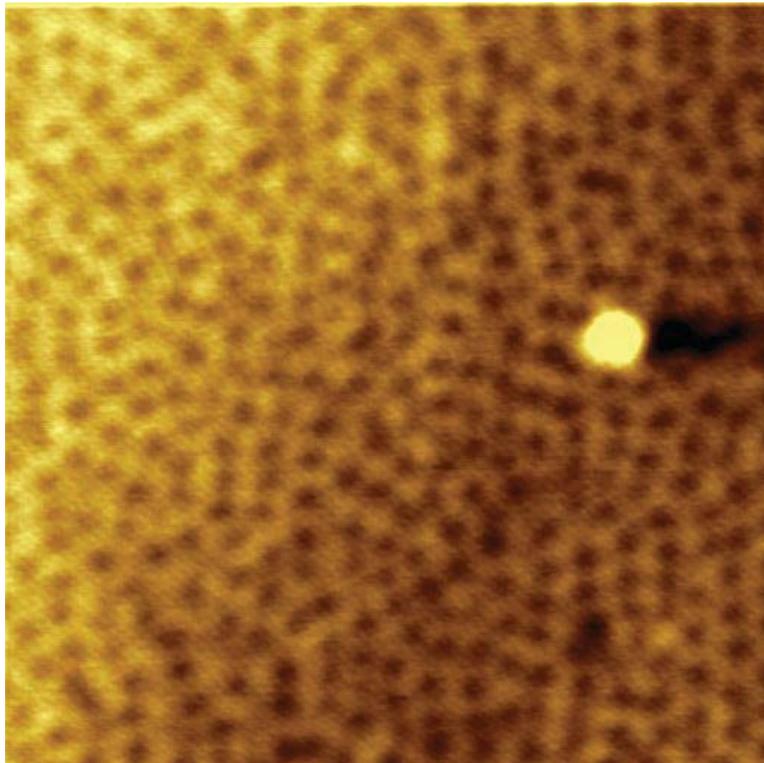
Atom Probe

TEM

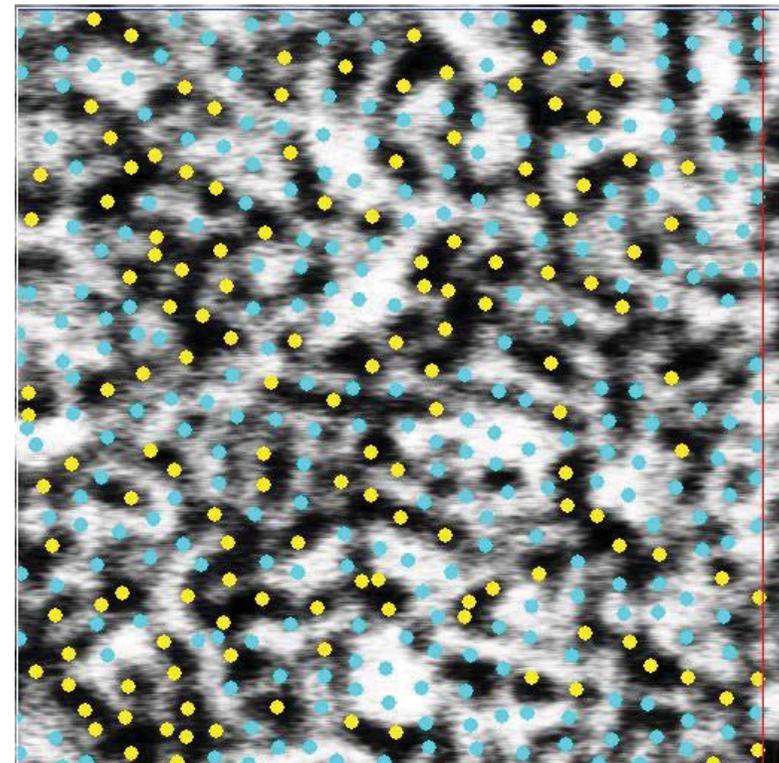
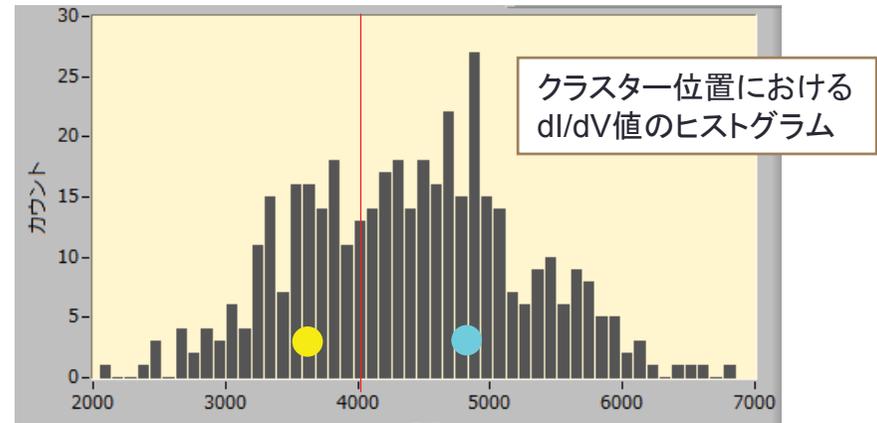
X線, 粒子線回折

STS(局所状態密度測定)の結果

$V_s = 1.6 \text{ V}$, $I_t = 0.2 \text{ nA}$
Scan $30\text{nm} \times 30\text{nm}$
6-9 500°C 保持材

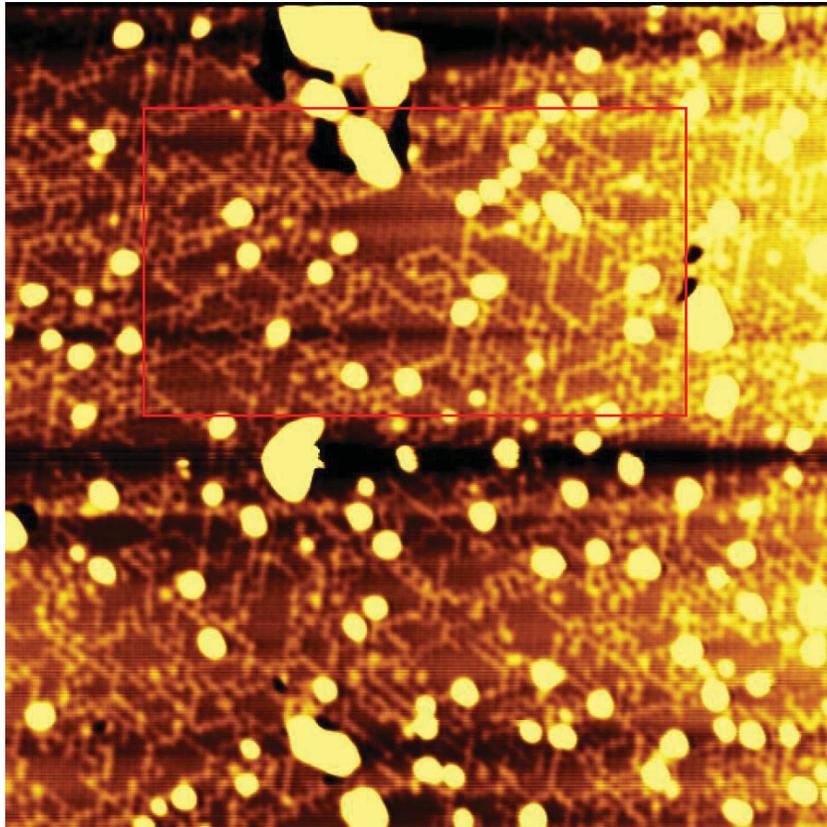


STM像



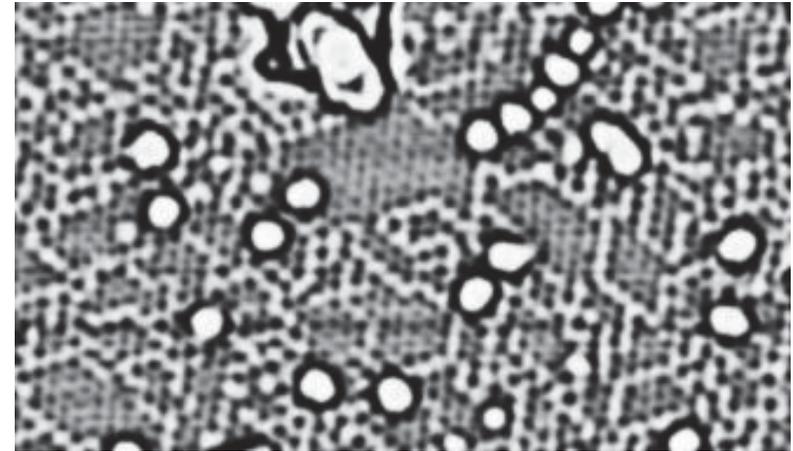
dI/dV map @+1.6V

クラスター配列のドメイン構造

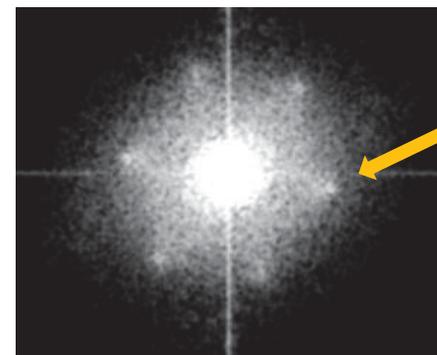


$V_s = +0.6V$, $I_t = 4nA$

ドメインのサイズ = 数nm ~ 10nm



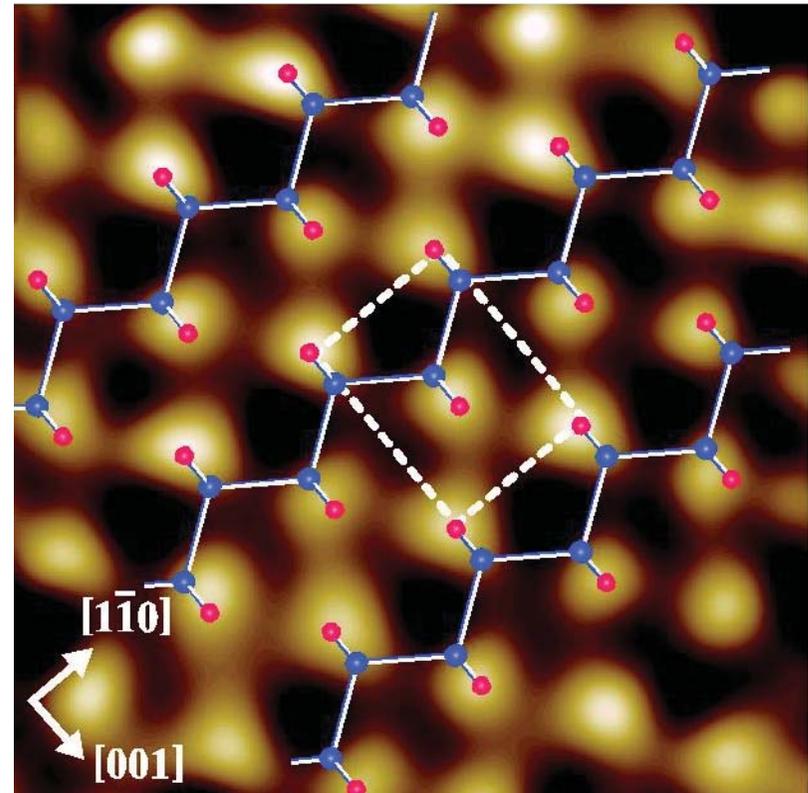
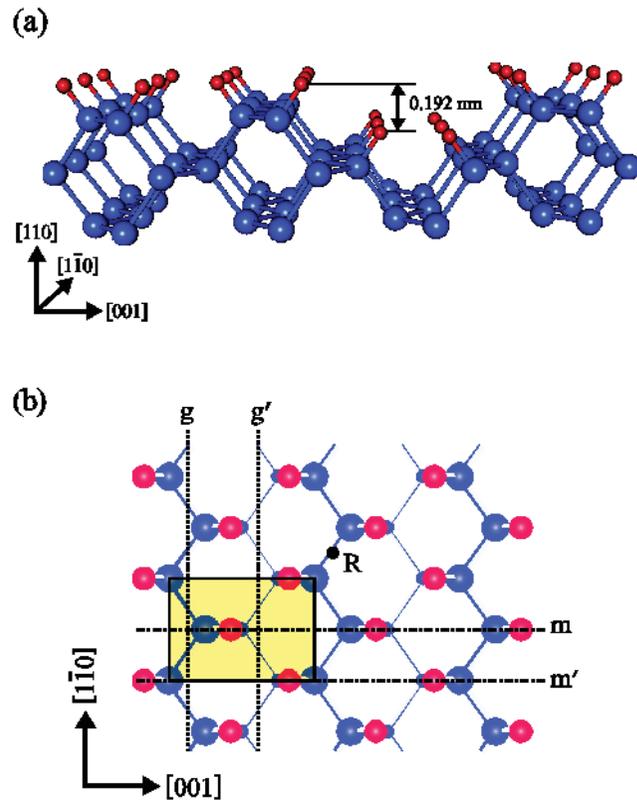
赤枠内の微分表示



クラスター配列から
来る輝点

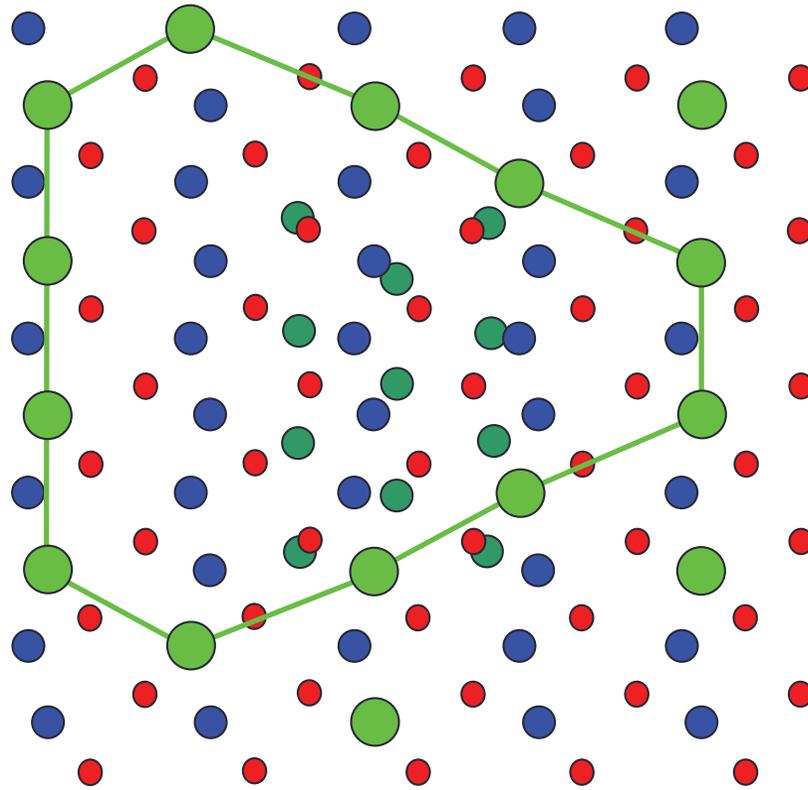
像全体のFFT

H:Si(110)-(1 × 1)



赤丸: H原子
青丸: Si原子

Pt/Si(111)-(7 × 7)

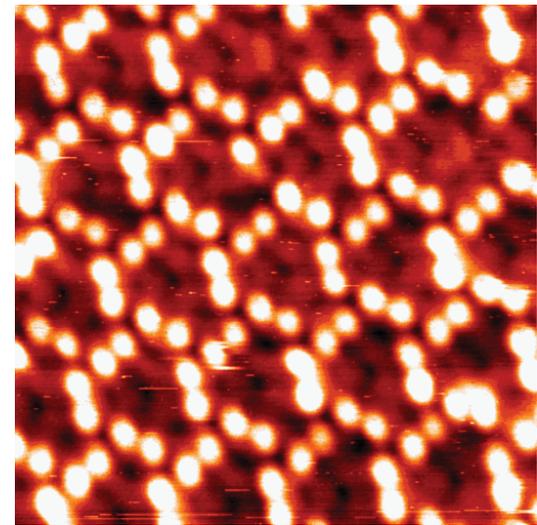
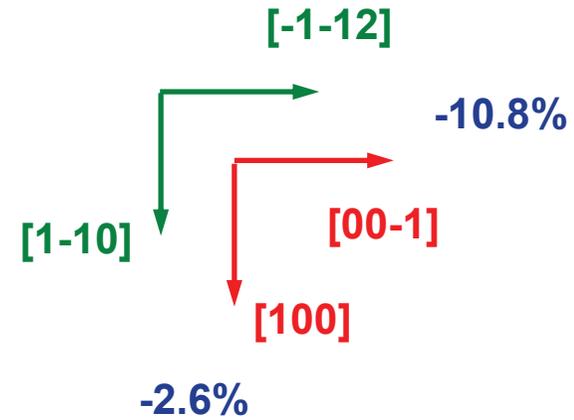


● Si (substrate)

● Pt (PtSi)

● Si (PtSi)

● atom of reconstruction



1 概要

SPM シミュレータのソルバーの一つである、量子論的 SPM 像シミュレータ (DFTB シミュレータ) は、量子力学的な電子状態の計算を元に、表面構造に対する周波数シフト像 (AFM)、トンネル電流像 (STM)、トンネル分光像 (STS)、局所接触電位差像 (KPFM) を計算します。この時、原子間の相互作用などを記述する、計算パラメータファイルを用いて計算を行います。計算パラメータファイルは、計算させたい元素に対して、元素と元素の組全ての二体間パラメータを記述したファイル群よりなっています。例えば、計算させたい系に、珪素 (Si)、炭素 (C)、水素 (H) が含まれているなら、hh, hc, hsi, ch, cc, csi, sih, sic, sisi の合計 $3 \times 3 = 9$ 個の組み合わせのファイル群よりなる、h-c-si という計算パラメータファイルが必要となります。計算パラメータファイルに入っていない元素の組み合わせに対しては、計算を行うことが出来ません。従って、計算パラメータファイルをより多くの元素に対応させていくことが重要になってきます。

計算パラメータファイルを作成するためのツールはあるのですが、多くの入力項目があり、また、作成された計算パラメータファイルが妥当な値を持っているとは限りません。なので、作成された計算パラメータファイルが妥当なものかどうかを検証し、入力項目をいろいろ変えて、トライアンドエラーを繰り返しながら作成していくことになります。

計算パラメータファイル作成の順番は、顧客の要望にもよりますが、今のところ、

- シリコン系: h-c-si, h-n-si, h-o-si, h-si-p
- タングステン系: h-o-w, h-si-w
- 白金系: h-c-pt, h-si-pt
- 金系: h-c-au, h-si-au
- チタン系: h-si-ti-o, w-ti-o, au-ti-o, pt-ti-o
- アルミナ系: h-si-al-o
- ルテニウム系: w-ru-o, au-ru-o, pt-ru-o

という順序で作成する予定になっています。

2 DFTB の計算方法

DFTB シミュレータは密度汎関数理論に基づく強束縛計算 (DFTB 法、Density Functional based Tight Binding method) という手法を用いて原子構造

の電子状態計算を行います。DFTB 法は密度汎関数法をベースにした計算法で、更に、電子の波動関数を、それぞれの原子に属した擬原子軌道 (Pseudo Atomic Orbital) の和によって記述する、強束縛法です。エネルギーが収束するまで反復して計算を行います。内殻電子の電子状態に関しては計算を行わず、そのかわりに、擬ポテンシャルという、擬原子軌道に影響を及ぼすポテンシャルと見做します。

DFTB シミュレータでは、元素 A と、その擬原子軌道 i 、元素 B とその擬原子軌道 j に対して、ホッピング積分 $\langle i|H|j \rangle$ 、重なり積分 $\langle i|j \rangle$ を計算パラメータファイルに保持して、そこから値を読み込むことで計算の高速化を図っています。現在、シミュレータは s 軌道、p 軌道、d 軌道に対応しています。

計算方法の詳細は、共有フォルダの
`/Data/個人作業用/ogata/SPM/dftb/prmdocuments/documents/`
にある、”DFTBmodelDocument.doc” に記述してあります。

3 計算パラメータファイルの作成手順

計算パラメータファイルの作成は、計算パラメータファイル作成ツールで行うことができます。作成ツールは計算機サーバのみで使用することが出来、他の環境では使用することが出来ません。作成ツールはいくつかのプログラム群からなっていて、計算機サーバの

`/home/ogata/amabin/`

フォルダにあるプログラム群を、自分のアカウントでパスが通ったフォルダにコピーして使って下さい。ソースコードは

`/home/ogata/amasrc/work/`

に置いてあります。オリジナルのものは

`/home/amasago/bin/`

に置いてあります。

作成ツールの使用方法は、共有フォルダの
`/Data/個人作業用/ogata/SPM/dftb/prmdocuments/documents/`

にある、”DFTB 法のパラメータ作成方法について.doc” というファイルに記述してあります。手順はドキュメントに書いてあるとおりなのですが、大まかに言うと、

1. `adpack` で擬ポテンシャル、擬原子軌道を作成する。
2. `openmx` で二量体のホッピング積分、重なり積分を計算する。
3. `mkdftbset.exe` により、必要なパラメータを抜き出して、ファイルに収める。

ということを行っています。adpack で擬ポテンシャル、擬原子軌道を作成する際には多くの入力項目があり、ほぼこの入力項目によって計算パラメータファイルが決まることになるでしょう。adpack, 及び、openmx については、共有フォルダの同じフォルダにマニュアル、adpack2.2.pdf、openmx3.6.pdf を置いたので参照してください。

どの電子を価電子にするか、擬ポテンシャルのカットオフ径をどれくらいにするのか、擬原子軌道のカットオフ径をどれくらいにするのか、が重要になってくると思います。擬ポテンシャルを作成する際に、物理的に意味の無いゴースト状態 (ghost states) が生じる可能性があるので、擬ポテンシャル作成の際は 'ghost.check' は 'on' にしておいた方がいいと思います。

4 作業内容

計算パラメータファイルを作成していただくのですが、作成された計算パラメータが妥当なものであることを保証する必要があります。そのためには、計算パラメータを用いて計算した結晶、或いは、表面のバンド構造が、フェルミレベル付近に於いては本来のバンドを再現している必要があります。なので、バンド計算をして頂き、バンドを再現する計算パラメータを作成していただきます。作成したい計算パラメータの元素に対して、

1. 単結晶のバンド図の再現
2. 化合物のバンド図の再現
3. 表面のバンド図の再現

を行って、計算パラメータを作成してください。

5 計算の手順

計算するためのシミュレータは `/home/ogata/share/` に置いた、`tipforce.exe` というファイルです。`tipforce.exe` をパスの通ったディレクトリに置き、同じディレクトリに計算パラメータファイルを置いてください。そして、計算するためのディレクトリに、

1. プロジェクトファイル (*.pro)、
2. チップの構造ファイル (tipTemp.xyz)、
3. 計算させたいサンプルの構造ファイル (sampleTemp.xyz)

の3つを用意して、

tipforce.exe (プロジェクトファイル) tipTemp.xyz sampleTemp.xyz

として計算させてください。どういう結晶構造の計算を行うのか、並進ベクトルはどうとるのか、などの計算条件はプロジェクトファイルに記述します。プロジェクトファイルについては、共有フォルダの

Data/個人作業用/ogata/SPM/dftb/prmdocuments/documents

にある、“spm_reference_manual.pdf”、“Tutorial.pdf”を参照してください。

DFTB シミュレータにバンド構造を計算させる機能を搭載させる予定はないのですが、このプログラムは、ソルバー選択の部分、つまり、プロジェクトファイルの“mode options”の部分でバンド計算をする機能を選択することができます。DFTB_AFM(或いは、DFTB_STM,DFTB_STS,DFTB_KPFFM)と記述されている部分を、手動で次のいずれかに書き換えて計算してください。

- BAND_BCC: bcc(体心立方格子)
- BAND_FCC: fcc(面心立方格子、或いは、ダイヤモンド型結晶)
- BAND_HCP: hcp(稠密六方格子)
- BAND_SRECTANGLE: 表面 (2次元、2つの並進ベクトルが長方形をなす)
- BAND_SLAB: スラブモデル (3次元、3つの並進ベクトルが直方体をなす)
- BAND_ISOLATED: 孤立系 (周期条件はなく、分子単独の固有値を求める)

同じ share ディレクトリに、例となる“si001_p2x2”、“si001_c4x2”を置いたので参照してください。計算がうまくいけば“log.band.dat”というファイルが出来るので、同じ share ディレクトリに置いた “mkband.sh”、“plvQ.sh” スクリプトを使用して、band.png という画像ファイルに出来るので、参照することが出来ます。

また、openmx にバンド計算をする機能があるので、擬ポテンシャル、擬原子起動を計算した段階で、openmx の機能を使ってバンド計算する事も出来ます。openmx でのバンド計算でバンド構造が再現できていないと、DFTB シミュレータを使って計算してもバンド構造は再現できないと思います。

DFTB計算パラメータ作成手順

- 使用可能となるDFTB計算パラメータのリスト
- DFTB計算パラメータの作成手順
- 作業量の軽量化
- DFTBパラメータ作成の高速化
- 担当者振り分け表
- パラメータ作成ツールの検証

使用可能となるDFTB計算パラメータのリスト

旧仕様のDFTBパラメータ: 19種

h-c-si, h-n-si, h-o-si, h-si-p, h-o-w
h-si-w, h-c-pt, h-si-pt, h-c-au, h-si-au
h-si-ti-o, w-ti-o, au-ti-o, pt-ti-o, h-si-al-o
h-si-ru-o, w-ru-o, au-ru-o, pt-ru-o

書式を変換
(小方)

使用可能元素: 12種類

H, C, N, P, Al, Si, Ti, Ru, W, Pt, Au, O

擬ポテンシャルファイルと
擬波動関数ファイルの
書式を変換 (篠塚)

新仕様のDFTBパラメータ: 65種

旧19種:

h-c-si, h-n-si, h-o-si, h-si-p, h-o-w
h-si-w, h-c-pt, h-si-pt, h-c-au, h-si-au
h-si-ti-o, w-ti-o, au-ti-o, pt-ti-o, h-si-al-o
h-si-ru-o, w-ru-o, au-ru-o, pt-ru-o

追加46種:

H-C-Si,	H-N-Si,	H-O-Si,	H-Si-P,
N-O-Si-H,	N-H-O-C-Si,	N-H-C-Si,	C-N-H-Si,
C-N-H-Au,	C-N-H-Cu,	N-H-C-O-Al-Si,	N-H-C-O-Al-Au,
N-H-C-O-Al-Cu,	C-H-S-Si,	C-H-S-Au,	C-H-S-Cu,
F-C-H-Si,	F-C-O-H-Si,	C-H-O-S-N-Si,	H-C-Cl-Si,
H-C-O-Cl-Si,	H-C-Br-Si,	H-C-O-Br-Si,	H-C-I-Si,
Na-I-H-Si,	Mg-Si-H,	Mg-Al-Si-H,	Mg-W,
Mg-Al-W,	Ag-Bi-Si-H,	Ag-Bi-W,	N-Al-H-Si,
Ge-H-Si,	Ge-W,	Ge-Au-Si-H,	Ge-Au-W,
Ga-As-W,	Ga-As-Au,	N-Ga-W,	N-Ga-Au,
N-Ga-Al-W,	N-Ga-Al-Au,	Ce-As-W,	Ce-As-Si-H,
Ce-P-W,	Ce-P-Si-H,		

使用可能元素: 26種類

H, C, N, P, Al, Si, Ti, Ru, W, Pt, Au,

(11元素、使い回し)

O, S, F, Cl, Br, I, Ge, Ga, As, Na, Ce,

Ag, Bi, Mg, Cu (15元素、新たに計算)

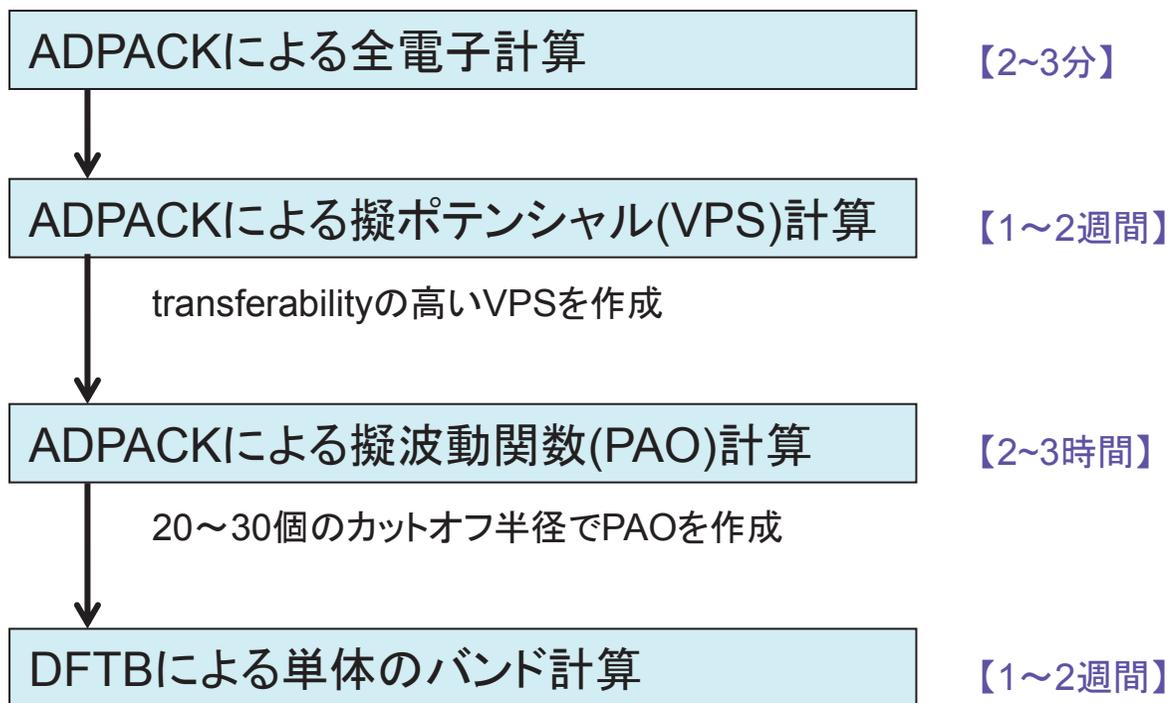
DFTBパラメータ作成ツールはほぼできあがっており、現在最終確認の段階にある。

DFTB計算パラメータの作成手順 1

新たに計算する15元素について

(O, S, F, Cl, Br, I, Ge, Ga, As, Na, Ce, Ag, Bi, Mg, Cu)

【1元素あたりの計算時間】



計算したバンド構造が論文等のバンド構造を再現するようなPAOのカットオフ半径の範囲を見積もる。
数千~数万回のOpenMX計算を要する。

DFTB計算パラメータの作成手順 2

検討すべき化合物について

DFTBによる化合物のバンド計算

【化合物1つあたり1~2週間】

計算したバンド構造が論文等のバンド構造を再現するようなPAOのカットオフ半径の組み合わせを決定する。
数千~数万回のOpenMX計算を要する。

DFTBパラメータ65種について

DFTB計算パラメータを作成

【パラメータ1つあたり数時間】

決定したPAOカットオフ半径を使って、
最終的なDFTB計算パラメータを作成する。

作業量の軽量化

化合物のバンド計算を行う際、
計算済みの元素と新しく計算する元素を一つずつ含むような化合物を選ぶ。

計算済みの元素

H	C	N	P	Al	Si
Ti	Ru	W	Pt	Au	

新しく計算する元素

O	S	F	Cl	Br	I
Ge	Ga	As	Na	Ce	
Ag	Bi	Mg	Cu		

例えば化合物 **AlAs** を選ぶ。

- Al のカットオフ半径は決定済み。
- As のカットオフ半径だけを変え、最適な値を決定する。

続いて化合物 **GaAs** を選ぶ。

- As のカットオフ半径は決定済み。
- Ga のカットオフ半径だけを変え、最適な値を決定する。

※ もし AlAs を介さずにいきなり GaAs のバンド計算をしようとすると、GaとAs両方のカットオフ半径を変化させることになる。
未知の値を2次的に探索しようとすると、計算量が膨大になる。

DFTBパラメータ作成の高速化

ある特定のカットオフ半径でバンド計算用のDFTBパラメータを作るとき、二原子間のホッピング積分や重なり積分の行列を、原子間距離を101ステップに刻んで計算する。

以下の表で示す数値の和だけ、OpenMX計算が行われる。

2成分系の場合

	C	Si
C	101	101
Si	101	101

3成分系の場合

	H	C	Si
H	101	101	101
C	101	101	101
Si	101	101	101

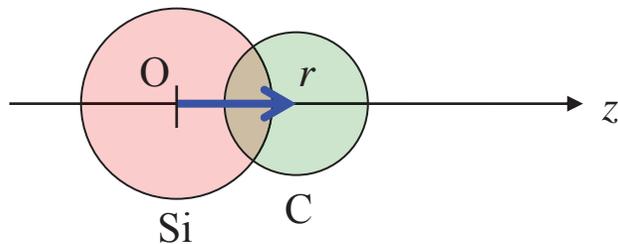
以下の3つの考えに基づき、計算量を大幅に減らすことに成功した。

- (1) 異核二原子間の行列計算を半減
- (2) 重なりなくなる原子間距離での行列計算をスキップ
- (3) 並行処理

(1) 異核二原子間の行列計算を半減

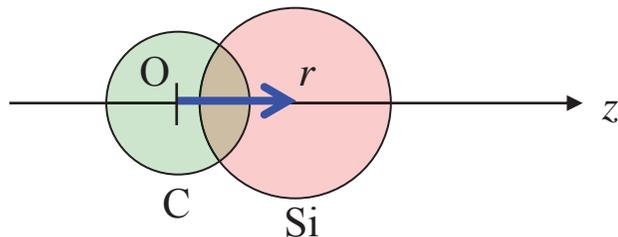
C_Si の行列要素を計算したら、簡単に Si_C の行列要素を作ることができる。
行列要素の基底となる、二つの原子の原子軌道のパリティに注目する。

(A) 原点にある Si $3d_{xz}$ 軌道から、 $z = r$ にある C $2p_x$ 軌道へのホッピング積分



$$\langle \phi_{2p_x}^C(\mathbf{r}) | H | \phi_{3d_{xz}}^{Si}(\mathbf{O}) \rangle$$

(B) 原点にある C $2p_x$ 軌道から、 $z = r$ にある Si $3d_{xz}$ 軌道へのホッピング積分

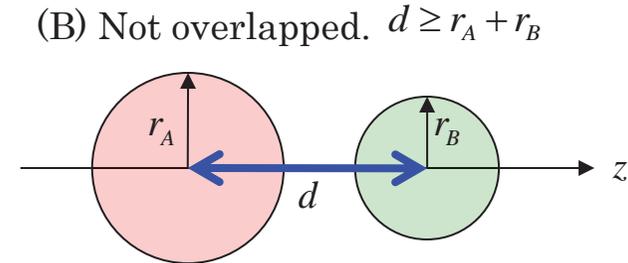
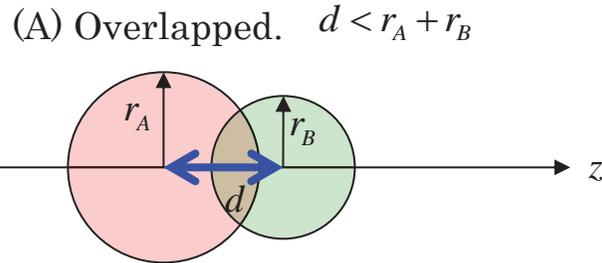


$$\begin{aligned} & \langle \phi_{3d_{xz}}^{Si}(\mathbf{r}) | H | \phi_{2p_x}^C(\mathbf{O}) \rangle \\ &= (-1)^{2+1} \langle \phi_{2p_x}^C(\mathbf{r}) | H | \phi_{3d_{xz}}^{Si}(\mathbf{O}) \rangle \end{aligned}$$

二つの原子の位置を入れ替えたとき、行列要素の値は二つの軌道の軌道角運動量 l_1, l_2 を用いて、符号に $(-1)^{(l_1+l_2)}$ を掛け算した値になる。

(2) 重なりがなくなる原子間距離での行列計算をスキップ

二つの原子のPAOカットオフ半径の和よりも原子間距離が大きいときは、計算する必要がない。軌道の重なりがないので、電子が飛び移る遷移振幅はゼロになる。



例えば原子間距離の最大値を15.0 (a.u.)、H, C, Si原子のカットオフ半径をそれぞれ4.0, 4.0, 5.6 (a.u.)に選んだ場合、行列要素を計算する回数は以下の表のように削減できる。

2成分系の場合

	C	Si
C	101→54	101→64
Si	/	101→75

計算量は404→161、60.1 %減

3成分系の場合

	H	C	Si
H	101→54	101→54	101→64
C	/	101→54	101→64
Si	/	/	101→75

計算量は909→365、59.8 %減

(3) 並行処理

1つのDFTBパラメータを作るとき、OpenMX計算を行う作業ディレクトリの数は

- ◆ 2成分系： 404個
- ◆ 3成分系： 909個
- ◆ 4成分系： 1616個
- ◆ ...

スクリプトを組み、並行処理できるようにした。

4コアで並行処理すれば、計算時間はほぼ4分の1になる。

以上の(1)、(2)、(3)を考慮に入れ、
H-C-Si系で具体的に時間短縮効果を確認した。

	作業ディレクトリ数	並行処理数	計算時間
従来	909	1	2時間19分36秒
高速化	365	4	13分33秒

計算時間として 90.3 % の削減に成功

DFTB原子間作用パラメータ 開発状況

DFTB計算 使用可能元素 (2015/10/07更新)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*1	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	*2	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	113	Fl	115	Lv	117	118

*1 ランタノイド	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
*2 アクチノイド	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

27元素 使用可能 (2015/09/26)

	12 H, C, N, O, Al, Si, P, Ti, Ru, W, Pt, Au
	15 Li, B, F, Na, Mg, S, Cl, Cu, Ga, Ge, As, Br, Ag, I, Bi

32元素 追加開発

	17 Sc, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zn, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Rh, Pd, Re, Ir (遷移金属)
	8 La, Ce , Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm (ランタノイド)
	4 Se, In , Sb, Te (半金属)
	3 K, Rb, Cs (アルカリ金属)

合計59元素を使えるようになる。
Ce と **In** は完了。(～2015/09/26)

2016年末までに
59元素完了

DFTB原子間作用パラメータ 開発状況

スケジュールと進捗

原子間作用計算、バンド計算のための元素ペアのスケジュール (2015/12/09)

篠塚 13元素 La, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Co, Zr, Nb, Mo, Tc, Rh

2015年						
10月	La-La △	La-La △	O-La ✓	B-La ✓		
11月	Mg-La ✓	Gd-Gd ×	O-Gd ✓	N-Gd ✓	Sb-Gd ✓	Cu-Gd ×
12月	Mg-Gd ✓	Tb-Tb ○	O-Tb ✓	Al-Tb △	Tb-Au △	Dy-Dy ○
2016年						
1月	O-Dy ✓	N-Dy ×	H-Dy ○	Ho-Ho ○	O-Ho ✓	P-Ho ×
2月	Si-Ho ✓	Er-Er ○	O-Er ✓	N-Er △	S-Er △	Se-Er △
3月	Tm-Tm ○	N-Tm ×	Cu-Tm △	S-Tm ✓	Co-Co ×	Al-Co ○
4月	N-Co ○	Si-Co ○	Zr-Zr ○	O-Zr ✓	O-Si-Zr ✓	C-Zr ○
5月	N-Zr ✓	Nb-Nb ○	O-Nb ✓	O-Nb ○	C-Nb ✓	C-Nb ✓
6月	Li-O-Nb ✓	Se-Nb ✓	B-Nb ✓	Mo-Mo ○	S-Mo ✓	C-Mo ○
7月	P-Mo ✓	Tc-Tc ○	B-Tc ○	N-Tc ✓	Rh-Rh ○	C-Rh ✓
8月	N-Rh ✓	Al-Rh ○	N-Ho △	N-La △	H-Ho △	H-Er △
9月	H-La △	H-Gd △	Ag-Er △			
10月						
11月						
12月						

荒田 11元素 K, Rb, Cs, Se, Sb, Te, Sc, V, Cr, Mn, Fe

2015年						
10月	K-K ○	K-K ○	K-I ○			
11月	K-Sb ○	B-K ○	Rb-Rb ○	O-Rb ○	H-Rb ○	
12月	Rb-Au ○	Cs-Cs ○	O-Cs ○	Sb-Cs ○	I-Cs ○	
2016年						
1月	Se-Se ✓	H-Se ✓	Se-Ag ✓	Zn-Se ✓	Sb-Sb ✓	
2月	Al-Sb ✓	Ga-Sb ✓	In-Sb ✓	Te-Te ✓	O-Te ✓	
3月	S-Te ✓	Zn-Te ✓	Sc-Sc ✓	O-Sc ✓	O-Sc ✓	
4月	Al-Sc ✓	H-Sc ✓	V-V ✓	O-V ✓	N-V ✓	
5月	C-V ✓	Cr-Cr ✓	O-Cr ✓	C-Cr ✓	S-Cr ✓	
6月	Mn-Mn ✓	S-Mn ✓	Al-Mn ✓	V-Mn ✓	Fe-Fe ✓	
7月	S-Fe ✓	Al-Fe ✓	Ti-Fe ✓			
8月						
9月						
10月						
11月						
12月						

吾妻 3元素 Ni, Zn, Y

2016年						
	Ni-Ni ✓	O-Ni ✓	Al-Ni ✓	C-Ni ✓	Zn-Zn ✓	O-Zn ✓
	S-Zn ✓	Cl-Zn ✓	Y-Y ✓	O-Y ✓	C-Y ✓	C-Y ✓
	S-Y ✓					

小方 3元素 Pd, Re, Ir

2016年						
	Pd-Pd ✓	C-Pd ✓	Cl-Pd ✓	Li-Pd ✓	H-Pd ✓	Re-Re ✓
	B-Re ✓	C-Re ✓	N-Re ✓	Al-Re ✓	Ir-Ir ✓	Mn-Ir ✓
	C-Ir ✓	C-Ir ✓	N-Ir ✓			

赤文字は作業の完了した元素。

篠塚担当のランタノイドについてはトラブルがあったので別途報告する。

原子間相互作用パラメータ計算 担当者振り分け表

担当者1 有機化合物系, 有機半導体系

原子 6種類: O, S, F, Cl, Br, I

元素ペア 32種類

S-S	F-F	Cl-Cl	Br-Br	I-I	C-N	C-O	C-Al
C-S	C-F	C-Br	C-I	C-Cl	N-O	N-Al	N-Au
N-S	H-S	H-F	H-Cl	H-I	H-Br	O-F	O-S
O-Cl	O-Br	S-Au	Si-S	F-Si	Si-Cl	Si-Br	Si-I

担当者2 半導体系

原子 5種類: Ge, Ga, As, Na, Ce

元素ペア 26種類

Ge-Ge	Ce-Ce	Ga-Ga	Na-Na	As-As	Si-Ge	Ge-W	Ge-Au
H-Ge	N-Ga	Ga-W	Ga-Au	Ga-As	Al-Ga	Si-As	H-As
As-W	As-Au	Na-I	Na-Si	H-Na	Ce-W	Si-Ce	H-Ce
P-Ce	As-Ce						

担当者3

Mg LPSO系等

原子 4種類: Ag, Bi, Mg, Cu

元素ペア 26種類

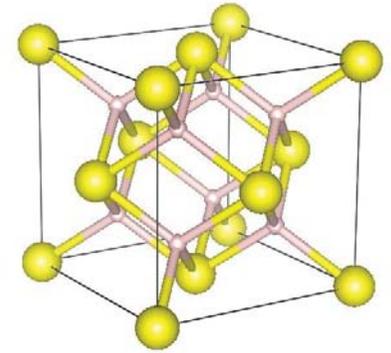
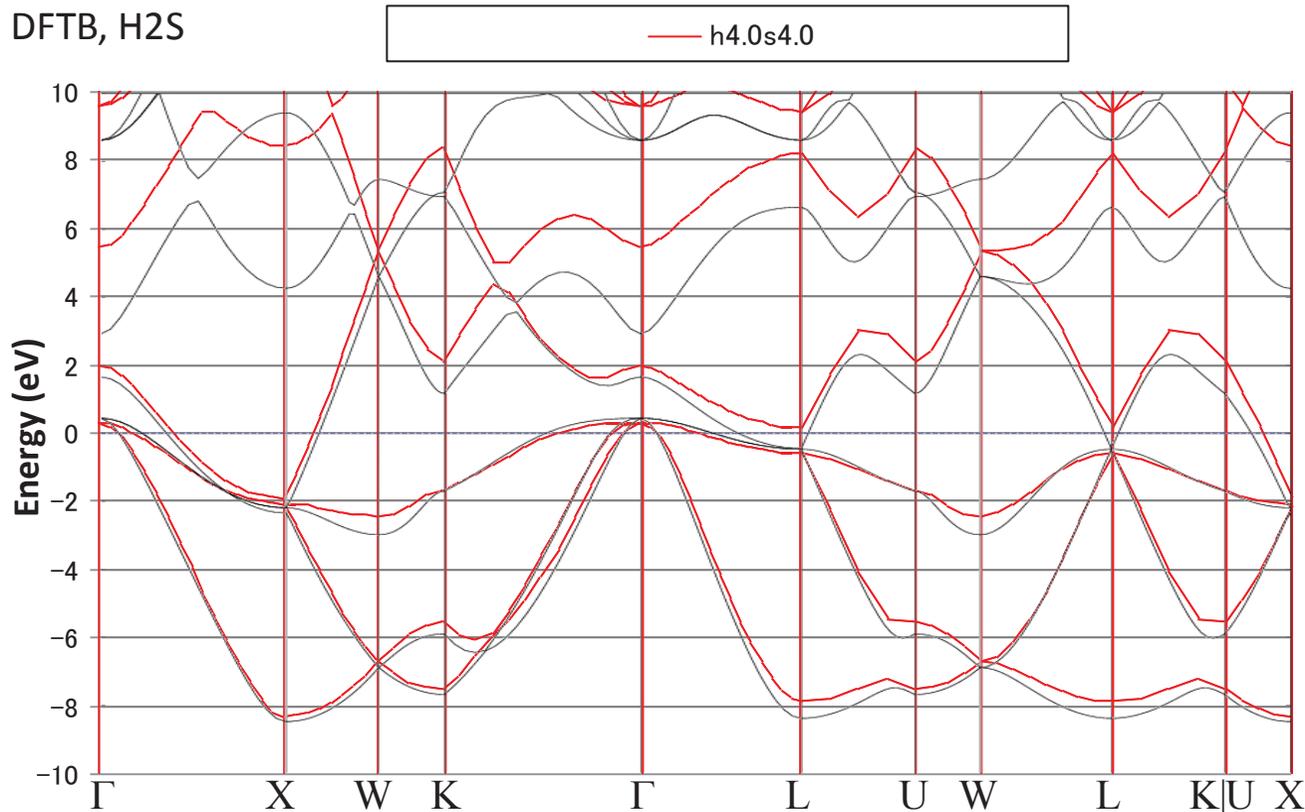
Ag-Ag	Bi-Bi	Mg-Mg	Cu-Cu	Ag-Bi	Si-Ag	Ag-W	H-Ag
Si-Bi	H-Bi	W-Bi	P-W	Al-W	W-Au	N-W	Mg-W
Mg-Al	H-Mg	Mg-Si	S-Cu	C-Cu	N-Cu	H-Cu	O-Cu
Al-Cu	Al-Au						

DFTB原子間作用パラメータ作成ツールの検証

H 1s, Si 3s3p/3d4s4pを考慮。

DFTBソルバーを用いてH₂SのFCC格子(右図)のバンド計算を行った。

DFTB, H2S

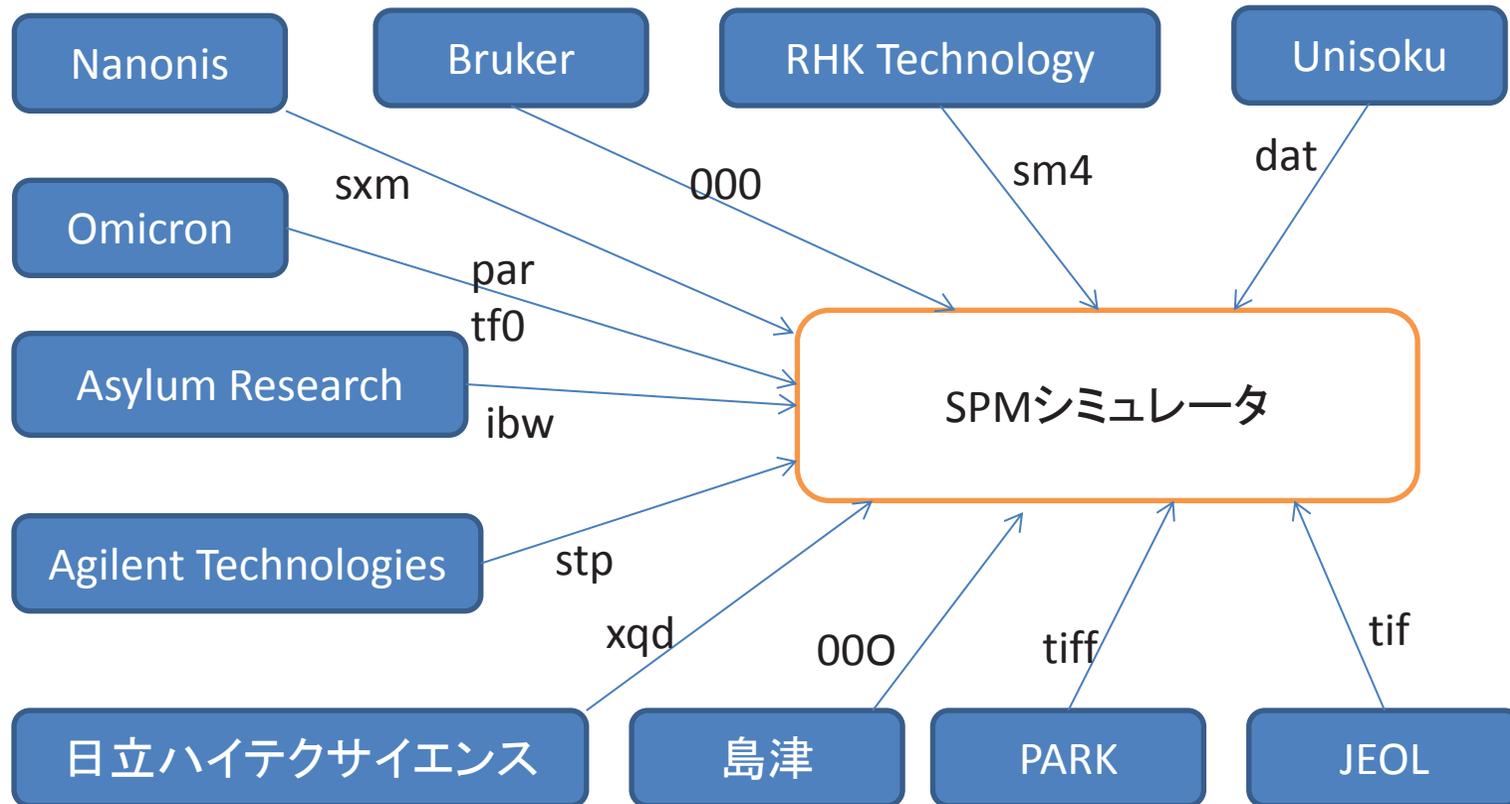


黒線は文献[AFLOW]のバンド図。

フェルミエネルギー近傍を含むエネルギー範囲で良好なバンド構造が得られた。
このような電子状態を考慮に入れて、STS, STM, AFM, KPFMのシミュレートが可能である。

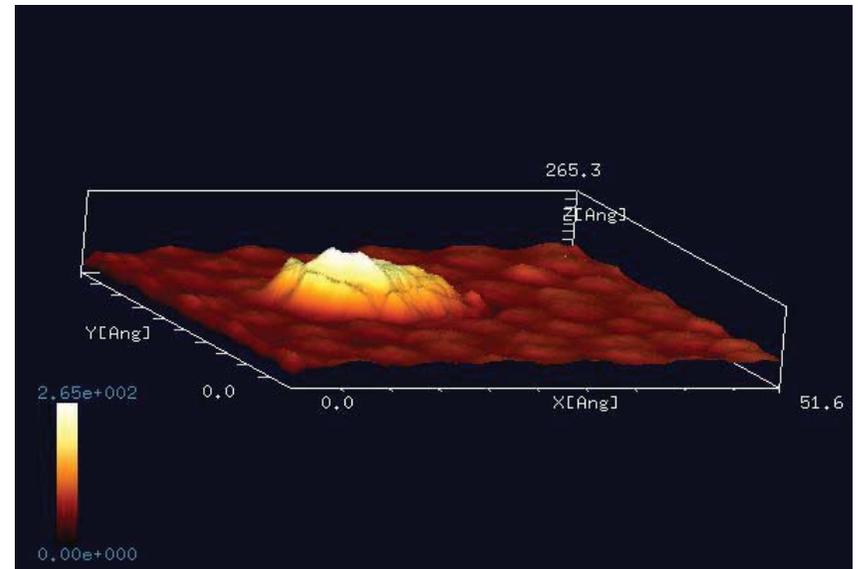
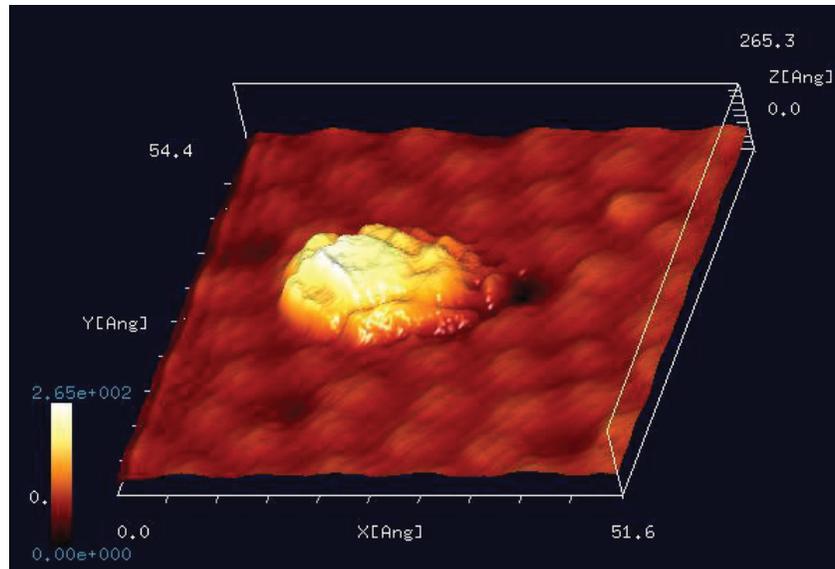
実験データ読み込み機能

ほぼ全てのメーカー製SPM実験データを直接読み込み可能



この他にも、JPEG, BitMap等、ほぼ全ての種類の画像データが読み込み可能

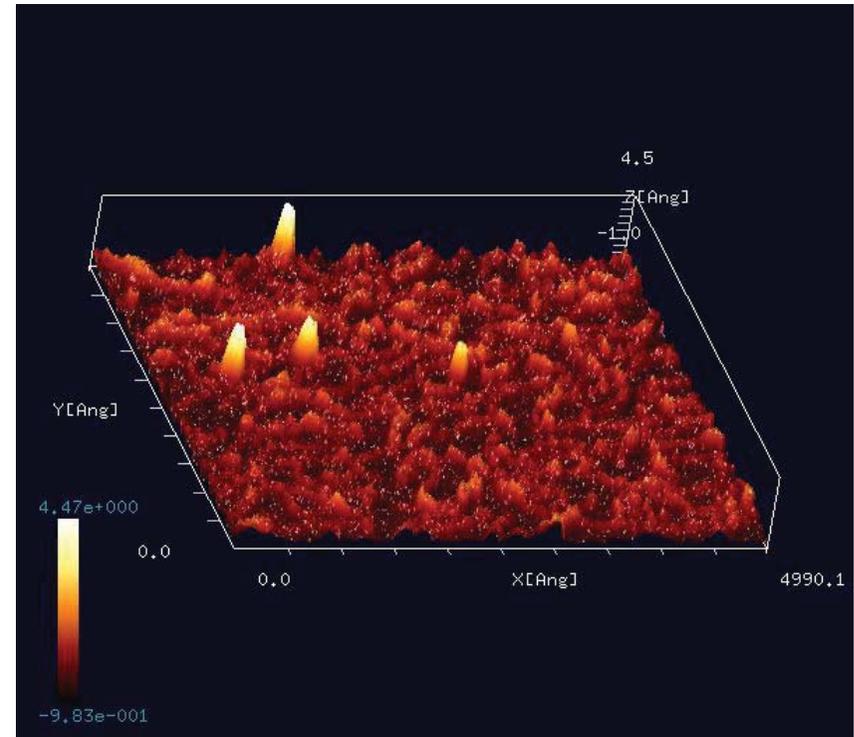
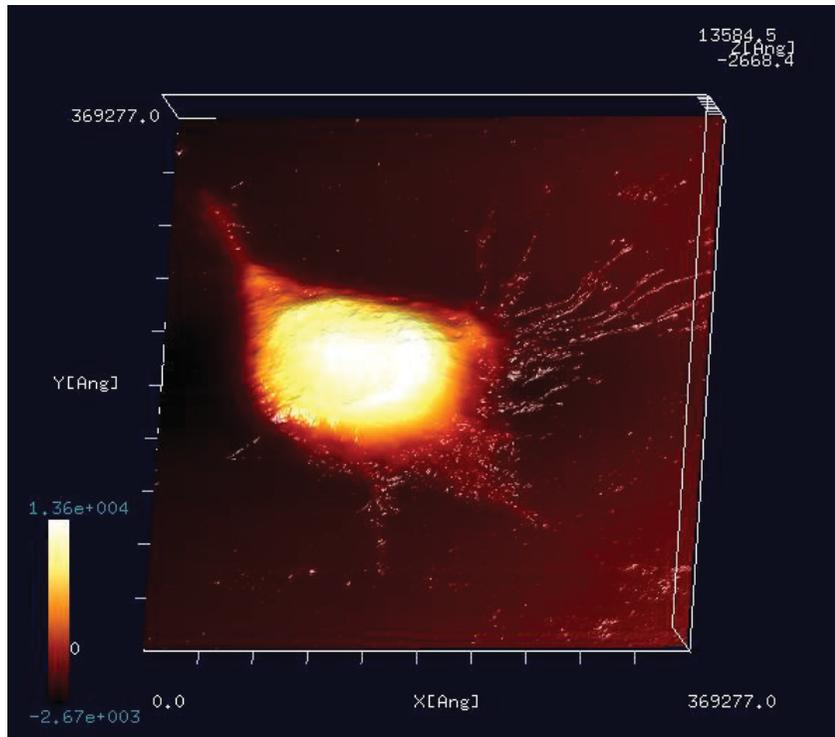
データ読み込み例:



データの拡張子はtxt

メーカー名は伏せてあります

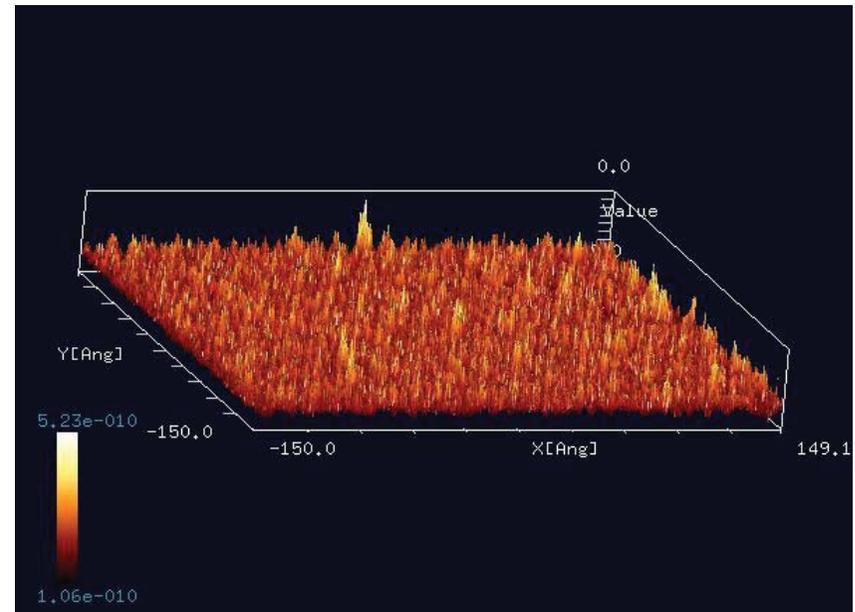
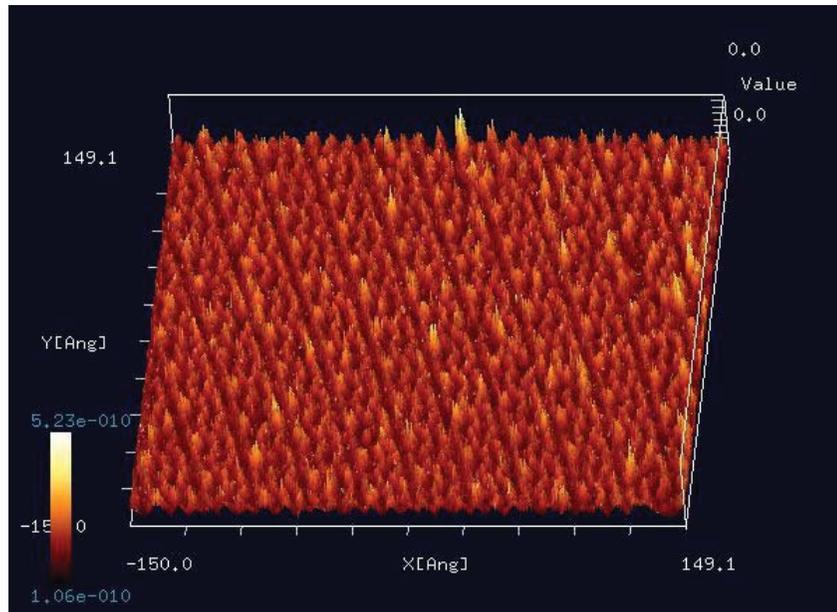
データ読み込み例:



データの拡張子はstp

メーカー名は伏せてあります

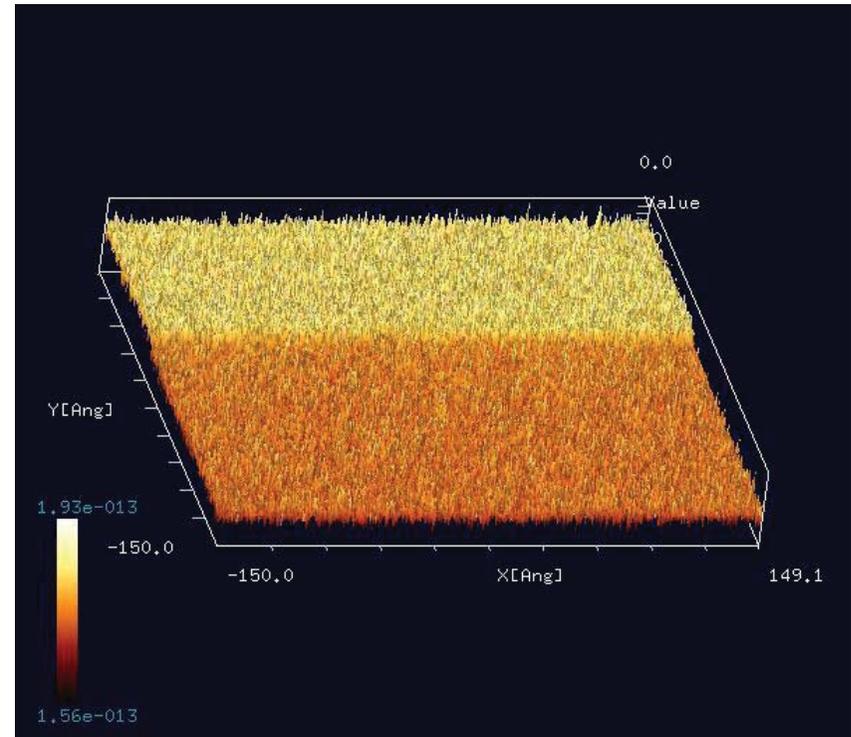
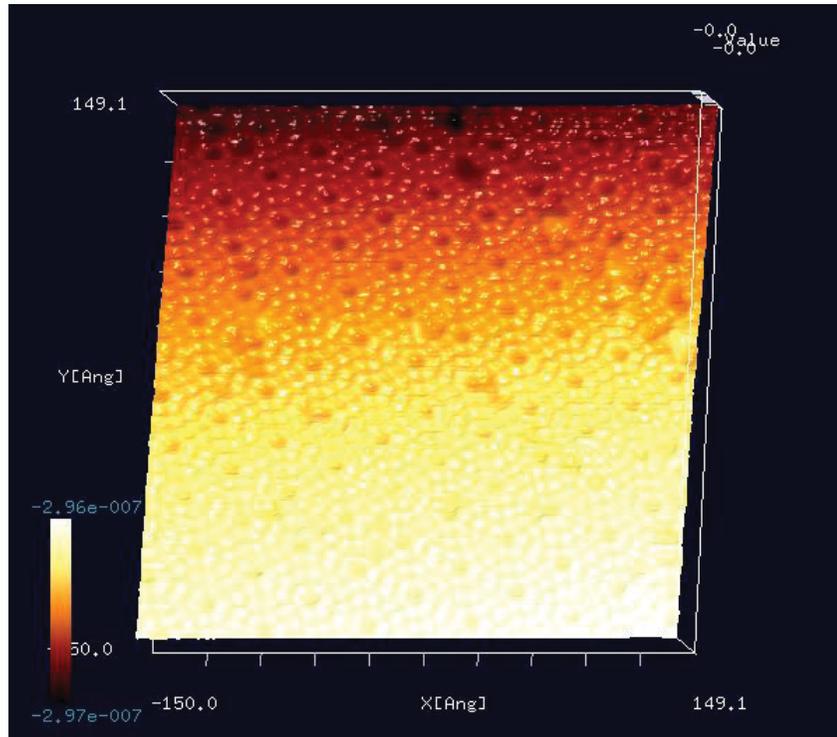
データ読み込み例:



データの拡張子はsxm

メーカー名は伏せてあります

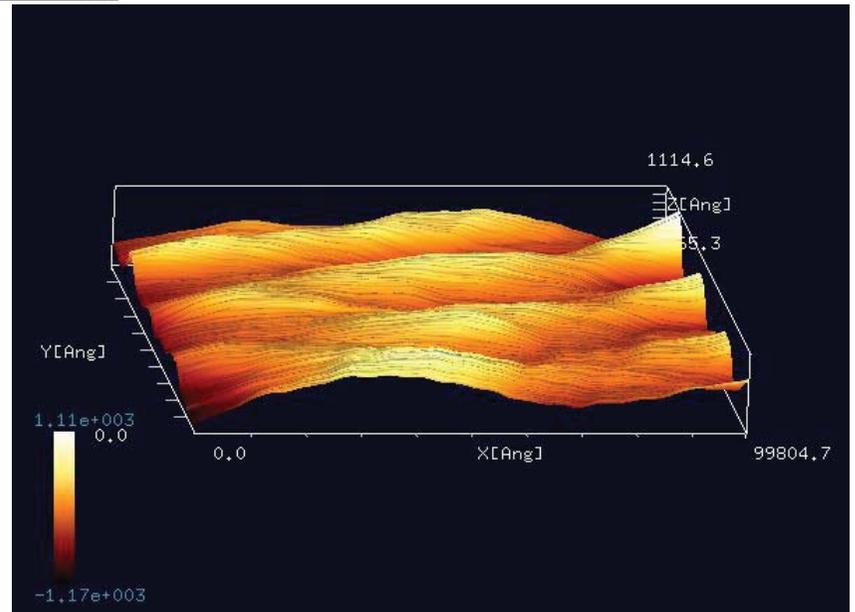
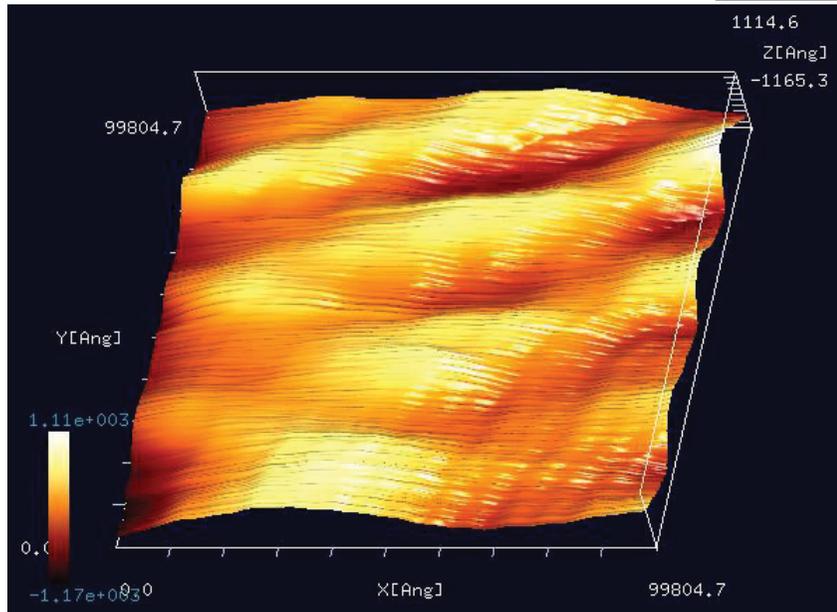
データ読み込み例:



データの拡張子はsxm

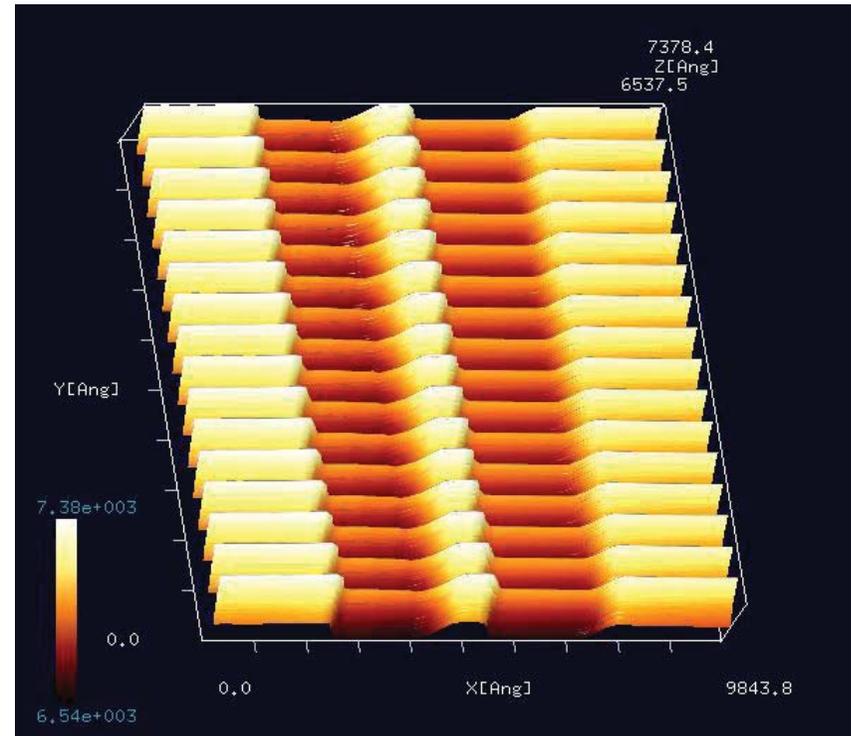
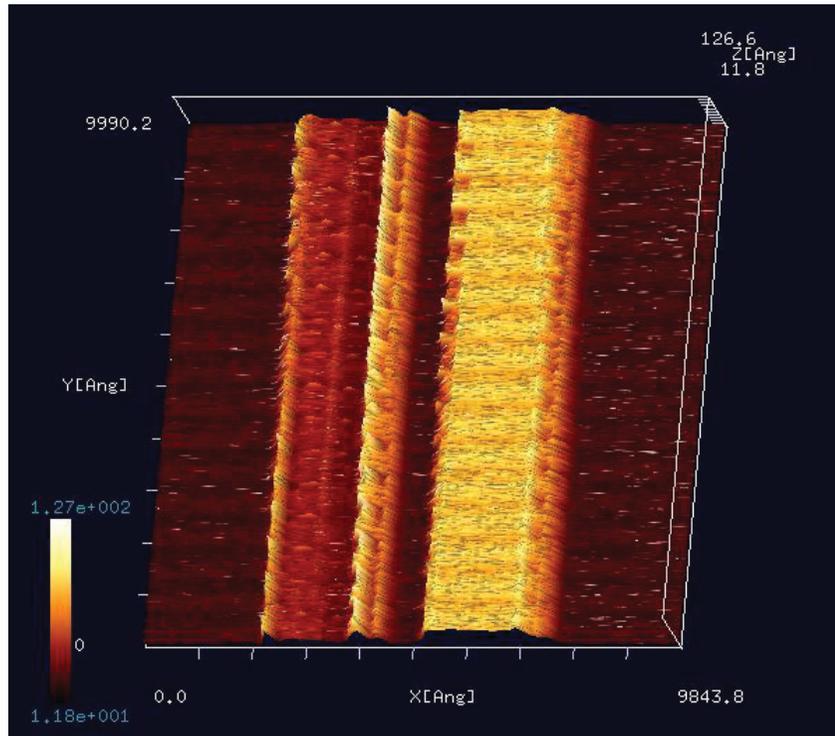
メーカー名は伏せてあります

データ読み込み例:



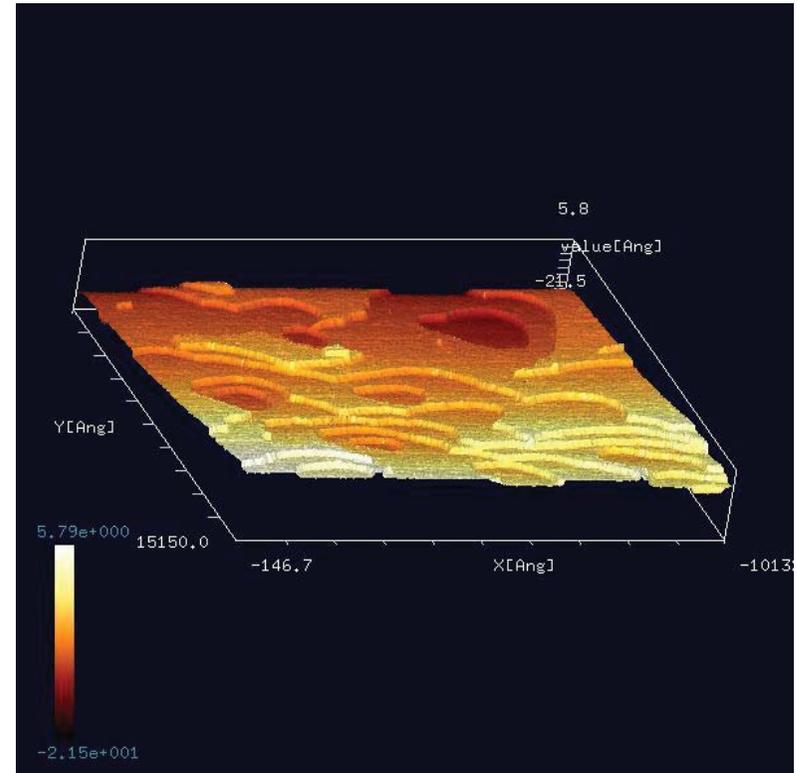
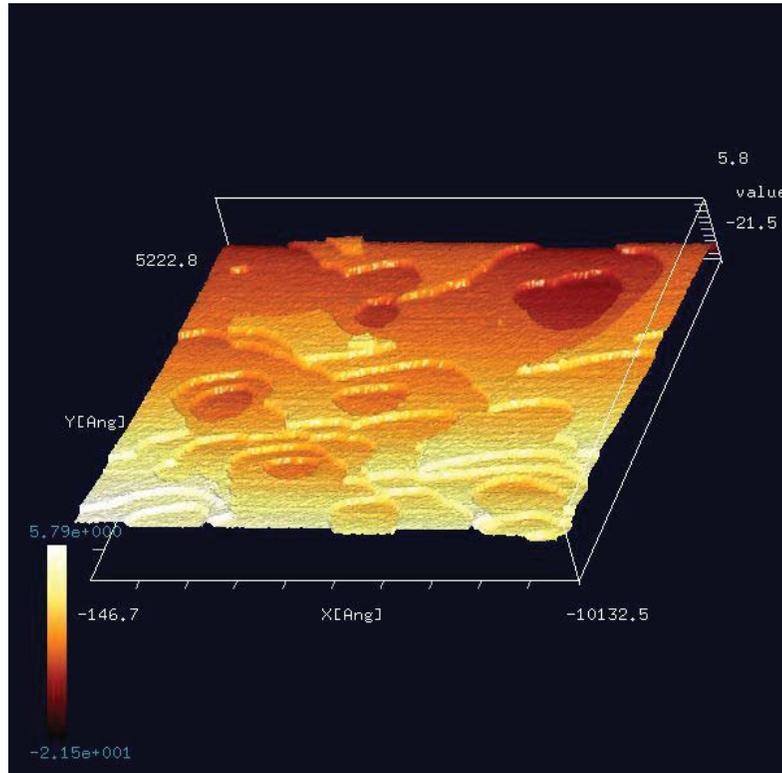
データの拡張子は000等

データ読み込み例:



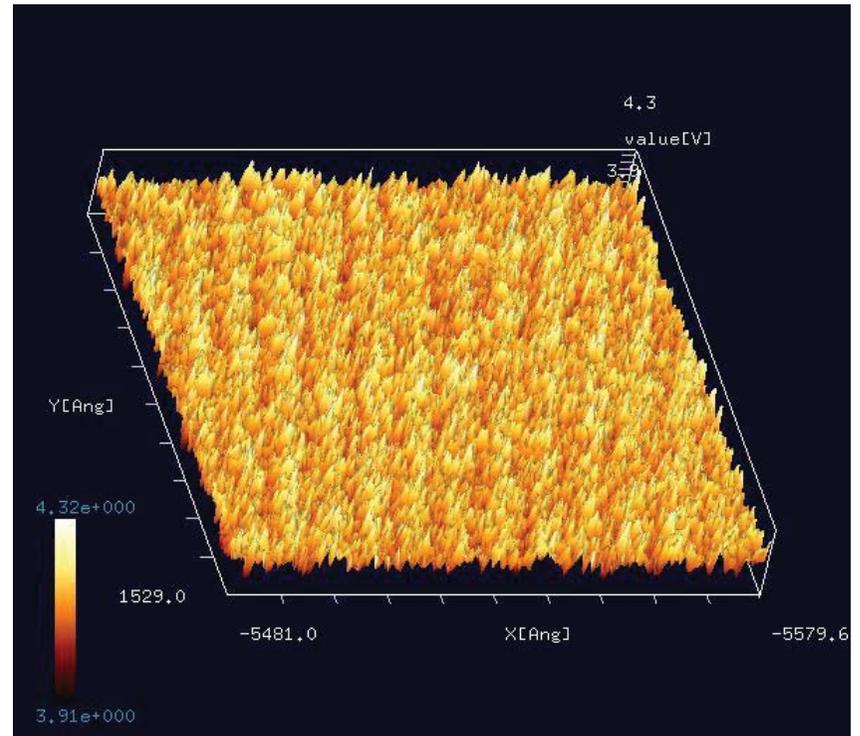
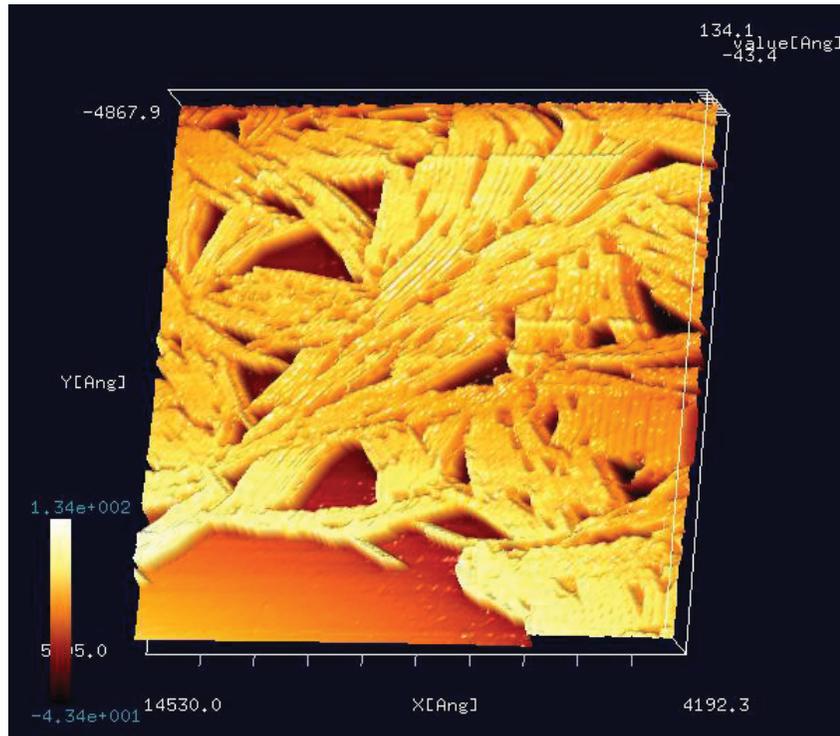
データの拡張子は000等

データ読み込み例:



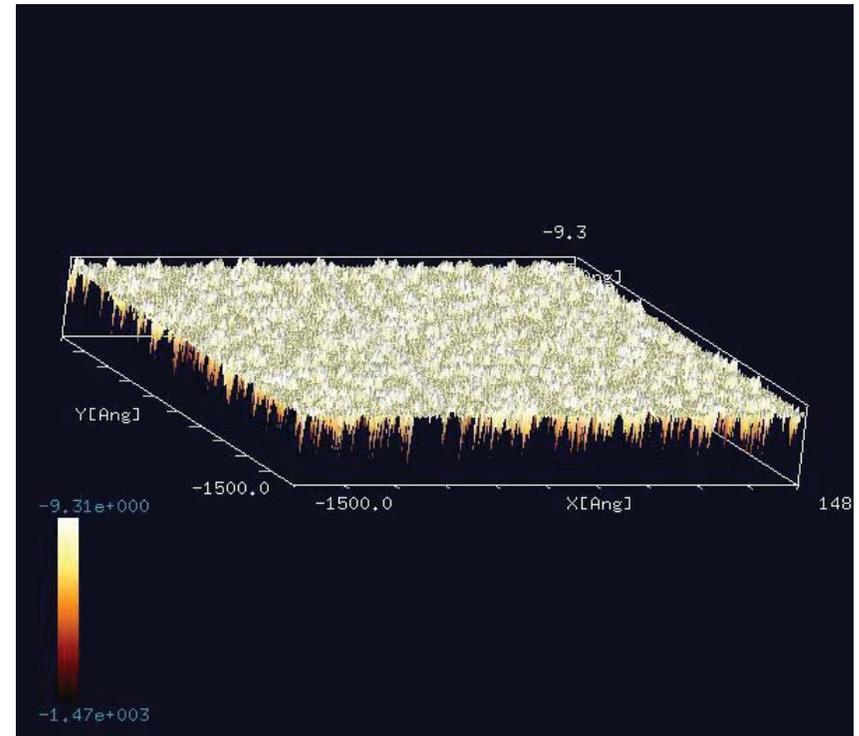
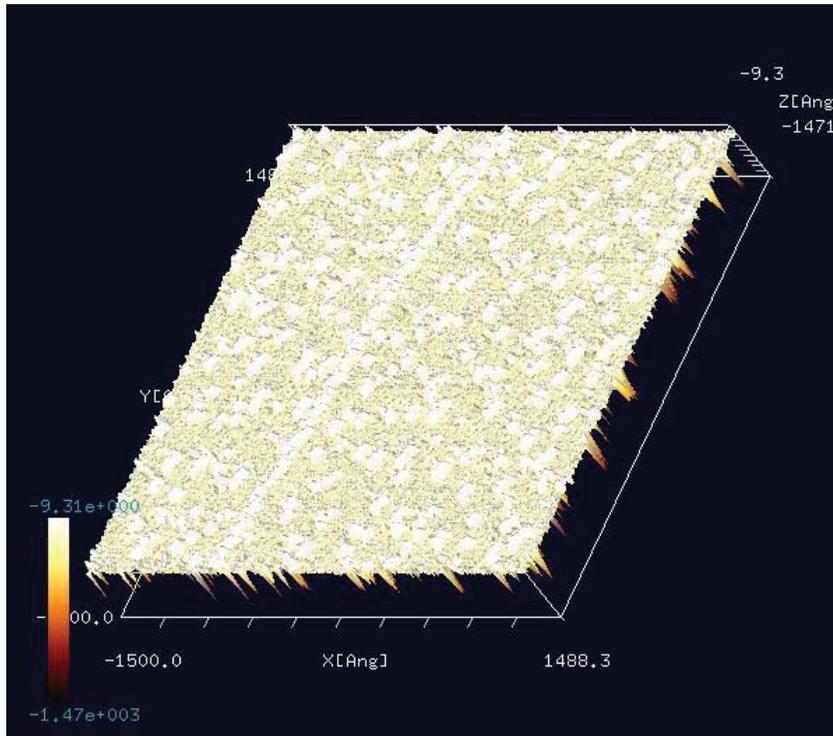
データの拡張子はsm4

データ読み込み例:



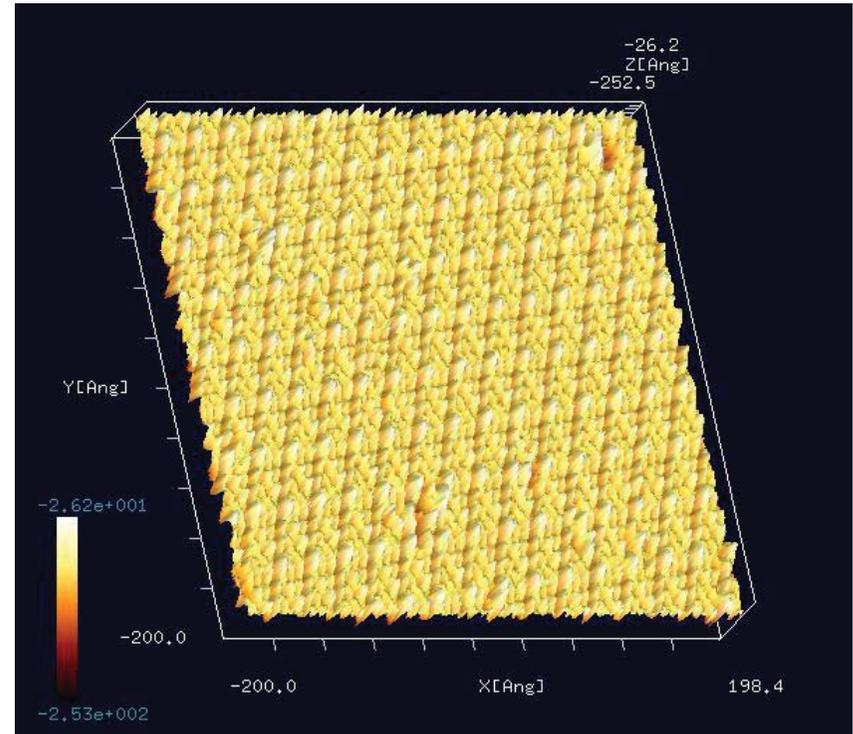
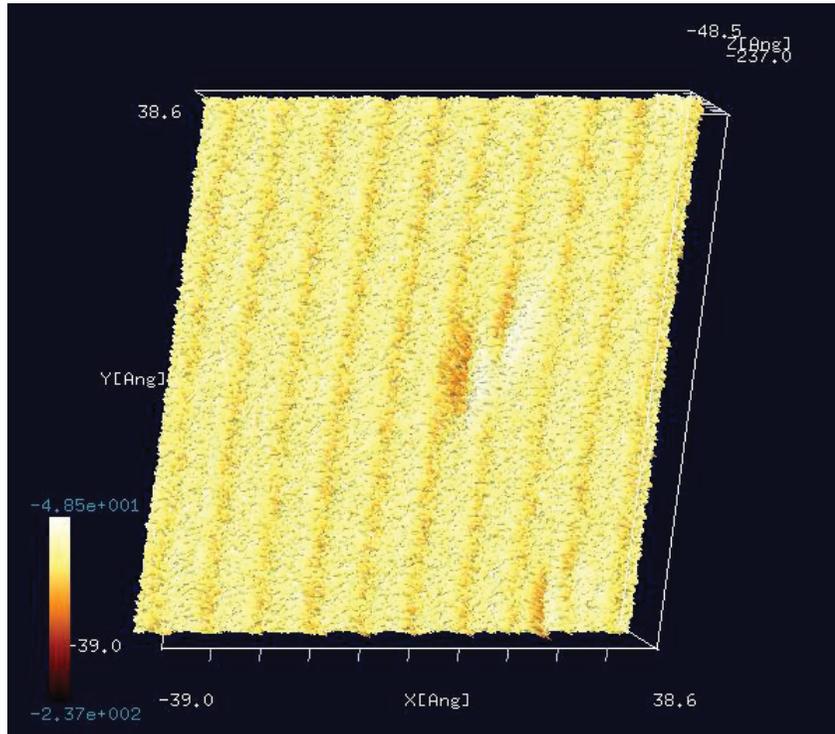
データの拡張子はsm4

データ読み込み例:



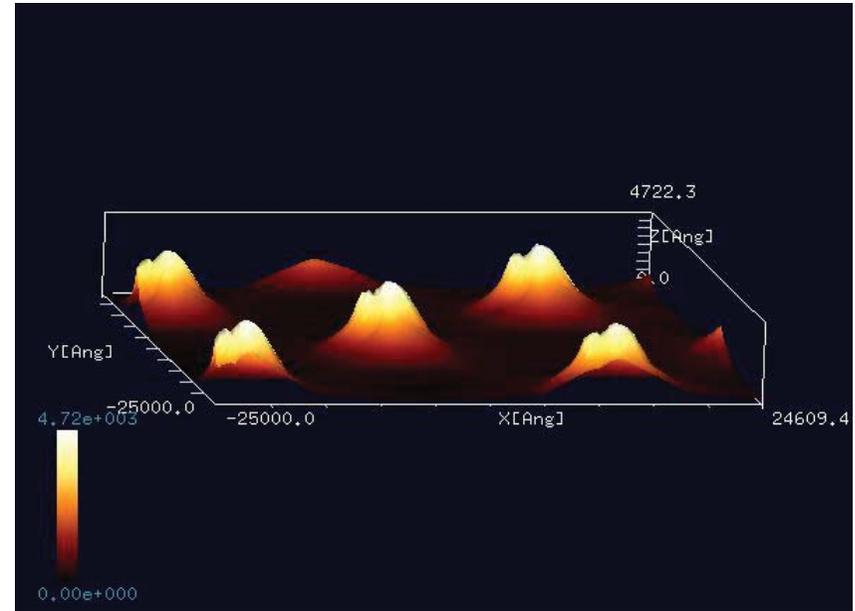
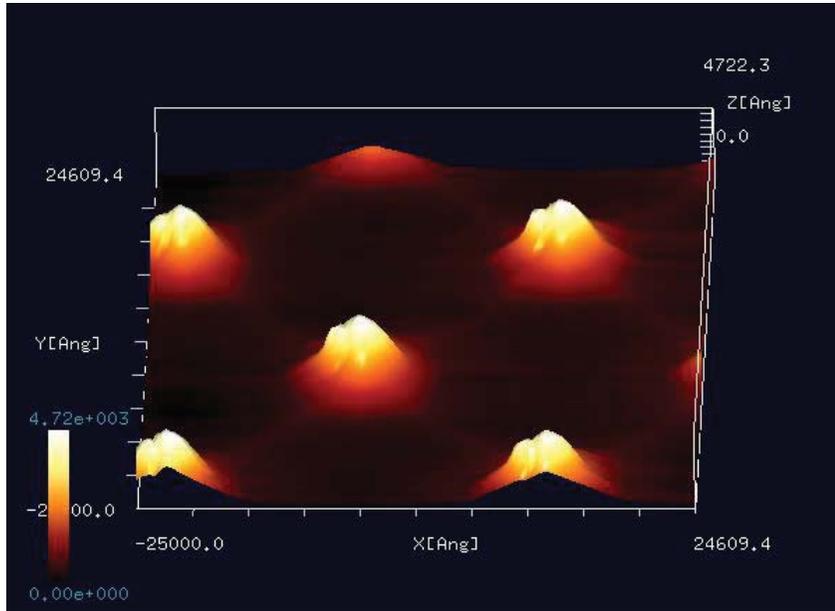
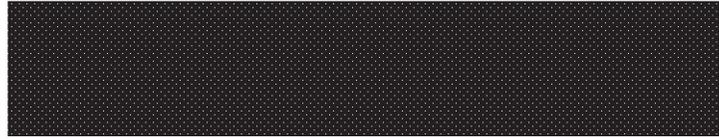
データの拡張子はtxt

データ読み込み例:



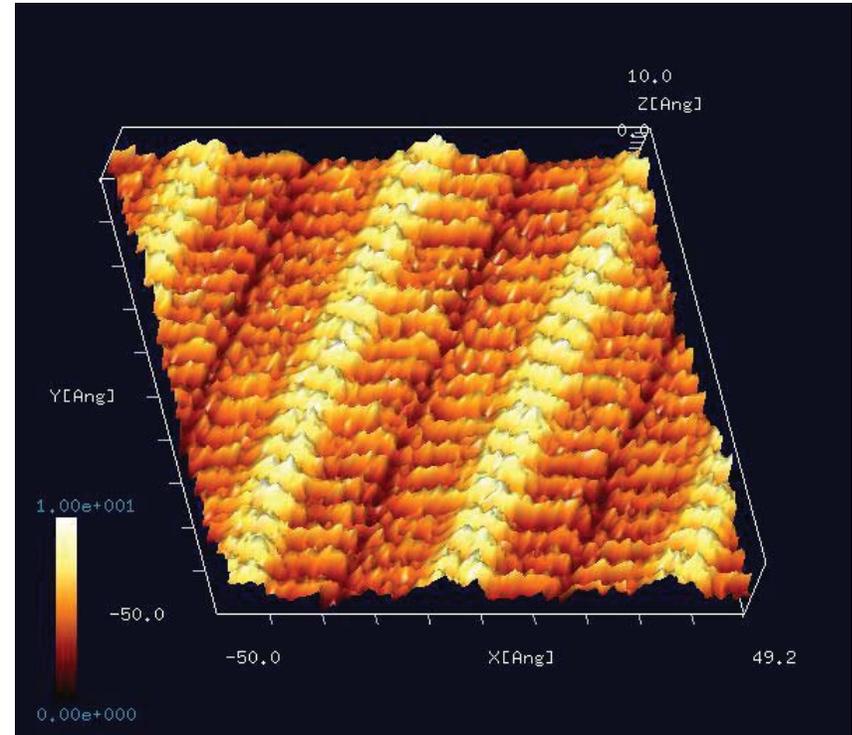
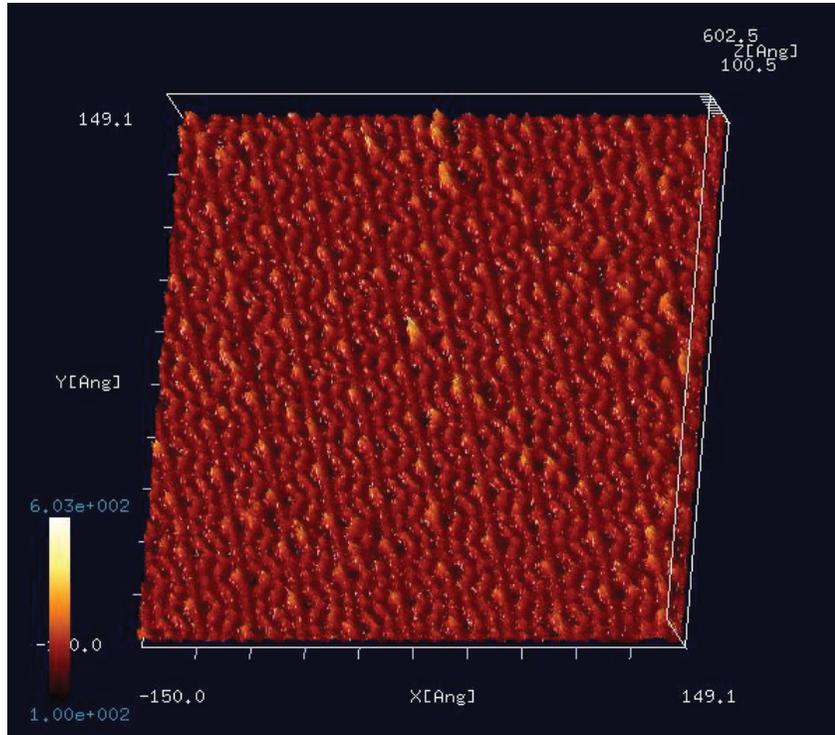
データの拡張子はtxt

データ読み込み例:



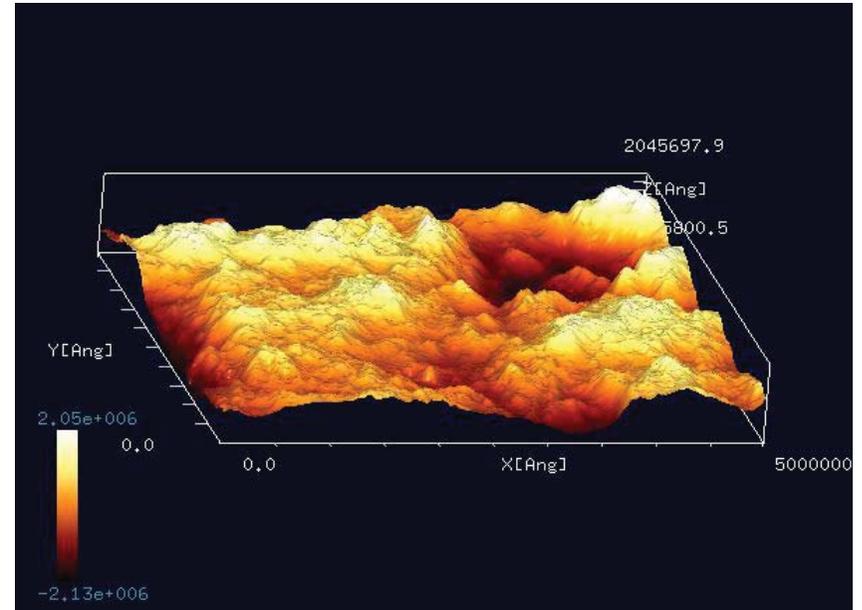
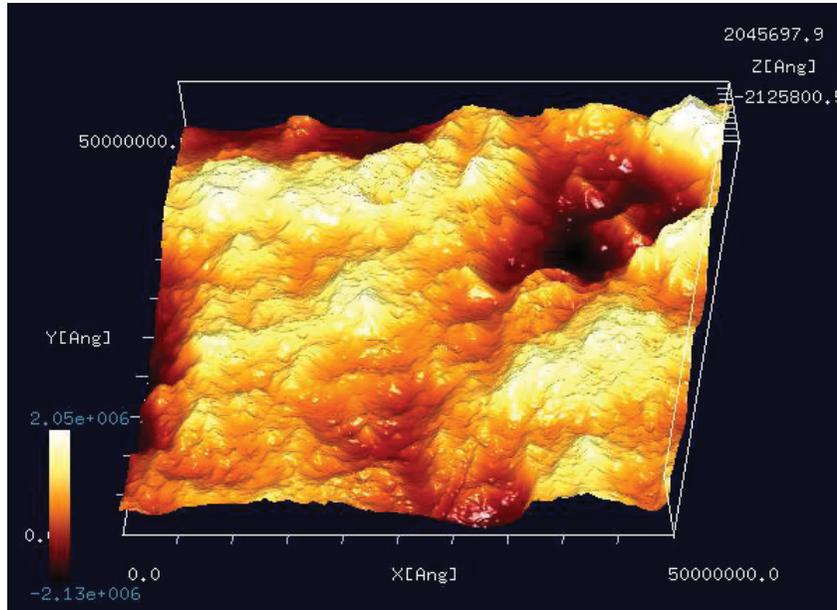
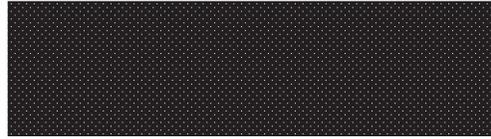
データの拡張子はasc

データ読み込み例:



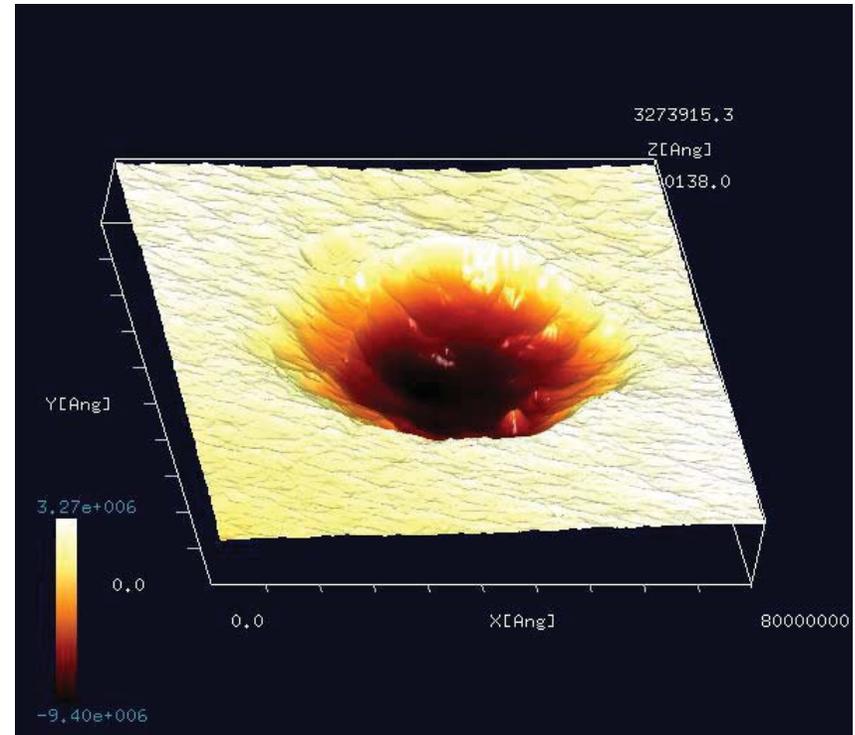
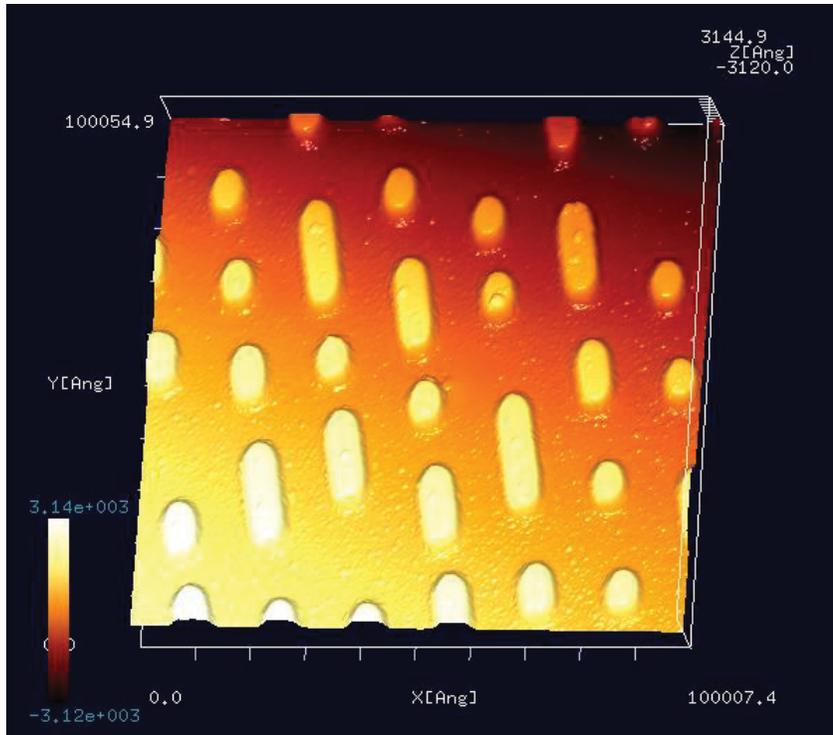
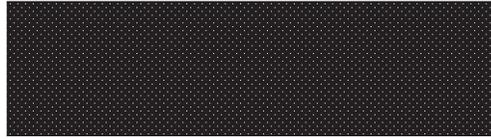
データの拡張子はasc

データ読み込み例:



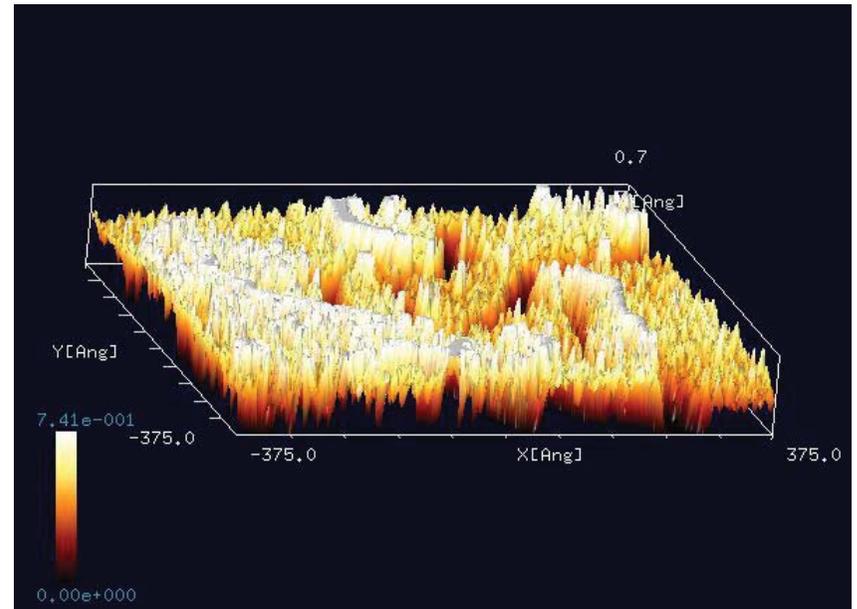
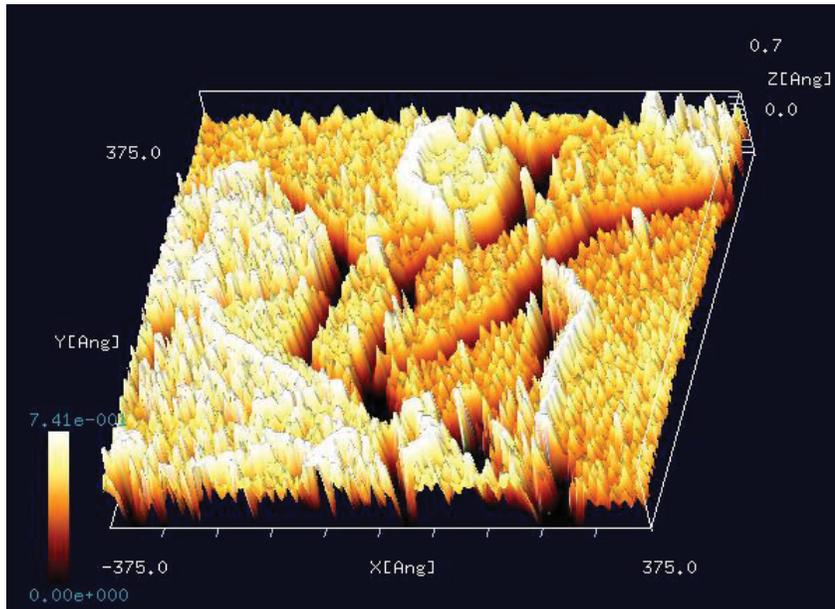
データの拡張子はsur

データ読み込み例:



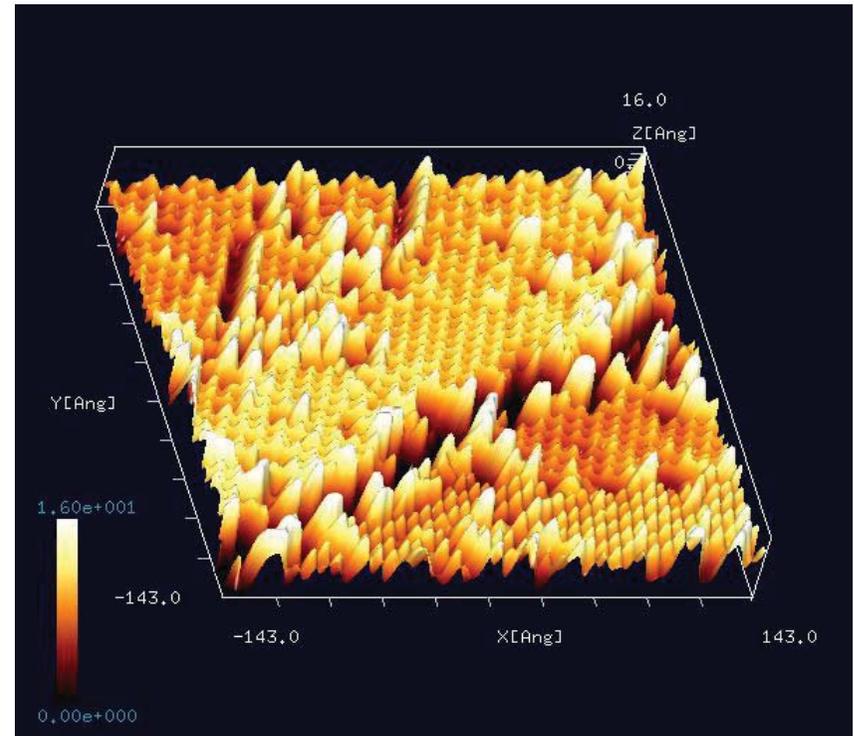
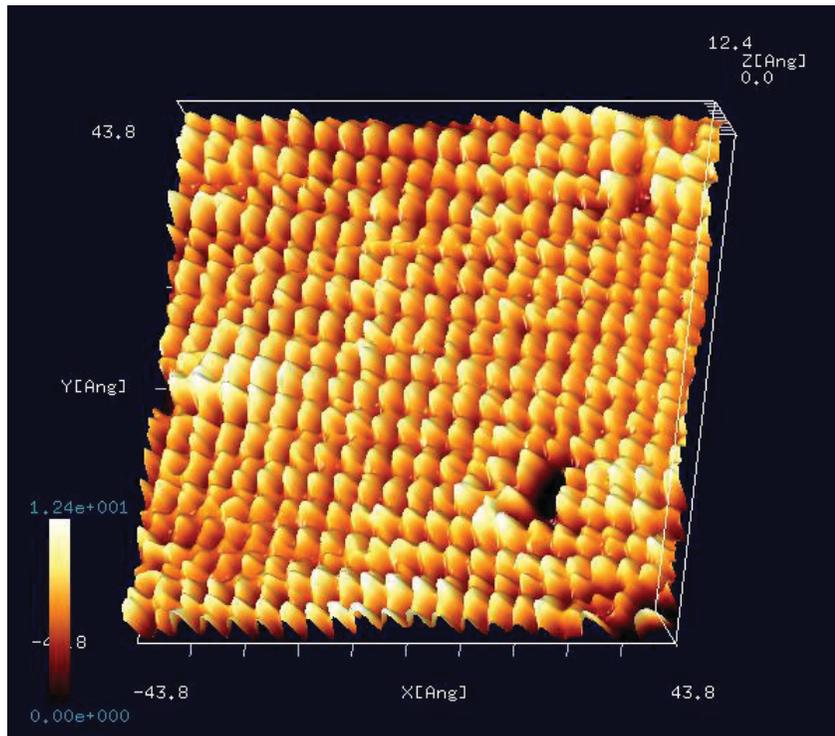
データの拡張子はsur

データ読み込み例:



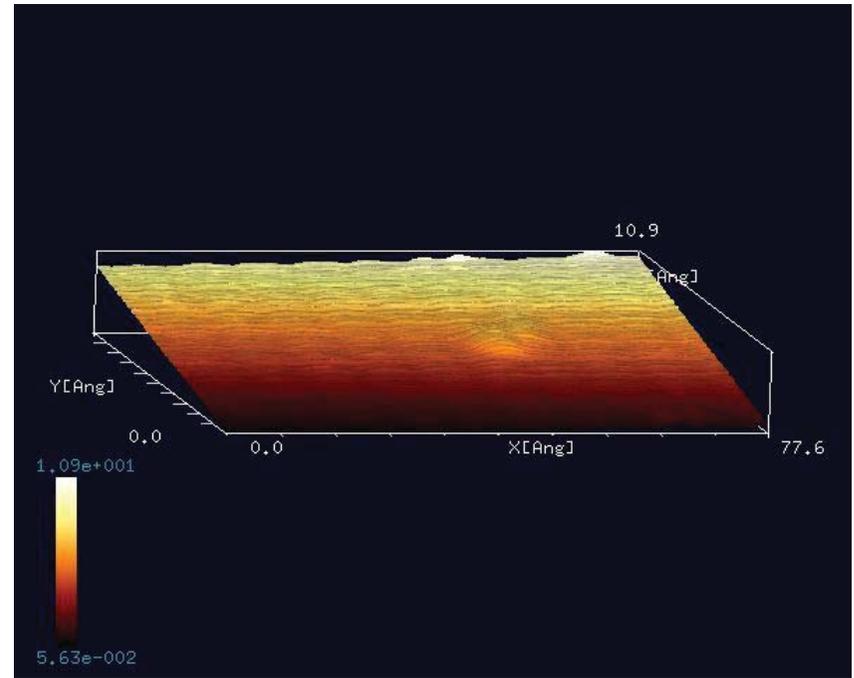
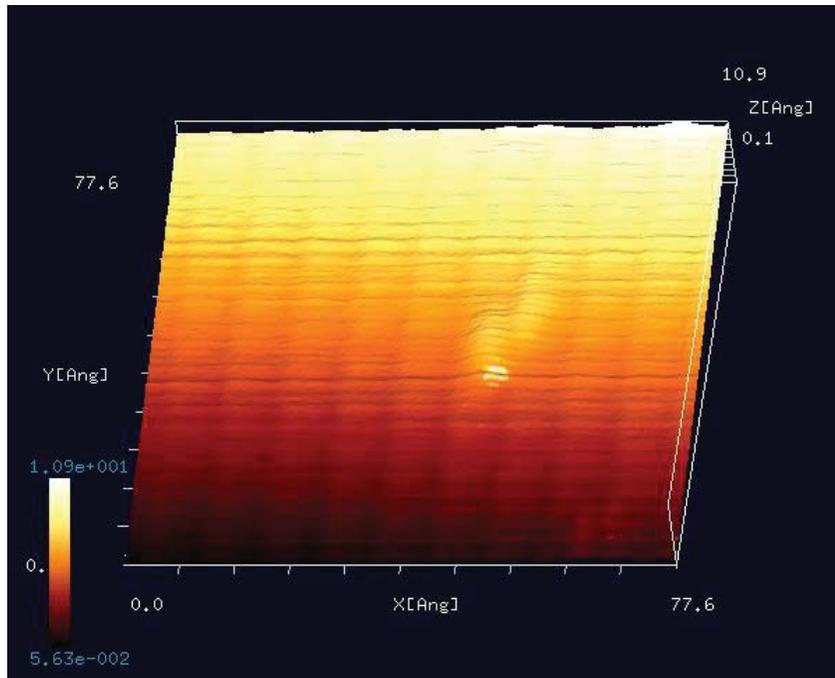
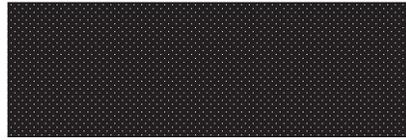
データの拡張子はhdr,dat

データ読み込み例:



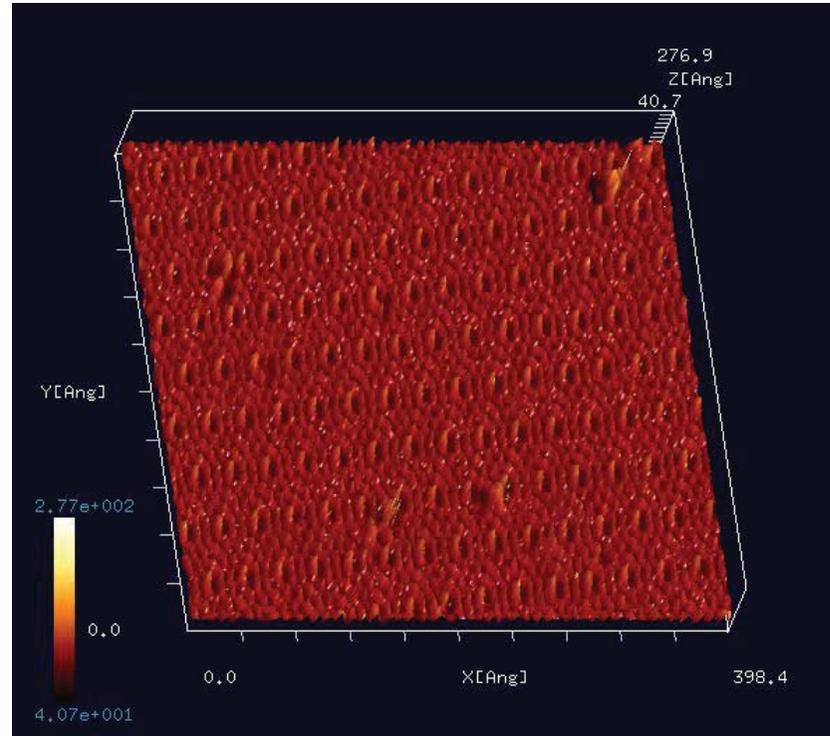
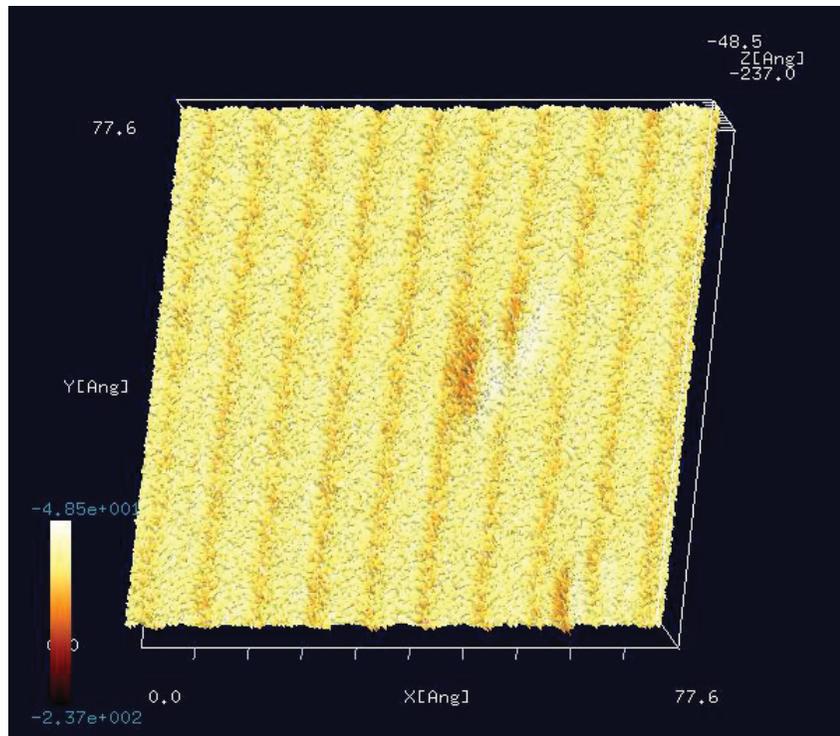
データの拡張子はhdr,dat

データ読み込み例:



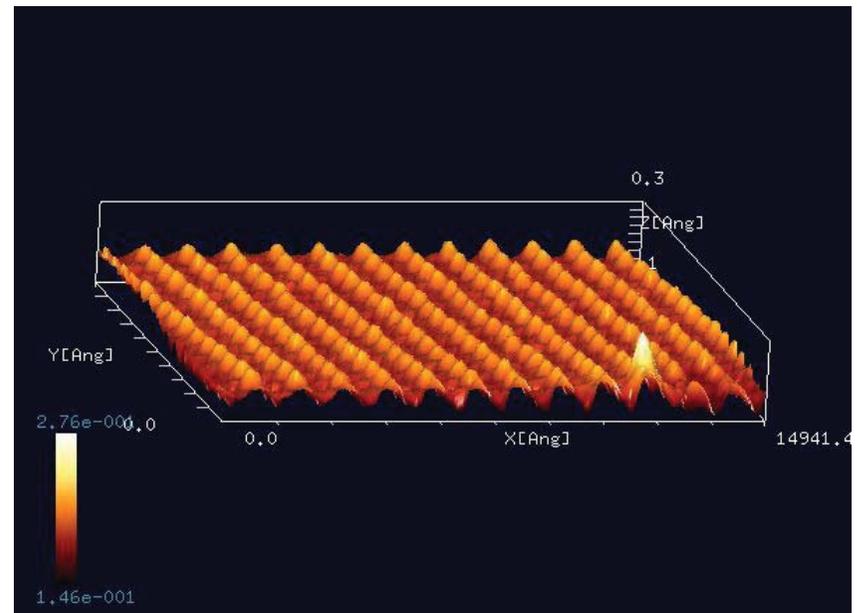
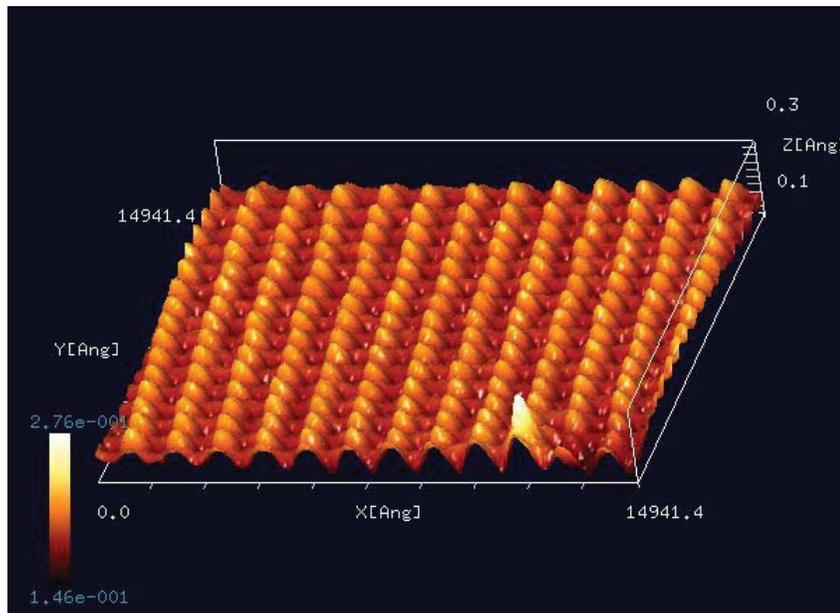
データの拡張子はpar,tf0等

データ読み込み例:



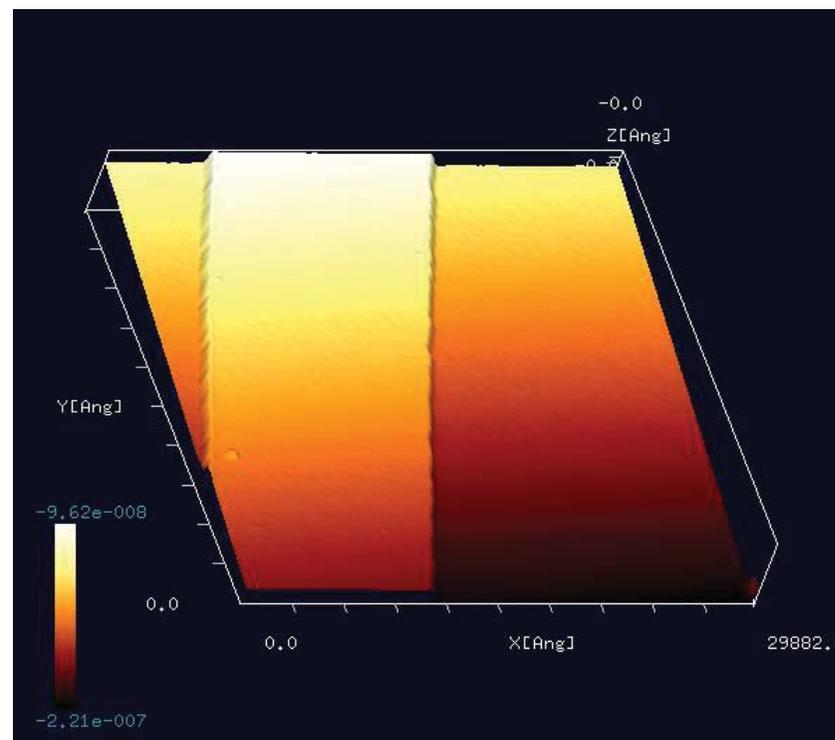
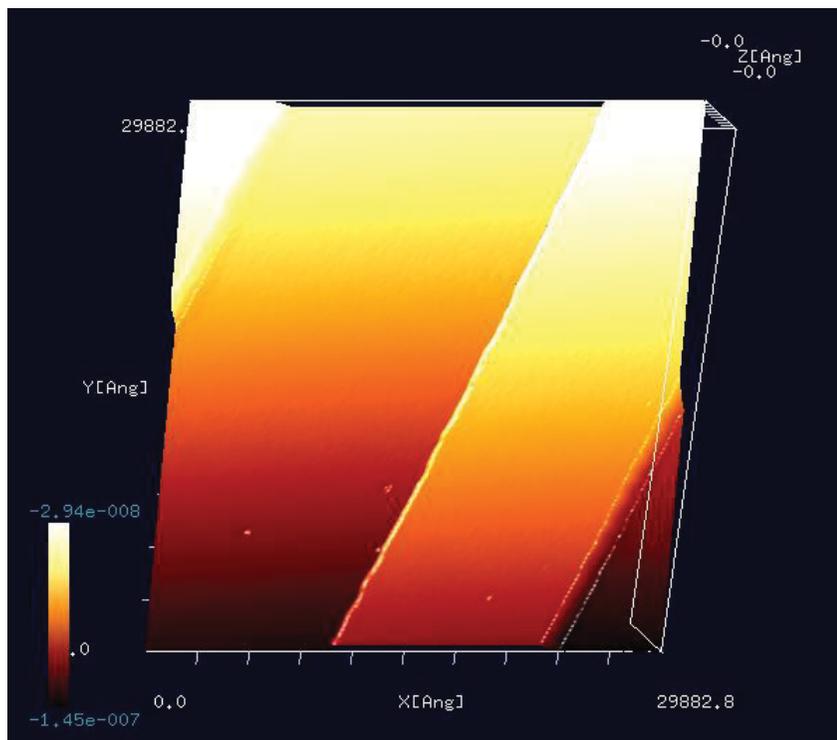
データの拡張子はpar,tf0等

データ読み込み例:



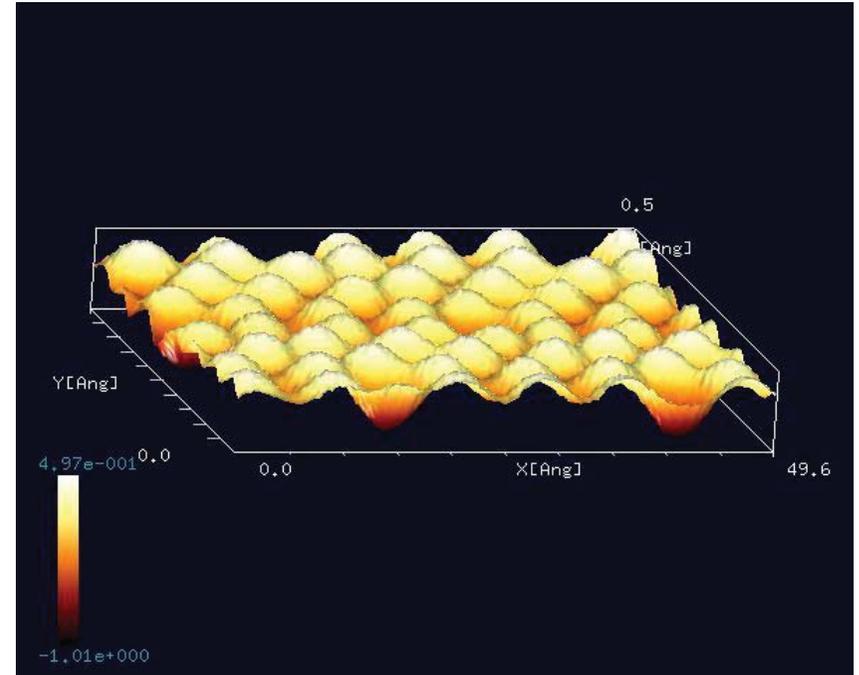
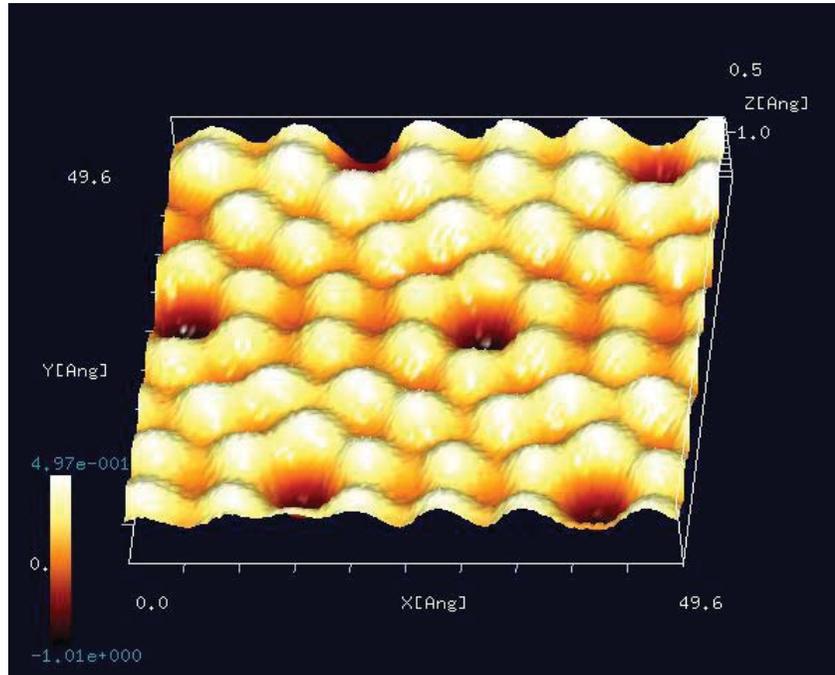
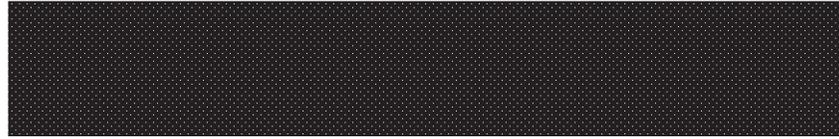
データの拡張子はibw

データ読み込み例:



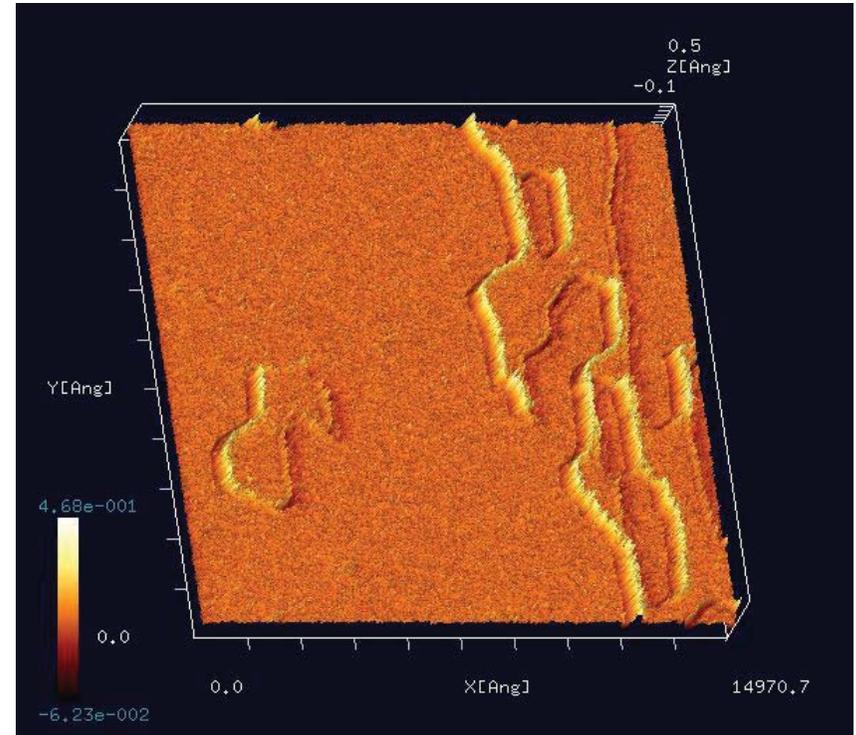
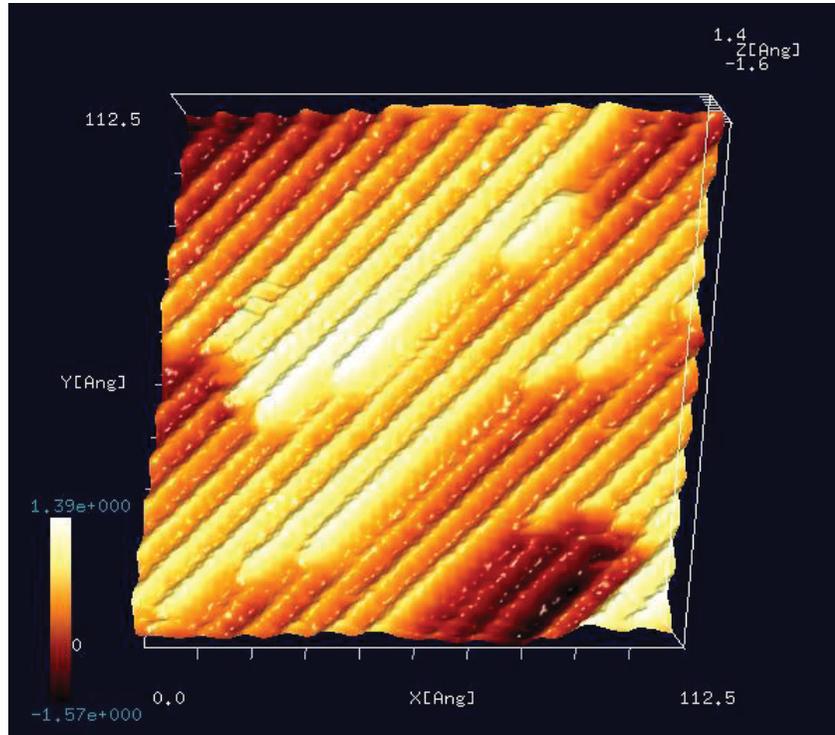
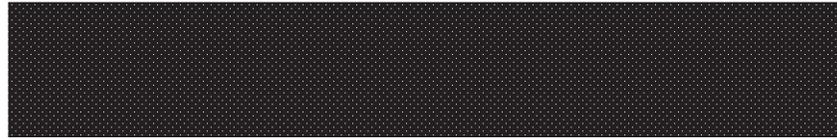
データの拡張子はibw

データ読み込み例:



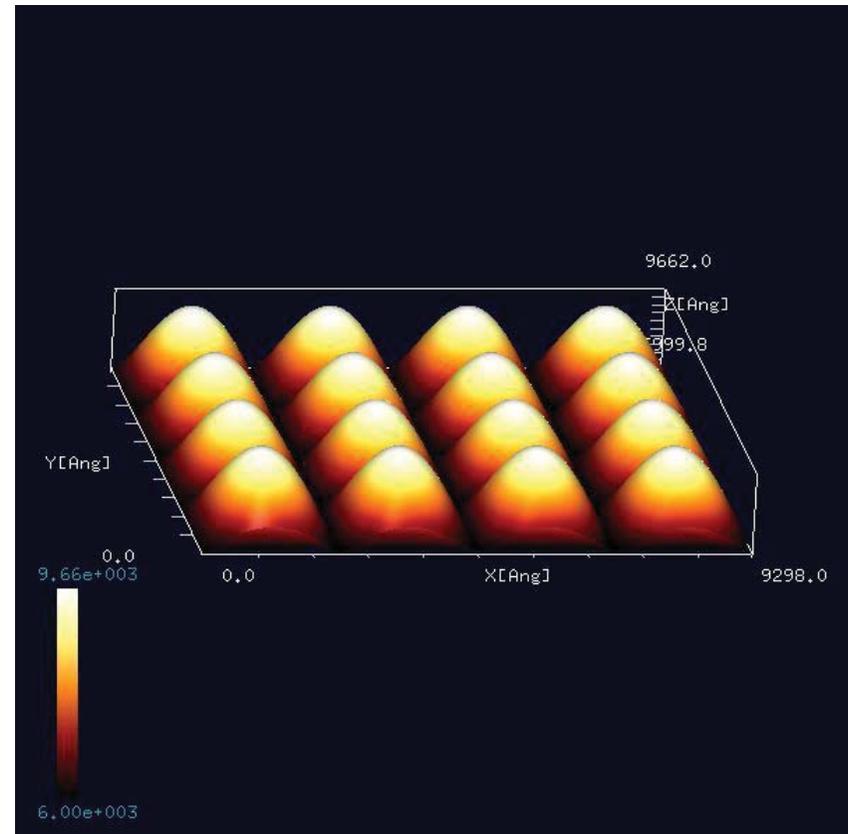
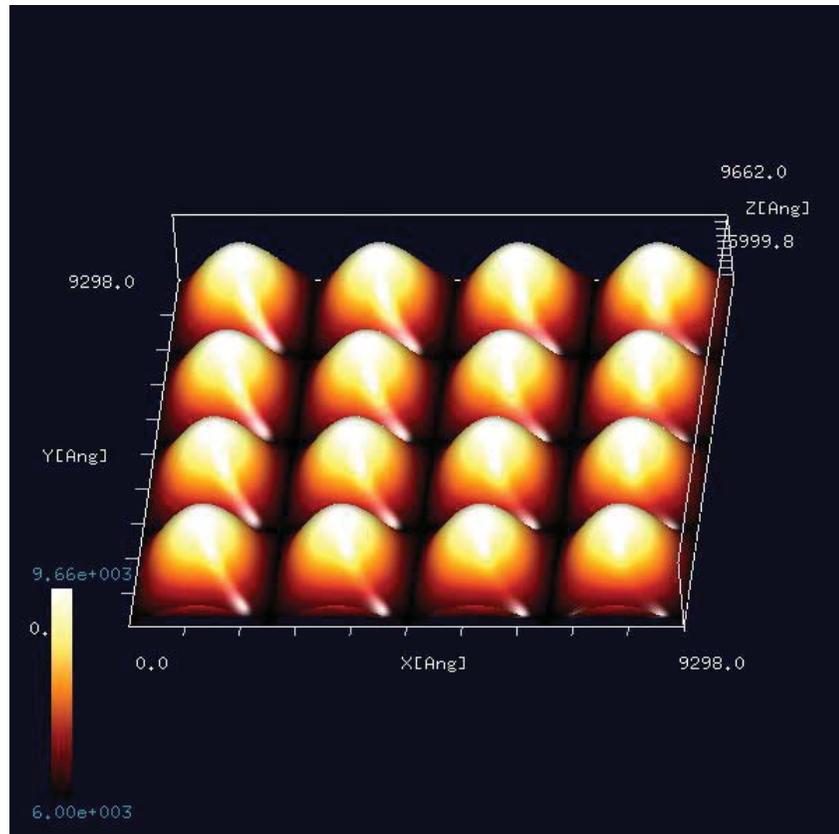
データの拡張子はstp

データ読み込み例:



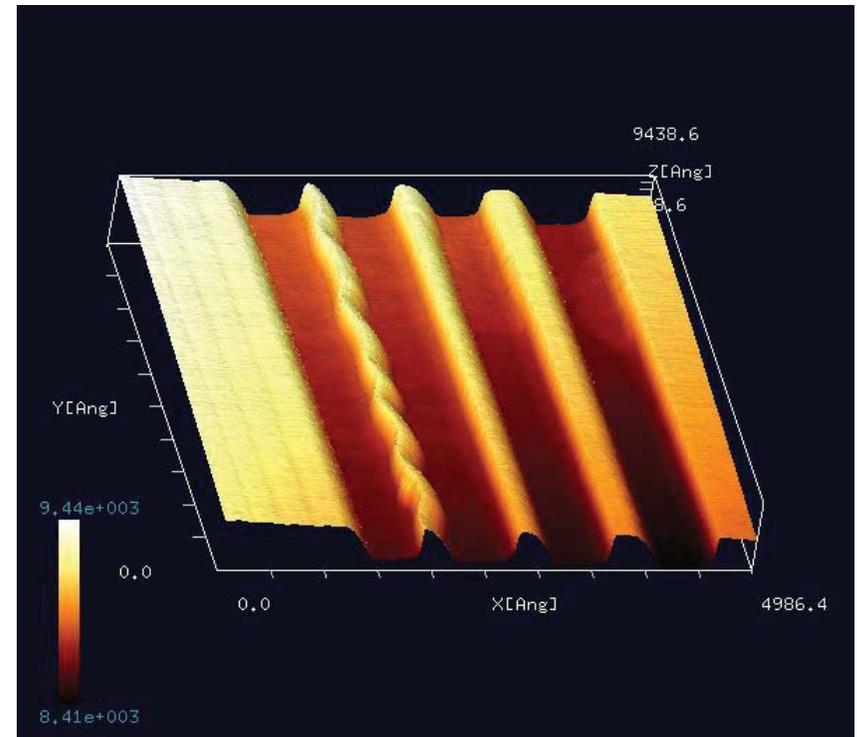
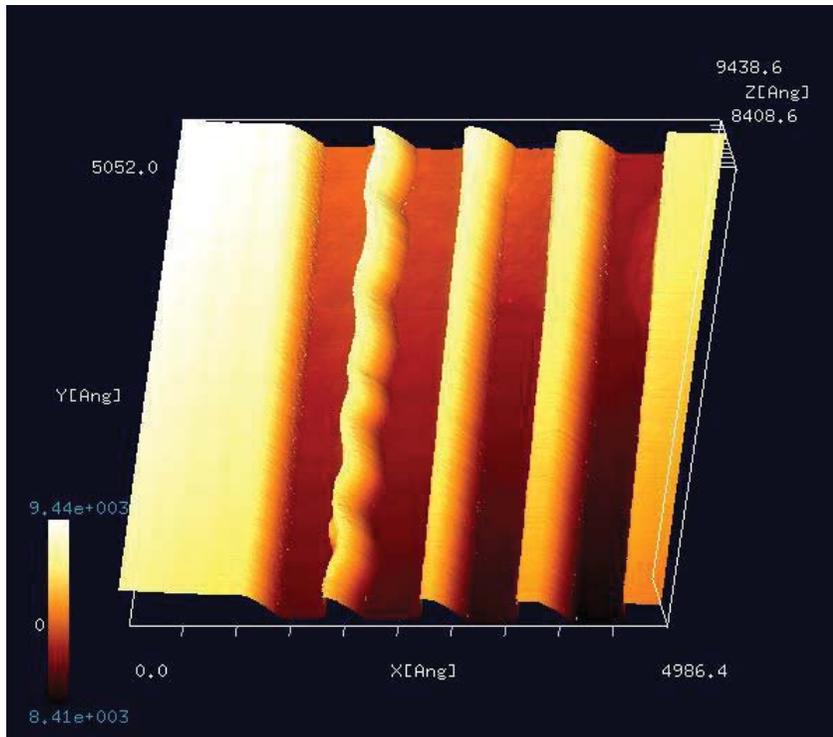
データの拡張子はstp

データ読み込み例:



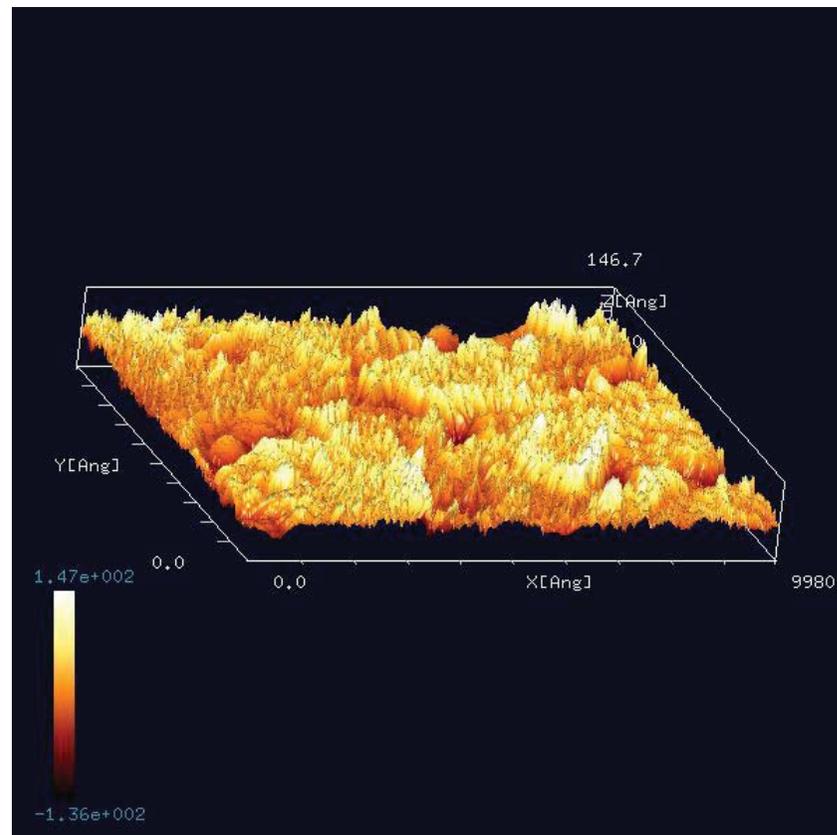
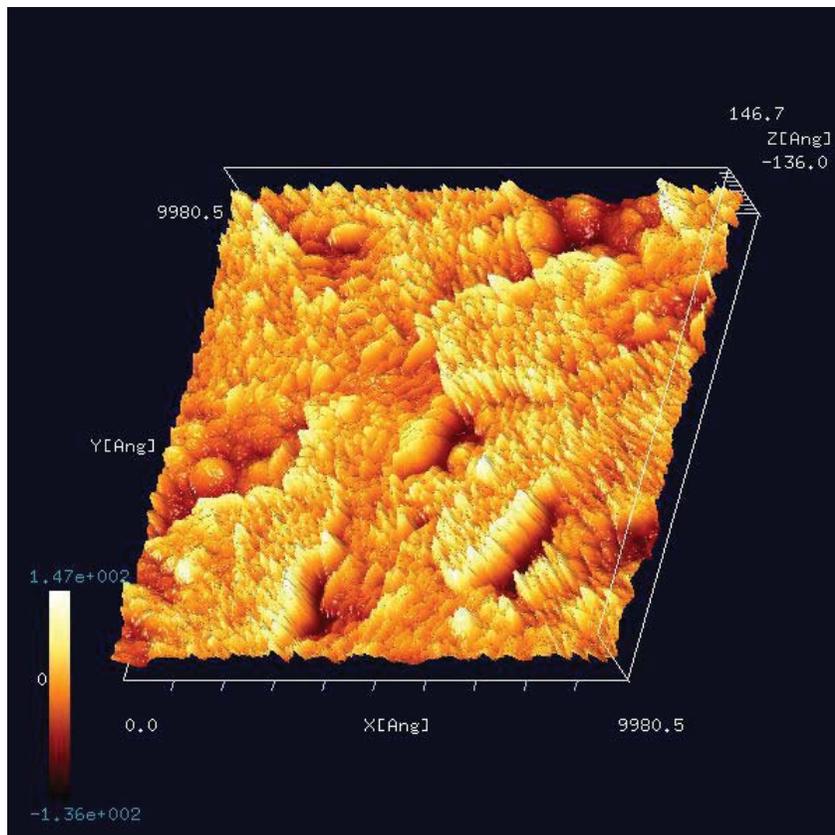
データの拡張子はxqd

データ読み込み例:



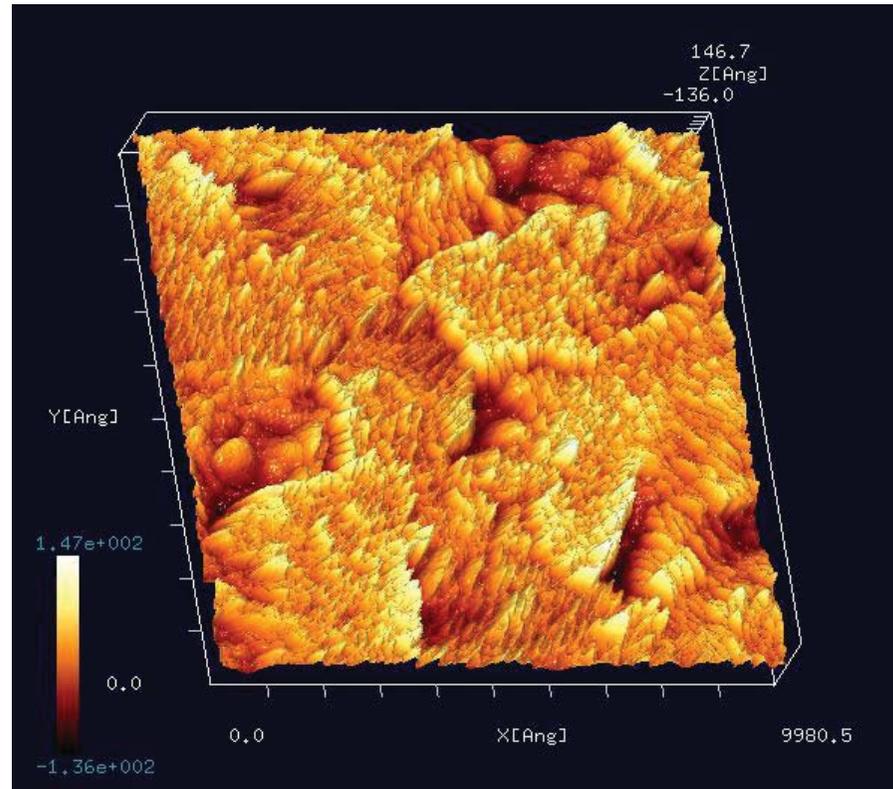
データの拡張子はxqd

データ読み込み例:



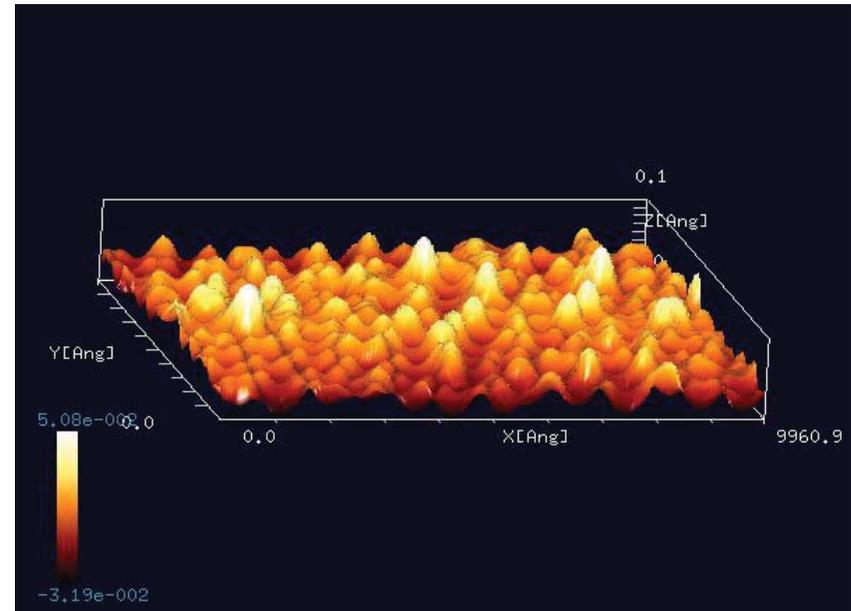
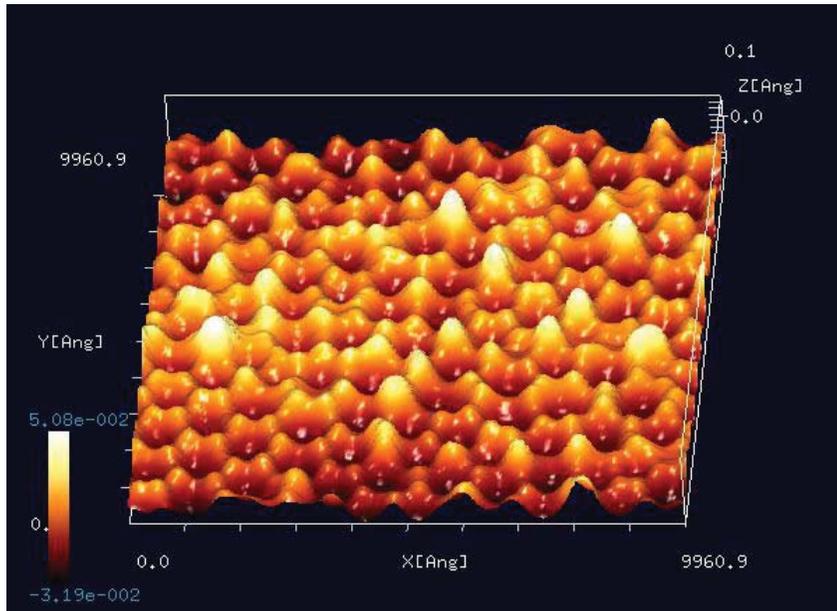
データの拡張子は000

データ読み込み例:



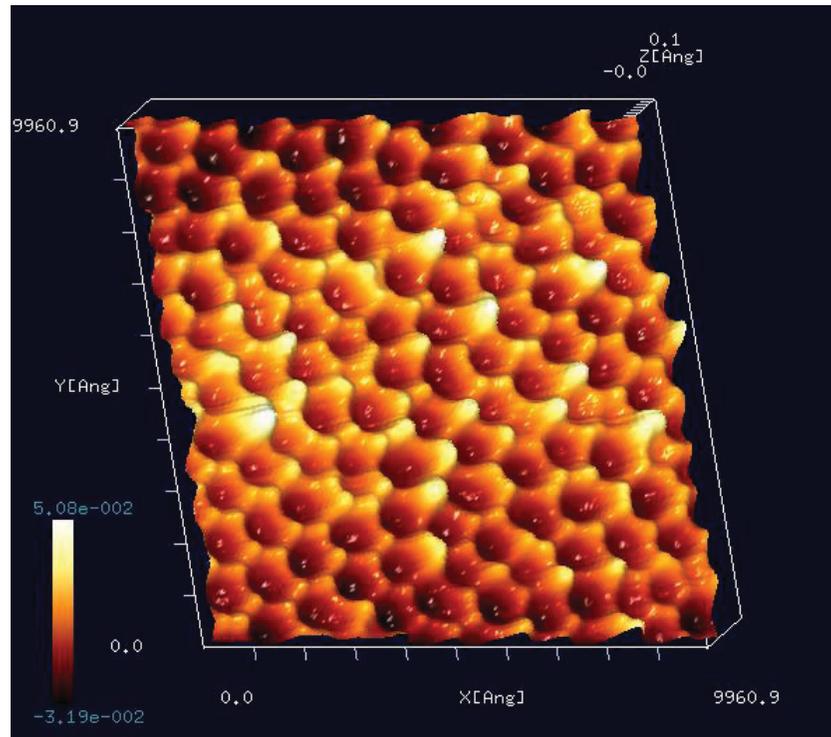
データの拡張子は000

データ読み込み例:



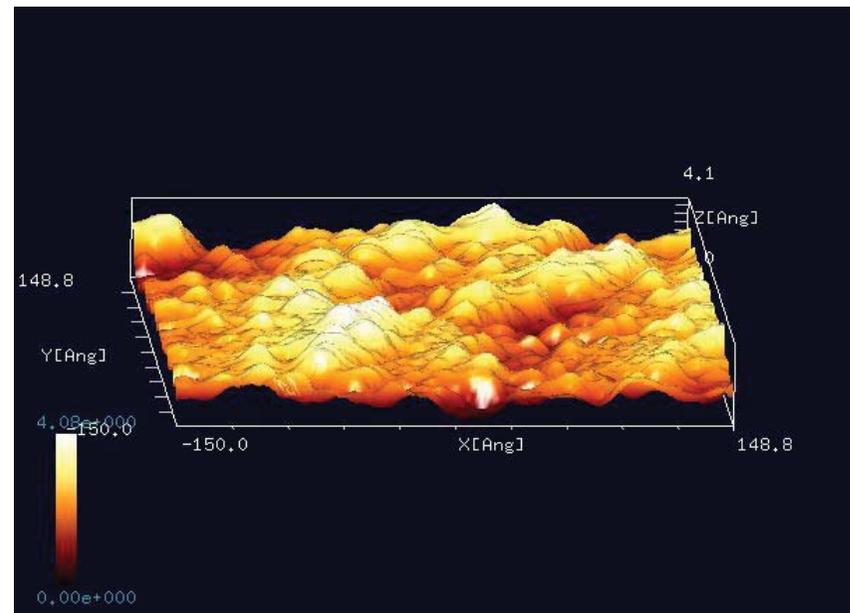
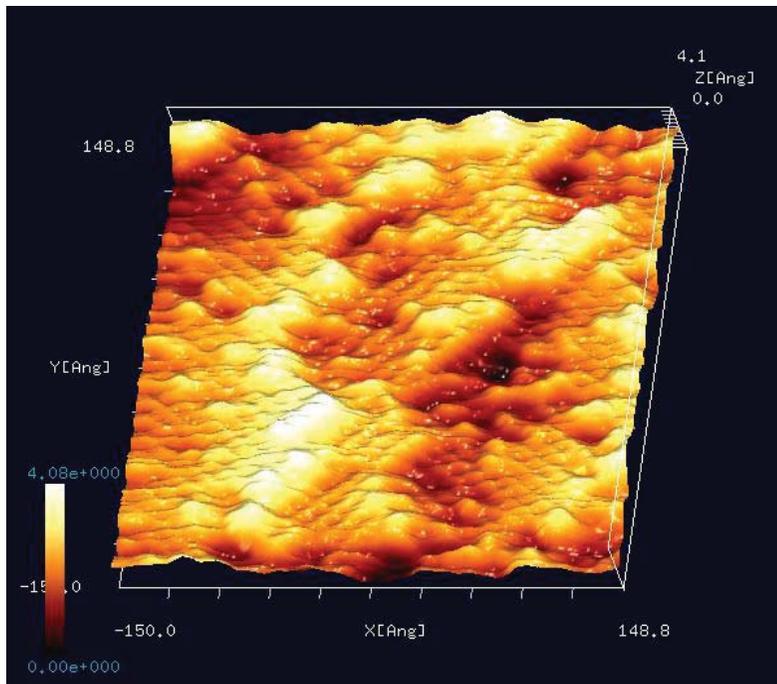
データの拡張子はtiff

データ読み込み例:



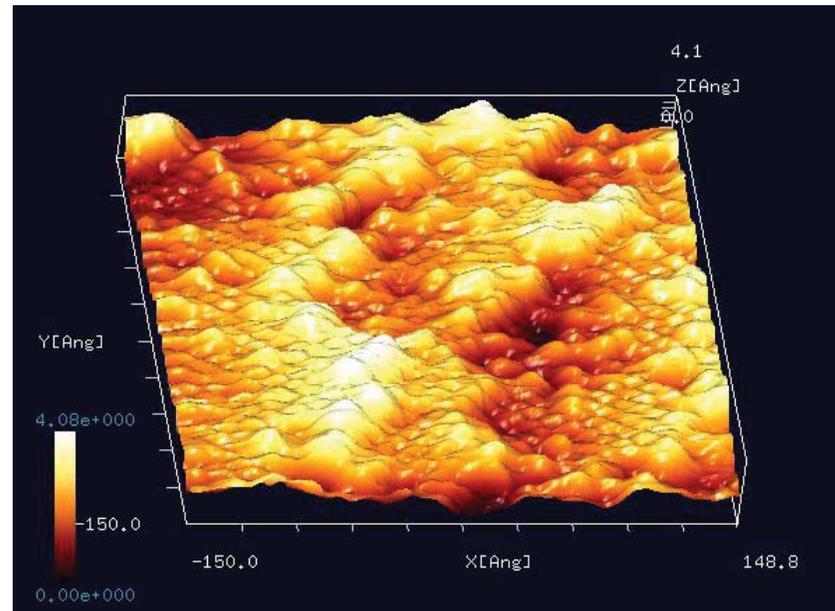
データの拡張子はtiff

データ読み込み例:



データの拡張子はtif

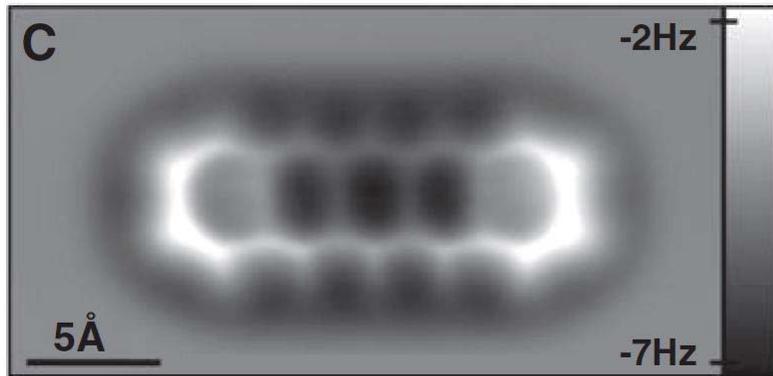
データ読み込み例:



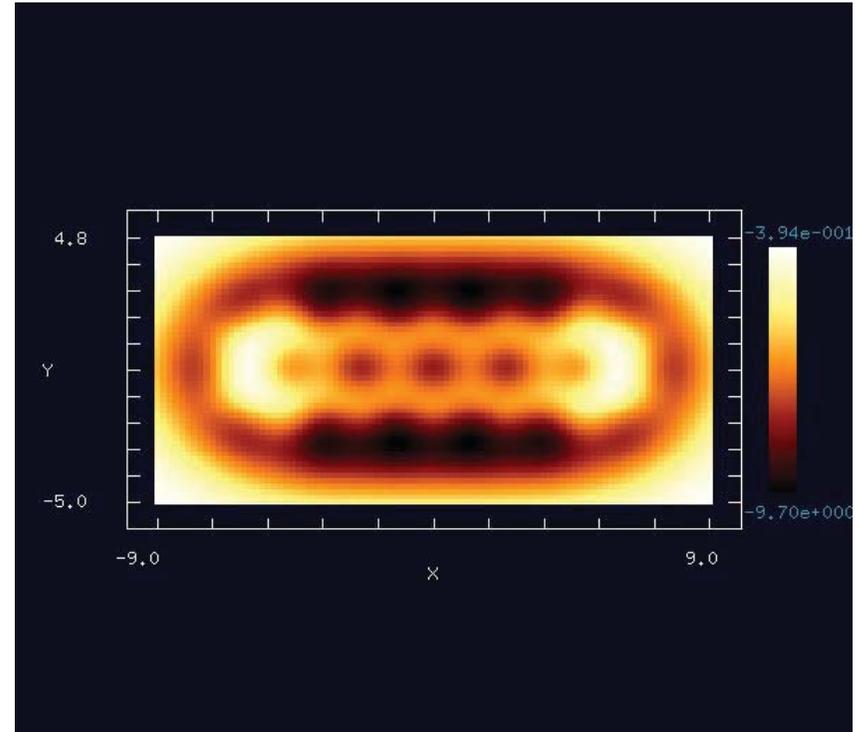
データの拡張子はtif

シミュレーションのデータの読み込み

シミュレーションデータの読み込み可能



AFM imaging of pentacene on Cu(111).
(Leo Gross, *et al.* (2009). The chemical
structure of a molecule
resolved by atomic force microscopy.
Science, 325, 1111)



左のシミュレーションデータ

SPM計算事例集&ニーズ/機能適応・類似計算例選択リスト

初心者(ユーザー)が希望する計算案件は右を満足させる必要がある

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	Blind Reconstruction法による探針形状推定	表面科学全般	Analyzer	SPM実験画像から探針形状を推定する逆問題のため、可能な探針形状は無数に存在する。そのため、パラメータを指定することで、ユーザーの好みの探針形状が選択できるようにされている。

類似計算例選択リスト

見方

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	Blind Reconstruction法による探針形状推定	表面科学全般	Analyzer	SPM実験画像から探針形状を推定する逆問題のため、可能な探針形状は無数に存在する。そのため、パラメータを指定することで、ユーザーの好みの探針形状が選択できるようにされている。

類似計算例選択リスト

【Analyzer】探針形状推定と探針影響除去

Blind Tip Reconstruction Methodにより、SPM実験データ画像から探針形状を推定し、この探針形状に関する情報を使って、オリジナルのSPM実験データ画像からアーティファクトを除去します。
先端が二股になった不完全な探針による人工的な立体構造のAFM像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルAFM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する

[「操作の様子」](#)
[計算手順書\(Excel\)](#)
[設定・出力ファイル\(Zip\)](#)

SPM実験画像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルSPM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する

[「操作の様子」](#)
[計算手順書\(Excel\)](#)
[設定・出力ファイル\(Zip\)](#)

SPM計算事例集&ニーズ/機能適応・類似計算例選択リスト

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	Blind Reconstruction法による探針形状推定	表面科学全般	Analyzer	SPM実験画像から探針形状を推定する逆問題のため、可能な探針形状は無数に存在する。そのため、パラメータを指定することで、ユーザーの好みの探針形状が選択できるようにされている。
<p data-bbox="410 596 990 635">【Analyzer】探針形状推定と探針影響除去</p> <p data-bbox="418 649 1958 771">Blind Tip Reconstruction Methodにより、SPM実験データ画像から探針形状を推定し、この探針形状に関する情報を使って、オリジナルのSPM実験データ画像からアーティファクトを除去します。 先端が二股になった不完全な探針による人工的な立体構造のAFM像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルAFM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する</p> <p data-bbox="445 778 714 868"> 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) </p> <p data-bbox="418 906 1730 1028">SPM実験画像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルSPM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する</p> <p data-bbox="445 935 714 1025"> 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) </p> <p data-bbox="410 1063 1019 1102">【Analyzer】探針形状推定・探針影響除去(1)</p>				

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	SPM実験画像からのアーティファクト除去	表面科学全般	GeoAFM	<p data-bbox="1440 249 1978 464">Analyzerによって得られた推定探針形状をデータとして保存し、これと実験画像データを組み合わせることで、試料のオリジナル画像を得ることが可能となる。</p> <p data-bbox="828 742 1978 778">【GeoAFM】探針形状データ、測定AFM像データから、試料表面形状を求めるモード</p> <p data-bbox="839 799 1968 921">・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像から、アーティファクトを除去した試料画像をシミュレーションによって求めたものです。</p> <p data-bbox="870 928 1326 956">「設定項目の入力、および、計算の様子」</p> <p data-bbox="870 963 1087 992">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="870 999 1139 1028">設定・出力ファイル(zip)</p> <p data-bbox="828 1049 1440 1085">【Analyzer】探針形状推定・探針影響除去(1)</p> <p data-bbox="828 1120 1440 1156">【Analyzer】探針形状推定・探針影響除去(2)</p>

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	ニューラルネットワーク学習による、試料のオリジナル画像の推定	表面科学全般	Analyzer	<p>SPM実験画像を元にして、探針の性質をニューラルネットワーク学習する。同一の探針で得られた実験画像であれば、試料のオリジナル画像を復元可能。</p> <p>【Analyzer】ニューラルネットワーク学習法による像補正</p> <p>ニューラルネットにより探針の描くSPM画像の特徴を学習し、この学習データを元に、探針によって生じたSPM画像のアーティファクトを除去します。</p> <p>理想的な探針によるコラーゲン分子のAFM像と、先端が二股になった不完全な探針によるコラーゲン分子のAFM像を元にして、ニューラルネットワーク学習を行い、先端が二股になった不完全な探針によるポリマー高分子AFM像のアーティファクトを除去する</p> <p>「操作の様子(前半)」</p> <p>「操作の様子(後半)」</p> <p>計算手順書(Excel)</p> <p>設定・出力ファイル(Zip)</p>

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	ステップのある標準試料を使った探針キャリブレーション	表面科学全般	GeoAFM	標準試料のオリジナル画像とSPM実験画像から、探針画像を高速で再現。
		<p>【GeoAFM】試料表面形状データ、測定AFM像データから、探針形状を求めるモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。 「設定項目の入力、および、計算の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) ・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、GroEL(シャペロニン)のAFM像、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。) 「設定項目の入力、および、計算の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) ・Si(111)-(7×7)DAS構造のAFM像、および、結晶原子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。 「設定項目の入力、および、計算の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) 		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
カンチレバー振 幅の絶対値評 価	実験で得られるフォー スカーブにおいて、レ バー/ピエゾ変位の校 正直線を使って求めら れる振幅を、シミュレ ーション結果と比較したい	ナノマテリアル、 化学、薬学、バ イオサイエンス	LiqAFM	カンチレバーの振動解析により 振幅を評価することが可能。
		<p>【LiqAFM】パラメータ・スキャンモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・真空中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の無い短冊形状としています。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) ・液体中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の2個開いた短冊形状としています。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) ・液体中で振動する三角形のカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) 		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
試料表面構造 パラメータ自動 推定	試料表面の傾斜を補正 したい	表面科学全般	Analyzer	傾斜補正機能対応済みである。
		<p>【Analyzer】実験データの読み込み、基板面の傾き補正、および、立体表示機能</p> <p>各メーカーのSPM実験装置から出力されたバイナリ形式の生の実験データを読み込み、基板面の傾斜を補正し、画像を立体表示します。</p> <p>RHK Technology Inc.のsm4形式のSPM実験データを読み込む</p> <p>「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip)</p> <p>Agilent Technologies (Molecular Imaging)のstp形式のSPM実験データを読み込む(その1)</p> <p>「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip)</p> <p>Agilent Technologies (Molecular Imaging)のstp形式のSPM実験データを読み込む(その2)</p> <p>「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip)</p> <p>Asylum Researchのibw形式のSPM実験データを読み込む</p> <p>「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip)</p> <p>Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その1)</p> <p>「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip)</p> <p>Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その2)</p> <p>「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip)</p> <p>Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その3)</p> <p>「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip)</p> <p>【Analyzer】デジタル画像処理機能(3)</p>		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
試料表面構造 パラメータ自動 推定	試料表面の構造をXYZ 座標データに変換した い	表面科学全般	Analyzer, GeoAFM	実験画像データを、独自のデー タファイル形式(.cube)で保存する ことで可能。
	結晶格子の長さ、角度、 断面の様子を知りたい	無機材料、特殊 合金、無機・有 機半導体	Analyzer	SPM実験画像上において、マウ スで2点を指定してその間の長さ、 断面図を、3点を指定して角度を、 計測・表示することが可能である。
	<p>【Analyzer】断面図の表示 SPMデータ画像上に2点を指定して、その2点を結ぶ線分での断面図を表示します。 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル</p> <p>【Analyzer】3点で表示される角度の計測 SPMデータ画像上において、3点A, B, Cを指定することにより、線分AB、線分BCの長さ、$\angle ABC$の 角度を測定します。 Si(111)-(7×7)DAS構造のSPM実験画像上に、三点A, B, Cを指定して、線分AB、線分BCの長さ、 および$\angle ABC$を測定する 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip)</p> <p>【Analyzer】Si(111)-(7x7)DASの実測・計算の比較例</p>			

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
SPM実験データ画像の読み込み	様々なメーカーのSPM実験装置から出力されるバイナリデータを画像表示したい	表面科学全般	Analyzer	Unisoku, Omicron, Asylum, JEOL, Agilent, Shimadzuなど主要SPMメーカーのデータ形式に対応済み。
<p data-bbox="401 354 1997 396">【Analyzer】実験データの読み込み、基板面の傾き補正、および、立体表示機能</p> <p data-bbox="401 404 1997 439">各メーカーのSPM実験装置から出力されたバイナリ形式の生の実験データを読み込み、基板面の傾斜を補正し、画像を立体表示します。</p> <p data-bbox="401 439 1997 475">RHK Technology Inc.のsm4形式のSPM実験データを読み込む</p> <p data-bbox="401 475 1997 504"> 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) </p> <p data-bbox="401 504 1997 532">Agilent Technologies (Molecular Imaging)のstp形式のSPM実験データを読み込む(その1)</p> <p data-bbox="401 532 1997 561"> 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) </p> <p data-bbox="401 561 1997 589">Agilent Technologies (Molecular Imaging)のstp形式のSPM実験データを読み込む(その2)</p> <p data-bbox="401 589 1997 618"> 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) </p> <p data-bbox="401 618 1997 646">Asylum Researchのibw形式のSPM実験データを読み込む</p> <p data-bbox="401 646 1997 675"> 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) </p> <p data-bbox="401 675 1997 704">Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その1)</p> <p data-bbox="401 704 1997 732"> 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) </p> <p data-bbox="401 732 1997 761">Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その2)</p> <p data-bbox="401 761 1997 789"> 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) </p> <p data-bbox="401 789 1997 818">Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その3)</p> <p data-bbox="401 818 1997 846"> 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) </p>				

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
カンチレバー形状	様々な形状のカンチレバー、多数の孔の開いたカンチレバーなどの、構造特性を知りたい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	LiqAFM	カンチレバー形状指定機能を充実させており、対応済み。
		<p>【LiqAFM】パラメータ・スキャンモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・真空中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の無い短冊形状としています。 <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) ・液体中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の2個開いた短冊形状としています。 <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) ・液体中で振動する三角形状のカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。 <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) <p>【LiqAFM】液中カンチレバーの固有振動解析</p> <p>【LiqAFM】非粘弾性試料解析モード</p>		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
エネルギー散逸	探針－試料間の相互作用によるエネルギーの散逸に関する情報を得たい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	FemAFM, CG, DFTB	周波数シフトAFM像のシミュレーションに関して対応済み。
		<p>【FemAFM】周波数シフト像モード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・Si(001)表面の周波数シフトAFM像をシミュレーションによって求めたものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) ・HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)の周波数シフトAFM像をシミュレーションによって求めたもの。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) ・Collagen(Collagen alpha-1(III) chain)の周波数シフトAFM像をシミュレーションによって求めたもの。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) ・Collagen(COLLAGEN ALPHA 1)の周波数シフトAFM像をシミュレーションによって求めたもの。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) <p>【CG】高さ一定・ノンコンタクトモード</p> <p>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。周波数シフト像を得ることができます。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・CO探針による、ペンタセン分子の周波数シフト像シミュレーション 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) 		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
SPM実験データのデジタル画像処理	実験データ画像に対して、以下のデジタル加工を施したい ・3D表示 ・非線形コントラスト調整 ・ノイズ除去 ・エッジ抽出 ・フーリエ変換による特定周波数成分の強調表示		Analyzer	Analyzerには、様々なデジタル画像処理機能が実装済みである。
<p>【Analyzer】コントラスト調整機能 ガンマ補正により、SPMデータ画像に対してコントラスト調整を行います。 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip)</p> <p>【Analyzer】ノイズ除去機能 メディアンフィルタ処理により、SPMデータ画像に対してノイズ除去できます。 「操作の様子」 計算手順書 設定・出力ファイル(Zip)</p> <p>【Analyzer】エッジ抽出機能 Sobelフィルタにより、SPMデータ画像に対してエッジ抽出できます。 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip)</p> <p>【Analyzer】画像のフーリエ解析 SPM実験画像データをフーリエ解析し、特定の周波数成分を強調した図に変換します。 SPM実験データ画像をフーリエ解析することにより高周波を強調した画像に変換する 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) SPM実験データ画像をフーリエ解析することにより低周波を強調した画像に変換する 「操作の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip)</p>				

SPM実験データの
デジタル画像
処理

実験データ画像に対し
て、以下のデジタル加
工を施したい

- 3D表示
- 非線形コントラスト調
整
- ノイズ除去
- エッジ抽出
- フーリエ変換による特
定周波数成分の強調
表示

【Analyzer】画像のフーリエ解析

【Analyzer】画像のフーリエ解析・高解像度化

【Analyzer】デジタル画像処理機能(1)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
KPFM対応	半導体表面のドーパントの位置、電子状態、深さ方向の分布について調べたい	無機・有機半導体	DFTB	DFTBにより、KPFMシミュレーションが実行可能。
	<p>【DFTB】KPFMモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・KPFMを用いて、不純物の窒素でドーブさせたSi(001)面の局所接触電位差像(LCPD像)を計算したものです。 <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) ・KPFMを用いて、TiO₂(110)表面のLCPD像を計算したものです。 <ul style="list-style-type: none"> (*)この計算を実行するためには、別途、チタン(Ti)と白金(Pt)のパラメータを購入していただく必要があります。 <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) <p>【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像</p> <p>【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像</p>			
	AFM, KPFM同時測定をシミュレーションしたい	無機・有機半導体	DFTB	DFTBにより、周波数シフトAFM像、KPFM像をシミュレーション可能。
<p>【DFTB】周波数シフトAFM像、KPFM像の計算例</p> <p>【DFTB】Olympiceneの周波数シフトAFMシミュレーション</p>				

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
原子モデリング・ツール機能の充実	<p>実験対象試料として、ユーザーの好みに応じて、自由に原子種を選んで、結晶薄膜構造モデルを作成したい</p>	<p>無機半導体、特殊合金、無機材料一般</p>	<p>SetModel</p>	<p>SetModelを使えば、簡単に結晶構造モデルを作成可能。</p>
	<p>"New Slab"タブのその他の機能 [動画] [操作手順書] [関連ファイル]</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ミラー指数の設定方法 ・空いている結合の手を水素終端する方法 ・結晶構造情報のAtom Positionsの編集方法 <p>【SetModel】原子モデル作成 欠陥のあるグラファイトの作成</p> <p>【SetModel】原子モデル作成 カーボンナノチューブモデルの作成</p>			
	<p>実験対象探針として、ユーザーの好みに応じて、自由に原子種を選んで、立体構造モデルを作成したい</p>	<p>無機半導体、特殊合金、無機材料一般</p>	<p>SetModel</p>	<p>SetModelを使えば、簡単に探針構造モデルを作成可能。</p>
<p>シリコンクラスターの探針モデルの作り方 [動画] [操作手順書] [関連ファイル]</p>				

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
高分子(タンパク質、DNAなど)のAFM像	高分子構造をProtein Data Bank等から取り込み、AFM像シミュレーションを行いたい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	GeoAFM, FemAFM	GeoAFM, FemAFMでは、Protein Data Bankに登録されているデータを読み込み、これを実験試料としてAFMシミュレーション可能
<p data-bbox="410 404 1643 439">【GeoAFM】探針形状データ、試料表面形状データから、測定AFM像データを求めるモード*</p> <ul data-bbox="435 461 1968 518" style="list-style-type: none"> ・Cone型探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。) <p data-bbox="462 525 917 546">「設定項目の入力、および、計算の様子」</p> <p data-bbox="462 554 679 575">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="462 582 731 604">設定・出力ファイル(Zip)</p> <ul data-bbox="435 618 1968 675" style="list-style-type: none"> ・先端が二股になっている不完全な探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。) <p data-bbox="462 682 917 704">「設定項目の入力、および、計算の様子」</p> <p data-bbox="462 711 679 732">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="462 739 731 761">設定・出力ファイル(Zip)</p> <p data-bbox="410 796 1549 832">【GeoAFM】試料表面形状データ、測定AFM像データから、探針形状を求めるモード*</p> <ul data-bbox="435 853 1968 932" style="list-style-type: none"> ・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。 <p data-bbox="462 939 917 961">「設定項目の入力、および、計算の様子」</p> <p data-bbox="462 968 679 989">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="462 996 731 1018">設定・出力ファイル(Zip)</p> <p data-bbox="410 1061 845 1096">【FemAFM】ノンコンタクトモード</p> <ul data-bbox="435 1118 1580 1146" style="list-style-type: none"> ・DNA(Self-assembled Three-Dimensional DNA)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。 <p data-bbox="462 1153 938 1175">「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p data-bbox="462 1182 627 1203">「結果の表示」</p> <p data-bbox="462 1210 679 1232">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="462 1239 731 1260">設定・出力ファイル(Zip)</p>				

高分子(タンパク質、DNAなど)のAFM像

- 【FemAFM】double-tipを使った、HOPG基板上の1-clgのAFM像、周波数シフト像シミュレーション
- 【GeoAFM】P2X₄受容体のAFM像
- 【GeoAFM】生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション
- 【GeoAFM】RhodopsinのAFM像
- 【GeoAFM】液中のtubulinのFM-AFM観察とAFMシミュレーション
- 【GeoAFM】水溶液中のDNAの直接観察とシミュレーション
- 【GeoAFM】液中の正方晶リゾチーム単結晶(110)表面の決定
- 【GeoAFM】回転分子モーターF₁-ATPaseのAFM観察とシミュレーション
- 【FemAFM】ラクトン系高分子ポリマーのAFMシミュレーション
- 【FemAFM】ノンコンタクトモード
- 【GeoAFM】試料とAFM像から探針形状を予測
- 【GeoAFM】バクテリオロドプシンのAFM像
- 【GeoAFM】タバコモザイクウィルスのAFM像
- 【FemAFM】DNAのAFM像、周波数シフトAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
試料表面の粘弾性の取り扱い	大気中で、探針－試料間の粘弾性接触力学を考慮したフォースカーブ等を得たい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	FemAFM	FemAFMにおいて、大気中での、試料表面に表面張力で指定される凝着の効果を取り入れた、粘弾性接触力学シミュレーションに対応済み。
<p>【FemAFM】粘弾性接触解析モード*</p> <ul style="list-style-type: none"> ・粘弾性のあるSi(001)表面に探針が凝着する際の、探針の垂直方向の変位、および、探針の感じる外力の時間変化をシミュレーションによって求めたもの。(ばね定数が小さい場合) <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「Excelファイルからのグラフの表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) ・粘弾性のあるSi(001)表面に探針が凝着する際の、探針の垂直方向の変位、および、探針の感じる外力の時間変化をシミュレーションによって求めたもの。(ばね定数が大きい場合) <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「Excelファイルからのグラフの表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) 				

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
試料表面の粘弾性の取り扱い	液体中で、探針－試料間の粘弾性接触力学を考慮したフォースカーブ等を得たい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	LiqAFM	LiqAFMにおいて、液体中での、試料表面に表面張力で指定される凝着の効果を取り入れた、粘弾性接触力学シミュレーションに対応済み。
		<p>【LiqAFM】粘弾性試料接触解析モード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・真空中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。真空中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとなります。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的小きな値に設定されているとします。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「Excelファイルからのグラフの表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) <ul style="list-style-type: none"> ・液体中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。液体中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとなります。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的大きな値に設定されているとします。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「Excelファイルからのグラフの表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) <p>【LiqAFM】溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較</p> <p>【LiqAFM】粘弾性接触解析</p>		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
AFM像の高速シミュレーション	ミクロンスケールでの、探針・試料・測定AFM画像の、簡便かつ高速なシミュレーションを行いたい[基板上のC ₆₀ 吸着層(欠陥を含む)、微粒子のAFM像など]	ナノマテリアル、無機材料一般、化学、薬学、バイオサイエンス	GeoAFM	GeoAFMでは、幾何学的手法による、高速相互予測シミュレーションが可能。(あくまで幾何学的手法であり、物理学的な考察は乏しいが、分子・原子の形状を再現し、適用範囲が極めて広い。)
<p>【GeoAFM】生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション</p> <p>【GeoAFM】標準型および簡易高速型AFMシミュレーションの比較</p> <p>【GeoAFM】バクテリオロドプシンのAFM像</p> <p>【GeoAFM】タバコモザイクウィルスのAFM像</p>				

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
<p>探針・試料の、原子間力による変形効果</p>	<p>探針・試料のファンデルワールスカによる変形効果を考慮した、AFMシミュレーションを行いたい</p>	<p>ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス</p>	<p>FemAFM</p>	<p>FemAFMでは、生体材料等の柔らかい物質表面をAFM探針で調べる際の、探針・試料間のファンデルワールスカによる変形効果を考慮したシミュレーションが可能。</p> <p>【FemAFM】ノンコンタクトモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。 <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) ・DNA(Self-assembled Three-Dimensional DNA)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。 <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) ・Collagen(Collagen alpha-1(III) chain)のAFM像をシミュレーションによって求めたもの。 <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) ・Collagen(COLLAGEN ALPHA 1)のAFM像をシミュレーションによって求めたもの。 <ul style="list-style-type: none"> 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) <p>【FemAFM】試料モデルからの相互作用・変形による測定画像の予測</p>

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
構造最適化 AFM像シミュレーション機能	エネルギー的に安定な原子配置の分子に対する、AFMシミュレーション画像を得たい ・基板に吸着したポルフィリン、フタロシアニン等やや大きめの分子のAFM像 ・金属表面上の自己組織化膜、長鎖分子のAFM像	無機・有機半導体、有機高分子	CG	CGは、古典力場法、分子力学(MM)法によって、エネルギー的に安定な原子配置を探索し、AFM測定における、探針・試料間の相互作用による分子構造の変形を調べることが可能。(安定な構造を見出すだけで、時間変化は調べられない。)
<div data-bbox="824 596 1268 639" style="background-color: #e0f2f1; padding: 2px;">【CG】フォースカーブ測定モード</div> <p data-bbox="853 645 1620 674">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。</p> <ul data-bbox="901 692 1931 749" style="list-style-type: none"> ・カーボンナノチューブ探針による、4つのオクタン分子鎖の構造最適化AFMフォースカーブシミュレーション <p data-bbox="901 759 1578 788">この例では試料構造の変形を考慮に入れた計算を行います。</p> <p data-bbox="928 792 1398 821">「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p data-bbox="928 825 1087 853">「結果の表示」</p> <p data-bbox="928 858 1149 886">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="928 891 1205 919">設定・出力ファイル(zip)</p> <div data-bbox="824 939 1554 982" style="background-color: #e0f2f1; padding: 2px;">【CG】方解石(calcite, CaCO₃)の周波数シフトAFM像</div> <div data-bbox="824 1016 1491 1059" style="background-color: #e0f2f1; padding: 2px;">【CG】ポリアセチレン分子の周波数シフトAFM像</div>				

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
分子動力学 AFM像シミュレーション機能	分子構造の時間変化を調べて、AFMシミュレーションに反映させたい ・TiO ₂ (110)表面に吸着したギ酸などの分子のAFM像 ・金属表面上の自己組織化膜、長鎖分子のAFM像	無機・有機半導体、有機高分子	MD	MDは、古典分子動力学法に従って、分子構造の時間変化を数値計算し、AFM測定において、探針・試料間の相互作用による分子構造の時間変化を、シミュレーションすることが可能。
		<p data-bbox="824 582 1984 625">【MD】1層、2層、3層カーボンナノチューブの側面を押し込んでフォース・カーブを測定</p> <p data-bbox="824 654 1239 696">【MD】apo-ferritinの圧縮実験</p> <p data-bbox="824 725 1156 768">【MD】GFPの圧縮実験</p> <p data-bbox="824 796 1549 839">【MD】MD法によるタンパク質分子の圧縮・伸長実験</p>		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
液体中での原子スケール構造最適化AFM像シミュレーション機能	試料・探針が、液体中環境と相互作用することによって生じる自由エネルギーの変化を考慮した上で、エネルギー的に安定な原子配置の分子に対する、AFMシミュレーション画像を得たい[純水中で、カーボンナノチューブを探針として、グラフェンシートに近付けたときのフォースカーブを調べる、等で有効]	無機・有機半導体、有機高分子	CG-RISM	CG-RISMは、Reference Interaction Site Model (RISM)法の採用により、液体中での、エネルギー的に安定な原子配置の探索を実行する。これにより、AFM測定における、探針・試料間の相互作用による分子構造の変形をシミュレーションすることが可能(。安定な構造を見出すだけで、時間変化は調べられない。)
<div style="background-color: #e0e0e0; padding: 5px;"> <p>【CG】フォースカーブ測定モード</p> <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・カーボンナノチューブ探針による、グラフェンシートの水中AFMフォースカーブシミュレーション、および真空中AFMフォースカーブシミュレーション <p>「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p>「結果の表示」</p> <p>「設定項目を再入力、計算、結果の表示」</p> <p>計算手順書(Excel)</p> <p>設定・出力ファイルその1(Zip)</p> <p>設定・出力ファイルその2(Zip)</p> </div>				

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
温度の効果を取り入れた、分子動力学AFM像シミュレーション機能	温度の効果による緩和を取り入れた、分子構造の時間変化を調べ、AFMシミュレーションに反映させたい	無機・有機半導体、有機高分子	MD	MDでは、統計力学の原理に従い、温度の効果は、原子の速度に取り入れられる仕様となっています。従って、温度一定の条件下で、分子構造の時間変化を数値計算し、AFMシミュレーションすることが可能となっています。
		<div data-bbox="824 492 1052 535" style="background-color: #e0f0ff; padding: 2px;">【MD】緩和計算</div> <p data-bbox="853 539 1657 568">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。</p> <ul data-bbox="895 571 1408 821" style="list-style-type: none"> <li data-bbox="895 571 1408 635">・ジクロロベンゼンの構造緩和 「設定項目の入力、計算開始、結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) <li data-bbox="895 692 1408 821">・ポルフィリンの構造緩和 「設定項目の入力、計算開始、結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) 		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
ソフトマテリアルの周波数シフトAFM像	タンパク質、DNAなどのソフトマテリアルの、 ・周波数シフトAFM像をシミュレーションしたい ・シフトした周波数の絶対値を評価したい ・カンチレバーの運動エネルギーが、試料に緩和されてゆくことを確認したい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	FemAFM, CG, DFTB	FemAFM、CG、および、DFTBは、周波数シフトAFM像シミュレーション機能を備えています。FemAFMは、試料の大きさが μm オーダーの有機高分子などの場合に適しています。CGは、試料の大きさが数十Åオーダーの有機分子などを調べるのに適しています。DFTBは、さらに小さな数Åオーダーの試料を調べるのに適しています。ユーザーの好みに応じて、ソルバーを使い分けることができるようになっています。
<div data-bbox="824 805 1295 846" style="background-color: #e0f2f1; padding: 5px;">【FemAFM】周波数シフト像モード</div> <p data-bbox="857 862 1933 889">・Collagen(COLLAGEN ALPHA 1)の周波数シフトAFM像をシミュレーションによって求めたもの。</p> <p data-bbox="886 893 1355 921">「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p data-bbox="886 925 1048 952">「結果の表示」</p> <p data-bbox="886 956 1104 983">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="886 988 1152 1015">設定・出力ファイル(Zip)</p> <div data-bbox="824 1061 1100 1102" style="background-color: #e0f2f1; padding: 5px;">【CG】カー定モード</div> <p data-bbox="870 1115 1960 1172">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求めます。(水中計算は対応していません。)</p> <p data-bbox="901 1176 1769 1203">・ダイヤモンド探針による、コラーゲン鎖のカー定モードAFM像シミュレーション</p> <p data-bbox="930 1208 1400 1235">「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p data-bbox="930 1239 1091 1266">「結果の表示」</p> <p data-bbox="930 1270 1147 1298">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="930 1302 1195 1329">設定・出力ファイル(Zip)</p>				

ソフトマテリアルの周波数シフトAFM像

タンパク質、DNAなどのソフトマテリアルの、

- 周波数シフトAFM像をシミュレーションしたい
- シフトした周波数の絶対値を評価したい
- カンチレバーの運動エネルギーが、試料に緩和されてゆくことを確認したい

【FemAFM】double-tipを使った、HOPG基板上の1-clgのAFM像、周波数シフトAFM像シミュレーション

【CG】ペンタセンキノン分子の周波数シフトAFM像シミュレーション

【CG】ペンタセンのAFM(周波数シフト像)観察とシミュレーション

【FemAFM】ラクトン系高分子ポリマーのAFMシミュレーション

【FemAFM】周波数シフト像モード

【DFTB】ペンタセン分子のAFM, STM観察とシミュレーション

【CG】DNAのNC-AFMシミュレーション

【FemAFM】DNAのAFM像、周波数シフトAFM像

【DFTB】HOPGのSTM像およびAFM像

【CG】HOPGの周波数シフトAFM像

【DFTB】Au(111)基板上的の水分子のSTM像およびAFM像

【DFTB】ルブレン分子のSTM像およびAFM像

【CG】ルブレン分子の周波数シフトAFM像

【DFTB】TPD分子のSTM像およびAFM像

【CG】TPD分子の周波数シフトAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
STM, AFMの高度なシミュレータ	第一原理DFTに基づく像シミュレーション	ナノマテリアル、ナノエレクトロニクス、表面物性	DFTB	量子力学的な電子状態の計算によりSPM像をシミュレート。
<p>【DFTB】AFMモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・AFMを用いて、水素終端されたSi(001)面を走査した、周波数シフト像を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) <p>【DFTB】STMモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・STMを用いて、水素終端されたSi(001)面から水素を一つ取り除いた表面のトンネル電流像を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) ・STMを用いて、Si(001)-3x1:H表面のトンネル電流像を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) ・STMを用いて、Au(001)-5x1表面のトンネル電流像を計算したものです。 (*)この計算を実行するためには、別途、金(Au)のパラメータを購入していただく必要があります。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) 				

STM, AFMの
高度な
シミュレータ

第一原理DFTに基づく
像シミュレーション

【DFTB】RuO₂(110)表面のSTM像

【DFTB】Bardeenの摂動法とDFTB法によるSTM像のシミュレーション

【DFTB】ポルフィリンのSTM像

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション

【DFTB】ペンタセン分子のAFM, STM観察とシミュレーション

【DFTB】Si(111)√3×√3-AgのSTM像

【DFTB】Ag(111)上のBi原子のSTM像

【DFTB】Ag(111)√3×√3-BiのSTM像

【DFTB】銅フタロシアニンのトンネル電流像

【DFTB】C₆Br₆モノレイヤーのSTMシミュレーション

【DFTB】炭化水素C₂₆H₁₄のSTMシミュレーション

【DFTB】Olympiceneの周波数シフトAFMシミュレーション

【DFTB】Mo(111)のconstant current STM像

【DFTB】InAs-GaSb界面の(110)面のconstant current STM像

【DFTB】Perylene on Ag(110)のconstant current STM像

【DFTB】ポリチオフェンワイヤのconstant current STM像

【DFTB】HOPGのSTM像およびAFM像

【DFTB】Au(111)基板上的の水分子のSTM像およびAFM像

【DFTB】ルブレン分子のSTM像およびAFM像

【DFTB】TPD分子のSTM像およびAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
STM, AFMの高度なシミュレータ	測定モード(FM-AFM, STM)毎に原子レベルでのAFM像、STM像、トンネル分光スペクトル、KPFM像を予測	ナノマテリアル、ナノエレクトロニクス、ナノデバイス、量子化学、表面物性	DFTB	STM, STS, AFM, KPFMの4つの測定モードに対応。
<p>【DFTB】AFMモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・AFMを用いて、水素終端されたSi(001)面を走査した、周波数シフト像を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) <p>【DFTB】KPFMモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・KPFMを用いて、不純物の窒素でドーブさせたSi(001)面の局所接触電位差像(LCPD像)を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) <p>【DFTB】STMモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・STMを用いて、水素終端されたSi(001)面から水素を一つ取り除いた表面のトンネル電流像を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) <p>【DFTB】STSモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・STSを用いて、Si(001)-3x1:H表面のトンネル電流分光を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) 				

STM, AFMの
高度な
シミュレータ

測定モード(FM-AFM,
STM)毎に原子レベルで
のAFM像、STM像、トン
ネル分光スペクトル、
KPFM像を予測

【DFTB】RuO₂(110)表面のSTM像

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像

【DFTB】TiO₂(110)表面のLCPD像

【DFTB】周波数シフトAFM像、KPFM像の計算例

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション

【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のSTM像シミュレーション

【DFTB】Au(001)再構成表面のSTM観察とシミュレーション

【DFTB】ペンタセン分子のAFM, STM観察とシミュレーション

【DFTB】TiO₂(110)面のAFM, KPFM観察とシミュレーション

【DFTB】Olympiceneの周波数シフトAFMシミュレーション

【DFTB】Mo(111)のconstant current STM像

【DFTB】InAs-GaSb界面の(110)面のconstant current STM像

【DFTB】Perylene on Ag(110)のconstant current STM像

【DFTB】ポリチオフェンワイヤのconstant current STM像

【DFTB】HOPGのSTM像およびAFM像

【DFTB】Au(111)基板上的の水分子のSTM像およびAFM像

【DFTB】ルブレン分子のSTM像およびAFM像

【DFTB】TPD分子のSTM像およびAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
観測中のサンプルをシミュレート	<ul style="list-style-type: none"> • サンプルの形状変化 • サンプルの動的反応 	バイオサイエンス、有機化学	FemAFM, LiqAFM, MD	生体高分子などの連続弾性体はFEM、LIQが対応。オクタンなどの低分子はMDが対応。
	<div data-bbox="404 307 942 349" style="background-color: #e0ffe0; padding: 5px;">【LiqAFM】粘弾性試料接触解析モード</div> <p data-bbox="414 357 1947 478">・真空中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。真空中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとなります。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的大きな値に設定されているとします。</p> <p data-bbox="445 485 922 514">「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p data-bbox="445 521 859 549">「Excelファイルからのグラフの表示」</p> <p data-bbox="445 556 673 585">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="445 592 714 621">設定・出力ファイル(Zip)</p> <p data-bbox="414 621 1947 735">・真空中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。真空中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとなります。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的小さな値に設定されているとします。</p> <p data-bbox="445 742 922 771">「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p data-bbox="445 778 859 806">「Excelファイルからのグラフの表示」</p> <p data-bbox="445 813 673 842">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="445 849 714 878">設定・出力ファイル(Zip)</p> <p data-bbox="414 878 1947 992">・液体中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。液体中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとなります。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的大きな値に設定されているとします。</p> <p data-bbox="445 999 922 1028">「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p data-bbox="445 1035 859 1063">「Excelファイルからのグラフの表示」</p> <p data-bbox="445 1071 673 1099">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="445 1106 714 1135">設定・出力ファイル(Zip)</p> <div data-bbox="404 1142 859 1185" style="background-color: #e0ffe0; padding: 5px;">【MD】フォースカーブ測定モード</div> <p data-bbox="414 1192 1191 1220">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。</p> <ul data-bbox="445 1220 797 1249" style="list-style-type: none"> ・オクタン分子のフォースカーブ <p data-bbox="476 1256 963 1285">「設定項目の入力、計算開始、結果の表示」</p> <p data-bbox="476 1292 694 1320">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="476 1328 756 1356">設定・出力ファイル(Zip)</p>			

観測中のサンプルをシミュレート

【FemAFM】試料モデルからの相互作用・変形による測定画像の予測

【MD】apo-ferritinの圧縮実験

【MD】GFPの圧縮実験

【MD】MD法によるタンパク質分子の圧縮・伸長実験

【MD】フォースカーブ測定モード

【MD】高さ一定モード

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
カンチレバーの 取り付け角度	探針の角度による影響	バイオサイエ ンス	GeoAFM, FemAFM, CG, MD, DFTB	GUIで探針の傾きを設定可能。
	【MD】原子分子ナノ材料AFM像シミュレータの活用事例			
	水中計測におけるカンチレバー角度の影響	バイオサイエ ンス	LiqAFM	カンチレバーの傾きを考慮して水中でのカンチレバーの振動をシミュレート可能。
カンチレバーの 環境設定	・大気中で温度、湿度の影響 ・液中で溶液の種類	バイオサイエ ンス	LiqAFM	大気中の温度、湿度の影響、或いは、溶液の種類は流体の密度、粘性で指定可能。
		【LiqAFM】溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
バイオ関係分子のAFM像	コラーゲン分子のシミュレーション	バイオサイエンス、医学、薬学	GeoAFM, FemAFM, CG, MD	高速で計算するにはGeoAFMが適しており、精密に計算するにはCG, MDが適している。
		<div data-bbox="824 307 1902 392" style="background-color: #e0f2f1; padding: 5px;"> 【GeoAFM】探針形状データ、試料表面形状データから、測定AFM像データを求めるモード </div> <ul style="list-style-type: none"> ・Cone型探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。) 「設定項目の入力、および、計算の様子」 「計算手順書(Excel)」 「設定・出力ファイル(Zip)」 <div data-bbox="824 606 1274 649" style="background-color: #e0f2f1; padding: 5px;"> 【FemAFM】ノンコンタクトモード </div> <ul style="list-style-type: none"> ・Collagen(Collagen alpha-1(III) chain)のAFM像をシミュレーションによって求めたもの。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 「計算手順書(Excel)」 「設定・出力ファイル(Zip)」 <div data-bbox="824 835 1108 878" style="background-color: #e0f2f1; padding: 5px;"> 【CG】カー一定モード </div> <p>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求めます。(水中計算は対応していません。)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ダイヤモンド探針による、コラーゲン鎖のカー一定モードAFM像シミュレーション 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 「計算手順書(Excel)」 「設定・出力ファイル(Zip)」 <div data-bbox="824 1120 1315 1163" style="background-color: #e0f2f1; padding: 5px;"> 【MD】高さ一定・ノンコンタクトモード </div> <p>探針を振動させながら高さ一定で平面上を走査し、周波数シフトを計算します。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ノンコンタクトモードでコラーゲン分子を走査したときの、周波数シフト像を計算します。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 「計算手順書(Excel)」 「設定・出力ファイル(Zip)」 		

バイオ関係分子
のAFM像

コラーゲン分子のシミュ
レーション

【FemAFM】ノンコンタクトモード

【MD】HOPG基板上的コラーゲンのAFMシミュレーション

【MD】高さ一定・ノンコンタクトモード

【GeoAFM】探針と試料からAFM像を予測

【GeoAFM】試料とAFM像から探針形状を予測

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
バイオ関係分子のAFM像	コラーゲン細繊維、染色体、DNA、アミロイド、微小管、蛋白質のシミュレーション	バイオサイエンス、医学、薬学	GeoAFM, FemAFM	非常に分子量の大きい組織をシミュレートするにはGeoAFMが適している。弾性体として精密に計算するにはFemAFMが適している。
		<p> 【GeoAFM】探針形状データ、試料表面形状データから、測定AFM像データを求めるモード </p> <ul style="list-style-type: none"> ・Cone型探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。) 「設定項目の入力、および、計算の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) ・先端が二股になっている不完全な探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。) 「設定項目の入力、および、計算の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) <p> 【GeoAFM】試料表面形状データ、測定AFM像データから、探針形状を求めるモード </p> <ul style="list-style-type: none"> ・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、GroEL(シャペロニン)のAFM像、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。) 「設定項目の入力、および、計算の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) <p> 【FemAFM】double-tipを使った、HOPG基板上の1-clgのAFM像、周波数シフトAFM像シミュレーション </p> <p> 【GeoAFM】P2X₄受容体のAFM像 </p> <p> 【GeoAFM】生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション </p>		

バイオ関係分子
のAFM像

コラーゲン細繊維、染
色体、DNA、アミロイド、
微小管、蛋白質のシ
ミュレーション

【GeoAFM】RhodopsinのAFM像

【GeoAFM】液中のtubulinのFM-AFM観察とAFMシミュレーション

【GeoAFM】水溶液中のDNAの直接観察とシミュレーション

【GeoAFM】液中の正方晶リゾチーム単結晶(110)表面の決定

【GeoAFM】回転分子モーターF₁-ATPaseのAFM観察とシミュレーション

【MD】apo-ferritinの圧縮実験

【MD】GFPの圧縮実験

【MD】MD法によるタンパク質分子の圧縮・伸長実験

【GeoAFM】探針と試料からAFM像を予測

【GeoAFM】試料とAFM像から探針形状を予測

【GeoAFM】バクテリオロドプシンのAFM像

【GeoAFM】タバコモザイクウィルスのAFM像

【FemAFM】DNAのAFM像、周波数シフトAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
高分子化合物 の特性	タイヤ(ゴム)、ポリマー のAFM像、フォースカーブ	バイオサイエ ンス、有機材料	GeoAFM, FemAFM, CG, MD	各ソルバーのAFM像のほかに、 FemAFMの粘弾性接触解析、CG、 MDのフォースカーブ計算が可能。
		<p>【GeoAFM】探針形状データ、試料表面形状データから、測定AFM像データを求めるモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ピラミッド型探針を使用した、HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像を、シミュレーションによって求めたものです。 「設定項目の入力、および、計算の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) ・先端が二股になっている不完全な探針を使って、HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。 「設定項目の入力、および、計算の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) 		
		<p>【GeoAFM】探針形状データ、測定AFM像データから、試料表面形状を求めるモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像から、アーティファクトを除去した試料画像をシミュレーションによって求めたものです。 「設定項目の入力、および、計算の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) 		
<p>【GeoAFM】試料表面形状データ、測定AFM像データから、探針形状を求めるモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。 「設定項目の入力、および、計算の様子」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) 				

高分子化合物
の特性

タイヤ(ゴム)、ポリマー
のAFM像、フォースカー
ブ

【FemAFM】double-tipを使った、HOPG基板上の
1-clgのAFM像、周波数シフトAFM像シミュレーション

【FemAFM】ラクトン系高分子ポリマーのAFMシミュレーション

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
ナノ材料の特性	CNT、グラフェンの形状、硬さ	ナノマテリアル、有機材料	CG, MD	AFM像、フォースカーブの計算が可能。CGは水中フォースカーブにも対応している。
		<p>【CG】フォースカーブ測定モード</p> <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・カーボンナノチューブ探針による、グラフェンシートの水中AFMフォースカーブシミュレーション、および真空中AFMフォースカーブシミュレーション <p>「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p>「結果の表示」</p> <p>「設定項目を再入力、計算、結果の表示」</p> <p>計算手順書(Excel)</p> <p>設定・出力ファイルその1(Zip)</p> <p>設定・出力ファイルその2(Zip)</p> <p>【MD】細いCNT探針を太いCNT試料の内部に差し込んで、フォース・カーブを測定する</p> <p>【MD】1層、2層、3層カーボンナノチューブの側面を押し込んでフォース・カーブを測定</p> <p>【CG】高さ一定モード</p> <p>【CG】力最小モード</p> <p>【CG】CNTに対するフォースカーブのヒステリシス</p>		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
サンプルの状態と観測結果	基板上にある分子試料の固定状態	有機化学	CG, MD	CG, MDで構成原子ごとに固定するかしないかを選択可能。MDは分子の時間変化をシミュレート可能。
		<p>【CG】フォースカーブ測定モード</p> <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・カーボンナノチューブ探針による、4つのオクタン分子鎖の構造最適化AFMフォースカーブシミュレーション <p>この例では試料構造の変形を考慮に入れた計算を行います。</p> <p>「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p>「結果の表示」</p> <p>計算手順書(Excel)</p> <p>設定・出力ファイル(zip)</p> <p>【MD】緩和計算</p> <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ジクロロベンゼンの構造緩和 <p>「設定項目の入力、計算開始、結果の表示」</p> <p>計算手順書(Excel)</p> <p>設定・出力ファイル(zip)</p> <p>【MD】ブタジエン分子を基板上に並べ、CNT探針を接近させてフォース・カーブを測定</p> <p>【MD】apo-ferritinの圧縮実験</p> <p>【MD】GFPの圧縮実験</p> <p>【MD】MD法によるタンパク質分子の圧縮・伸長実験</p>		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
液中、大気中	液中、大気中での分析	バイオサイエンス	LiqAFM, CG	LiqAFMは液中、大気中の振動解析、粘弾性解析をシミュレート可能。CGは水中フォースカーブをシミュレート可能。
		<p>【LiqAFM】粘弾性試料接触解析モード</p> <ul style="list-style-type: none"> 液体中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。液体中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとして、探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的大きな値に設定されているとします。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「Excelファイルからのグラフの表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) <p>【CG】フォースカーブ測定モード</p> <p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> カーボンナノチューブ探針による、グラフェンシートの水中AFMフォースカーブシミュレーション、および真空中AFMフォースカーブシミュレーション 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 「設定項目を再入力、計算、結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイルその1(zip) 設定・出力ファイルその2(zip) <p>【LiqAFM】溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較</p> <p>【LiqAFM】粘弾性接触解析</p> <p>【CG】高さ一定モード</p> <p>【CG-RISM】水中のフォースカーブシミュレーション</p>		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
ケルビンプローブフォース顕微鏡の実験画像予測	半導体、金属表面における原子解像度の局所接触電位差像(LCPD像)の予測	表面物性、ナノデバイス、ナノエレクトロニクス	DFTB	Si(001)-c(4x2)、Si(001)-p(2x1):H、Si(111)-(5x5)等の計算を論文発表している。
		<div data-bbox="824 372 1127 411" style="background-color: #e0ffe0; padding: 2px;">【DFTB】KPFMモード</div> <ul style="list-style-type: none"> ・KPFMを用いて、不純物の窒素でドーブさせたSi(001)面の局所接触電位差像(LCPD像)を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) ・KPFMを用いて、TiO₂(110)表面のLCPD像を計算したものです。 (*この計算を実行するためには、別途、チタン(Ti)と白金(Pt)のパラメータを購入していただく必要があります。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(Zip) <div data-bbox="824 896 1701 935" style="background-color: #e0ffe0; padding: 2px;">【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像</div> <div data-bbox="824 958 1810 996" style="background-color: #e0ffe0; padding: 2px;">【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像</div> <div data-bbox="824 1033 1255 1072" style="background-color: #e0ffe0; padding: 2px;">【DFTB】TiO₂(110)表面のLCPD像</div>		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
半導体表面の仕事関数の分布	半導体表面の局所接触電位差像	無機材料、ナノデバイス、ナノエレクトロニクス	DFTB	不純物を添加したP型、N型半導体表面のケルビンプローブフォース顕微鏡による局所接触電位差像のシミュレート。
		<p>【DFTB】KPFMモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・KPFMを用いて、不純物の窒素でドーピングさせたSi(001)面の局所接触電位差像(LCPD像)を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) <p>【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像</p> <p>【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像</p>		

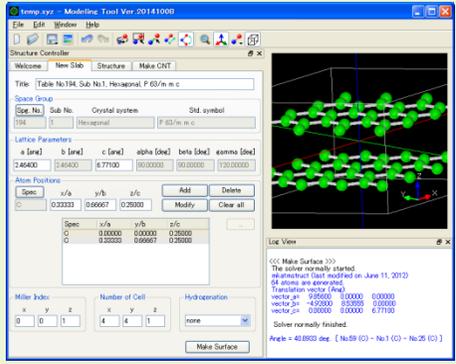
ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
金属、半導体などの表面構造	金属、半導体表面のトンネル電流像の予測	無機材料、ナノデバイス、ナノエレクトロニクス	DFTB	Si(001)表面のSTM像、Au(001)表面のSTM像、基板上の分子のSTM像などをシミュレート。
		<div data-bbox="824 358 1104 396" data-label="Section-Header"> <p>【DFTB】STMモード</p> </div> <ul style="list-style-type: none"> <li data-bbox="845 411 1943 596"> <p>・STMを用いて、水素終端されたSi(001)面から水素を一つ取り除いた表面のトンネル電流像を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip)</p> <li data-bbox="845 632 1674 789"> <p>・STMを用いて、Si(001)-3x1:H表面のトンネル電流像を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip)</p> <li data-bbox="845 825 1912 1011"> <p>・STMを用いて、Au(001)-5x1表面のトンネル電流像を計算したものです。 (*この計算を実行するためには、別途、金(Au)のパラメータを購入していただく必要があります。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip)</p> <div data-bbox="824 1043 1249 1082" data-label="Section-Header"> <p>【DFTB】RuO₂(110)表面のSTM像</p> </div> <div data-bbox="824 1118 1788 1156" data-label="Section-Header"> <p>【DFTB】Bardeenの摂動法とDFTB法によるSTM像のシミュレーション</p> </div> <div data-bbox="824 1192 1632 1230" data-label="Section-Header"> <p>【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション</p> </div>		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
金属、半導体などの表面構造	半導体、絶縁体表面の周波数シフト像の予測	無機材料、ナノデバイス	DFTB	Si(001)表面のAFM像、TiO ₂ (110)表面のAFM像などをシミュレート。
		<div data-bbox="824 311 1106 354" style="background-color: #e0f2f1; padding: 2px;">【DFTB】AFMモード</div> <p data-bbox="857 365 1877 394">・AFMを用いて、水素終端されたSi(001)面を走査した、周波数シフト像を計算したものです。</p> <p data-bbox="886 396 1355 425">「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p data-bbox="886 428 1048 456">「結果の表示」</p> <p data-bbox="886 459 1106 488">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="886 491 1152 519">設定・出力ファイル(zip)</p>		
半導体表面のドーパントの推定	ドーパント(不純物)の位置、深さ、種類などを数値計算により推定	無機材料、ナノデバイス、ナノエレクトロニクス、半導体	DFTB	不純物を埋め込んだSi表面のSTM像、KPFM像などをシミュレート。
		<div data-bbox="824 791 1127 833" style="background-color: #e0f2f1; padding: 2px;">【DFTB】KPFMモード</div> <p data-bbox="857 845 1943 902">・KPFMを用いて、不純物の窒素でドーブさせたSi(001)面の局所接触電位差像(LCPD像)を計算したものです。</p> <p data-bbox="886 905 1355 933">「設定項目を入力して、計算を始めるまで」</p> <p data-bbox="886 936 1048 965">「結果の表示」</p> <p data-bbox="886 968 1106 996">計算手順書(Excel)</p> <p data-bbox="886 999 1152 1028">設定・出力ファイル(zip)</p> <div data-bbox="824 1065 1699 1108" style="background-color: #e0f2f1; padding: 2px; margin-top: 10px;">【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像</div> <div data-bbox="824 1130 1810 1173" style="background-color: #e0f2f1; padding: 2px; margin-top: 10px;">【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像</div>		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
金属、半導体の物性の推定	半導体、金属表面の状態密度予測	無機材料、ナノデバイス、ナノエレクトロニクス	DFTB	半導体、金属表面の設定した探針位置での走査トンネル分光(STS)のシミュレート。
	<p>【DFTB】STSモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・STSを用いて、Si(001)-3x1:H表面のトンネル電流分光を計算したものです。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) 			
	触媒反応で重要な材料についての物性	表面物性、触媒化学	DFTB	Pt, Ru等の触媒金属表面でのSTS像、KPFM像のシミュレート。
	<p>【DFTB】KPFMモード</p> <ul style="list-style-type: none"> ・KPFMを用いて、TiO₂(110)表面のLCPD像を計算したものです。 (*)この計算を実行するためには、別途、チタン(Ti)と白金(Pt)のパラメータを購入していただく必要があります。 「設定項目を入力して、計算を始めるまで」 「結果の表示」 計算手順書(Excel) 設定・出力ファイル(zip) <p>【DFTB】TiO₂(110)面のAFM, KPFM観察とシミュレーション</p>			

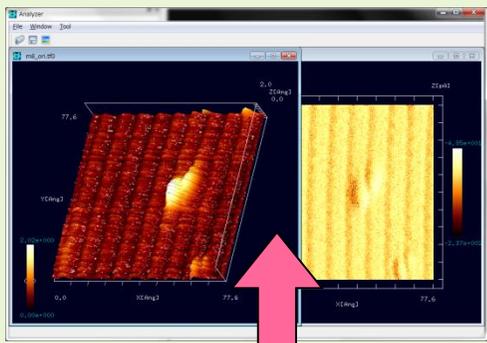
ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
オリジナルの探針形状データの作成／使用	オリジナルの探針形状データの作成／使用	表面科学全般	GeoAFM 計算環境	作成した探針形状データは、GeoAFMおよびFemAFMによる計算に利用できる。
		<p data-bbox="830 372 1597 412">【GeoAFM】オリジナルの探針形状データの作成／使用</p> <p data-bbox="861 439 1794 468">探針形状を想定した画像データを作り、それから探針形状データを作成／利用する。</p>		

AAS SPMシミュレータ 計算事例



SetModel

原子モデル作成

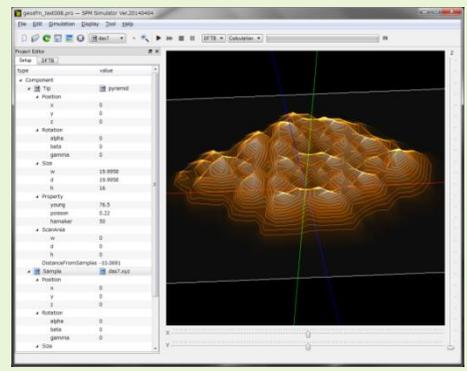


Analyzer

実験データ画像処理
プロセッサ

GeoAFM

高速相互予測
AFMシミュレータ



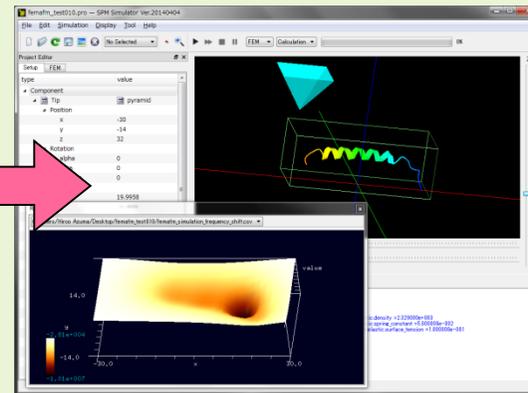
DFTB

量子論的
SPMシミュレータ

SPMシミュレータ

FemAFM

連続弾性体
AFMシミュレータ



MD

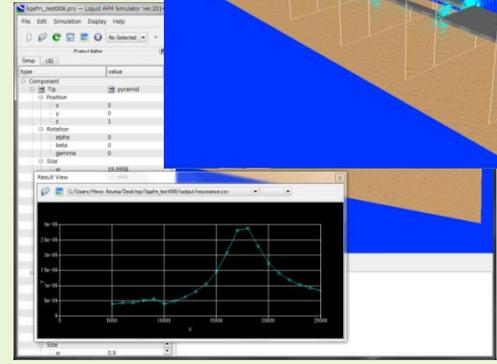
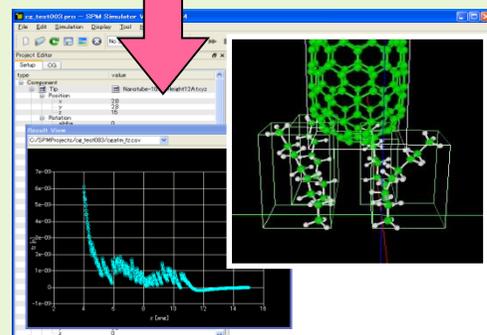
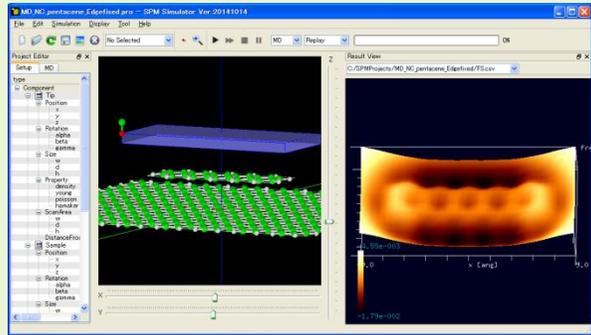
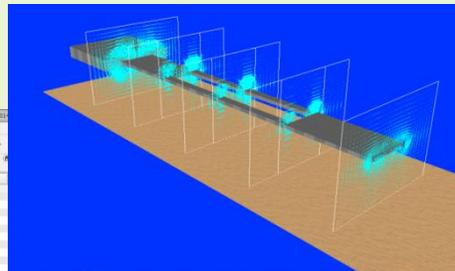
分子動力学
AFM像シミュレータ

CG

構造最適化
AFM像シミュレータ

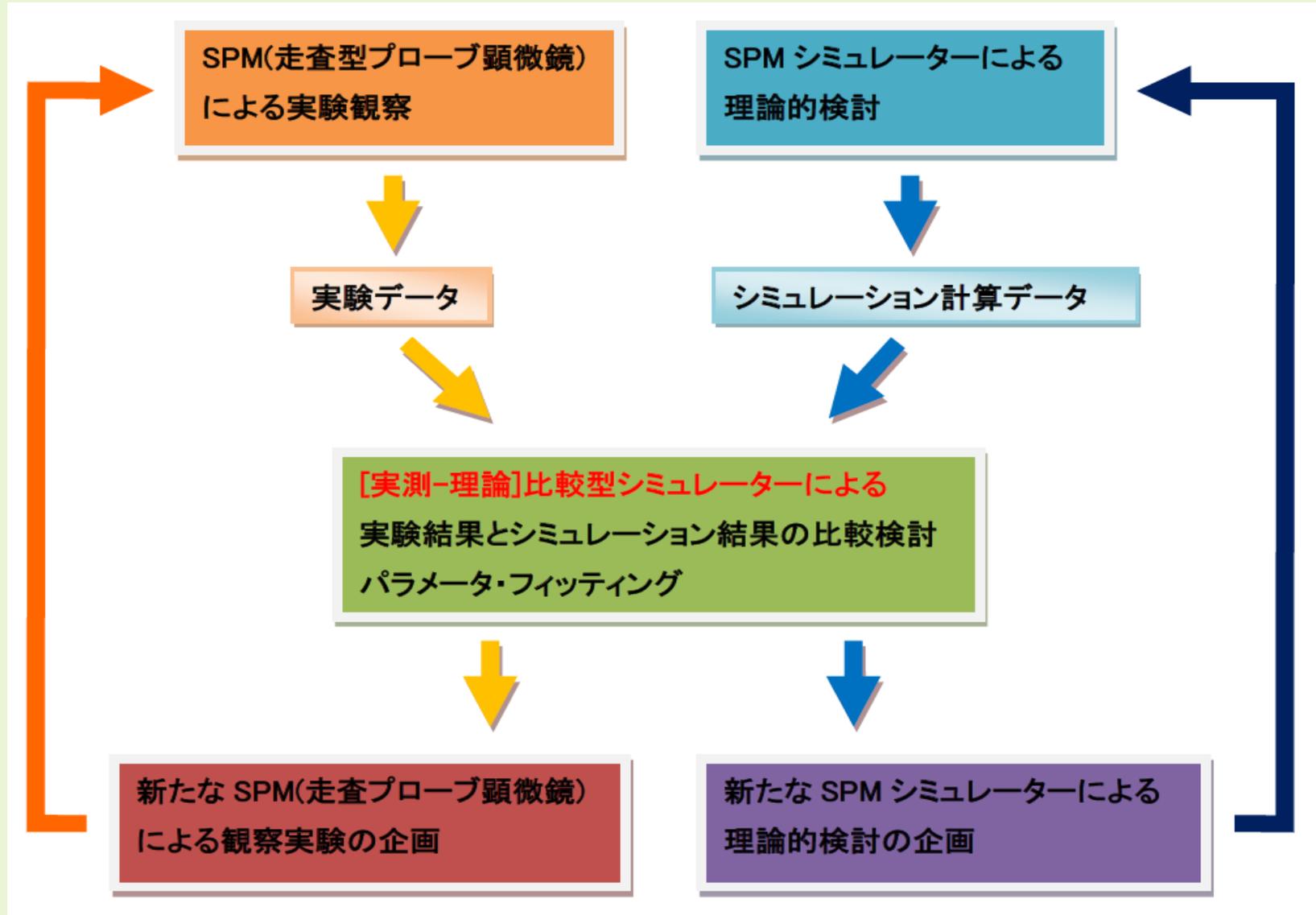
LiqAFM

液中ソフトマテリアル
AFMシミュレータ



【Analyzer】 実験像・計算像比較検証機能

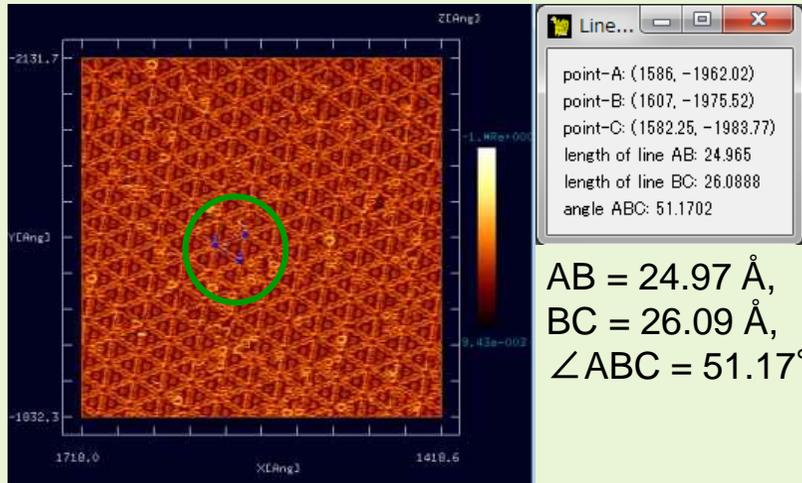
実験データと理論シミュレーションデータを統合的に扱う。



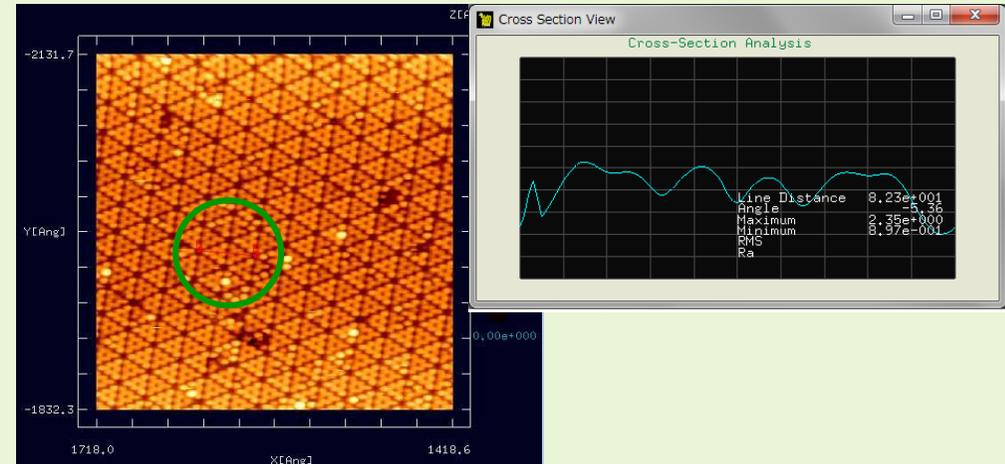
【Analyzer】 Si(111)-(7x7) DASの実測AFM—計算の比較例

格子の長さや角度を比較計測

実測画像

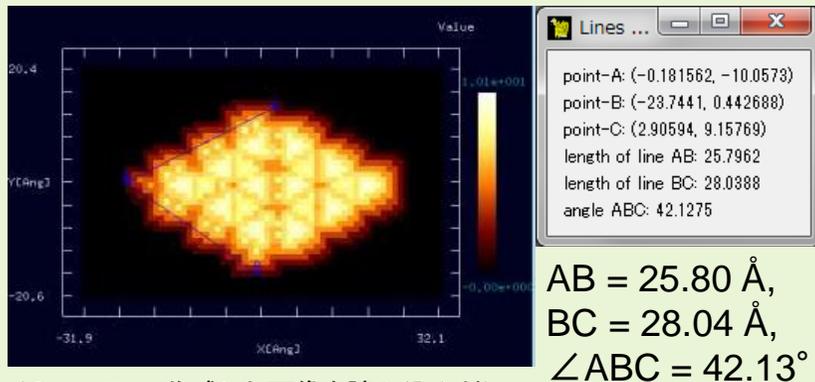


SPM像の断面図の比較

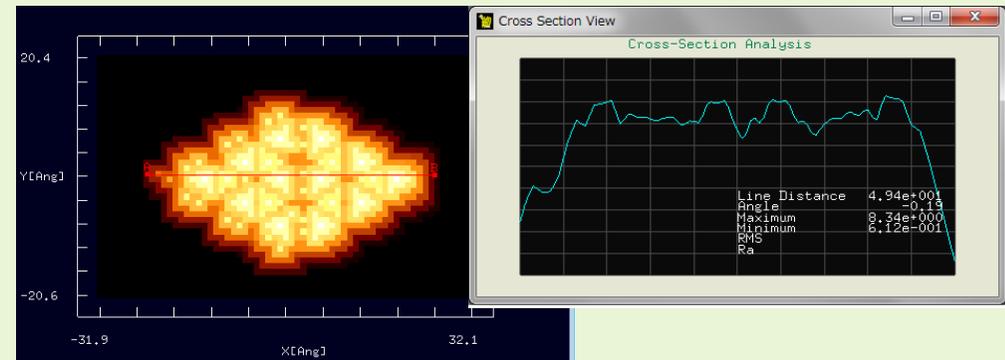


(オリジナル画像は東京工業大学・大学院、総合理工学研究科、平山博之教授より提供)

計算画像



(GeoAFMで作成した画像を読み込んだ)



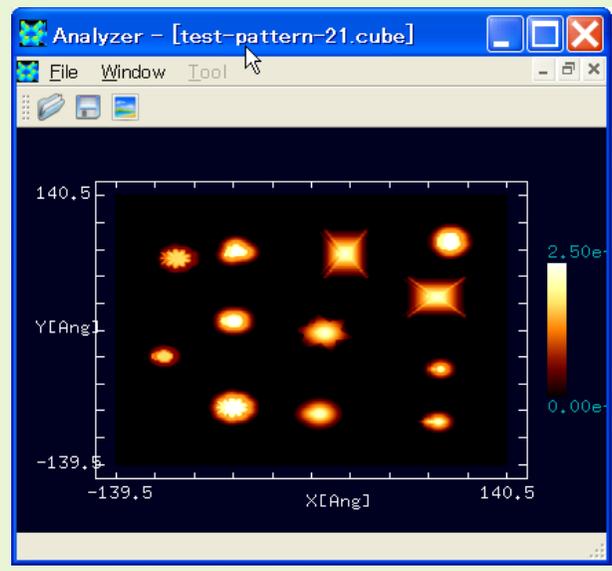
(GeoAFMで作成した画像を読み込んだ)

これらはすべて同一のプラットフォーム上で行うことができる。
比較によって、より良いシミュレーションを行うための指針が得られる。

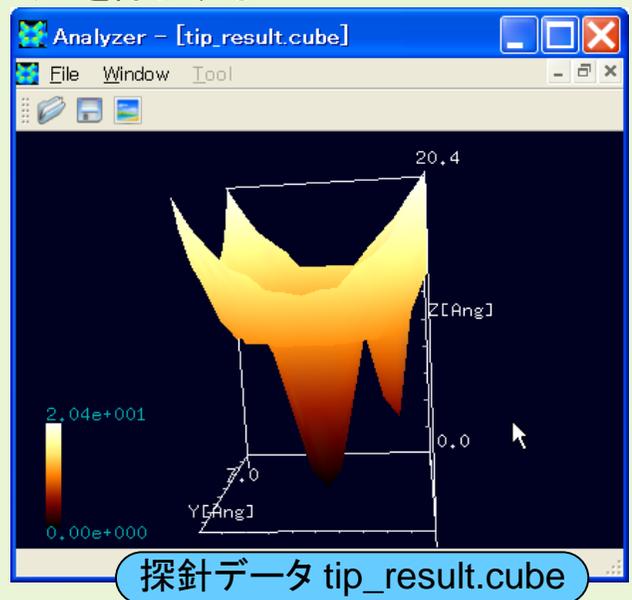
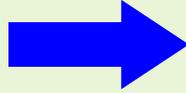
【Analyzer】探針形状推定・探針影響除去 (1)

探針形状推定

先端が二股になった不完全な探針による人工的な立体構造のAFM像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルAFM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する

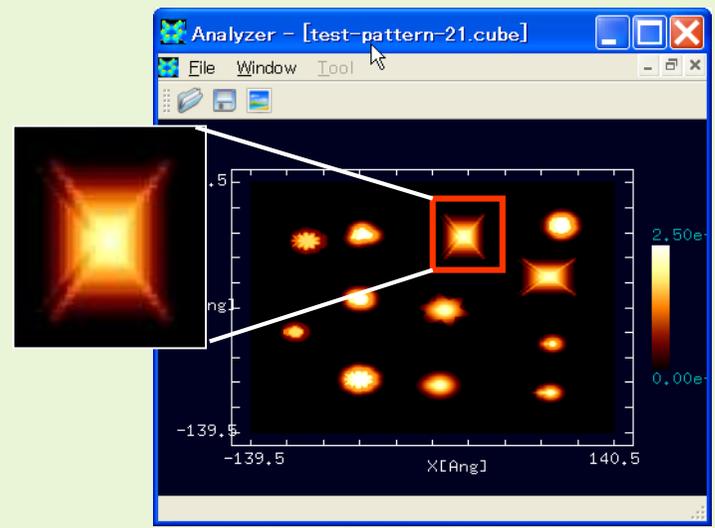


パラメータ(0.0~1.0)
0.0 : 最大探針
1.0 : 最小探針
を設定して探針形状推定

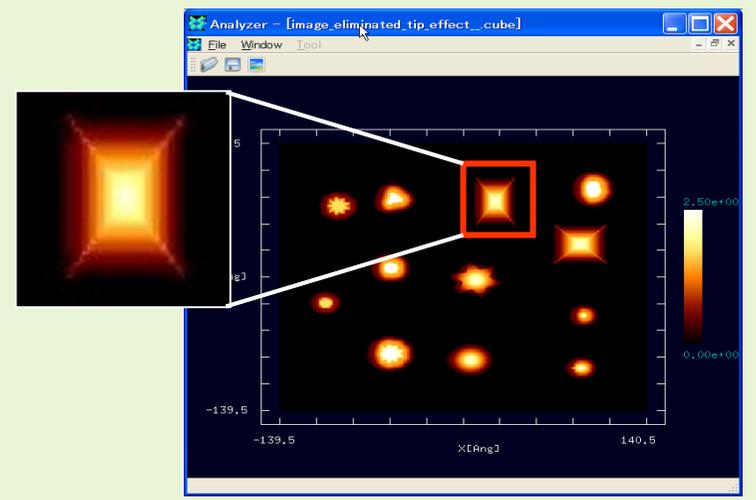
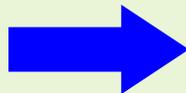


探針データ tip_result.cube

探針影響除去



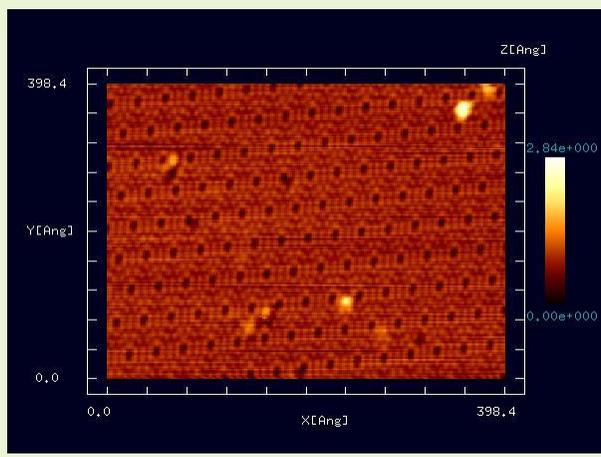
探針データを指定して
探針影響除去



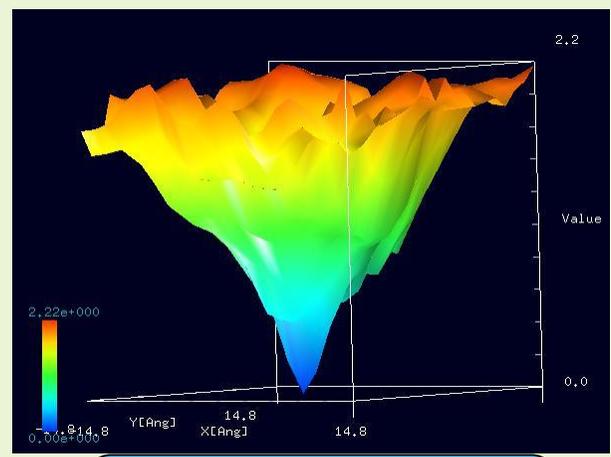
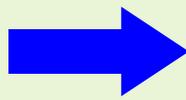
【Analyzer】探針形状推定・探針影響除去 (2)

探針形状推定

SPM実験画像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルSPM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する

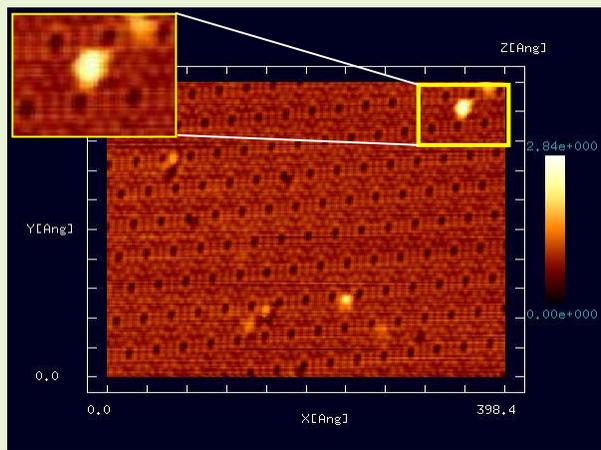


パラメータ(0.0~1.0)
0.0 : 最大探針
1.0 : 最小探針
を設定して探針形状推定

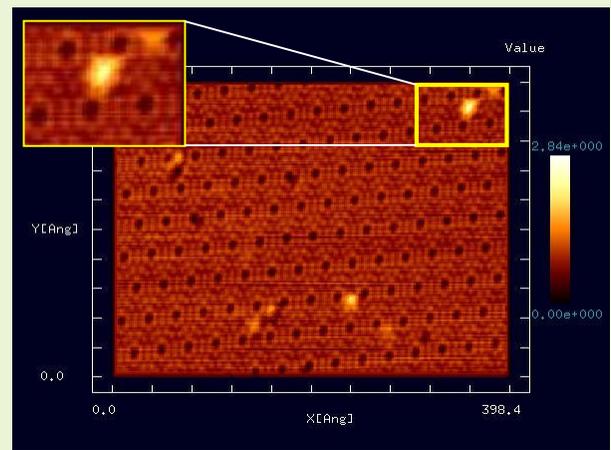
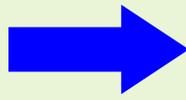


探針データ tip_result.cube

探針影響除去



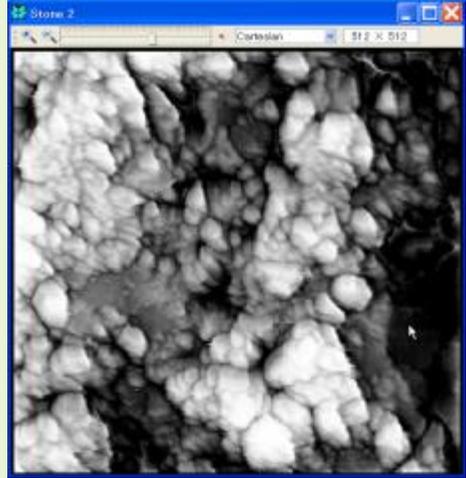
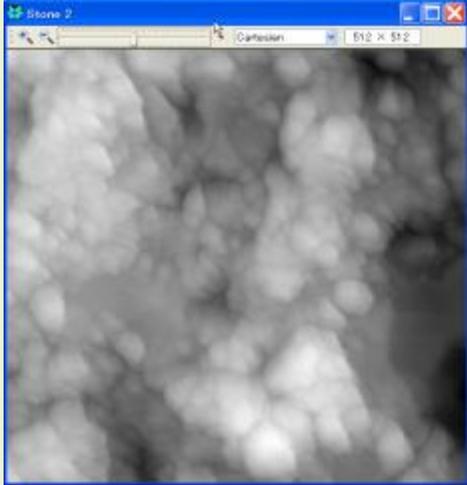
探針データを指定して
探針影響除去



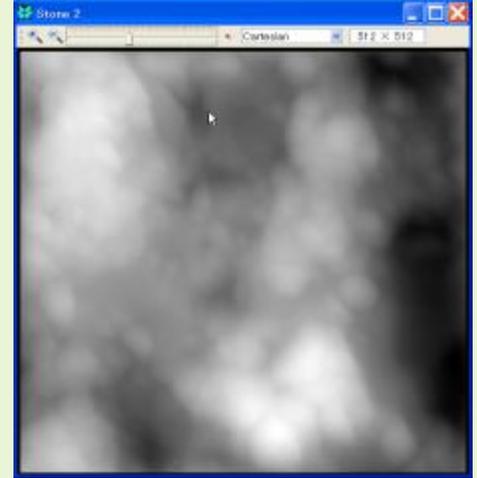
実験データは、東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授より提供

【Analyzer】画像のフーリエ解析・高解像度化(1)

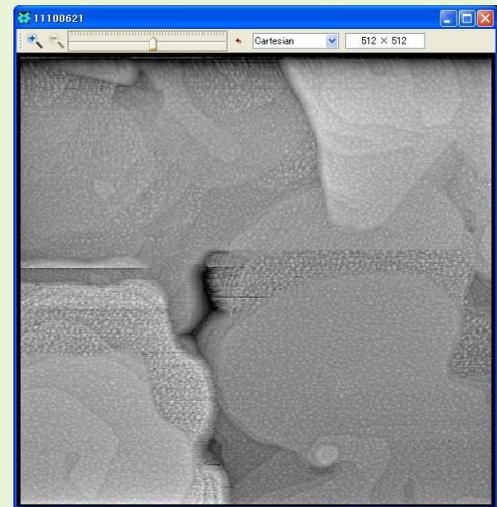
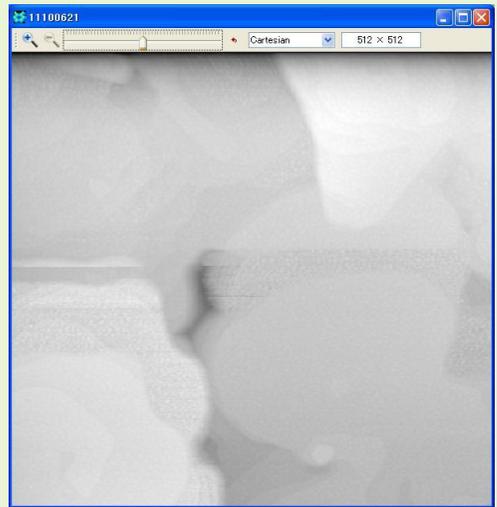
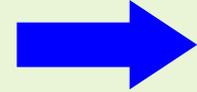
画像のフーリエ解析



高周波を強調

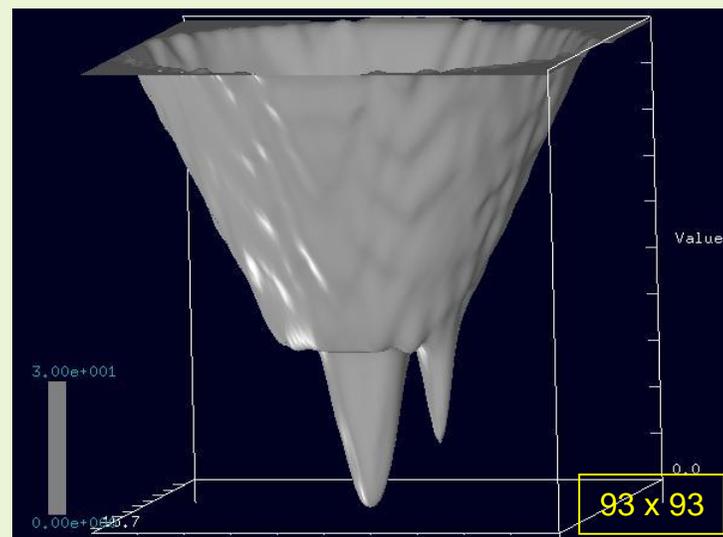
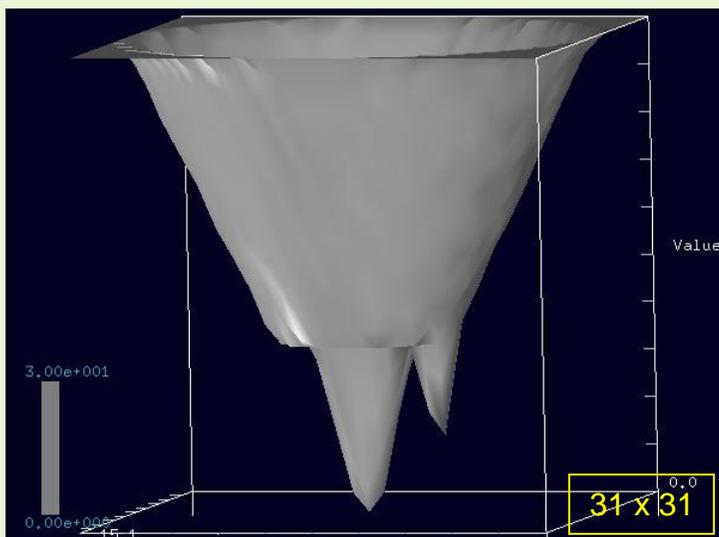
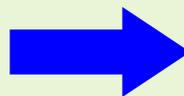
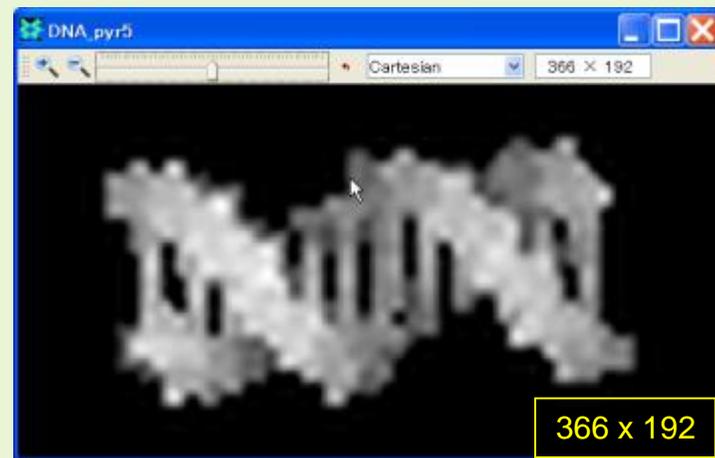
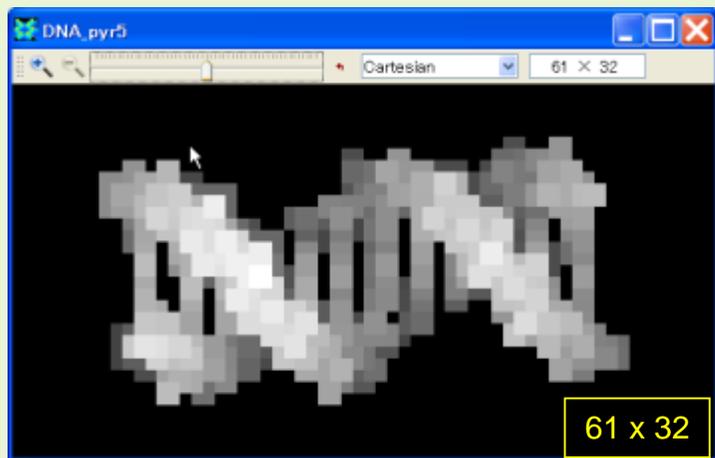


低周波を強調



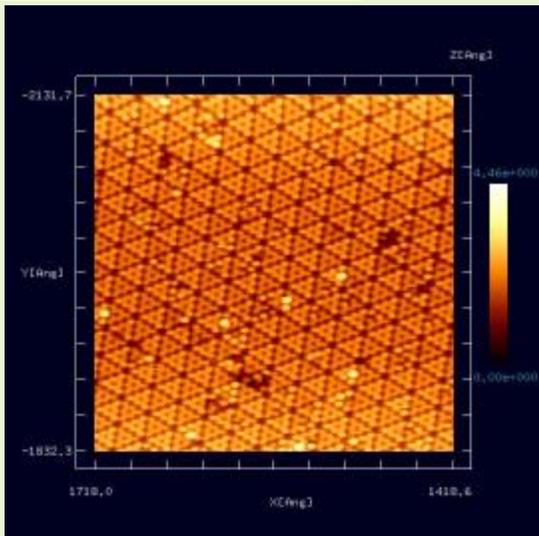
【Analyzer】画像のフーリエ解析・高解像度化(2)

画像高解像度化

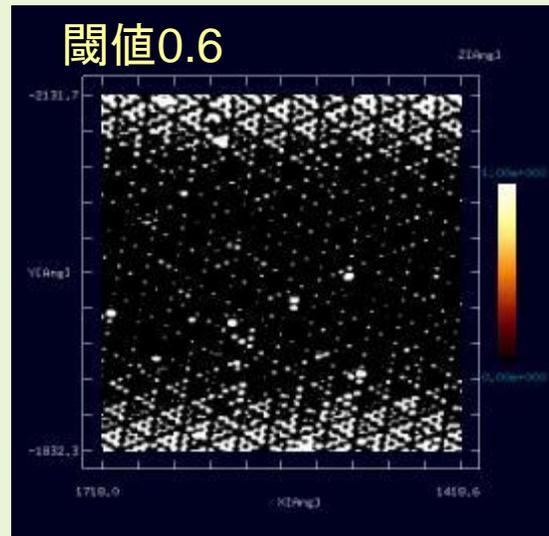
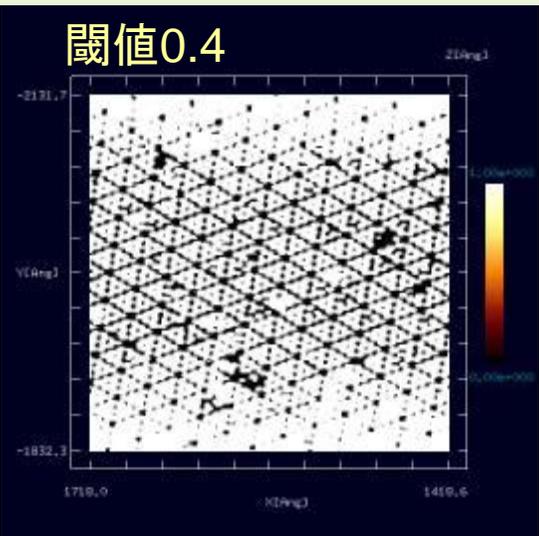
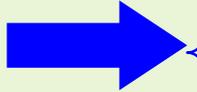


【Analyzer】 デジタル画像処理機能 (1)

画像データの二値化

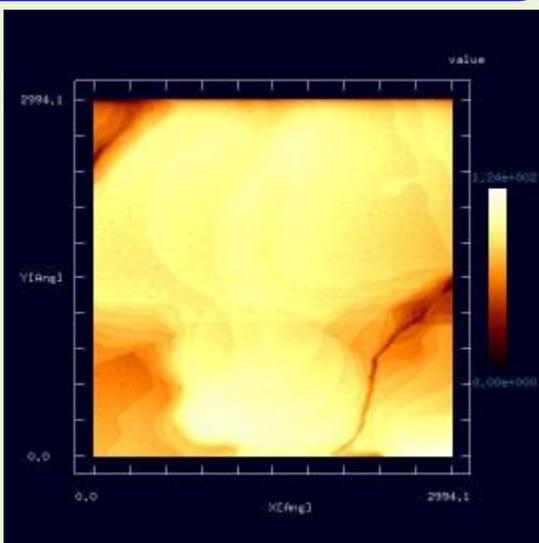


閾値(0.0~1.0)を設定して
白黒画像変換

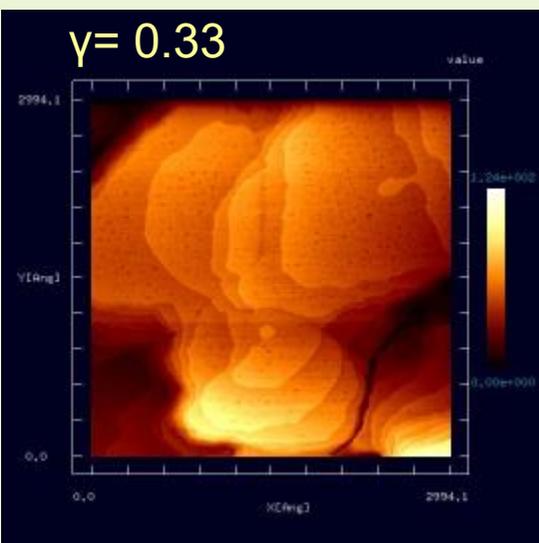
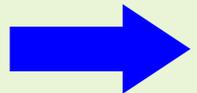


(オリジナル画像は東京工業大学・大学院、総合理工学研究科、平山博之教授より提供)

コントラスト調整(ガンマ補正)



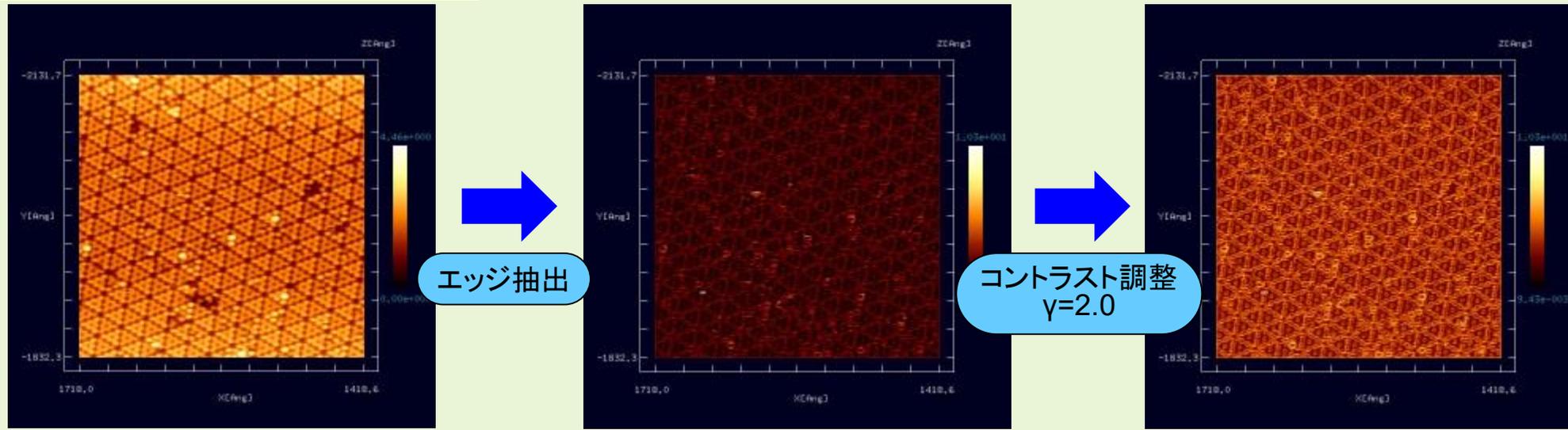
γ 値(0.25~4.0)を設定



(オリジナル画像は大阪大学大学院、基礎工学研究科、福井賢一教授より提供)

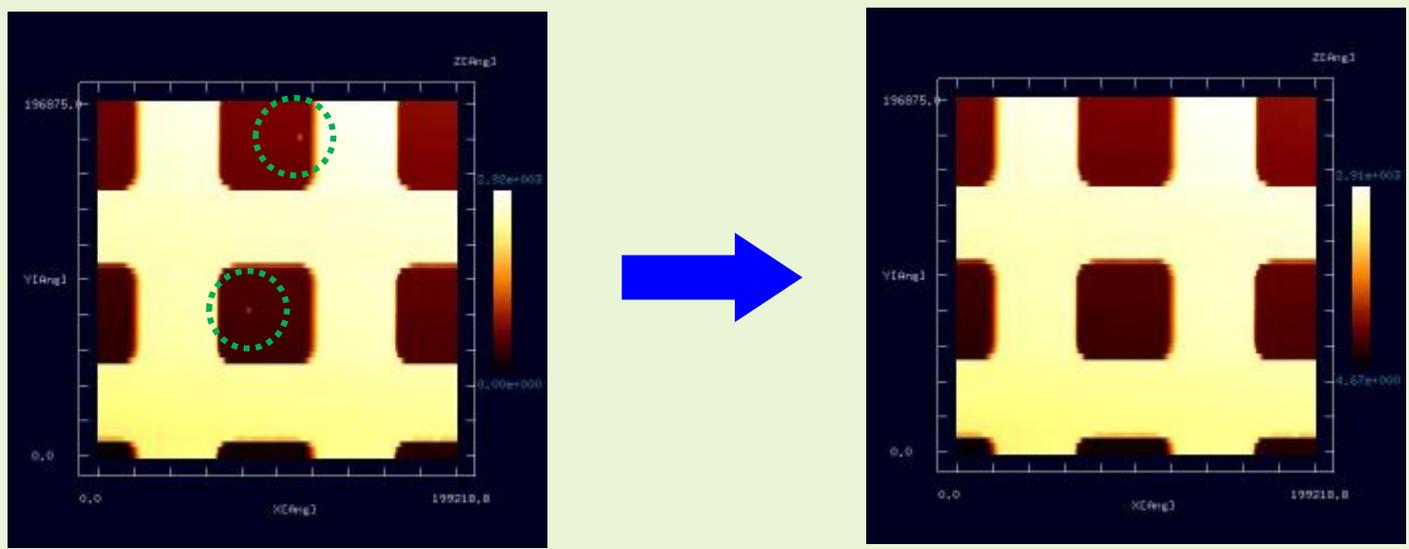
【Analyzer】 デジタル画像処理機能 (2)

エッジ抽出(Sobelフィルタ処理)



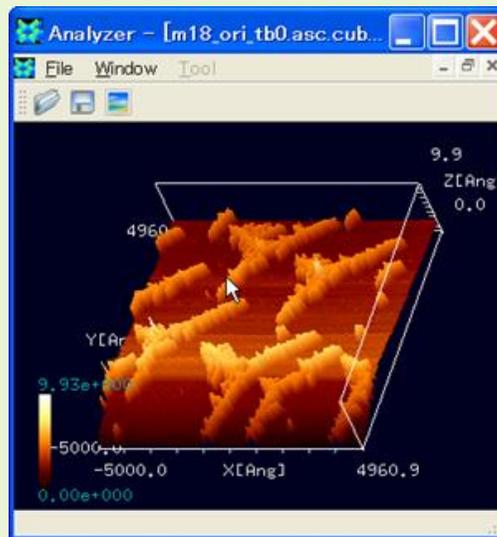
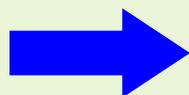
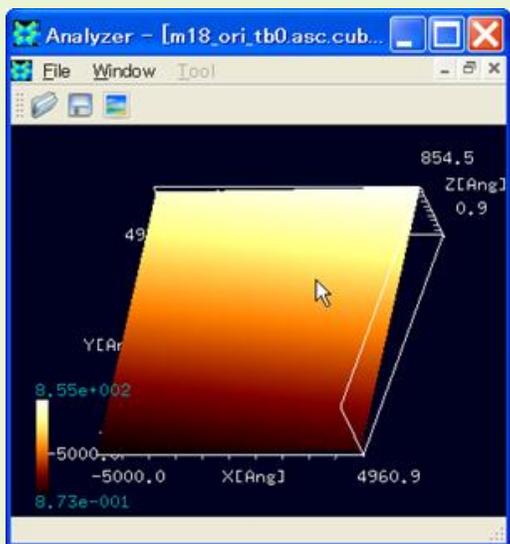
(オリジナル画像は東京工業大学・大学院、総合理工学研究科、平山博之教授より提供)

ノイズ除去(メディアンフィルタ処理)

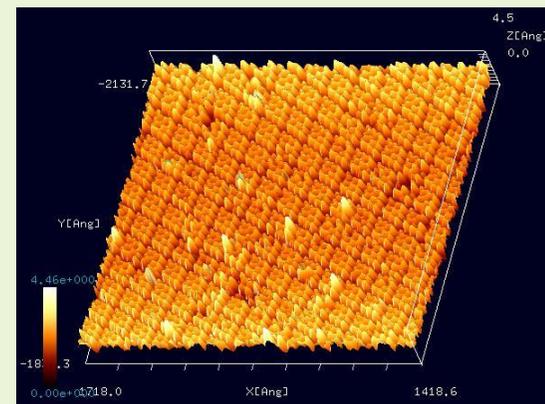
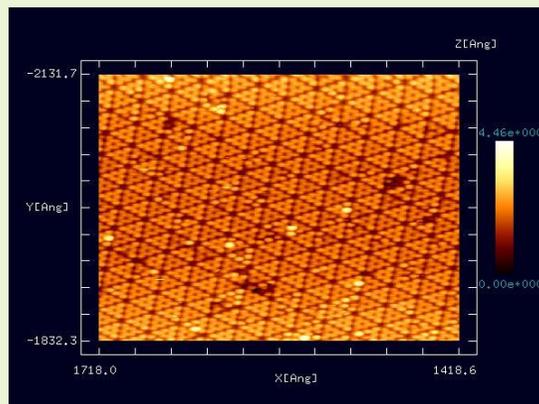
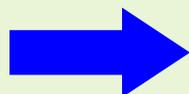
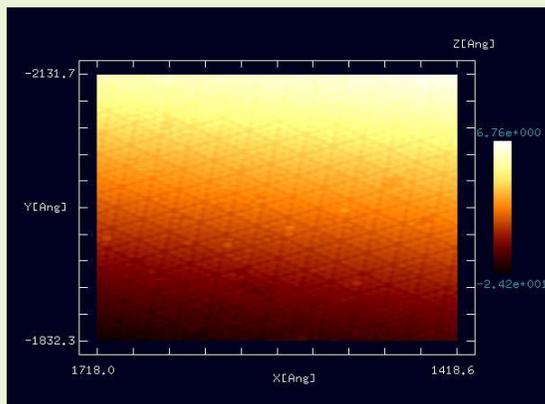


(オリジナル画像は東北大学大学院、理学研究科、橋本克之助教より提供)

傾き自動補正と立体表示機能



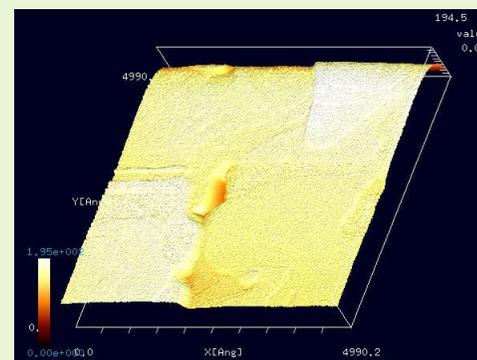
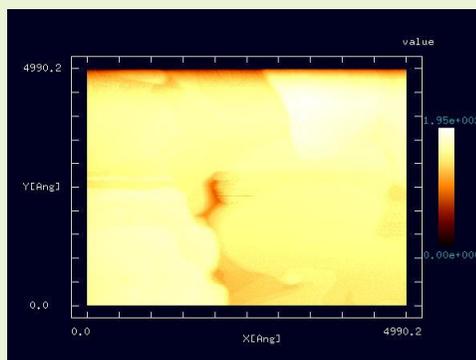
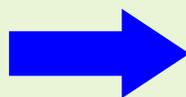
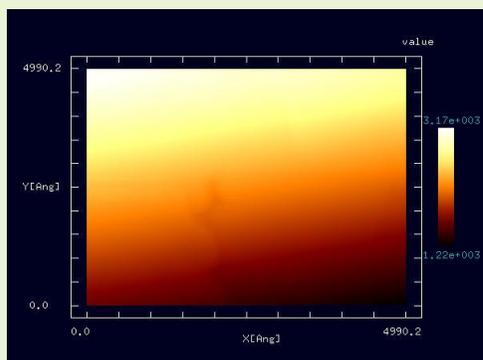
(オリジナル画像は東京大学、生産技術研究所 福谷研究室提供)



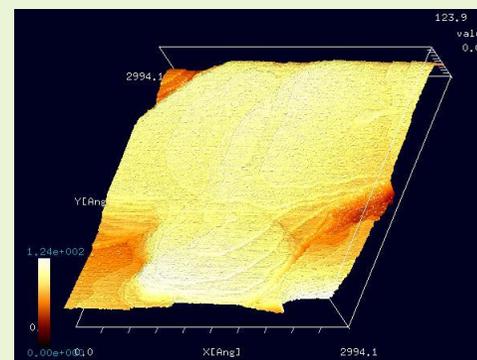
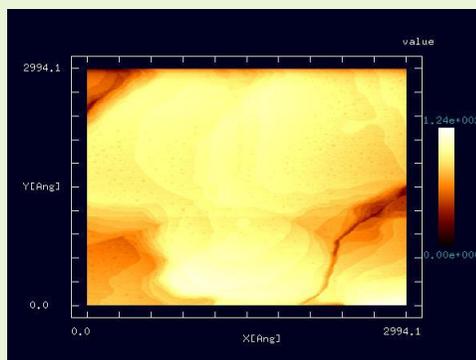
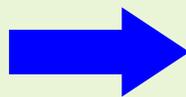
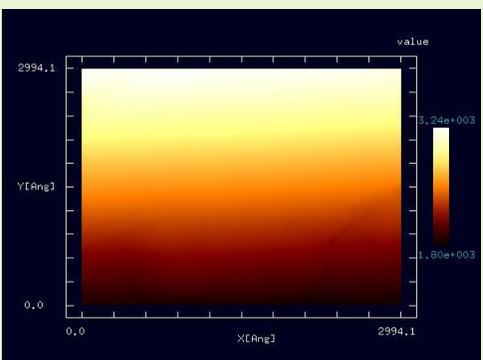
(実験データは、東京工業大学・大学院、総合理工学研究科、材料物理学専攻、量子表面講座、平山博之教授より提供)

【Analyzer】 デジタル画像処理機能（4）

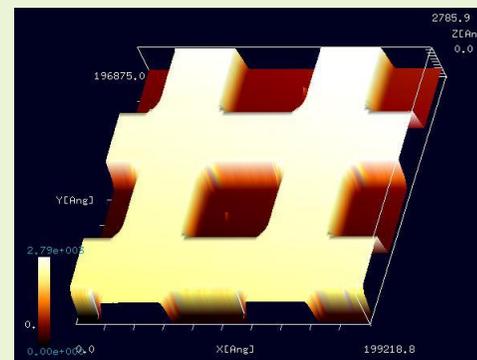
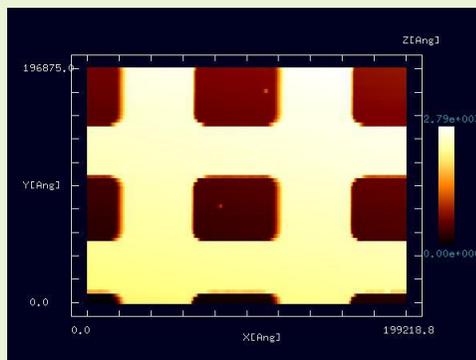
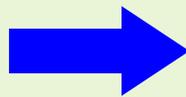
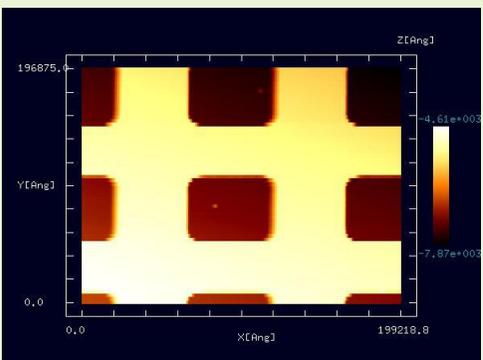
傾き自動補正と立体表示機能



(実験データは、大阪大学・大学院、基礎工学研究科、物質創成専攻、機能物質化学領域、表面・界面機能化学講座、福井賢一教授より提供)

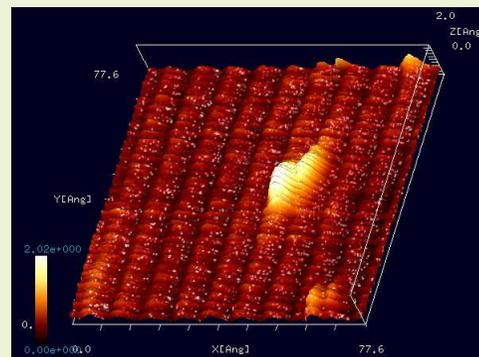
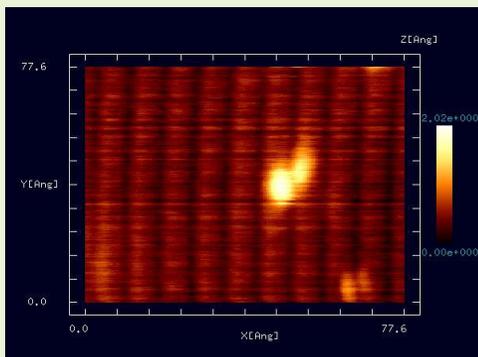
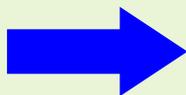
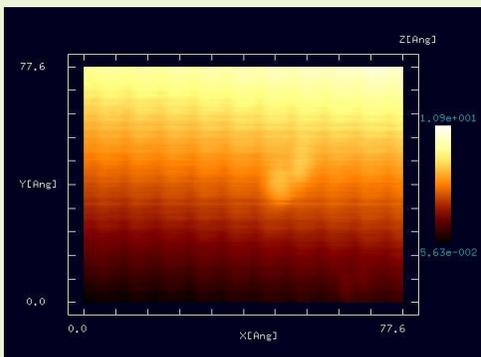


(実験データは、大阪大学・大学院、基礎工学研究科、物質創成専攻、機能物質化学領域、表面・界面機能化学講座、福井賢一教授より提供)

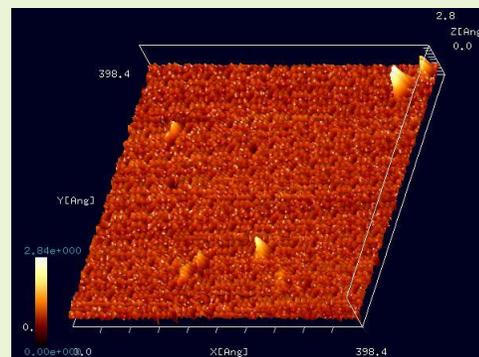
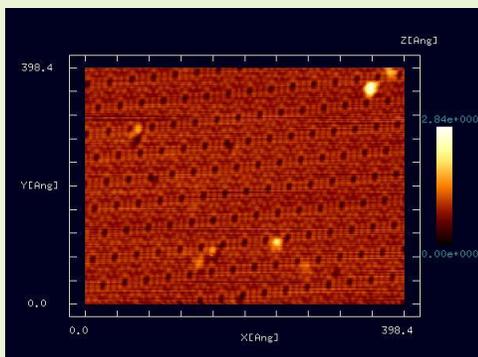
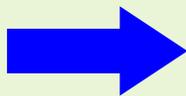
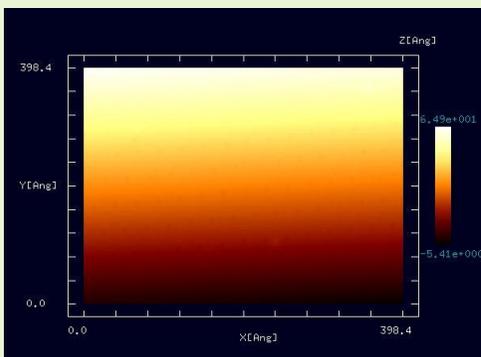


(実験データは、東北大学大学院、理学研究科物理学専攻、量子物性物理学講座、量子伝導物性研究室、橋本克之博士より提供)

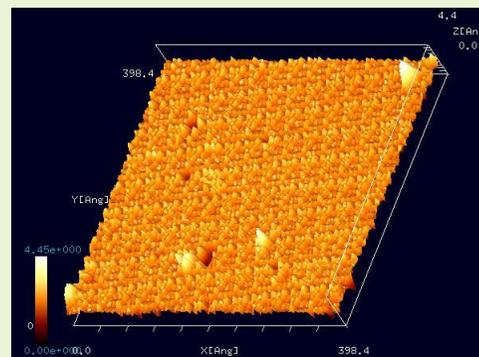
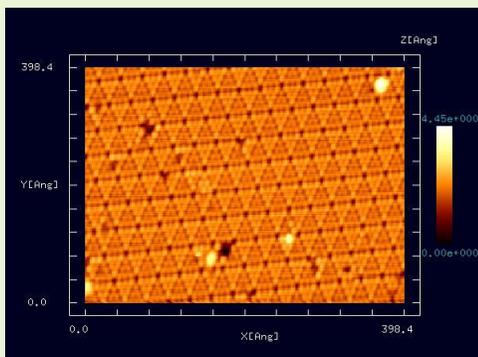
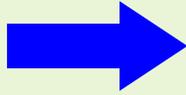
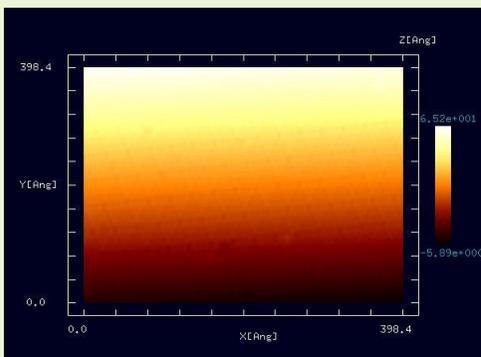
傾き自動補正と立体表示機能



(実験データは、東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授より提供)



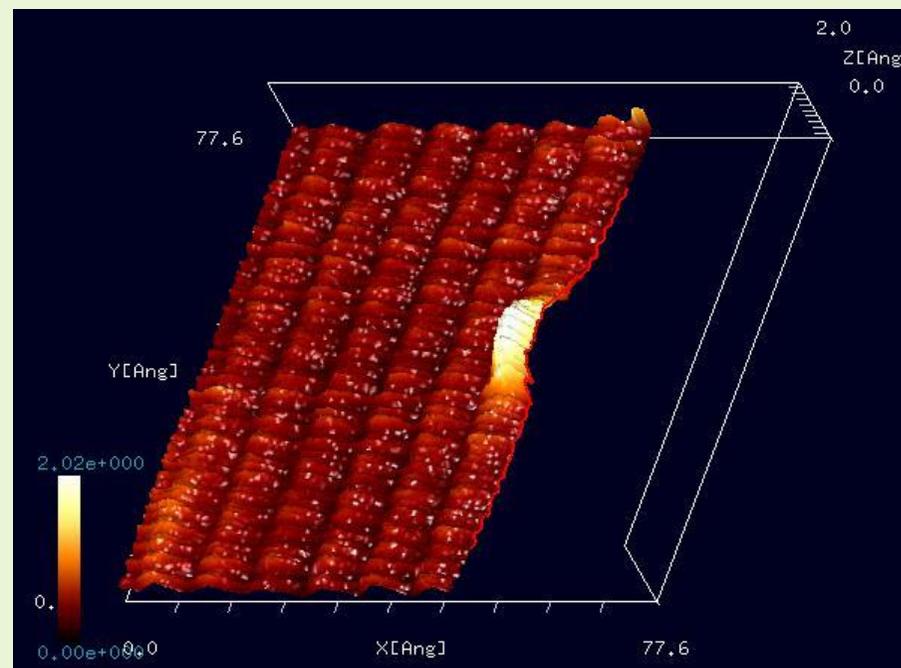
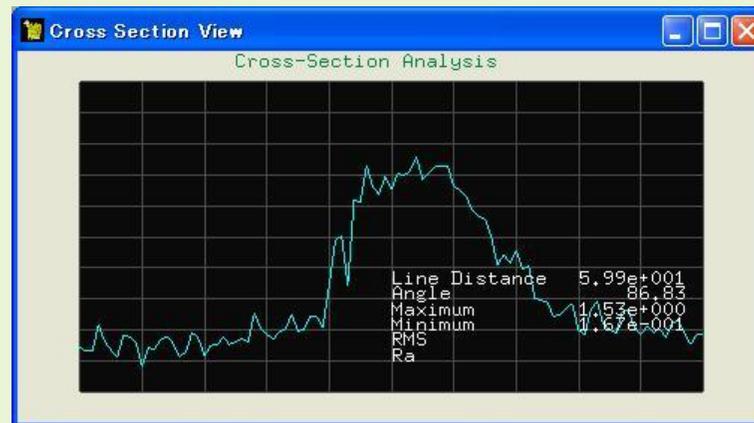
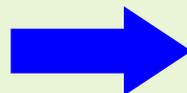
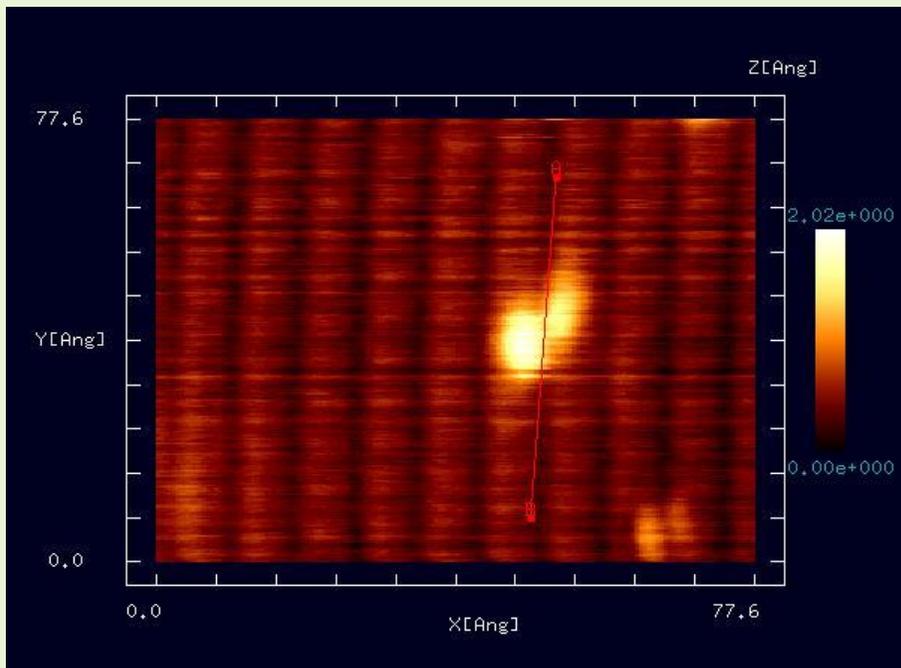
(実験データは、東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授より提供)



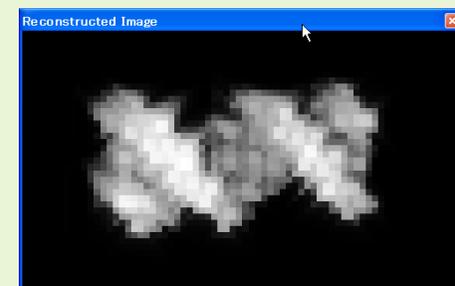
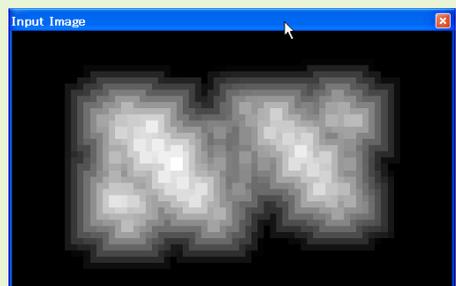
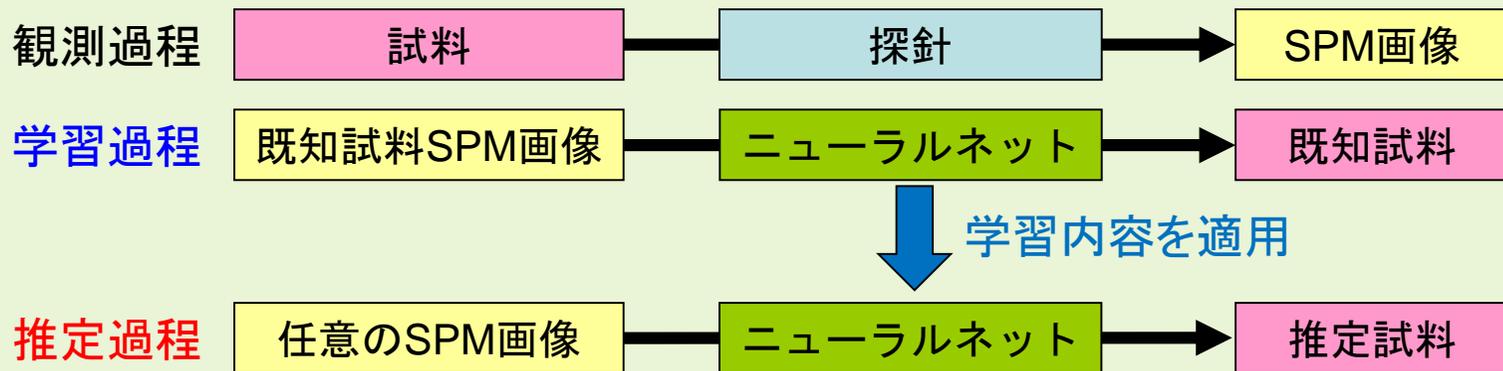
(実験データは、東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授より提供)

【Analyzer】断面図の表示

断面図の表示



(オリジナルデータは東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授より提供)

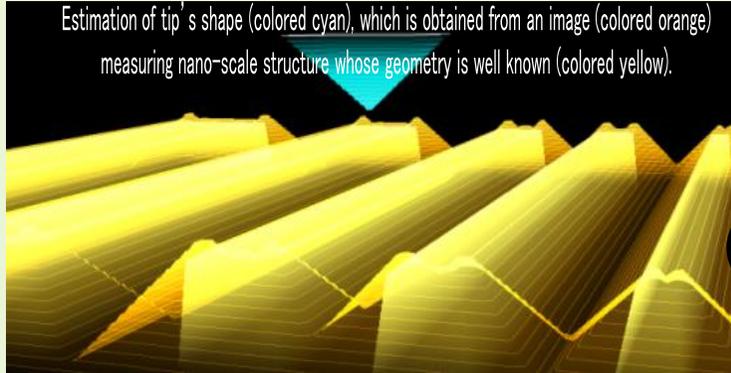


探針の影響を取り除いた画像が得られる。

【GeoAFM】高速相互予測AFMシミュレータ

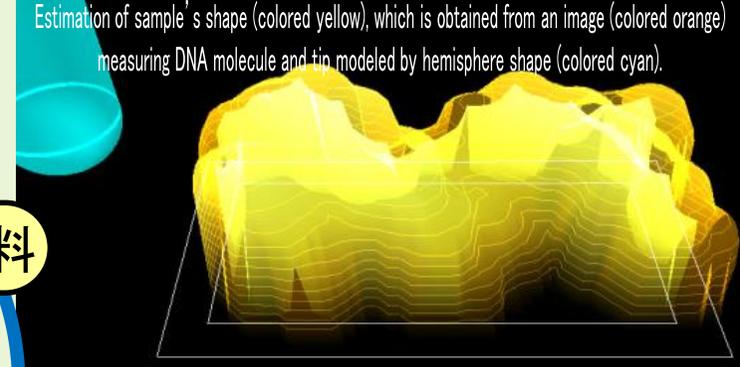
「高速相互予測AFMシミュレータ」は、探針の立体的な形状データ、試料表面の凹凸を表現した形状データ、測定AFM像データ、の三種類のデータのうち、二種類のデータから、残り一種類のデータを高速に予測するシミュレーションを実行する。探針 - 試料間の相互作用は考慮せず、純粹に幾何学的な計算のみ行う。

Estimation of tip's shape (colored cyan), which is obtained from an image (colored orange) measuring nano-scale structure whose geometry is well known (colored yellow).

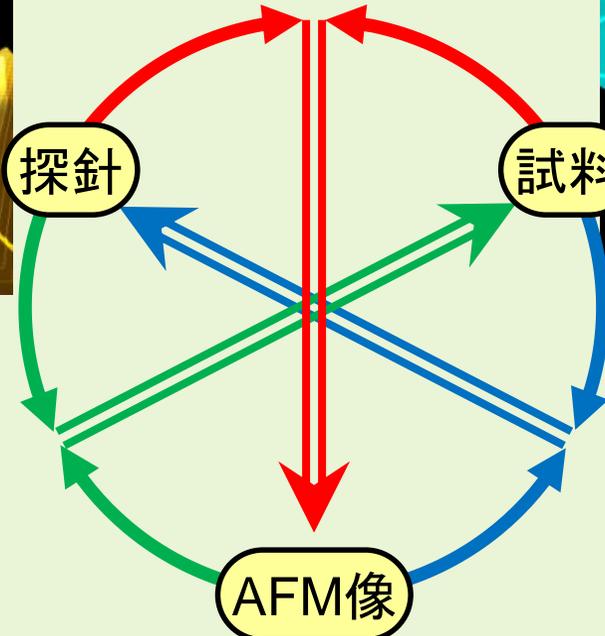


試料とAFM像から探針形状を予測

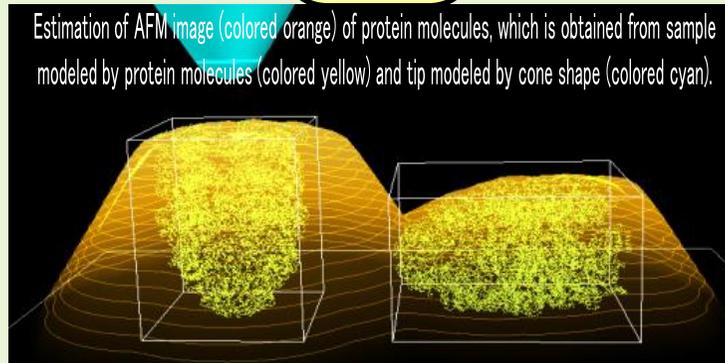
Estimation of sample's shape (colored yellow), which is obtained from an image (colored orange) measuring DNA molecule and tip modeled by hemisphere shape (colored cyan).



AFM像と探針から試料形状を予測



Estimation of AFM image (colored orange) of protein molecules, which is obtained from sample modeled by protein molecules (colored yellow) and tip modeled by cone shape (colored cyan).



探針と試料からAFM像を予測

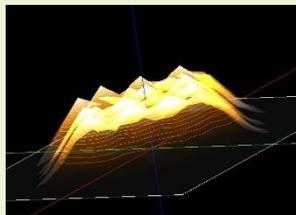
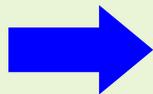
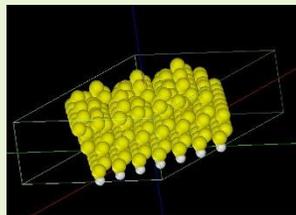
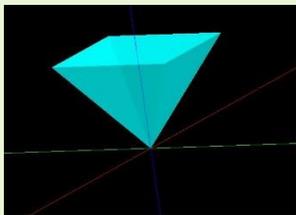
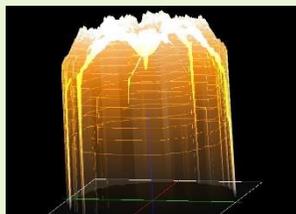
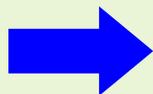
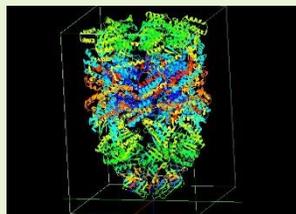
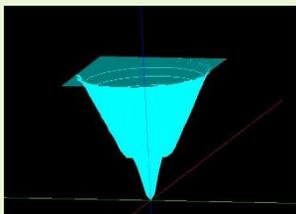
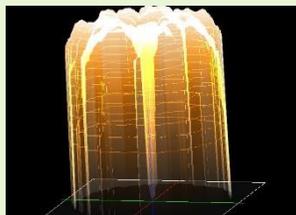
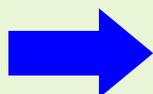
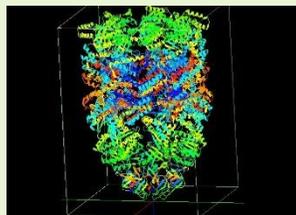
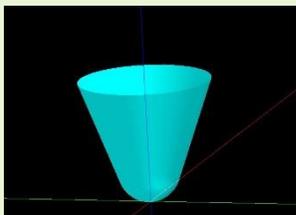
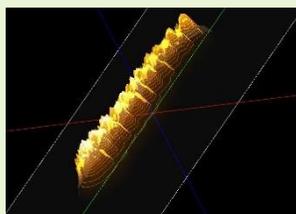
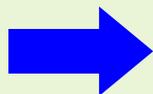
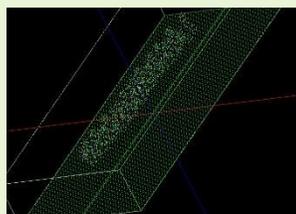
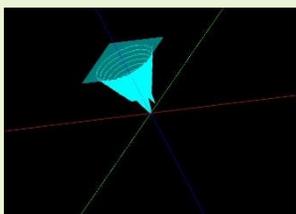
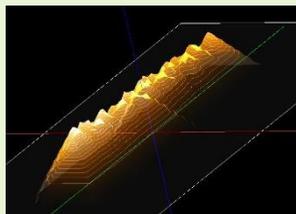
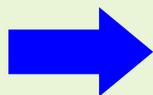
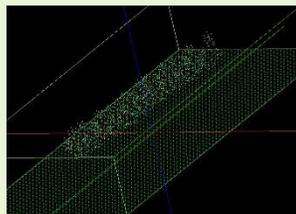
【GeoAFM】高速相互予測AFMシミュレータ

探針と試料からAFM像を予測

探針

試料

AFM像



ピラミッド型探針を使用した、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: ϵ カプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像を、シミュレーションによって求めたものです。

先端が二股になっている不完全な探針を使って、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: ϵ カプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。

Cone型探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)

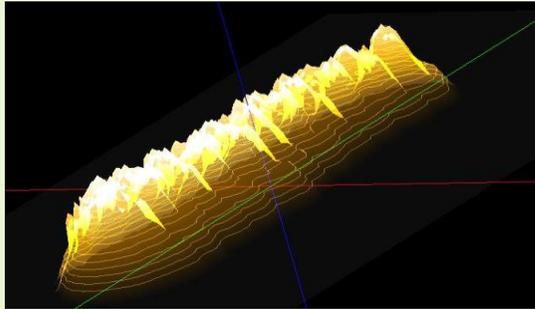
先端が二股になっている不完全な探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)

ピラミッド型探針を使用した、Si(111)-(7×7)DAS構造のAFM像を、シミュレーションによって求めたものです。

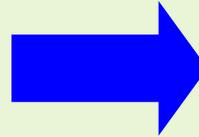
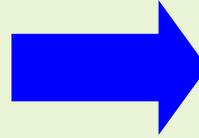
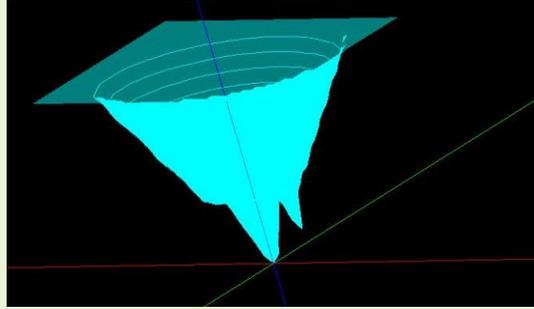
【GeoAFM】高速相互予測AFMシミュレータ

AFM像と探針から試料形状を予測

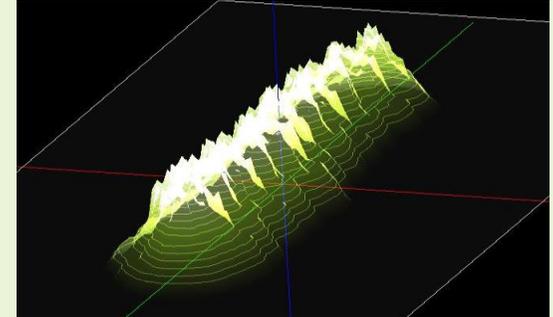
AFM像



探針



試料

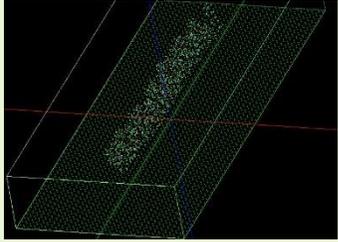


先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: ϵ カプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像から、アーティファクトを除去した試料画像をシミュレーションによって求めたものです。

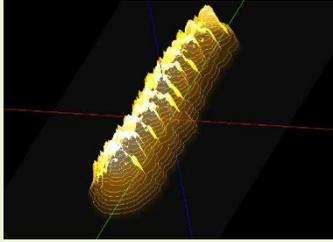
【GeoAFM】高速相互予測AFMシミュレータ

試料とAFM像から探針形状を予測

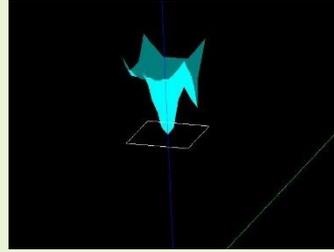
試料



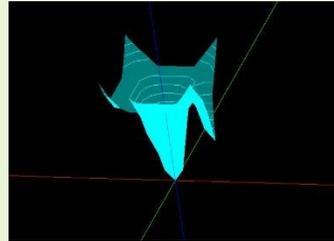
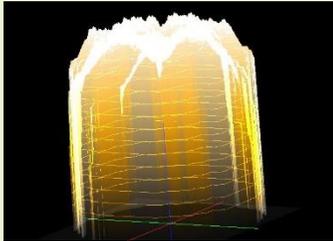
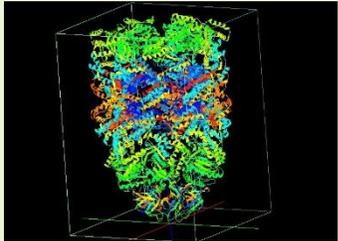
AFM像



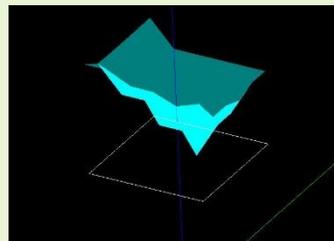
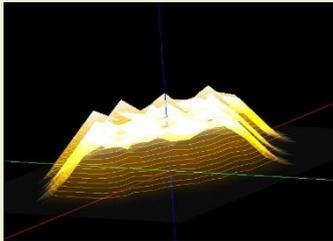
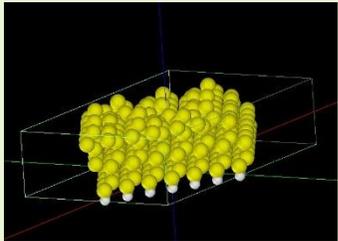
探針



先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite: 高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG: εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。



先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、GroEL(シャペロニン)のAFM像、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。)



Si(111)-(7×7)DAS構造のAFM像、および、結晶原子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。

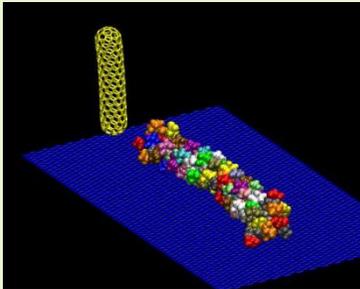
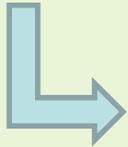
【GeoAFM】標準型および簡易高速型AFMシミュレーションの比較

通常
の力計算法
WS上で2週間

幾何学
法による高速計算法
PC上で1秒

簡易法

MD



実験で観察されるAFM像を良好に再現する。

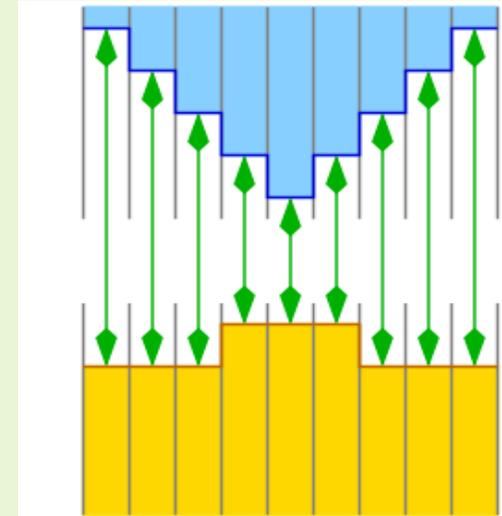
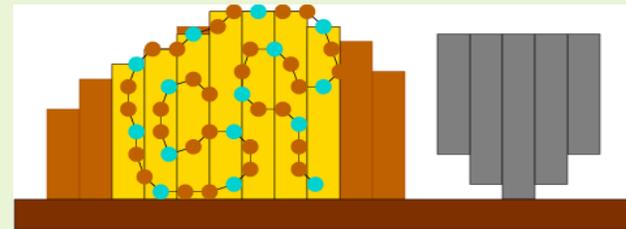
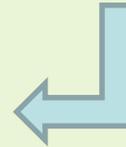
探針はProとGlyの
高さの違いを認識できる



カラーゲン像

By 2×10^{-8} shorter !!

GeoAFM

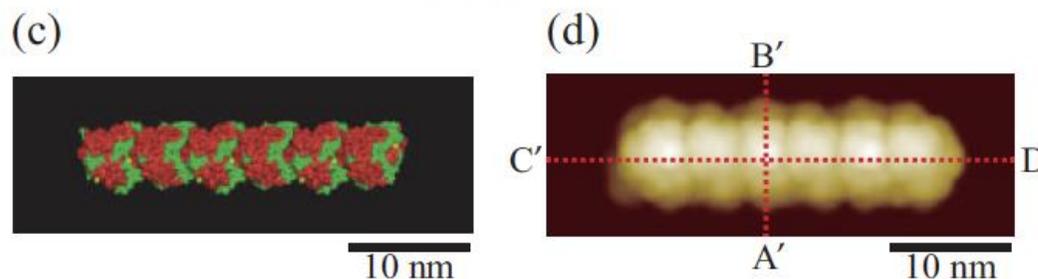
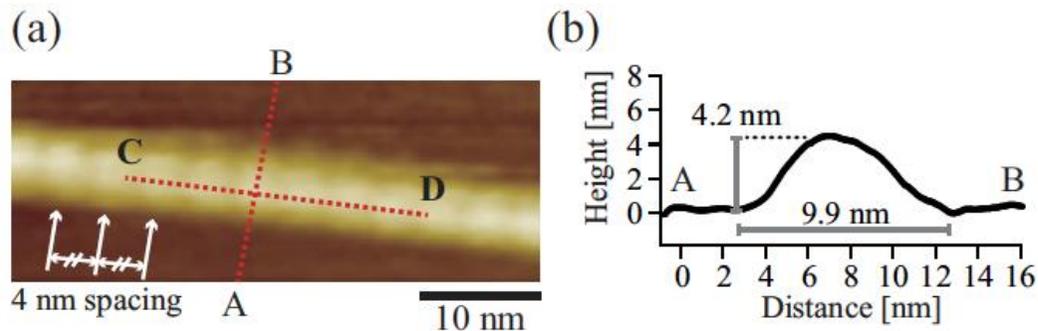


探針・試料の原子をメッシュに分ける。メッシュごとに最高点原子を決め、高さの差を測る。幾何学的な計算で計算量が少ない。

【GeoAFM】液中のtubulinのFM-AFM観察とAFMシミュレーション

H.Asakawa, K.Ikegami, M.Setou, N.Watanabe, M.Tsukada, T.Fukuma.
Biophysical Journal 101(5), 1270-1276 (2011).

AFM 実験観察



AFM シミュレーション

GeoAFM



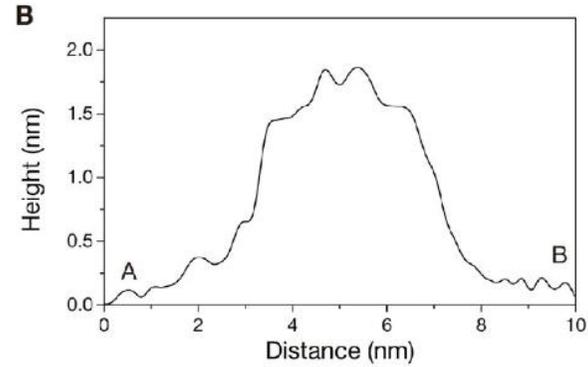
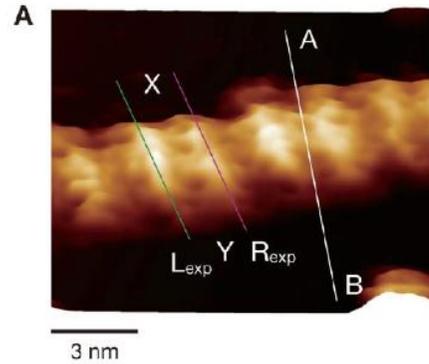
実験・理論の比較



【GeoAFM】水溶液中のDNAの直接観察とシミュレーション

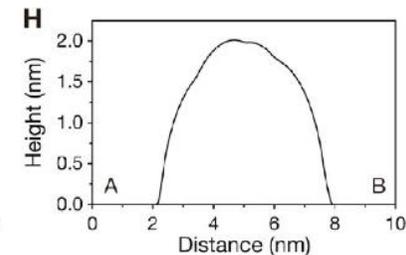
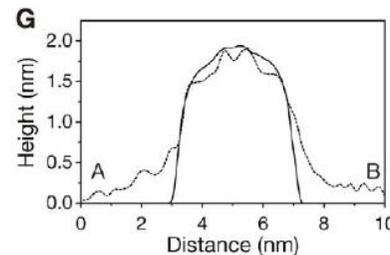
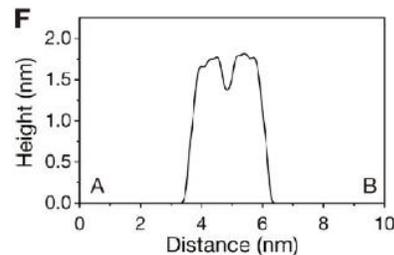
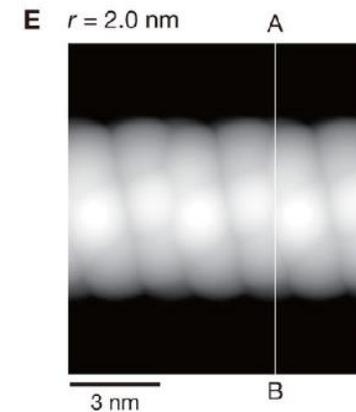
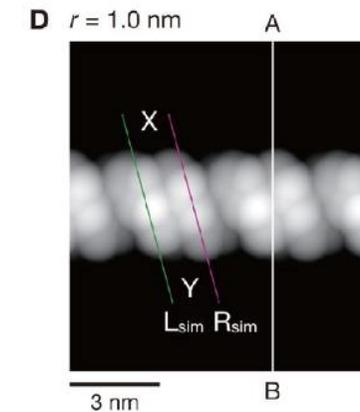
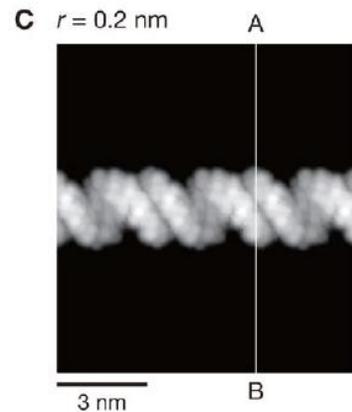
S. Ido, K. Kimura, N. Oyabu, K. Kobayashi, M. Tsukada, K. Matsushige and H. Yamada, ACS Nano 7(2), 1817-1822 (2013). DOI: 10.1021/nn400071n

FM-AFM実験



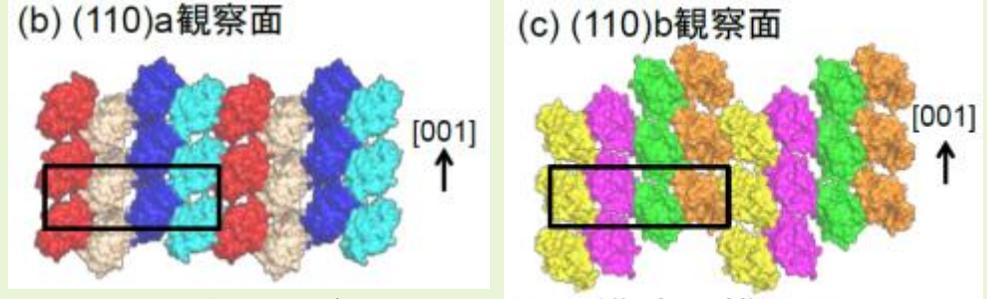
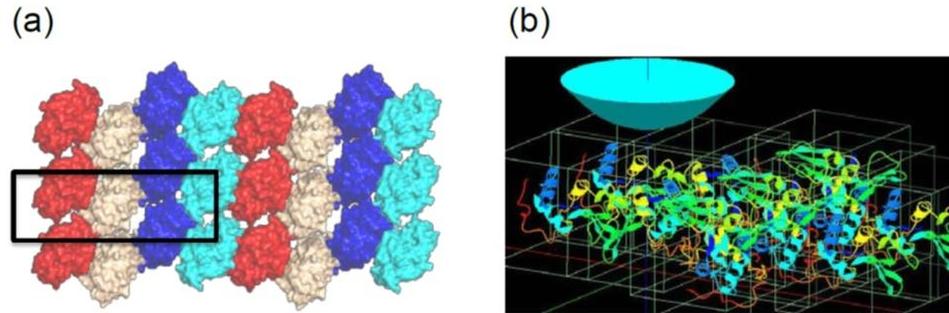
理論シミュレーション

GeoAFM

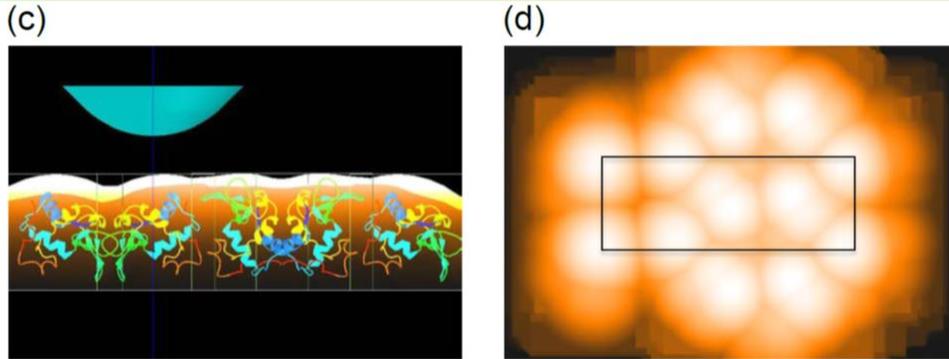


【GeoAFM】液中の正方晶リゾチーム単結晶(110)表面の決定

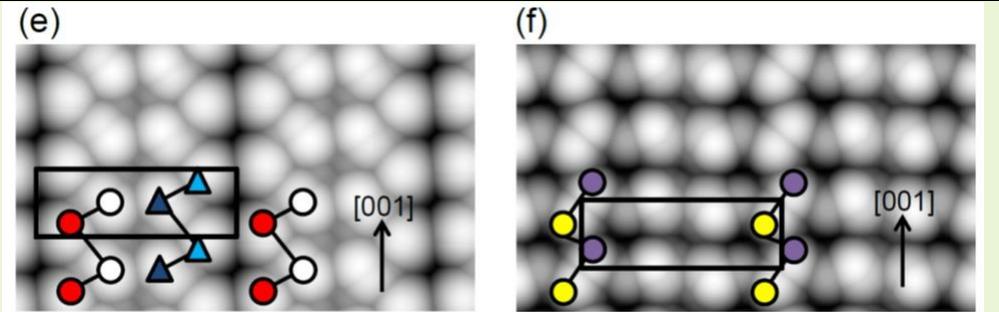
正方晶リゾチーム単結晶(110)表面は、二通りの表面構造(110)a面と(110)b面を取る可能性がある。



正方晶リゾチームの結晶構造の模式図



SPMシミュレータ像の作成

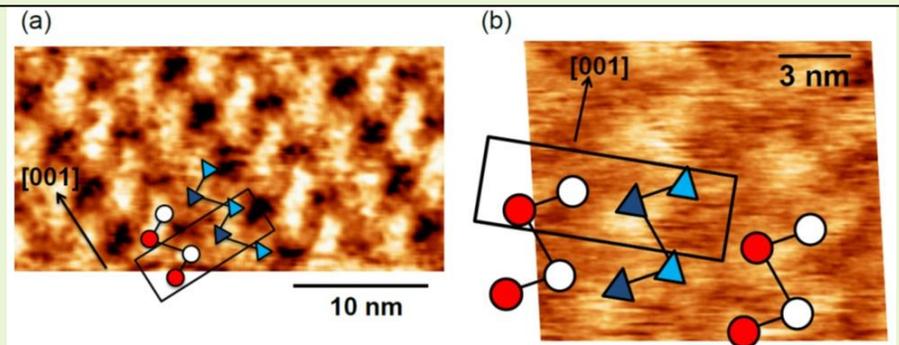


(110)a面の予測画像

GeoAFM

(110)b面の予測画像

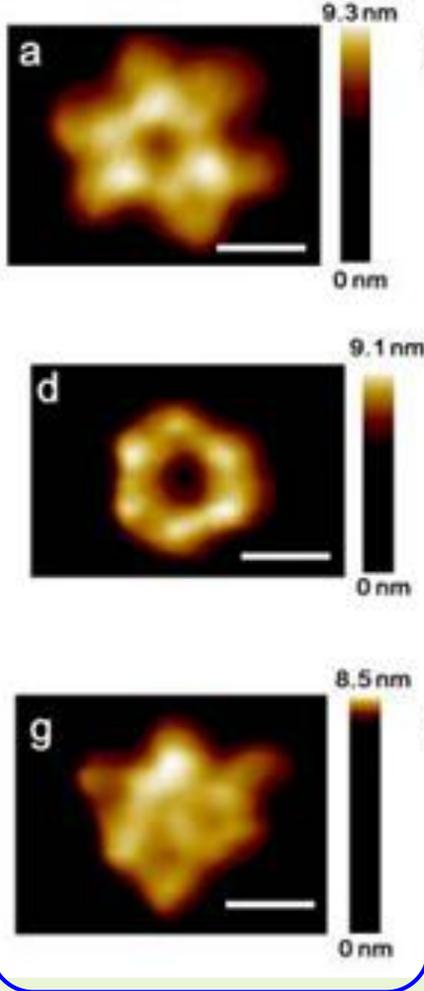
実験で得られたAFM像とSPMシミュレータ像とを比較し、(110)a面の構造を持つことを裏付けた。



溶液中での正方晶リゾチーム(110)面のFM-AFM像(実測)

【GeoAFM】回転分子モーター F₁-ATPaseのAFM観察とシミュレーション

AFM観察

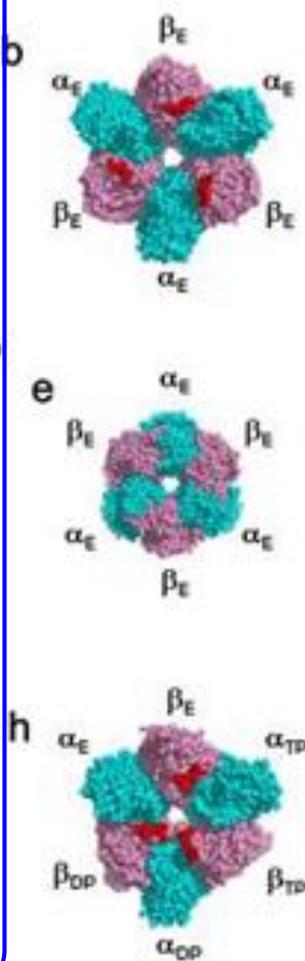


ATP非存在下
C末側

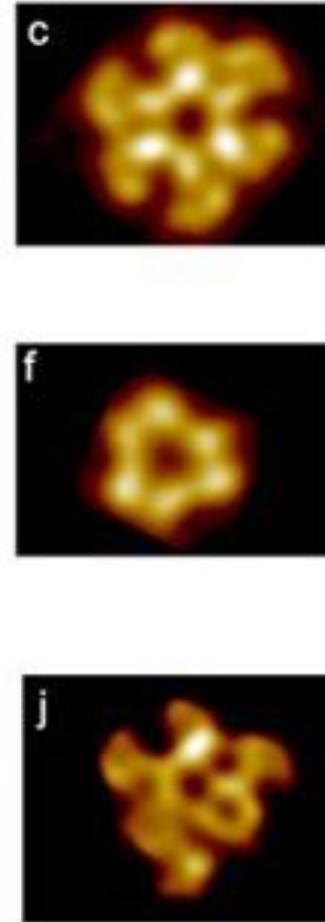
ATP非存在下
N末側

ATP存在下
C末側

シミュレーションに
使った結晶構造



GeoAFM



F₁-ATPase:

ATPの加水分解エネルギーを利用してサブユニットを一方向に回転させる回転分子モーター。

実験で得られたAFM像とSPMシミュレータ像とを比較し、実験の信頼性を裏付けた。

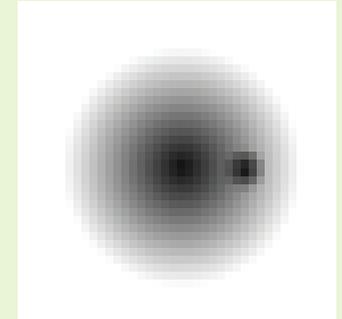
よく一致

Step 1. 探針形状を想定した画像データを作る。

ペイントツール(例、GIMP)を用いて、探針形状を想定した試料面の画像データを作る。

ペイントツールのグラデーション機能、ブラシ機能、ぼかし機能などを使い、左図のようなグレースケールの画像ファイルを作成する。ここでは縦横サイズをそれぞれ40ピクセルとした。

それをpngまたはbmp形式の画像ファイルとして保存する。
形状データに変換する際、白が高く、黒が低いとみなされる。

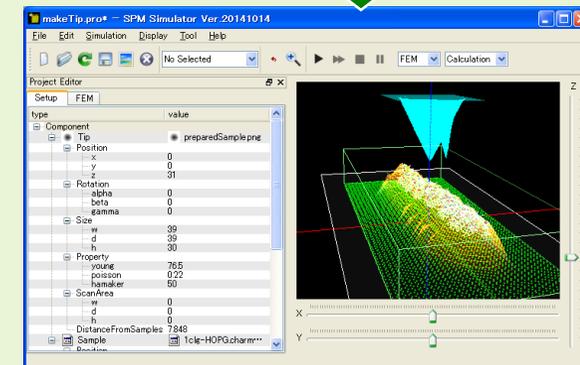
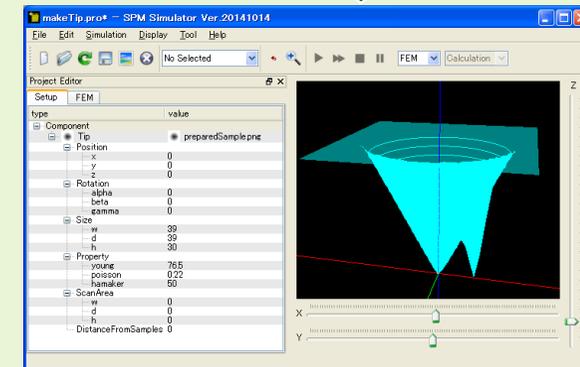


Step 2A. 画像データを探針形状として利用する。

SPMシミュレータは、探針形状または試料形状として、画像データを利用できる。読み込んだ画像ファイルは、高さ形状のデータに変換される。探針形状として画像ファイルを利用する場合。

1. Componentを右クリック → Add Tip → Fileをクリックし、上記の画像ファイルを選択する。
2. 1ピクセルあたりの長さを入力する。例えば1 [Å]とする。
3. 高さ方向のサイズを入力する。例えば30 [Å]とすると、画像ファイルの各ピクセルの明度が0~30 [Å]の高さデータに変換される。

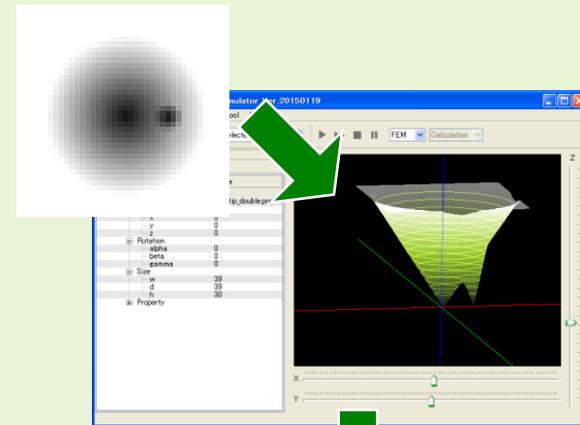
読み込んだ形状データは、GeoAFMおよびFemAFMによる計算に利用できる。



Step 2B. 画像データに基づき、先端を丸めた探針形状を作成する。

(1) 画像データを試料形状として読み込む。

1. Componentを右クリック → Add Sample → Fileをクリックし、上記の画像ファイルを選択する。
2. 1ピクセルあたりの長さを入力する。例えば1 [Å]とする。
3. 高さ方向のサイズを入力する。例えば30 [Å]とすると、画像ファイルの各ピクセルの明度が0~30 [Å]の高さデータに変換される。



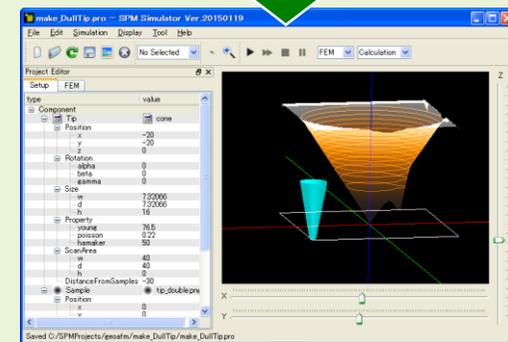
(2) 細く先端の丸い探針を利用して、GeoAFMによりImageをシミュレートする。

Componentを右クリック → Add Tip → Cone をクリックし、先端の半径を1.0 [Å]、頂角を10° とする。

Tip → Position を(-20, -20, 0)、ScanAreaを(40, 40, 0)とする。

画面を右クリック → GeoAFM → Set Resolutionをクリックし、解像度を1 [Å]とする。

画面を右クリック → GeoAFM → Show Simulated Imageをクリックし、Imageをシミュレートする。

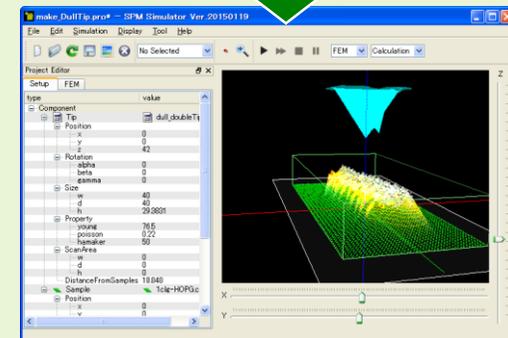


(3) Imageをcubeファイルとしてエクスポートする。

画面を右クリック → GeoAFM → Export Simulated Dataをクリックし、cube形式で保存する。

(4) GeoAFMおよびFemAFMによる計算に利用する。

新しいSPMプロジェクトを用意して、今作成したcubeデータをGeoAFMおよびFemAFMによる計算に利用できる。



【GeoAFM】GIMPによるオリジナルの探針形状画像データの作成

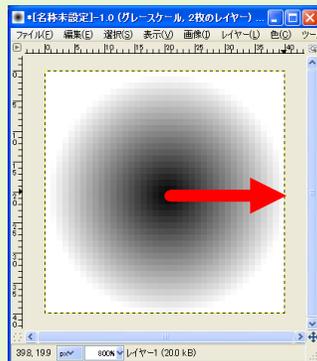
探針形状を想定した画像データを作る。GIMPを起動。40 x 40 pixelのキャンバスを作成。

レイヤー1

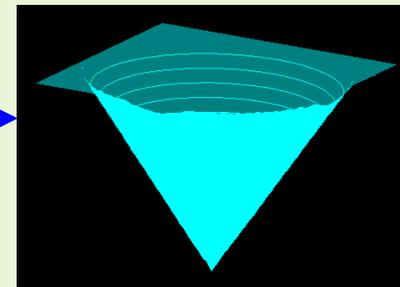
円錐形状を想定した画像を描く。

グラデーションツールを選択。
形状として「放射状」を選択。

「モード」→「標準」



画像ファイルをpng, bmp, jpg形式で保存し、SPMシミュレータに読み込ませる。

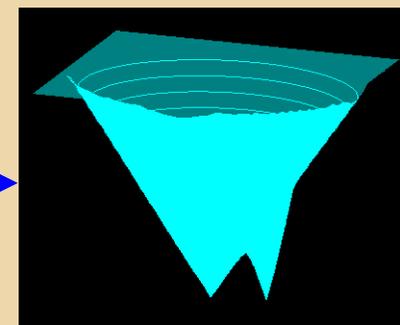
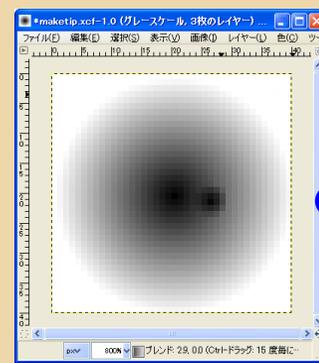
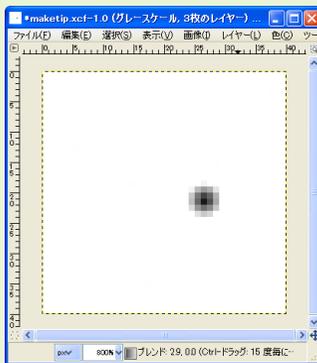


レイヤー2

中心から少し離れた位置に
鋭い円錐形状を描く。

グラデーションツールを選択。
形状として「放射状」を選択。

「モード」→「乗算」

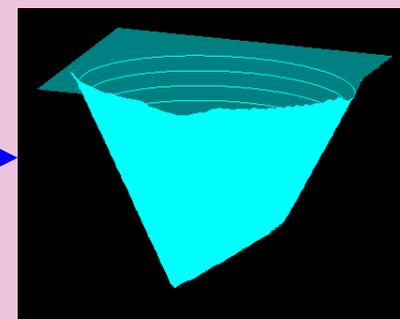
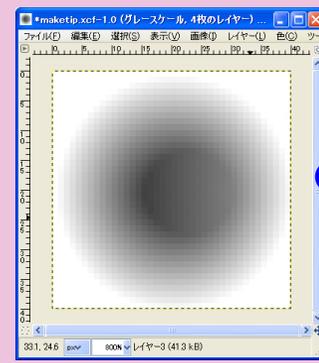
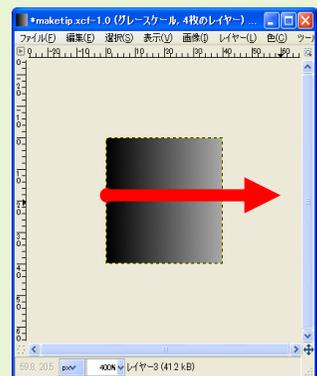


レイヤー3

円錐の下を斜めにカットする
ための形状を描く。

グラデーションツールを選択。
形状として「線形」を選択。

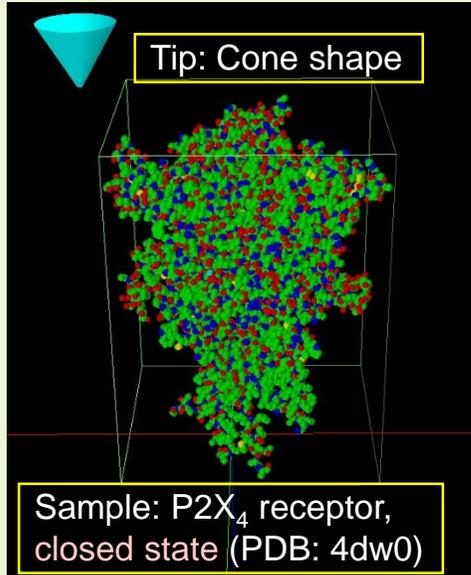
「モード」→「比較(明)」



【GeoAFM】P2X₄受容体のAFM像

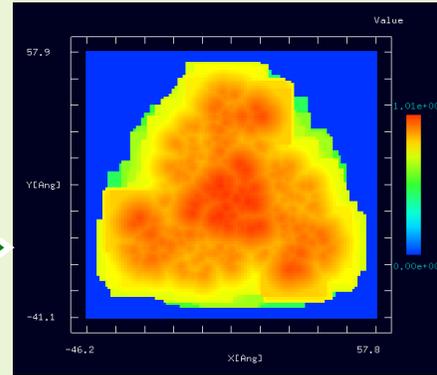
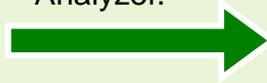
P2X₄受容体は細胞表面のイオンチャンネル型ATP受容体で、ATP存在下で構造が変化する。

Before activation



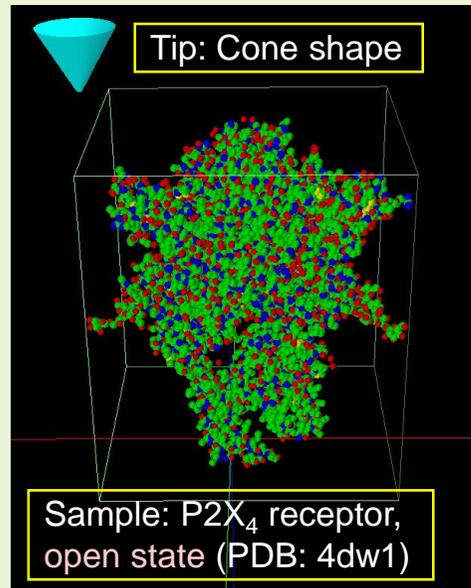
Simulation

GeoAFM result is imported to Analyzer.

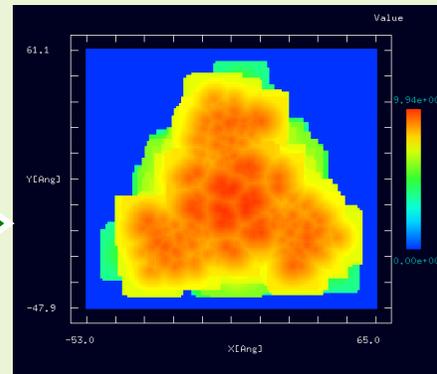
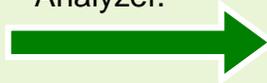


obtuse triangular structure

After binding with ATP



GeoAFM result is imported to Analyzer.

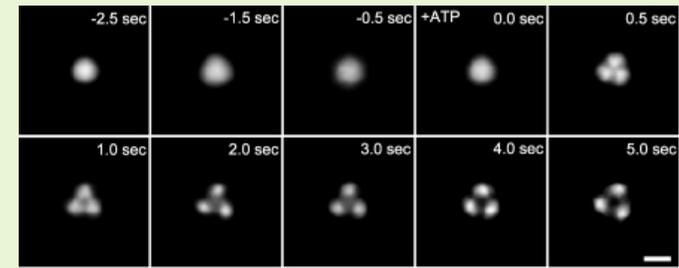


Trimer structure

Experiment

Fast-Scanning AFM Observations of the ATP-Induced Structural Changes in the P2X₄Rs.

Before activation

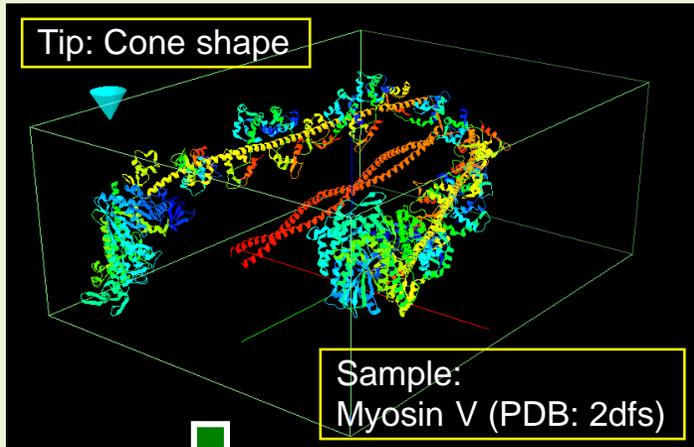


After binding with ATP

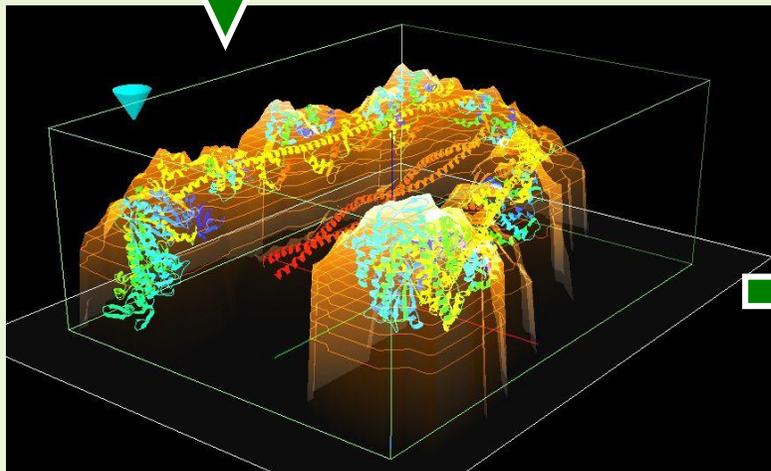
Y. Shinozaki, K. Sumitomo, M. Tsuda, S. Koizumi, K. Inoue, K. Torimitsu, PLoS Biol., 5;7(5):e103, 2009.

【GeoAFM】生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション

Simulation



Result of GeoAFM
Less than 1 second

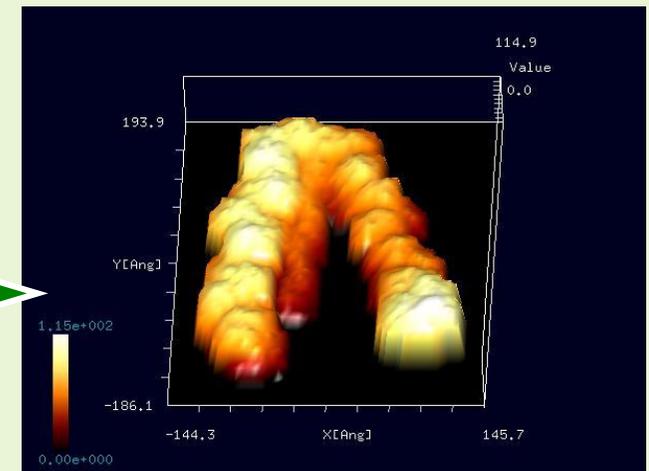
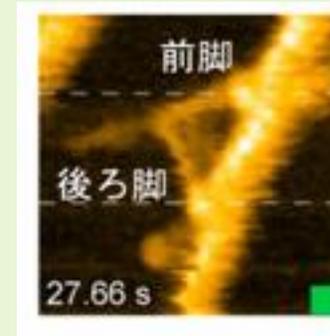


Export to result.cube,
Import the result.cube to Analyzer.

Experiment

金沢大学 理工研究域数物科学系の安藤 敏夫教授と古寺 哲幸助教らの研究グループは、世界最高性能の高速原子間力顕微鏡を開発し、アクチンフィラメントに沿って動くミオシンV分子の振舞いを直接高解像撮影することに世界で初めて成功した。

<http://www.jst.go.jp/pr/announce/20101011/>



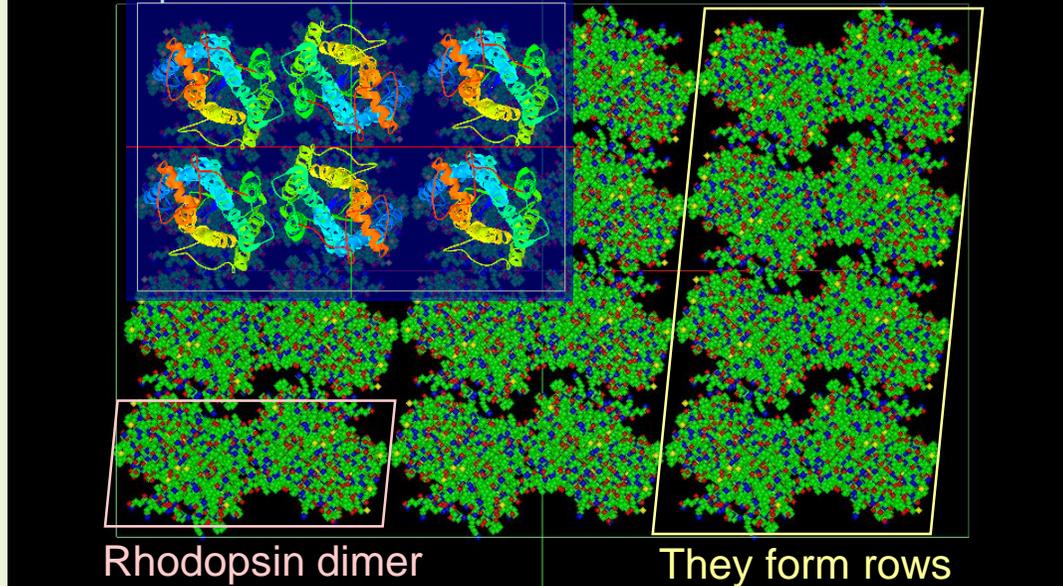
【GeoAFM】 Rhodopsin のAFM 像

ロドプシンは眼の網膜に存在し、光を認識するためのタンパク質である。ロドプシンはディスク膜中に大量に埋め込まれており、AFMによる観察が行われている。ロドプシンはダイマーの列を形成する。ロドプシン・ダイマー列が形成する準結晶を想定し、ロドプシン・ダイマー12ユニット(水素原子を除いて65904原子)から成るモデルを用意した。

Simulation

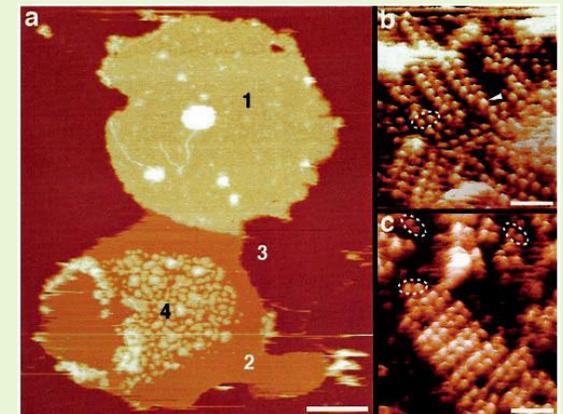
Bird view of the sample.

12 rhodopsin dimers were constructed based on the PDB 1N3M.



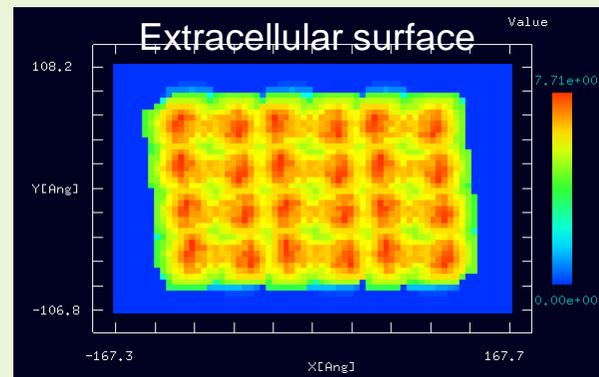
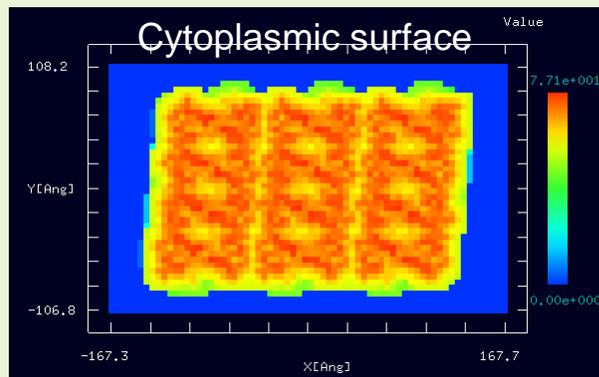
Experiment

Topography of an open, spread-flattened disk adsorbed to mica and imaged in buffer solution.



Y. Liang et al., J.Biol.Chem. 278 (2003) 21655-21662.

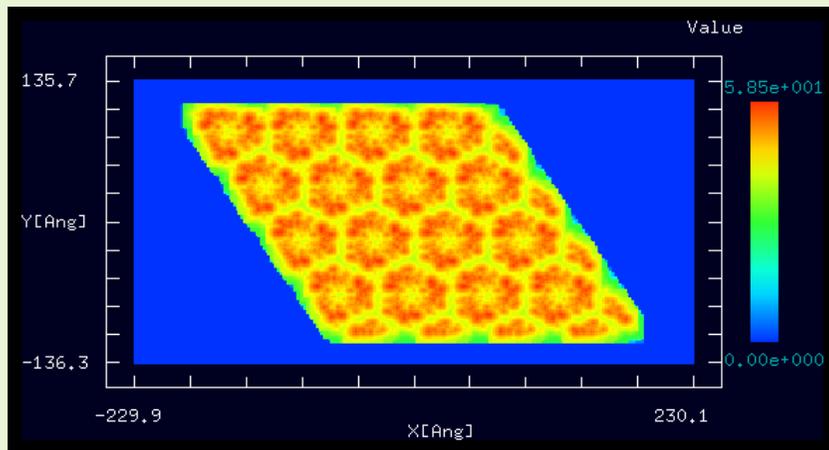
GeoAFM result is imported to Analyzer.



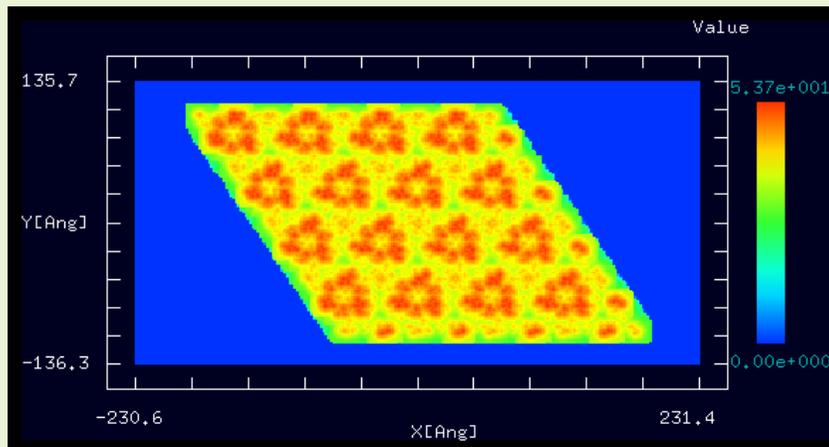
【GeoAFM】バクテリオロドプシン(bacteriorhodopsin)のAFM像

- ・ バクテリオロドプシンは高度好塩菌の膜タンパク質であり、光駆動プロトンポンプとして、プロトンを細胞質内から外へ輸送する。
- ・ ある波長の光を照射されると構造変化する。

シミュレーション結果

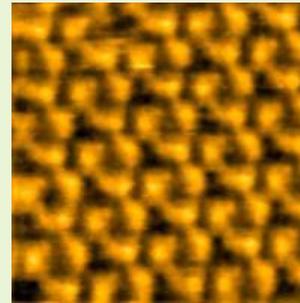


バクテリオロドプシン(1c8r:照射前)

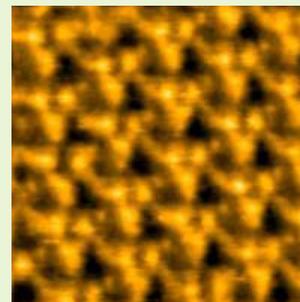


バクテリオロドプシン(1c8s:照射後)

実測画像



照射前

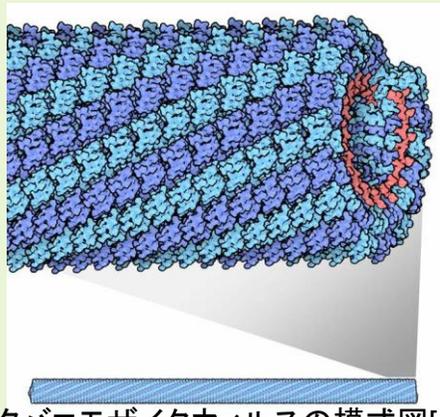


照射後

Shibata, Mikihiro; Yamashita, Hayato; Uchihashi, Tkayuki; Kandori, Hideki; Ando, Toshio; Nature Nanotechnology, 5(3):208-212; 2010-03

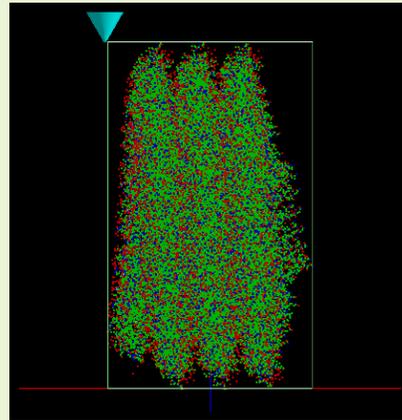
【GeoAFM】タバコモザイクウイルス(TMV)のAFM像

- タバコモザイクウイルスは、タバコなどの葉にモザイク状の斑点ができ葉の成長が悪くなるタバコモザイク病の原因である。
- その構造は螺旋状に積み重なり円筒形の形をしたタンパク質の覆いとそれに包まれた1本のRNAからなる。

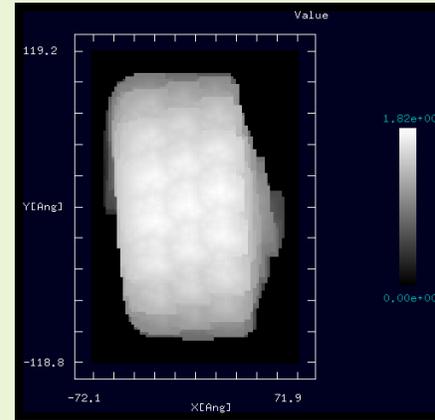


タバコモザイクウイルスの模式図[1]

シミュレーション結果



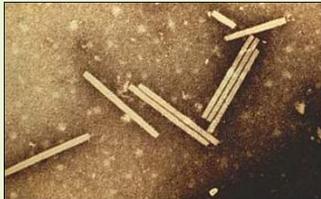
シミュレーションに用いたモデル



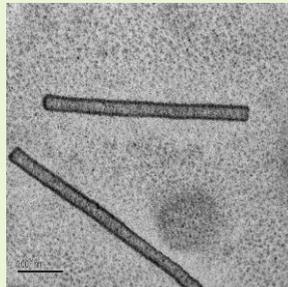
Tobacco mosaic virusのGeoAFMでのシミュレーション画像

EMやTEM、SEMではタンパク質のサブユニットを見ることは難しいが、AFMならばこのくらいははっきりと輪郭を捉えられる可能性がある。

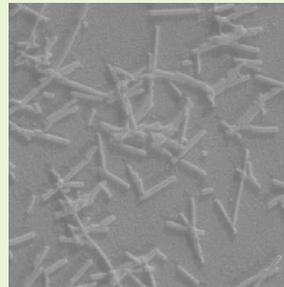
実測画像



Electron Microscopeでの実測画像[2]



Transmission Electron Microscopyでの実測画像[3]



Scanning Electron Microscopeでの実測画像[4]

[1]:<http://pdbj.org/mom/109>

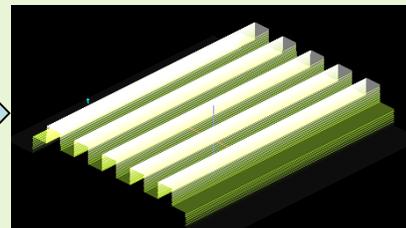
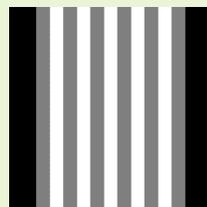
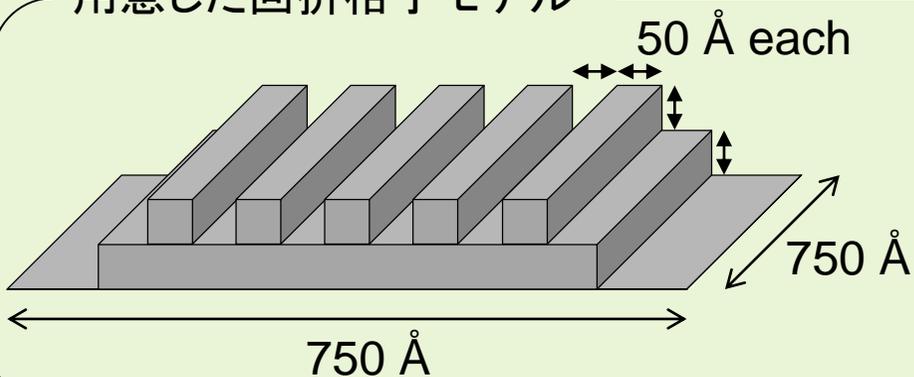
[2]:http://erec.ifas.ufl.edu/plant_pathology_guidelines/module_02.shtml

[3]:http://www.smem.uni-bayreuth.de/en/samples_gallery/Transmission-Electron-Microscopy-TEM/Biological-Samples/virus/index.html

[4]:<http://www.lv-em.com/sem-tobacco-mosaic-virus>

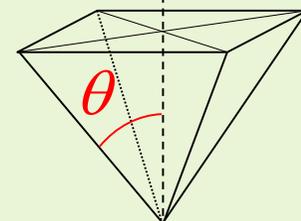
【GeoAFM】回折格子のAFM像シミュレーション

用意した回折格子モデル



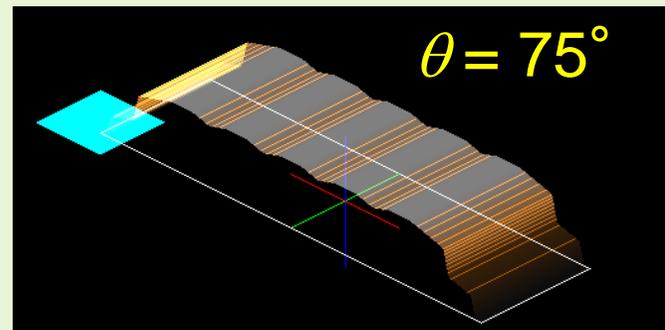
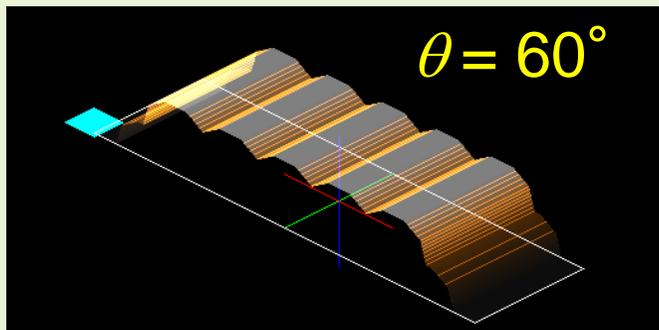
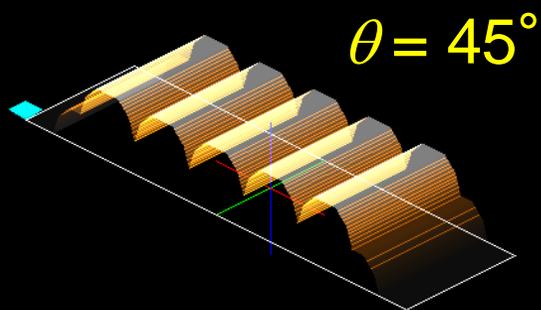
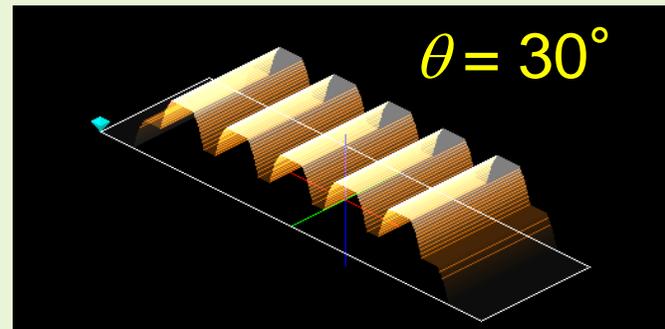
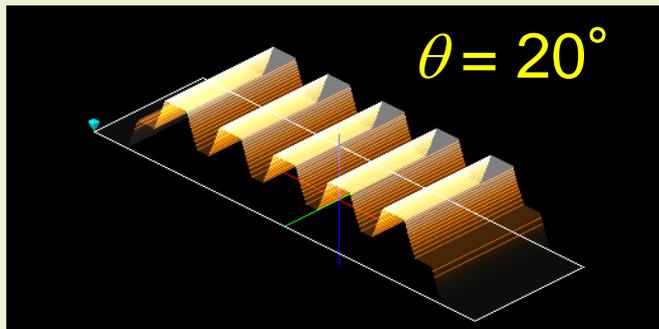
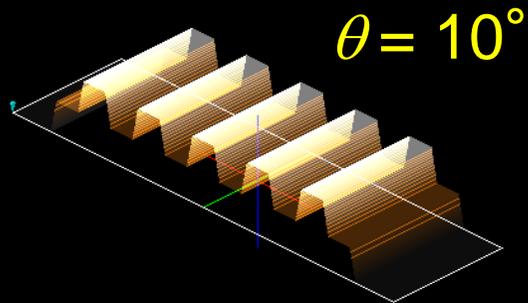
画像ファイルから形状データを作成

探針



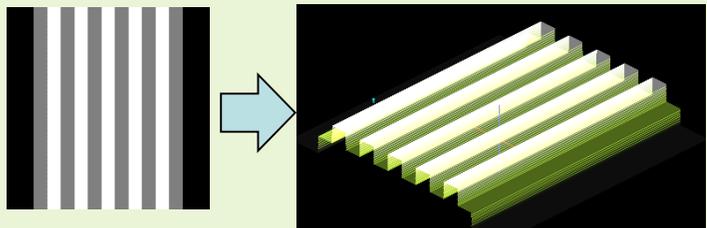
ピラミッド探針

探針の先端を鋭いものからだんだん鈍くしてシミュレートした結果。



【GeoAFM】ベンチマークテスト

計算可能なサイズを調べる。回折格子モデルを大きくしながら、GeoAFMのシミュレートを試みた。

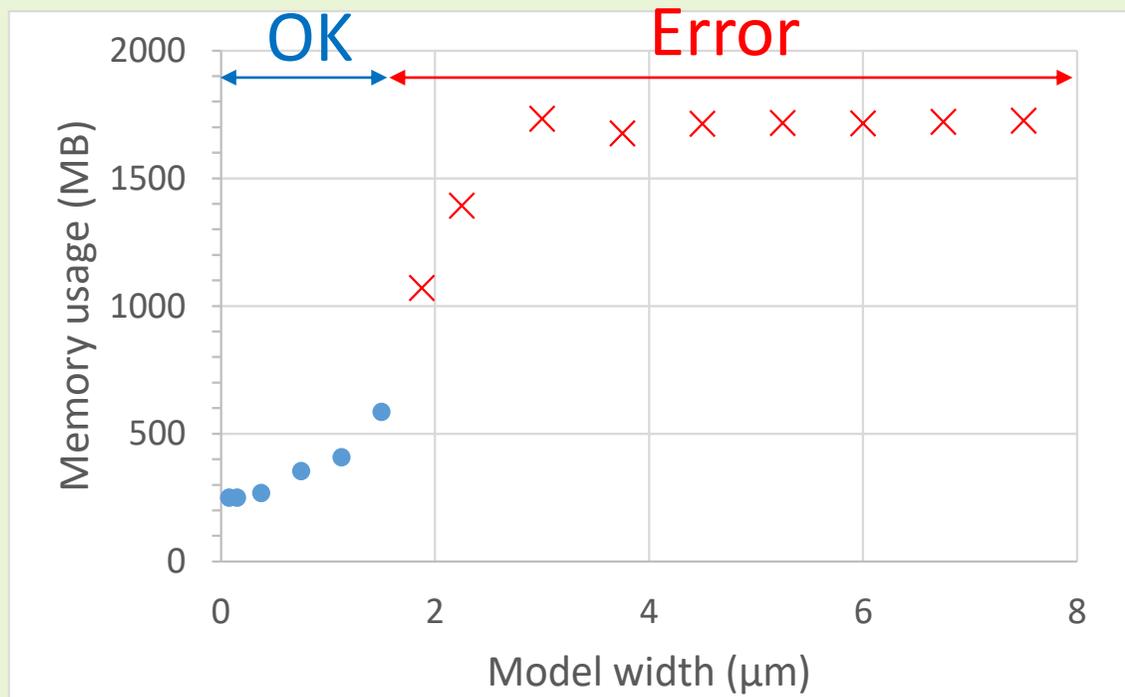


画像ファイルから形状データを作成

SPMシミュレータで画像ファイルをSampleとして読み込む際に、xy方向の縮尺およびz方向の高さを変えられる。

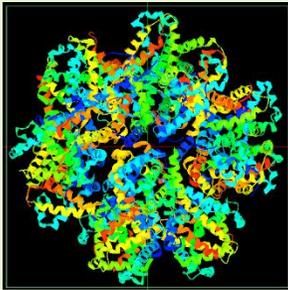
探針は $\theta = 10^\circ$ のピラミッド形状。

GeoAFMの分解能を10 Å(上限値)に固定した。

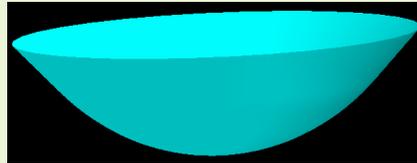


モデルの大きさが1.9 μm以上になると計算不可能。一般的なSEM画像のサイズは5 μm以上なので、残念ながら、SEM像をSPMシミュレータで再現することはできない。

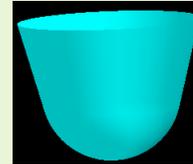
【GeoAFM】球状タンパク質の粒径解析



シミュレーションに用いた探針



Cone
Radius 32.0[Å]
Angle 45.0[deg]



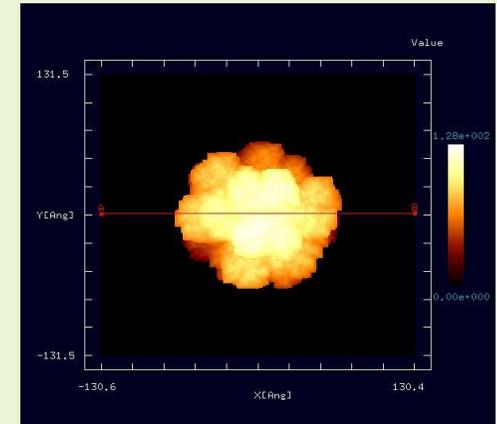
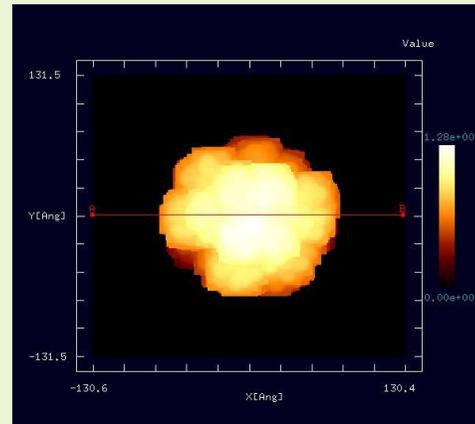
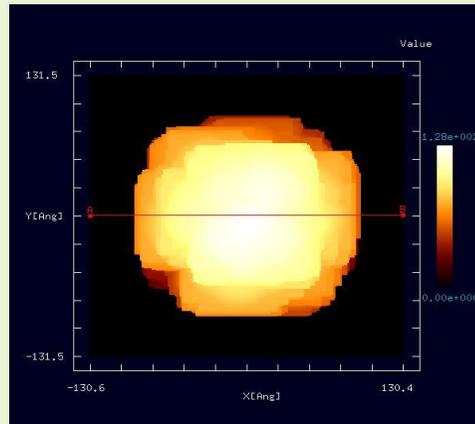
Cone
Radius 8.0[Å]
Angle 15.0[deg]



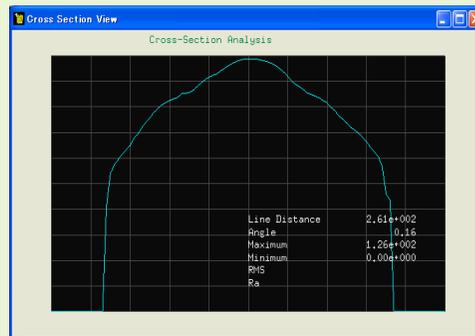
Pyramid
Angle 16.0[deg]

試料
ヘモグロビン
(PDB: 1yhu)
横幅127.9[Å]

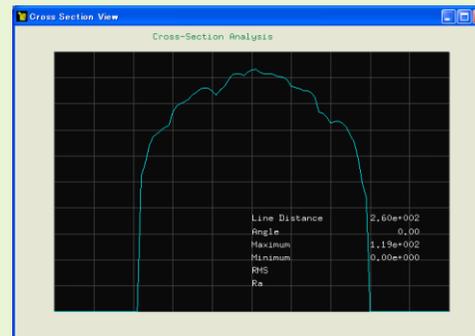
GeoAFM



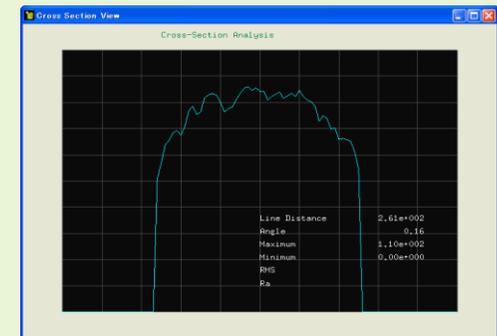
Cross
Section



189[Å]



151[Å]



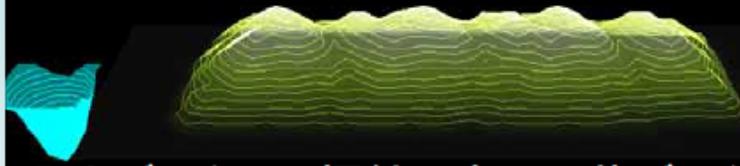
136[Å]

探針形状によって、得られるAFM像が大きく変わる。細い探針ほど実際の大きさに近づく。

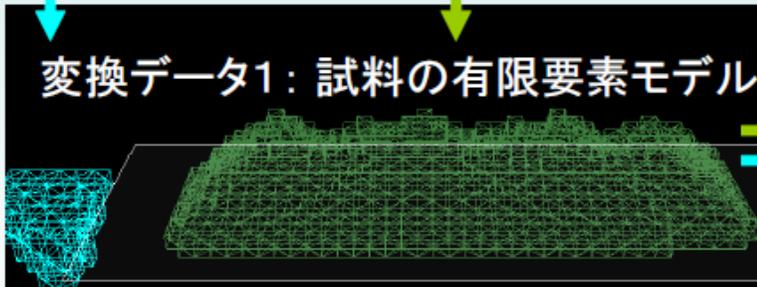
【FemAFM】 試料モデルからの相互作用・変形による測定画像の予測

FemAFM

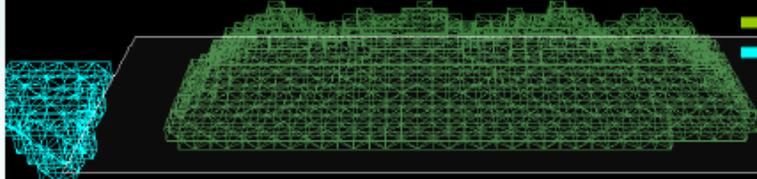
入力データ1: 試料の表面形状データ



入力データ2: 探針の表面形状データ



変換データ1: 試料の有限要素モデル

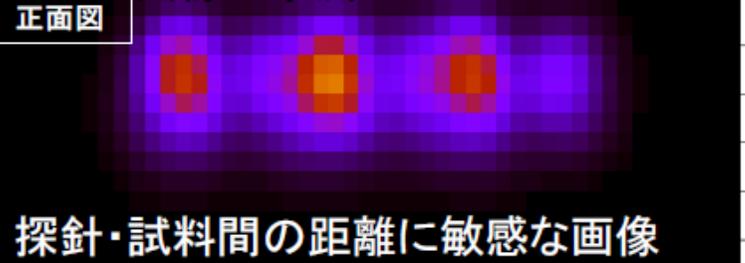


変換データ2: 探針の有限要素モデル

探針・試料の表面形状を弾性率とファンデルワールス力をもつ有限要素の連続体に変換し、その相互作用と弾性変形を計算し、探針が受ける引力の分布を画像化。

計算結果: 引力分布の画像予測

正面図

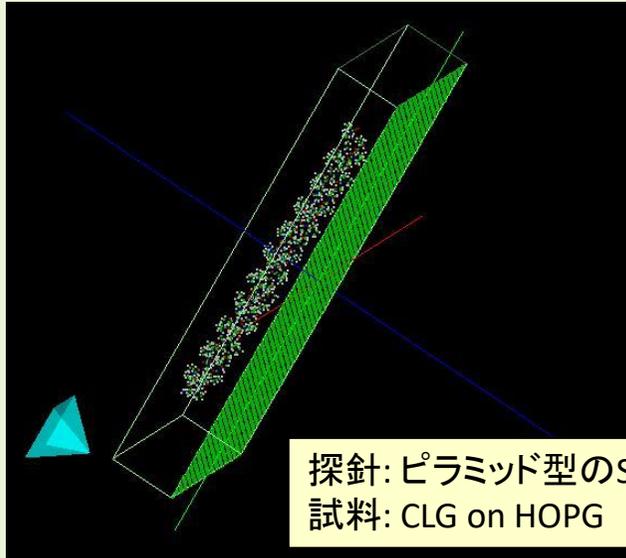


探針・試料間の距離に敏感な画像

連続弾性体AFMシミュレータ(FemAFM)は、有限要素法を使用して、AFM像をシミュレートする。高速相互予測AFMシミュレータ(GeoAFM)とは異なり、試料や探針の形状の変形に対応できる。

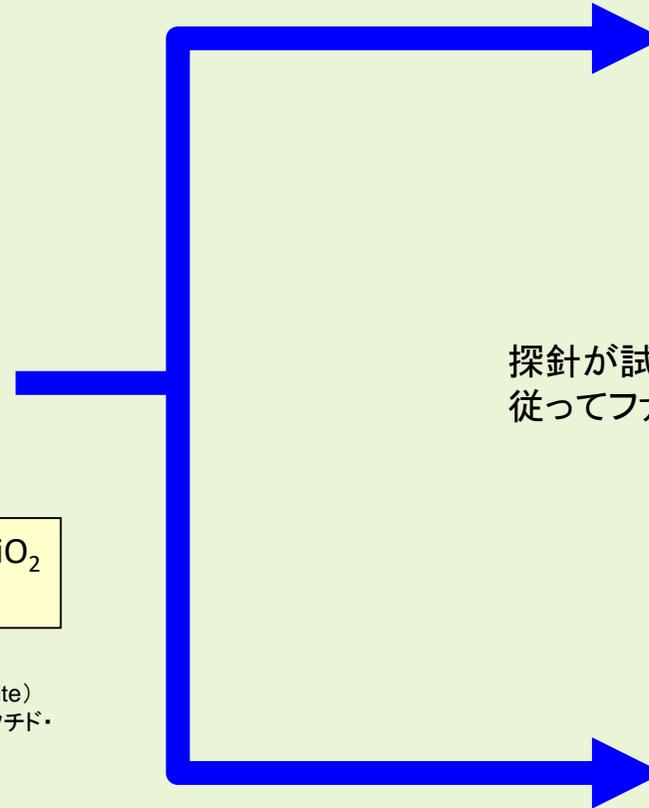
【FemAFM】ラクトン系高分子ポリマーのAFMシミュレーション

FemAFM



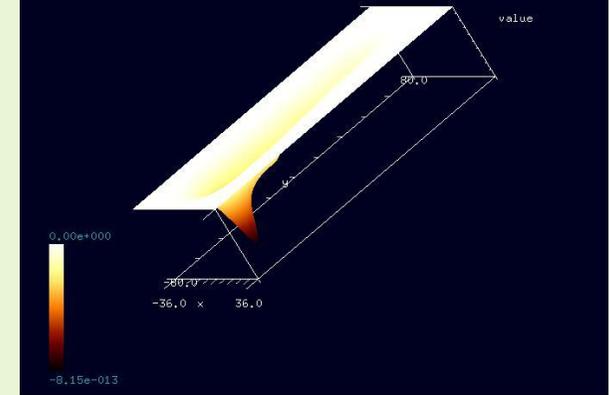
HOPG: 高配向熱分解黒鉛 (Highly Oriented Pyrolytic Graphite)
CLG: ラクトン系高分子量ポリマー (CLG: ε-カプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)

Constant height (static) mode



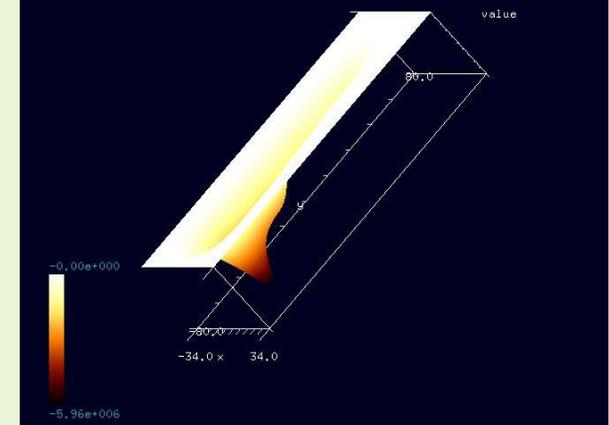
Frequency shift mode

AFM画像



探針が試料に接近している部分では、逆6乗法則に従ってファンデルワールス力が急激に増大している。

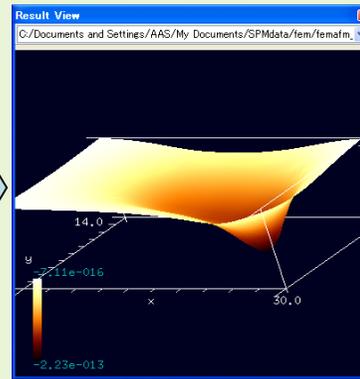
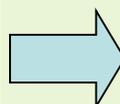
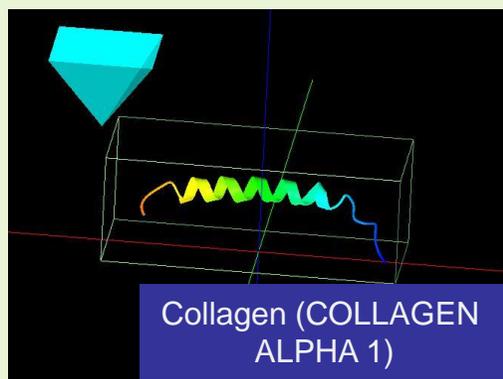
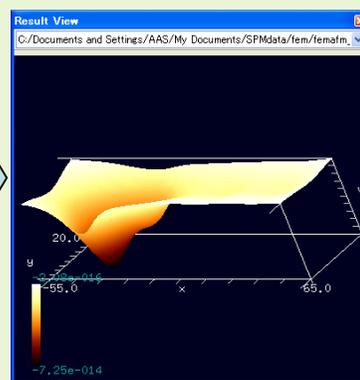
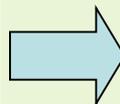
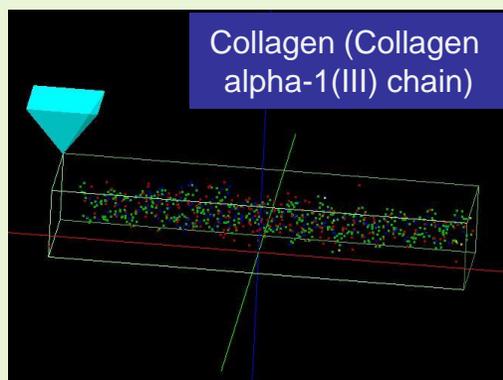
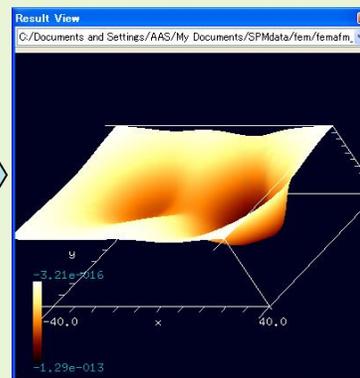
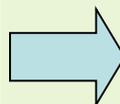
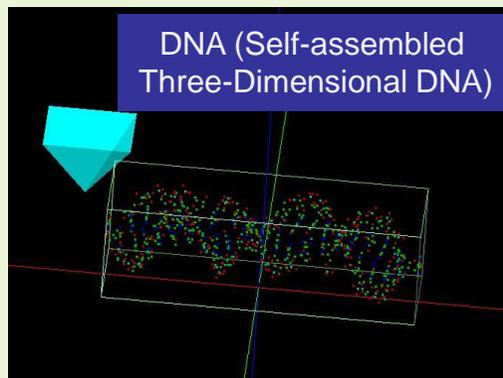
周波数シフトAFM画像



カンチレバーを周波数500[MHz]で励振させており、周波数のずれは最大で5.96[MHz]

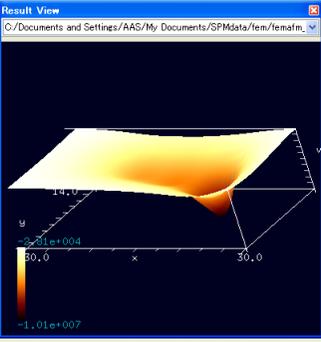
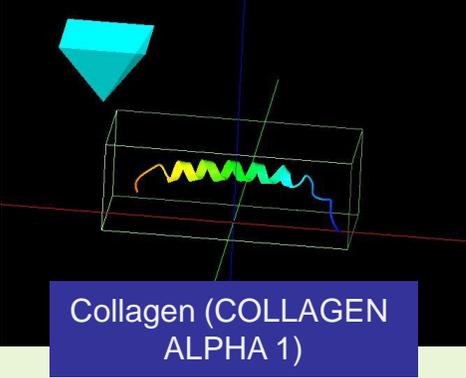
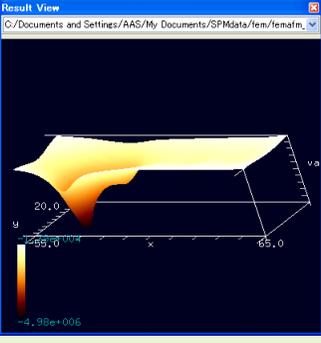
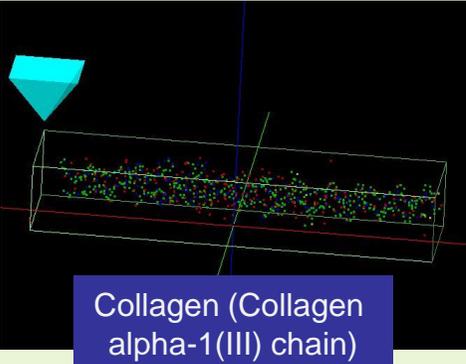
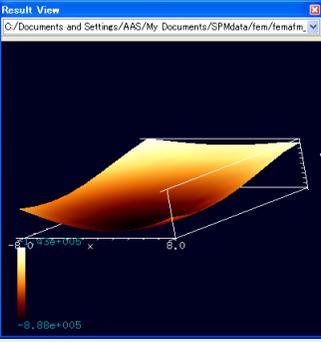
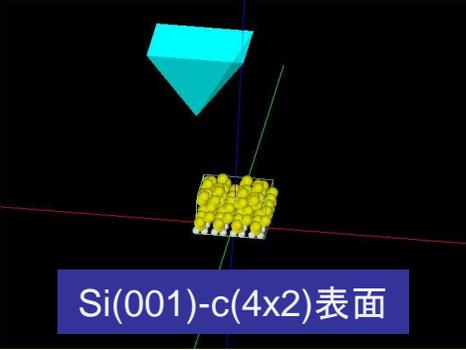
【FemAFM】ノンコンタクトモード

カンチレバー先端の探針が、試料表面から数Å離れた状態で原子間に働く相互作用を測定しつつ、試料表面を走査する状況に対応しています。



【FemAFM】周波数シフト像モード

カンチレバーを外力によって一定の周波数で振動させながら、非接触で試料表面に近付け、探針-試料間の相互作用により生じる周波数シフトの分布画像を求める状況に対応しています。



cf. Experiment

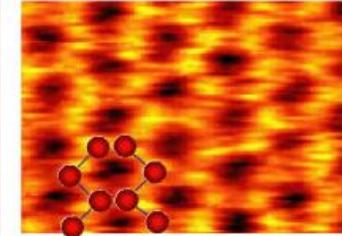
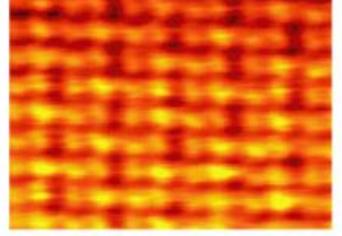
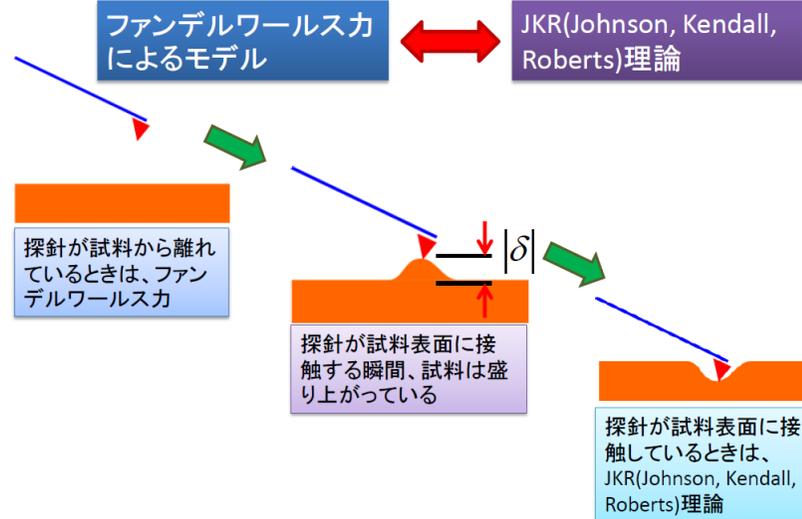
Si(001)-c(4x2)	Si(001)-p(2x1)
	
(a) 弱い相互作用 ($\Delta f = -10\text{Hz}$)	(b) 強い相互作用 ($\Delta f = -30\text{Hz}$)

図1: Si(001)表面のNC-AFM像 (40 Å x 30 Å)

第26回表面科学講演大会(2006) 要旨集2C04
内藤 賀公ら、LT-NC-AFM によるSi(001)ダイマー構造変化の観察

【FemAFM / LiqAFM】粘弾性接触解析の計算原理(参考)

探針-試料間の粘弾性接触を記述するモデル



ファンデルワールス力

$$F \cong \frac{A}{12} \frac{D}{d^2}$$

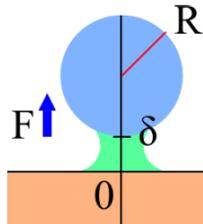
ただし、 $D = 2R$, $A = \sqrt{H_1 H_2}$
 H_1, H_2 : Hamaker定数

探針先端部 → 純粋な弾性体

試料 → 粘弾性の性質を持たせる → 表面張力の導入

→ JKR理論を使うことにする

JKR理論



F : 二つの固体の間に働く力(上向きを正)

δ : 二つの固体の間の距離(下向きを正)

$$F = 4F_c (x^3 - x^{3/2})$$

$$\delta = \delta_0 (3x^2 - 2\sqrt{x})$$

x : 二つの固体の接触面積に比例する無次元量

$$6^{-2/3} \leq x \leq 1$$

$$F_c = 3\pi\gamma R \quad (\gamma : \text{試料の表面張力})$$

$$\delta_0 = \frac{a_0^2}{3R}, \quad a_0 = \left(\frac{9\pi\gamma R^2}{E^*} \right)^{1/3}, \quad \frac{1}{E^*} = \frac{1-\sigma_1^2}{E_1} + \frac{1-\sigma_2^2}{E_2}$$

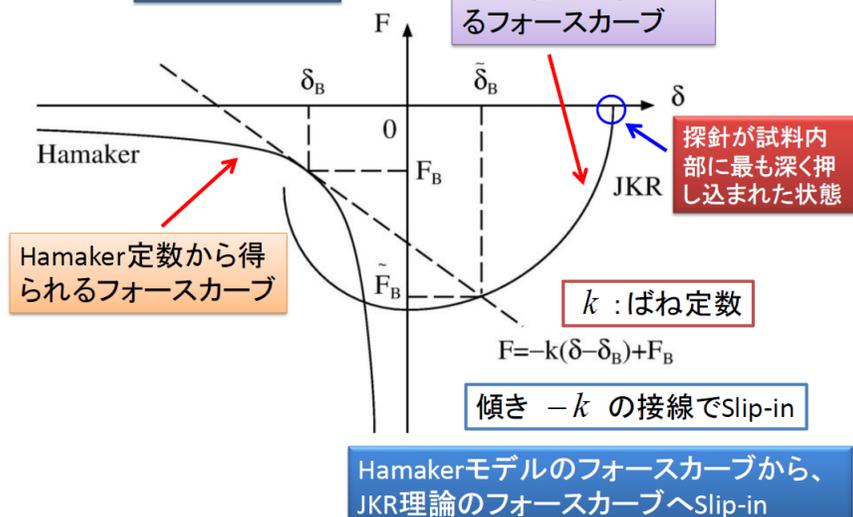
E_1, E_2 : ヤング率 σ_1, σ_2 : ポアソン比

a_0 : 探針を粘弾性物質内部に押し込んだ際、凝着力と弾性反発力が相殺して、探針の試料から受ける力がゼロになる際の、接触面積

$a = a_0 x$: 接触面積

ファンデルワールス力によるモデルとJKR理論の間の転移

Slip-inとSlip-out

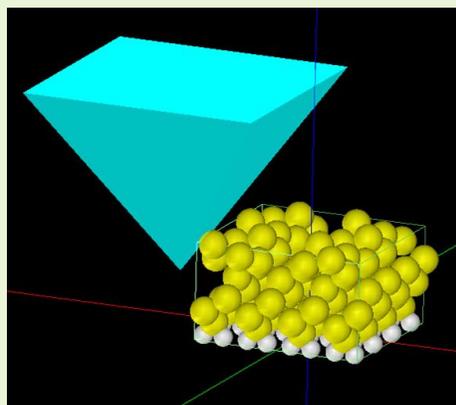


【FemAFM】粘弾性接触解析

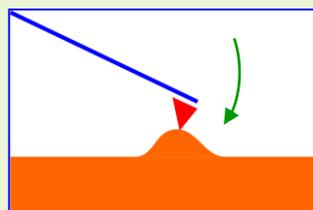
FemAFM

粘弾性接触解析モード

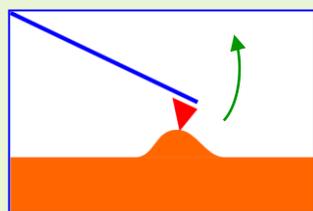
外力によってカンチレバーを一定の周波数で振動させる。探針を試料表面上のある一点に近付けた際の、探針が試料に接触した後、次に試料内部に押し込まれ、最後は引き返されて試料表面から離脱する直前までの、探針の振る舞いをシミュレートする。



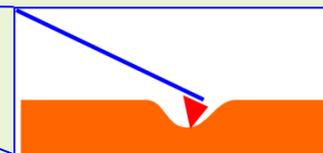
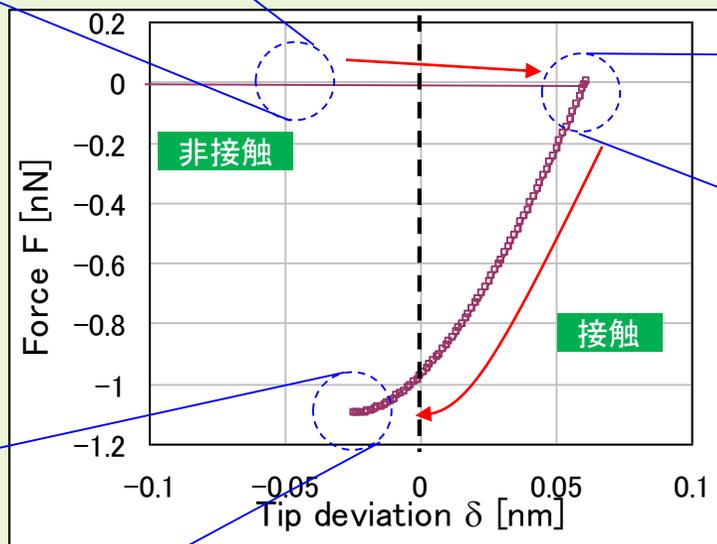
探針: ピラミッド型の SiO_2
試料: $\text{Si}(001)$



探針が試料に接した直後の状態



探針が試料から離脱する直前の状態

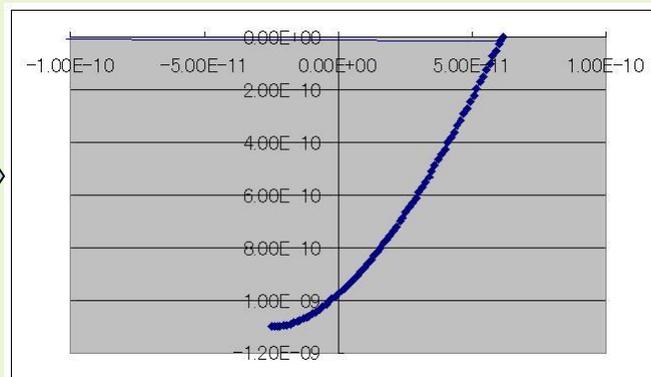
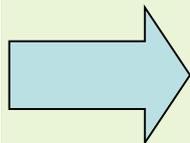
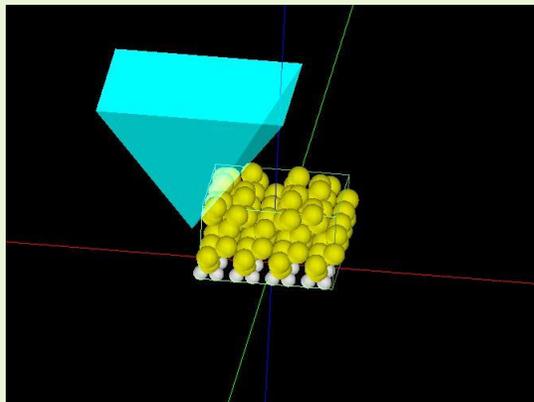


探針が試料内部に押し込まれた状態

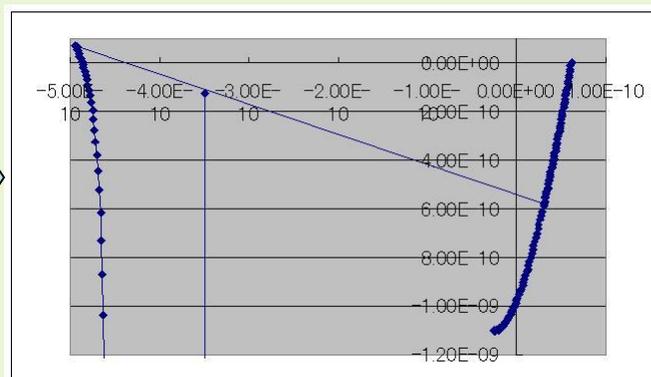
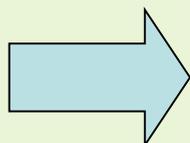
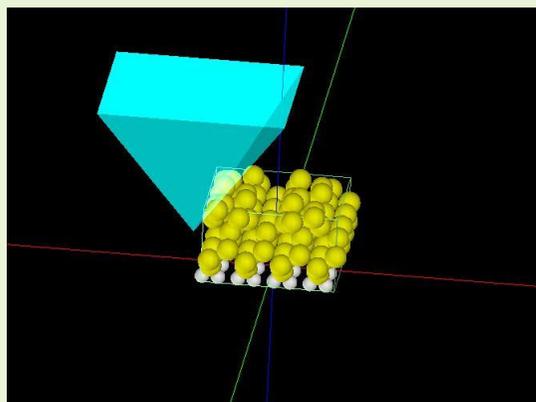
探針が受ける力の向きは、鉛直方向上向きを正とする。

【FemAFM】粘弾性接触解析モード

試料表面の一点上において、外力によってカンチレバーを一定の周波数で振動させ、探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれてから、引き戻されて離脱する直前までの様子を再現します。

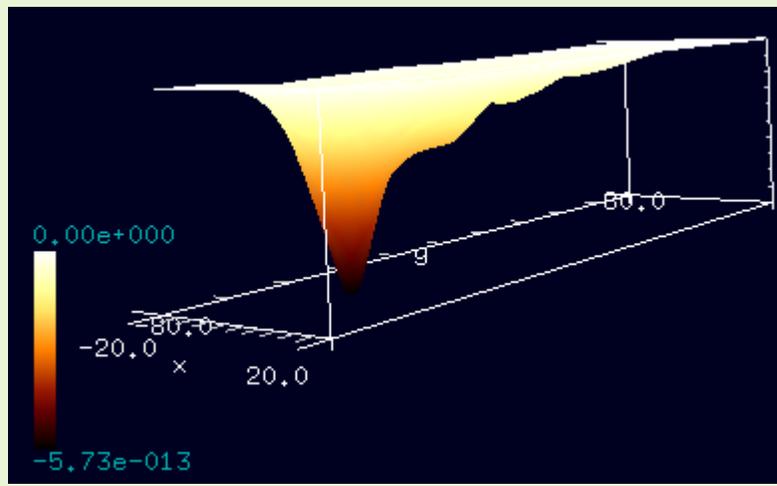
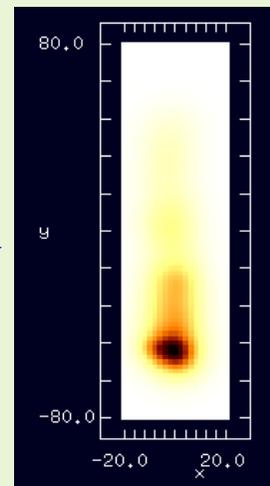
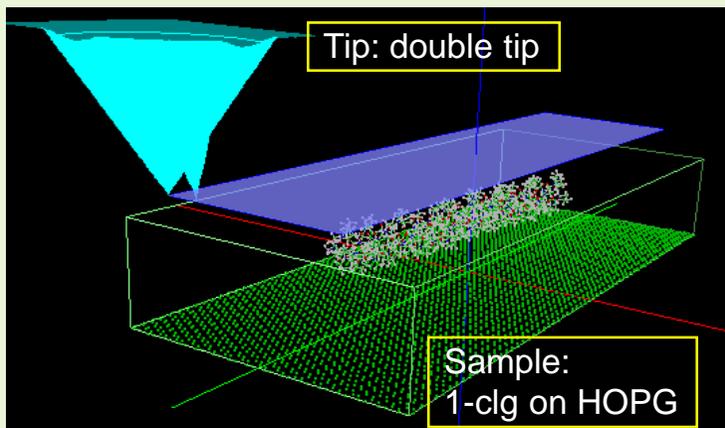


粘弾性のあるSi(001)表面に探針が凝着する際の、探針の垂直方向の変位、および、探針の感じる外力の時間変化をシミュレーションによって求めたもの。(ばね定数が**小さい**場合)

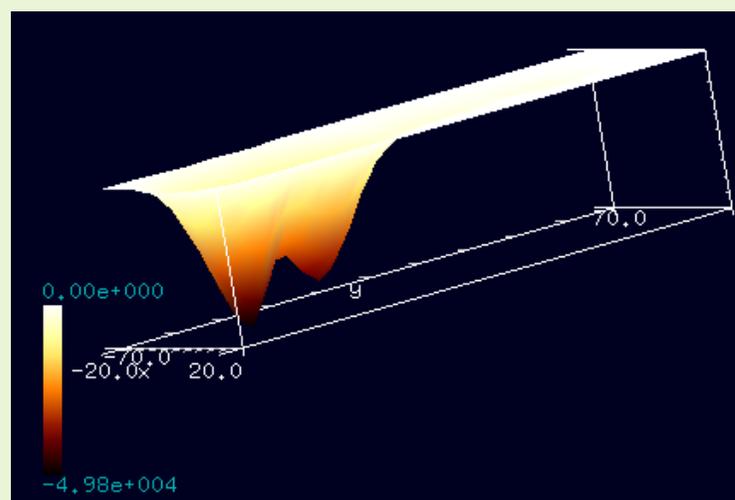
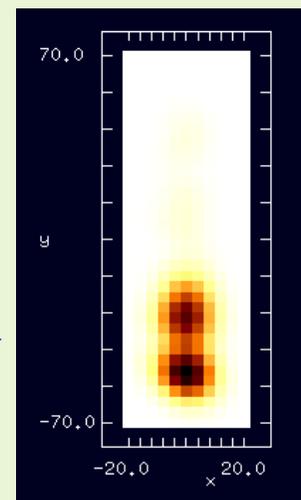


粘弾性のあるSi(001)表面に探針が凝着する際の、探針の垂直方向の変位、および、探針の感じる外力の時間変化をシミュレーションによって求めたもの。(ばね定数が**大きい**場合)

【FemAFM】 double-tipを使った、HOPG基板上の1-clgのAFM像、周波数シフトAFM像シミュレーション



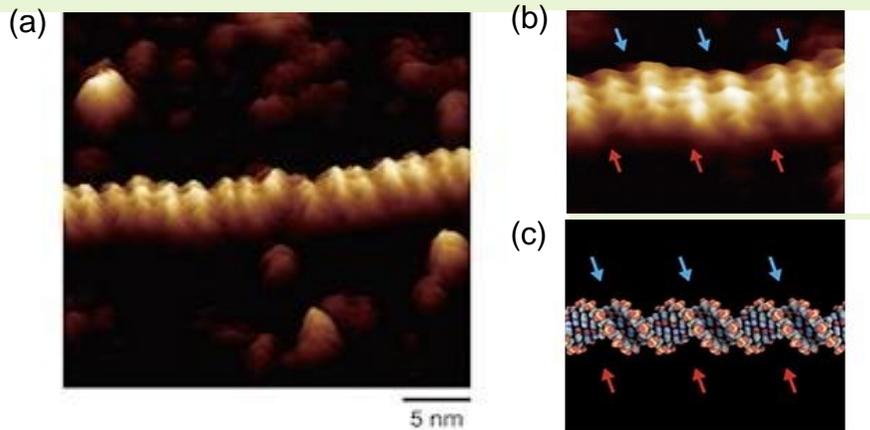
Constant height (static) mode



Frequency shift mode

【FemAFM】DNAのAFM像、周波数シフトAFM像シミュレーション

実測画像



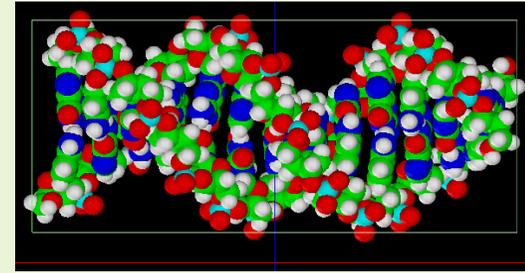
周波数変調原子間力顕微鏡 (FM-AFM) で捉えられた二重らせんDNA分子 (pUC18 プラスミド DNA) の (a) 水溶液中における分子像。 (b) 部分拡大像、(c) 構造モデル。

Ido Shinichiro, Kimura Kenjiro, Oyabu Noriaki, Kobayashi Kei, Tsukada Masaru, Matsushige Kazumi, Yamada Hirofumi.

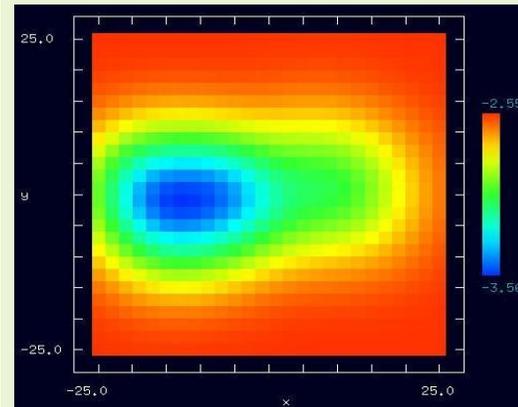
Beyond the Helix Pitch: Direct Visualization of Native DNA in Aqueous Solution.

ACS Nano (2013)

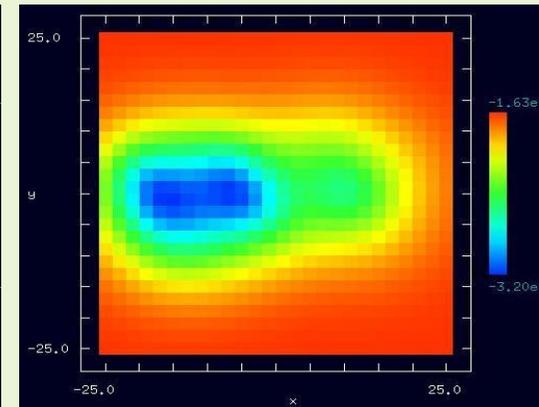
シミュレーション結果



シミュレーションに用いたモデル (横から見た図)



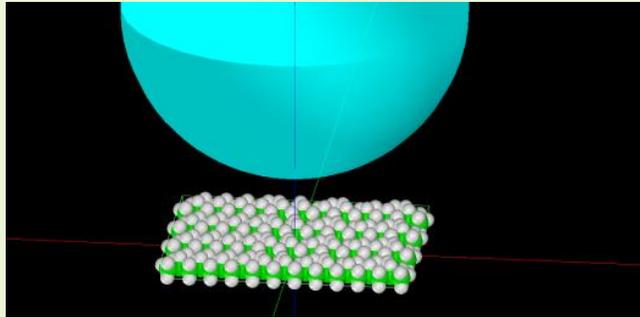
高さ一定モードによるAFM像のシミュレーション結果



周波数シフトAFM像のシミュレーション結果

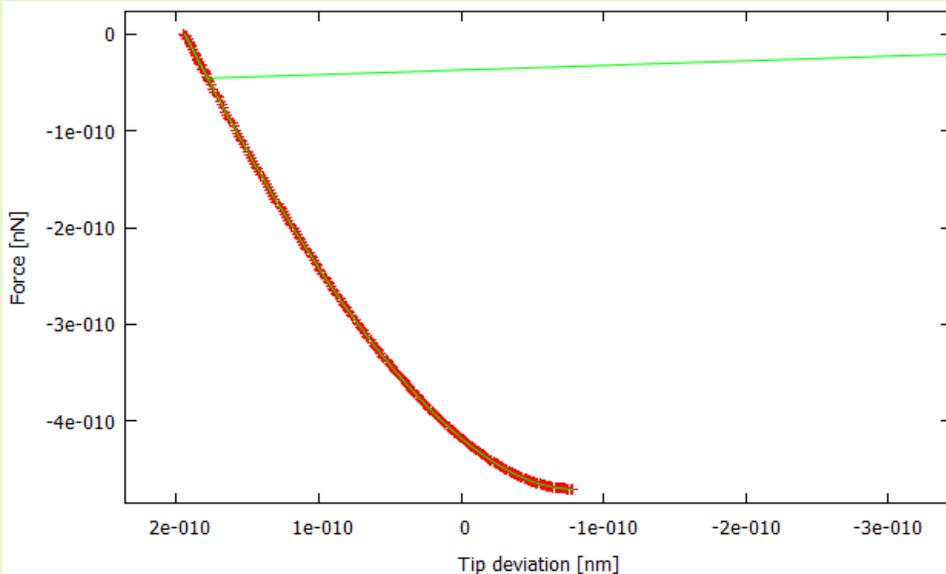
- 周波数シフトAFM像では、二重螺旋の狭い間隔と広い間隔をおおよそシミュレートできた。

【FemAFM】ポリプロピレンの粘弾性接触解析

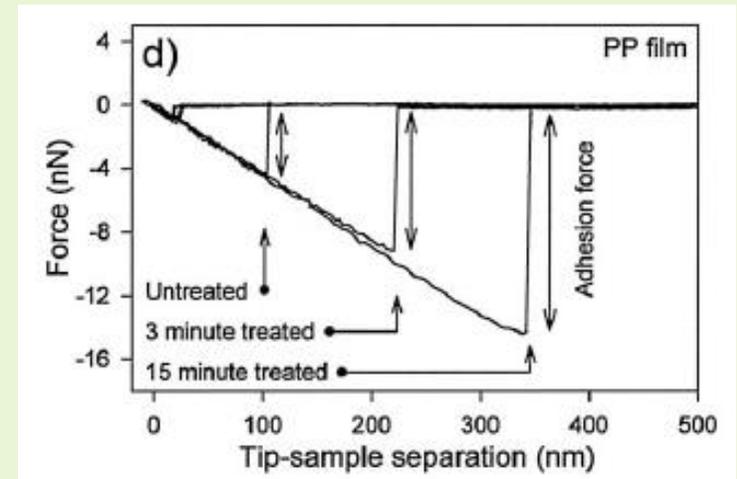


ポリプロピレン試料
窒化シリコン探針

FEMソルバー
フォースカーブ
粘弾性解析



実験例



Appl. Surf. Sci., 144-145, 627 (1999)

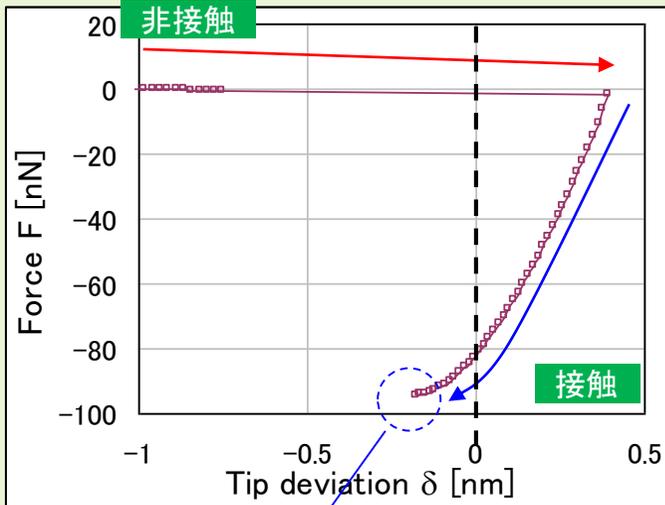
【LiqAFM】粘弾性接触解析

LiqAFM

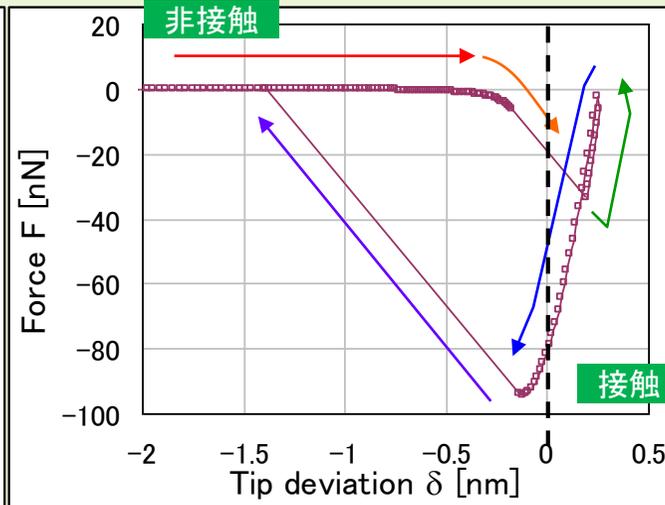
粘弾性接触解析

粘弾性を持つ試料と探針の接触の様子をシミュレーションによって調べ、フォースカーブ等を求めることができる。

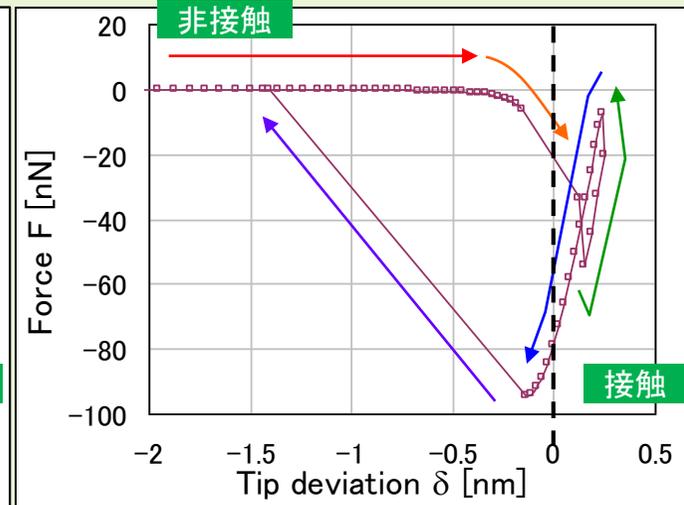
真空中、カンチレバーのばね定数 小



真空中、カンチレバーのばね定数 大



液体中、カンチレバーのばね定数 大



ばね定数が小さ過ぎるため、凝着力に逆らえず、試料から探針が離れない。

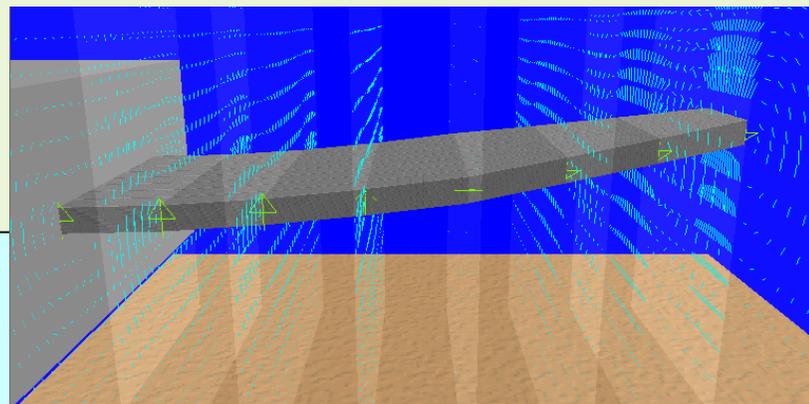
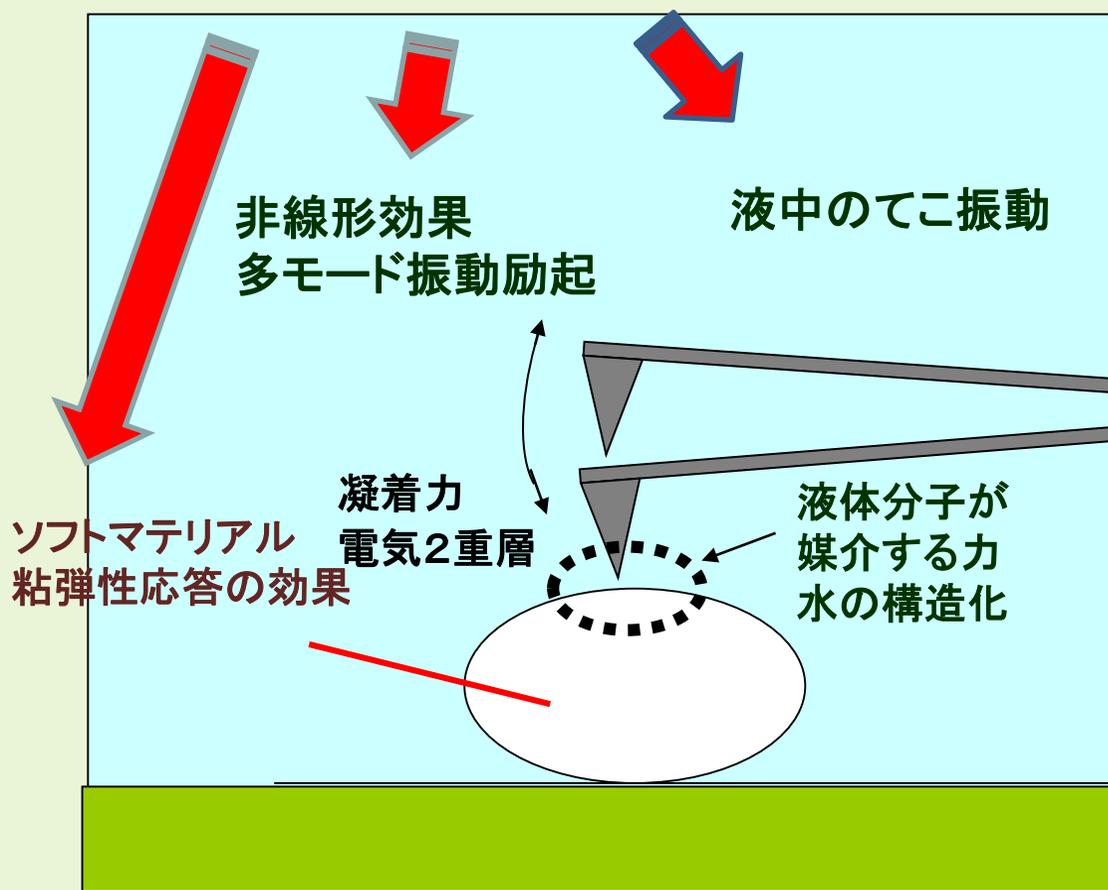
1. 探針が試料表面に近づく。
2. 試料表面から上部に突き出た部分で接触し、試料の内部に押し込まれる。
3. 凝着力がゼロになる位置まで押し込まれる。
4. 試料から離れる方向に引き戻される。
5. 試料から離脱する。

探針が試料に接触する過程で、探針の動きが流体の影響を受けている。

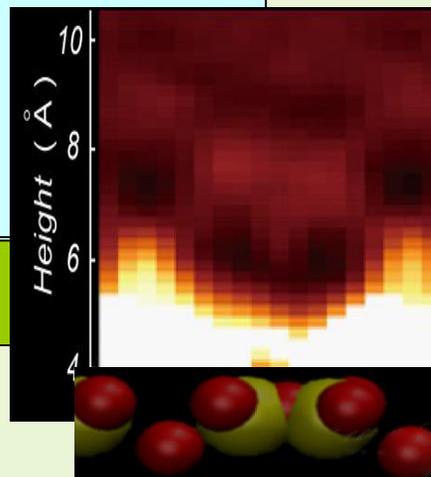
【LiqAFM】液中動的AFMの理論とシミュレーション

LiqAFM

AFM理論の課題



マイカ上の水のAFM像
水の構造化を示す

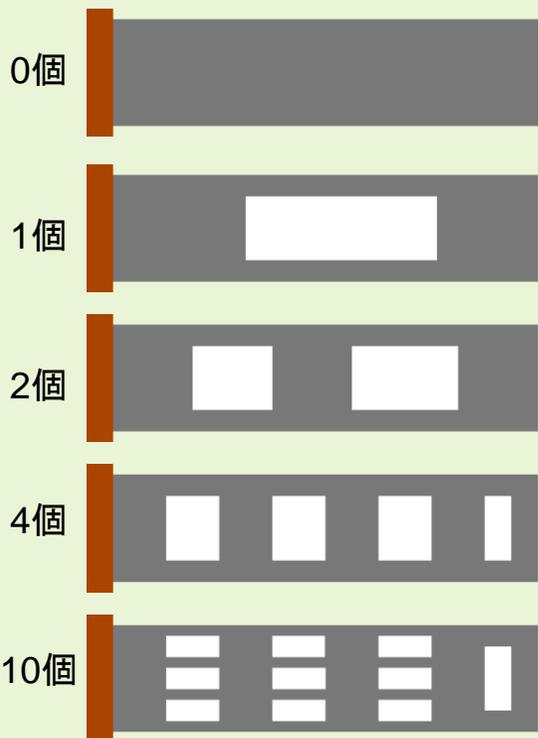


【LiqAFM】液中カンチレバーの固有振動解析

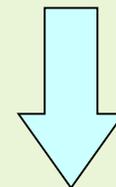
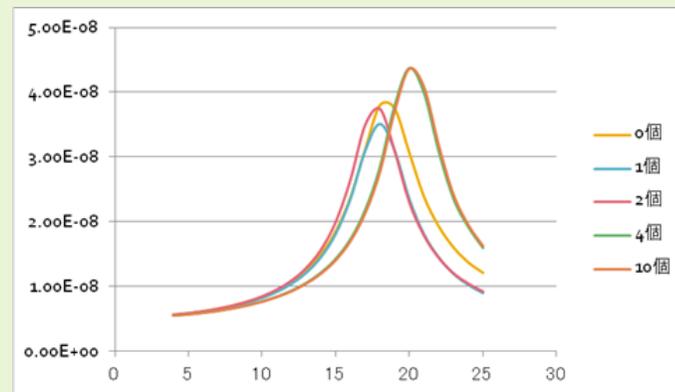
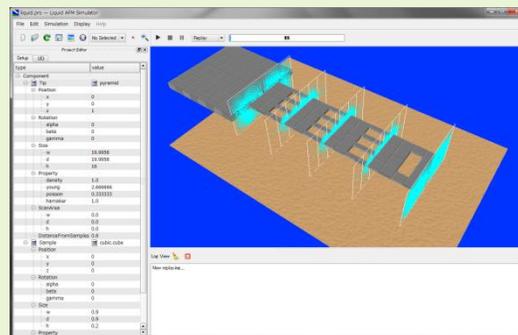
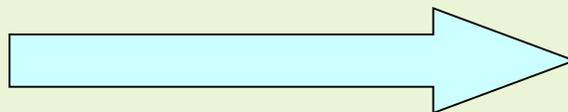
LiqAFM

液中平板状カンチレバーの振動

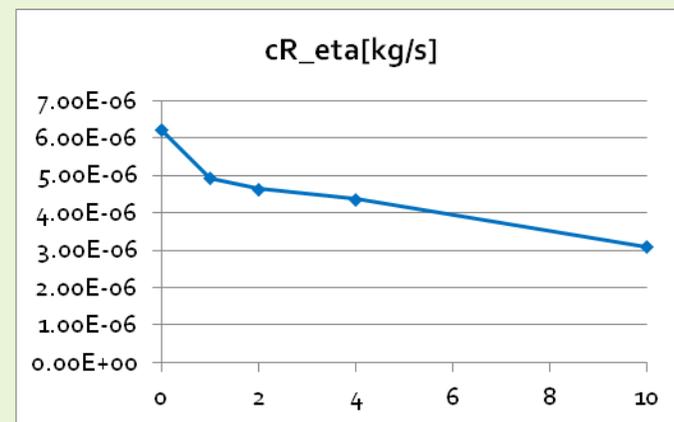
カンチレバーに穴を開ける



カンチレバーを流体中で強制振動させる。強制振動周波数を変化させて、カンチレバーの振幅の収束値を求める。



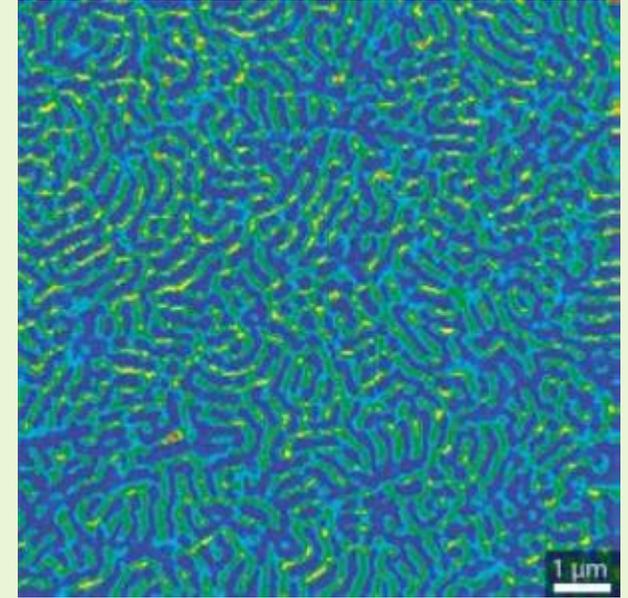
粘性抵抗力係数を求める。



孔の個数が増えると、粘性抵抗力係数が減少することが理解できる。

【LiqAFM】ソフトマテリアル系材料への展望

- ナノバイオ関連分野において、AFMによる実験解析が増加傾向
- DNAなどの生体物質のAFM実験画像を時系列的に測定
- 高分子の粘弾性をAFM測定など



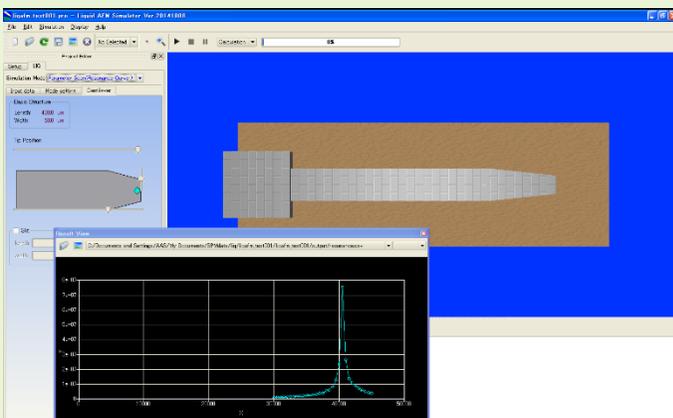
高分子薄膜をAFM観察し、粘弾性を可視化した図
D. Wang et al., Macromolecules 44, 8693–8697 (2011).

粘弾性接触解析を備えた弊社のシミュレータを発展させることで、
このような例をシミュレート可能にする。

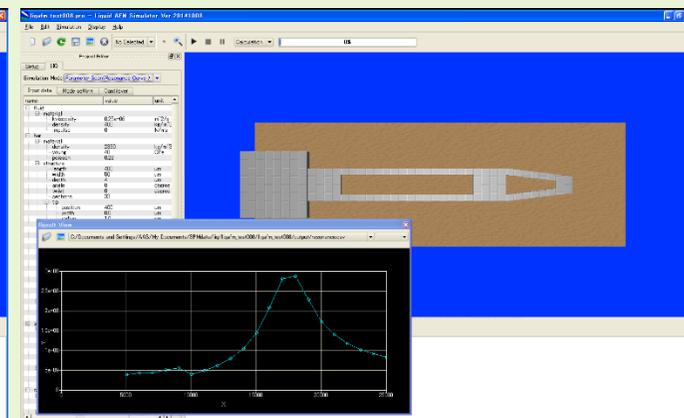
【LiqAFM】パラメータ・スキャンモード

LiqAFM

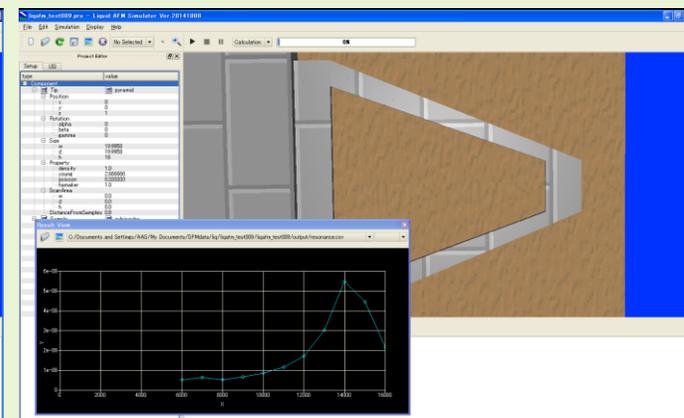
カンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を調べます。あらかじめ定められた範囲内において一定間隔で周波数を取り出し、それら各周波数でカンチレバーの根元を外力により励振させ、カンチレバーの動きの時間発展を調べます。最終的には、横軸に周波数、縦軸に対応する周波数成分の振幅とした共鳴曲線を求めます。この曲線から、共振周波数を推定できます。



真空中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の無い短冊形状としています。



液体中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の2個開いた短冊形状としています。

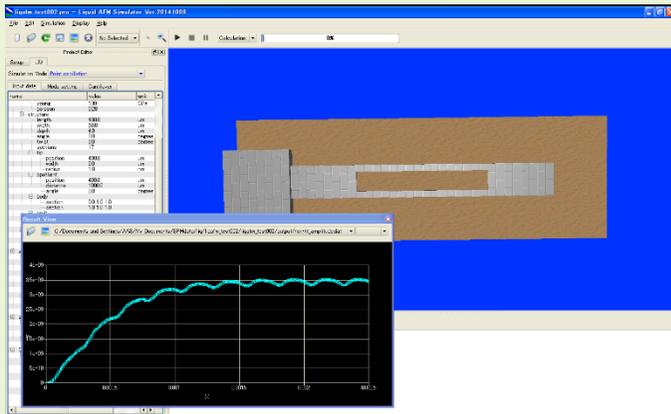


液体中で振動する三角形のカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。

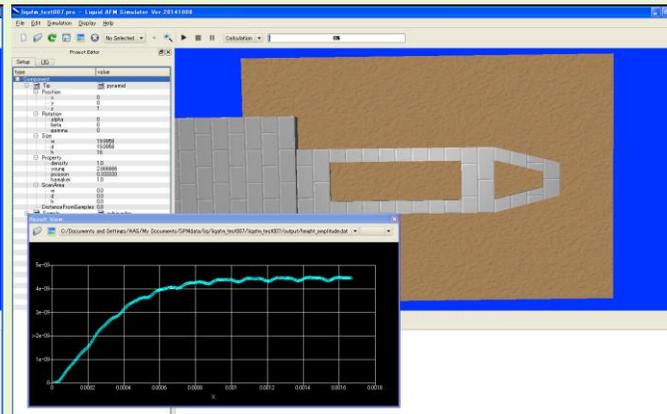
【LiqAFM】非粘弾性試料解析モード

LiqAFM

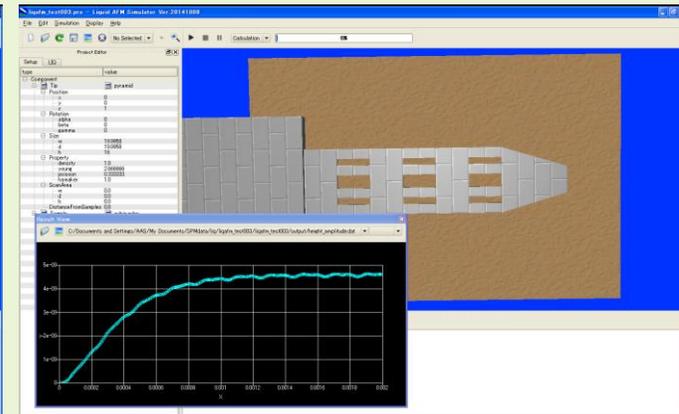
試料表面上の一点において、カンチレバーの根元を外力によって一定の周波数で振動させ、その時間発展を計算します。この際、試料は粘弾性の性質を持っておらず、探針が試料に接触しても凝着力が生じないと仮定します。



液体中で振動するカンチレバーの、振幅の時間変化を調べます。カンチレバーは、短冊形状で**1個の孔**が開いているとしています。液体中でカンチレバーの根元を外部から強制的に励振させ、その際の、励振周波数成分の振幅の時間変化を調べます。探針と試料表面の間の距離は十分大きく取られていて、探針は試料に接触しないように設定されています。



液体中で振動するカンチレバーの、振幅の時間変化を調べます。カンチレバーは、短冊形状で**2個の孔**が開いているとしています。液体中でカンチレバーの根元を外部から強制的に励振させ、その際の、励振周波数成分の振幅の時間変化を調べます。探針と試料表面の間の距離は十分大きく取られていて、探針は試料に接触しないように設定されています。

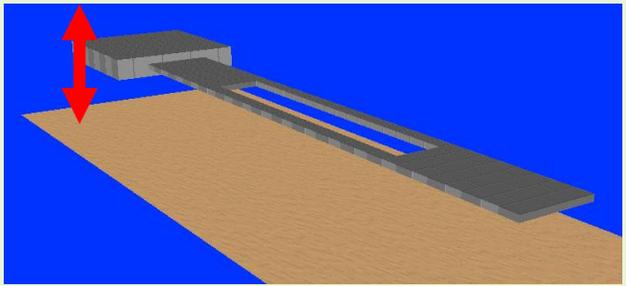


液体中で振動するカンチレバーの、振幅の時間変化を調べます。カンチレバーは、短冊形状で**多数の孔**が開いているとしています。液体中でカンチレバーの根元を外部から強制的に励振させ、その際の、励振周波数成分の振幅の時間変化を調べます。探針と試料表面の間の距離は十分大きく取られていて、探針は試料に接触しないように設定されています。

【LiqAFM】 溶媒を変えたときのカンチレバー振動の比較

溶媒として水、エタノール、n-ヘキサデカンを選び、カンチレバーの振動の条件を揃えてシミュレートを行った。

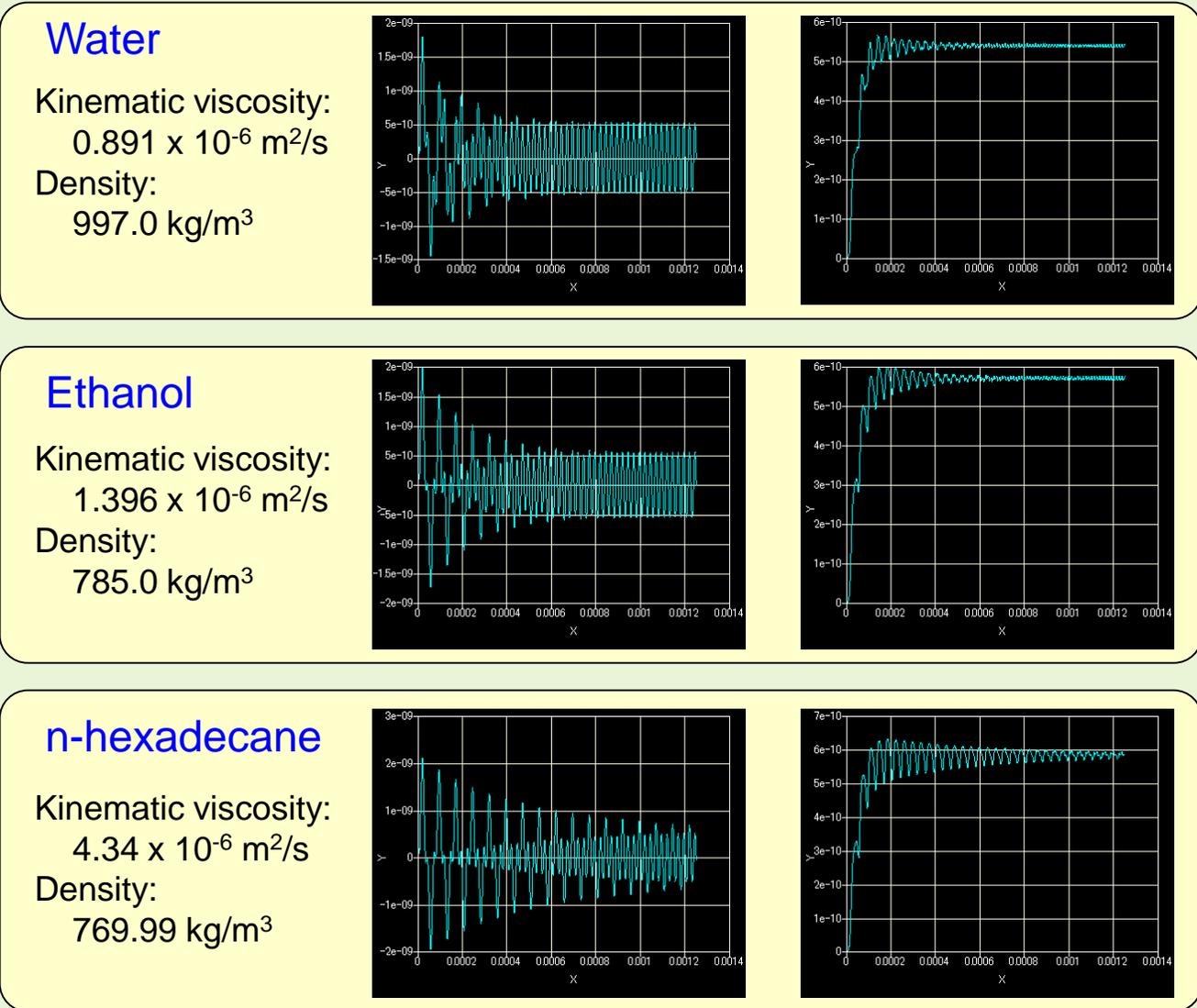
1つ穴の空いたカンチレバー



Frequency: 40 kHz
 Amplitude: 1 nm
 50 cycles
 4096 steps/cycle

振動開始時はカンチレバー先端の動きは不規則である。振動を繰り返すにつれて、次第に一定の振動に収束していく様子が分かる。

動粘性係数は、水<エタノール<n-ヘキサデカンの順に大きくなる。特に動粘性係数が小さいほどカンチレバーの振動の収束が早く、直感的な予想とも合致する。このように、溶媒の違いがカンチレバーの振動に与える影響をシミュレートすることができる。



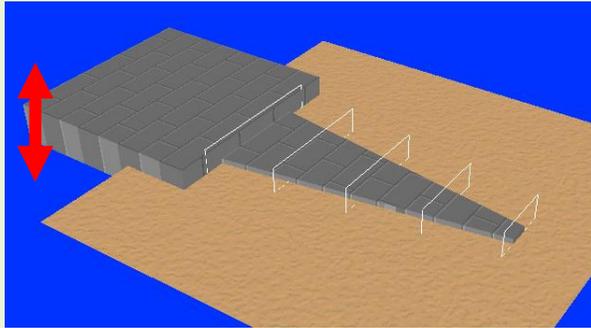
Head height vs. time

Amplitude vs. time

【LiqAFM】 溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較

溶媒として水、エタノール、n-ヘキサデカンを選び、カンチレバーの振動の条件を揃えて粘弾性解析のシミュレーションを行った。

先端に探針を取り付けたカンチレバー



Condition of the cantilever

- Length: 400 μm
- Width: 150 to 30 μm
- Thickness: 15 μm
- Frequency: 40 kHz
- Amplitude: 10 nm
- 2048 steps/cycle

動粘性係数は、水<エタノール<n-ヘキサデカンの順に大きくなる。
 今回のシミュレートでは、粘弾性解析によって得られたフォースカーブには溶媒による差異がほとんど見られなかった。ただしカンチレバー振動の時間変化にははっきりと違いが現れている。

Water

Kinematic viscosity:
 $0.891 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

Density:
 $997.0 \text{ kg}/\text{m}^3$

Ethanol

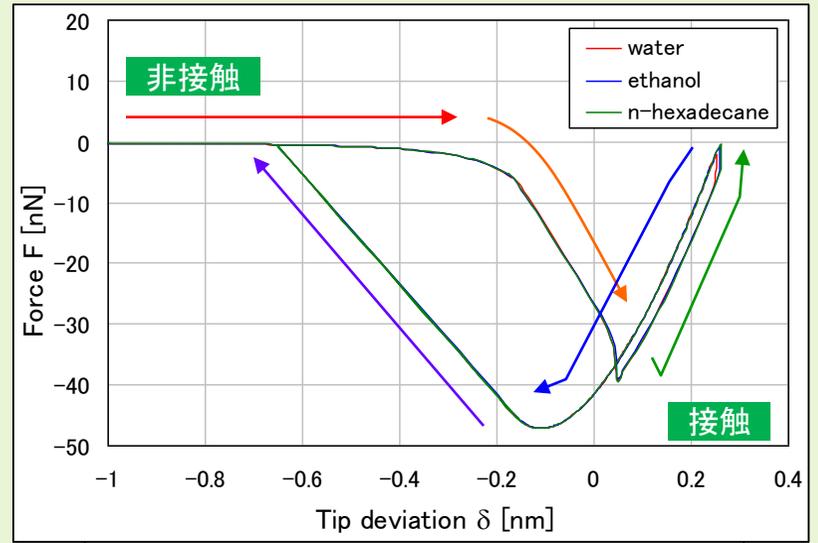
Kinematic viscosity:
 $1.396 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

Density:
 $785.0 \text{ kg}/\text{m}^3$

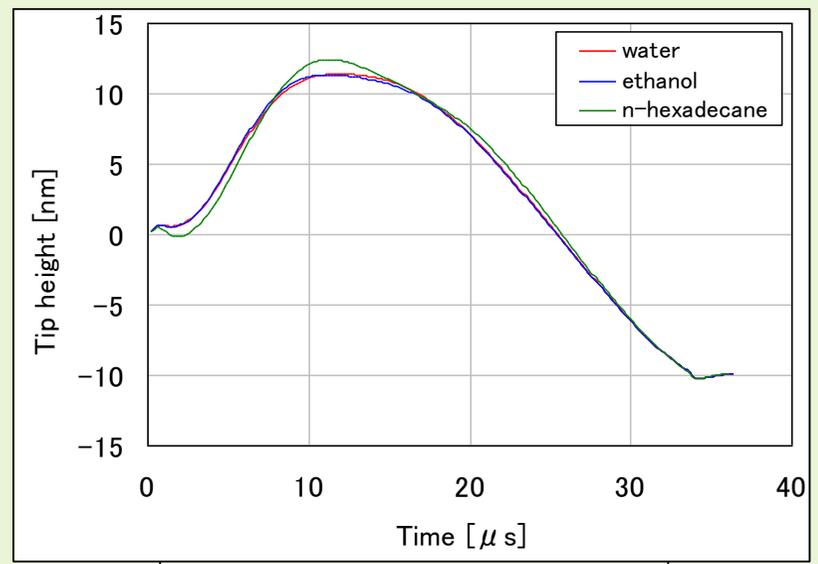
n-hexadecane

Kinematic viscosity:
 $4.34 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

Density:
 $769.99 \text{ kg}/\text{m}^3$



Force to the tip vs. tip deviation



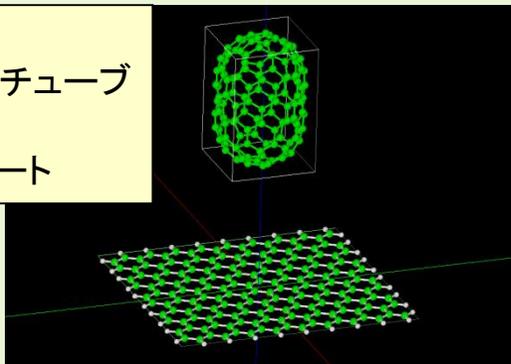
Head height vs. time

【CG】真空中／液中の系のエネルギーカーブおよびフォースカーブ

CG

CG-RISM

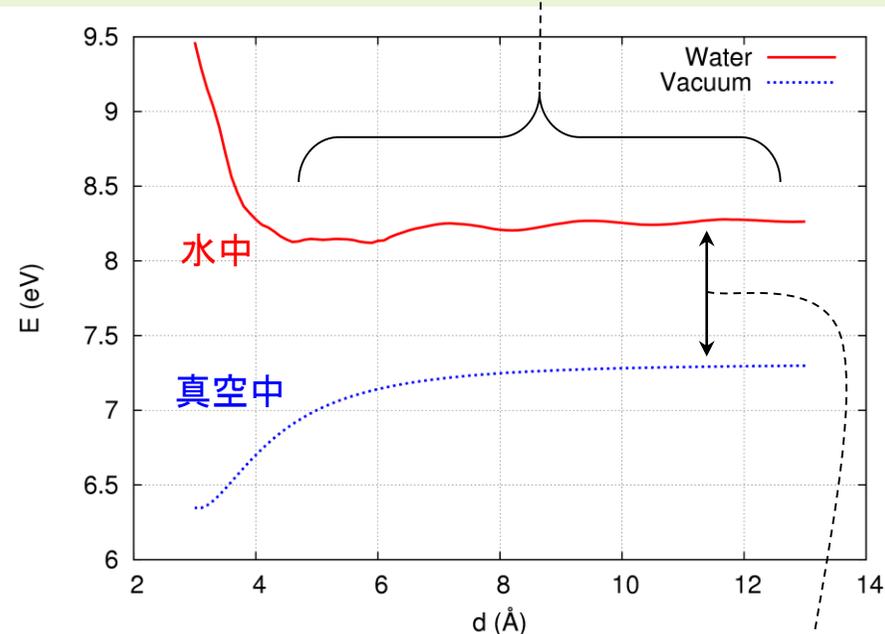
探針：
カーボンナノチューブ
試料：
グラフェンシート



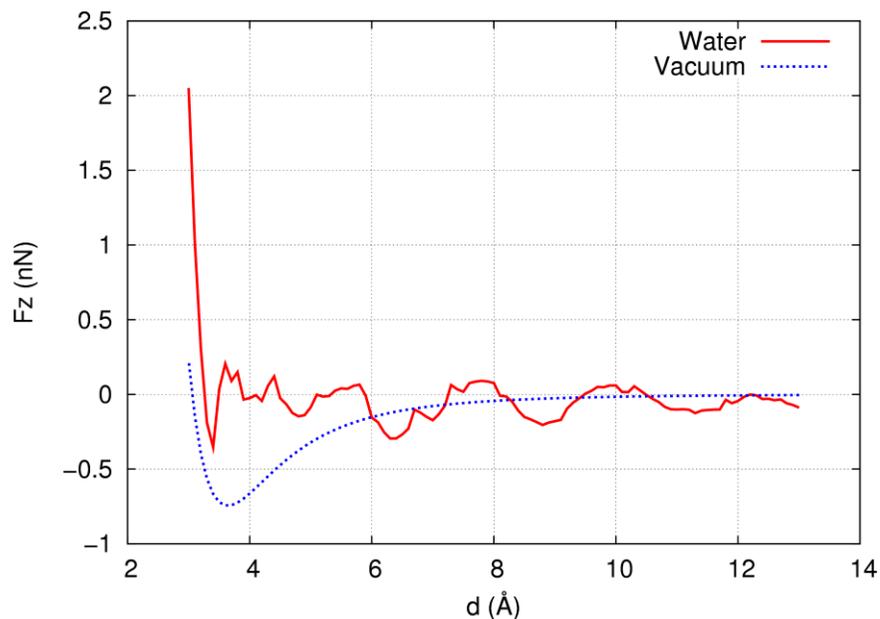
系のエネルギー

探針－試料間の距離 d を変化させ、
系のエネルギーを算出

水和構造による振動的振舞い



フォースカーブ

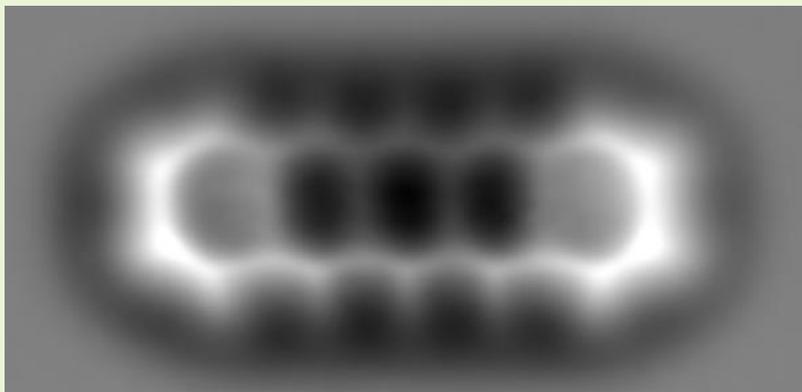


水中環境によるオフセット

(水中計算側(赤線)は単純な数値微分)

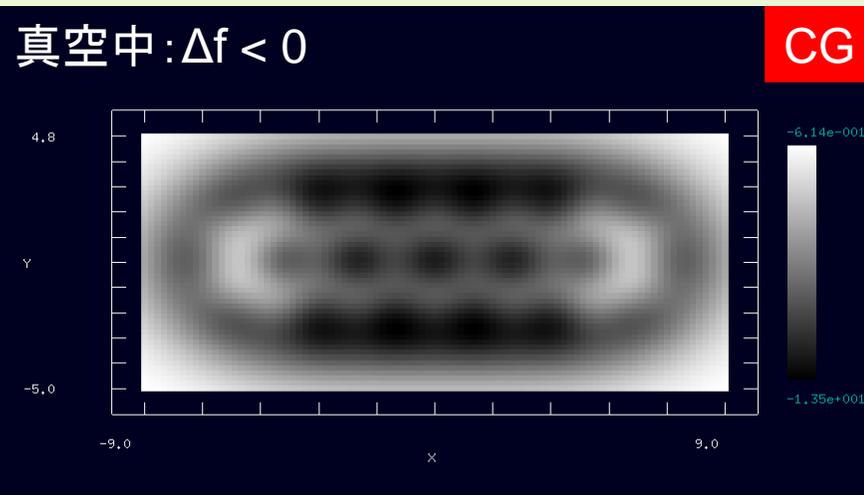
【CG】ペンタセンのAFM(周波数シフト像)観察とシミュレーション

周波数シフト像の実験結果



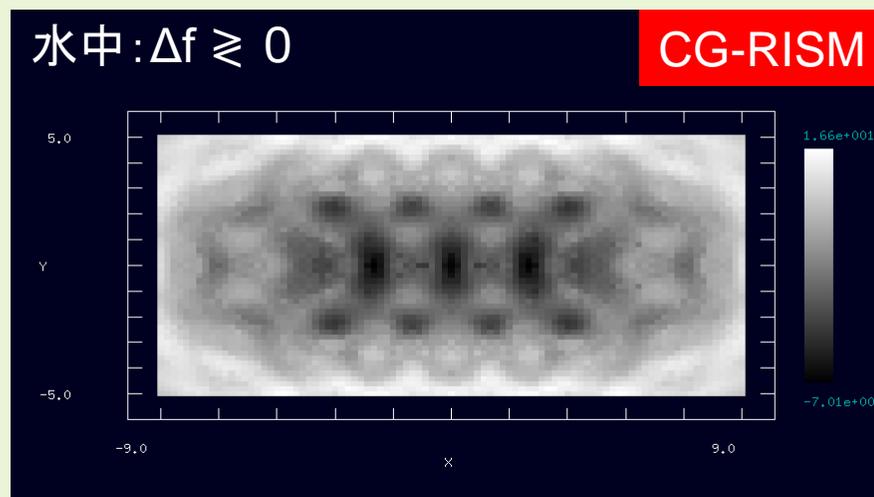
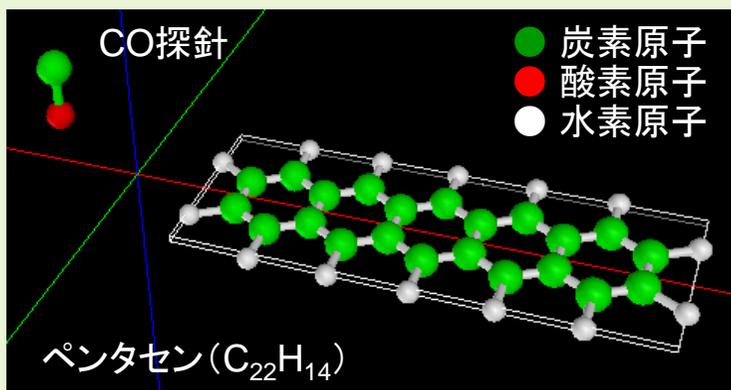
L. Gross *et al.*, Science **325**, 1110-1114 (2009).

周波数シフト像のシミュレーション



Good agreement

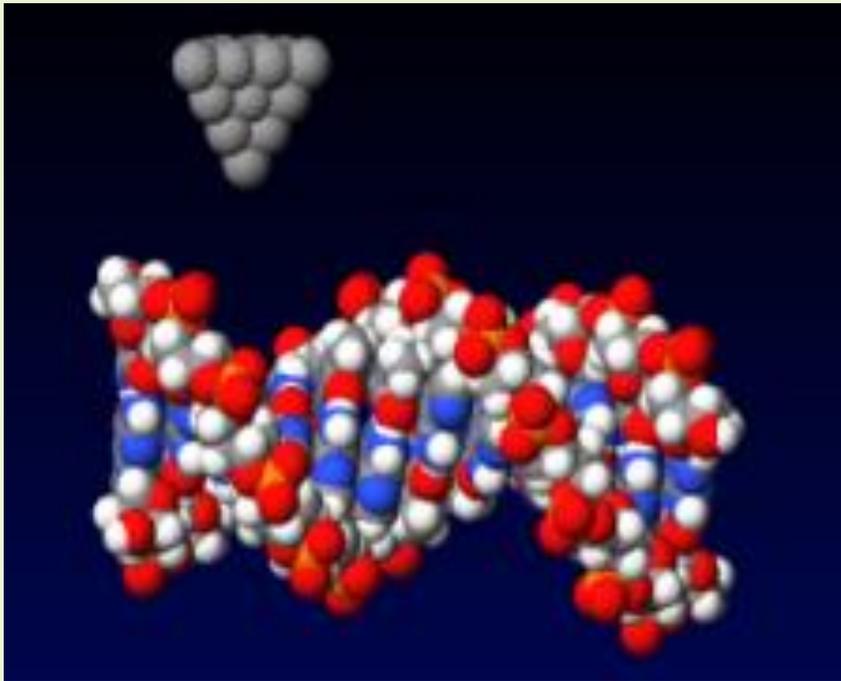
水中のシミュレートも可能



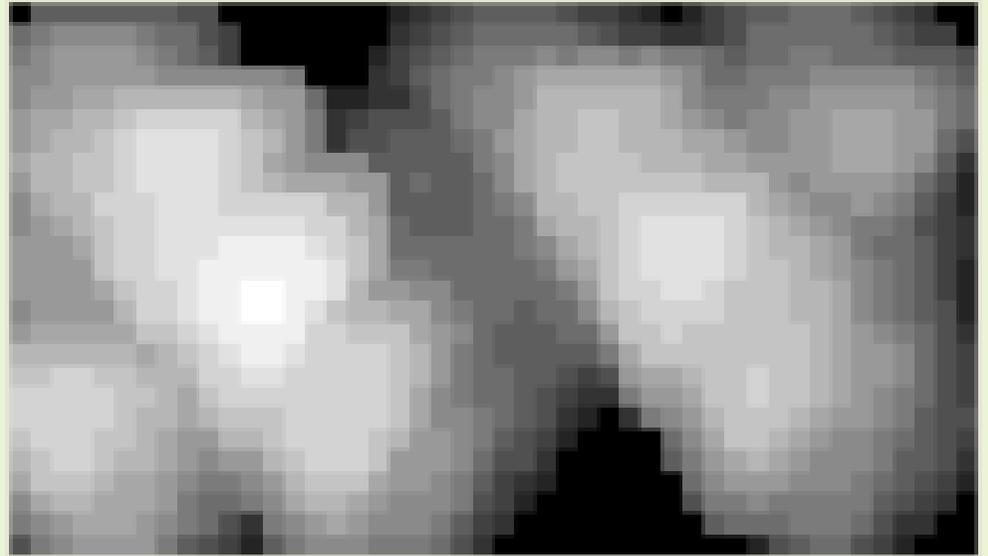
【CG】DNAのNC-AFMシミュレーション

Example of NC-AFM topography image

DNA model



Simulation result

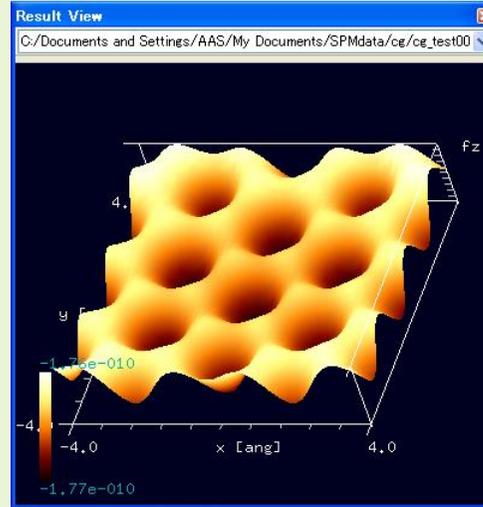
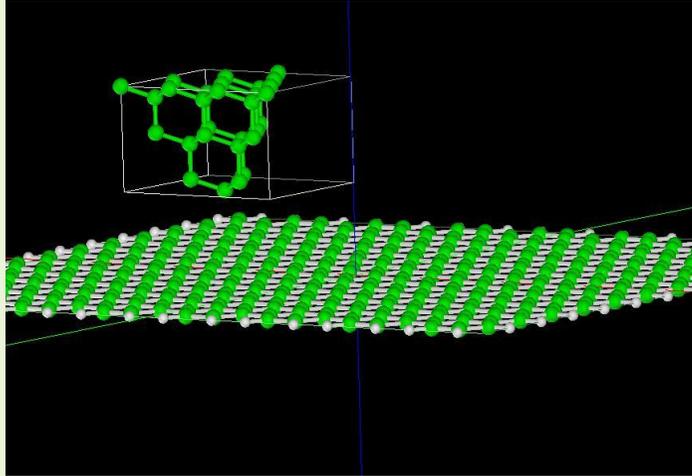


【CG】高さ一定モード

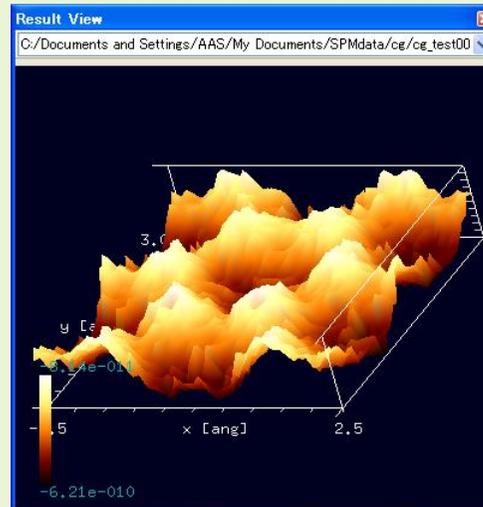
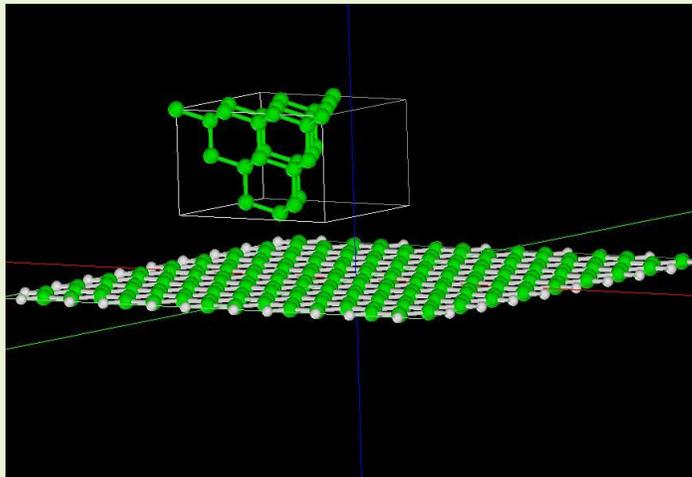
CG

CG-RISM

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。



ダイヤモンド探針による、グラフェンシートの高さ一定モード真空中AFMシミュレーション

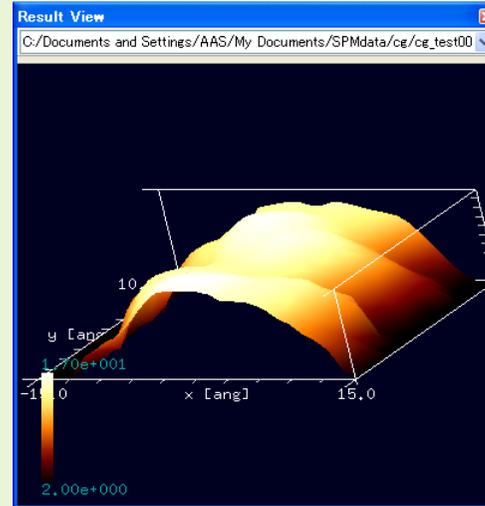
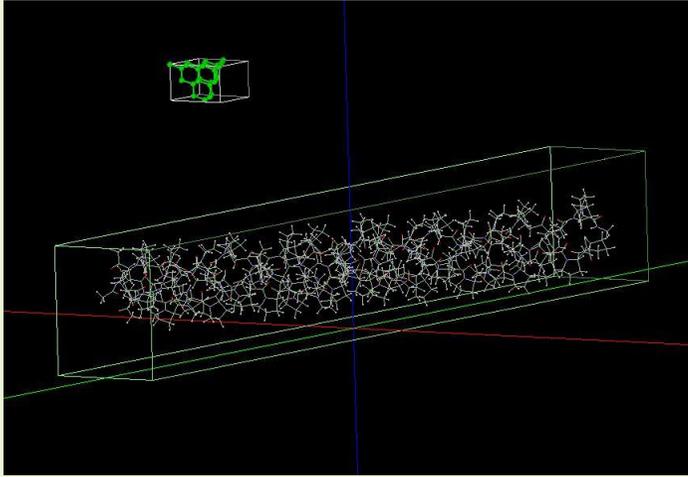


ダイヤモンド探針による、グラフェンシートの高さ一定モード水中AFMシミュレーション

【CG】カー定モード

CG

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求めます。（水中計算は対応していません。）



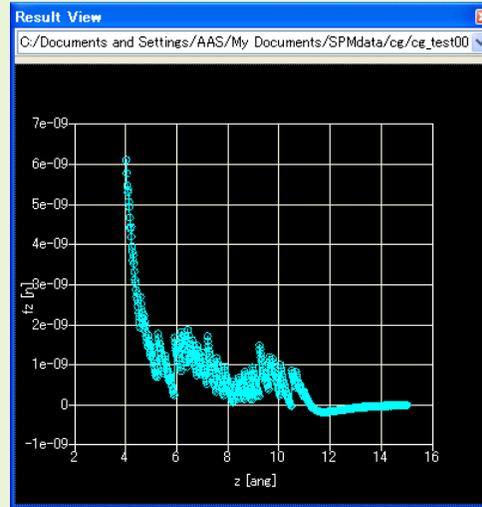
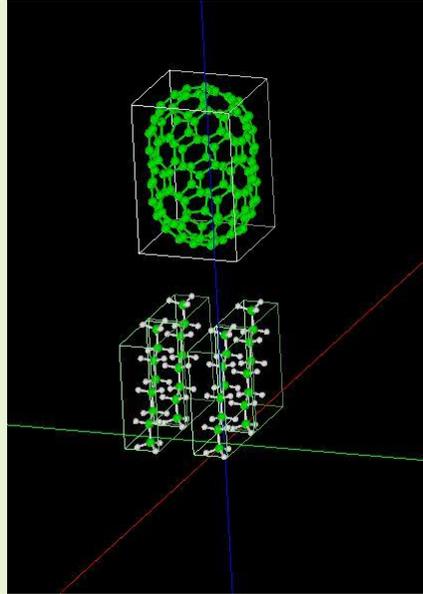
ダイヤモンド探針による、コラーゲン鎖のカー定モードAFM像シミュレーション

【CG】フォースカーブ測定モード

CG

CG-RISM

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。



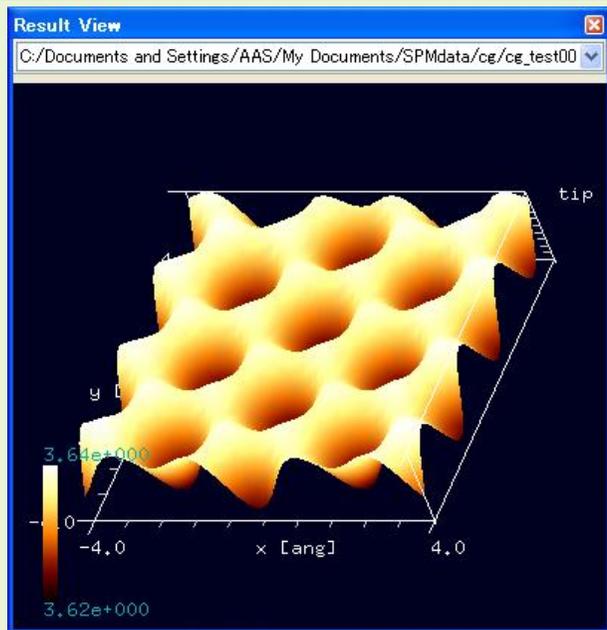
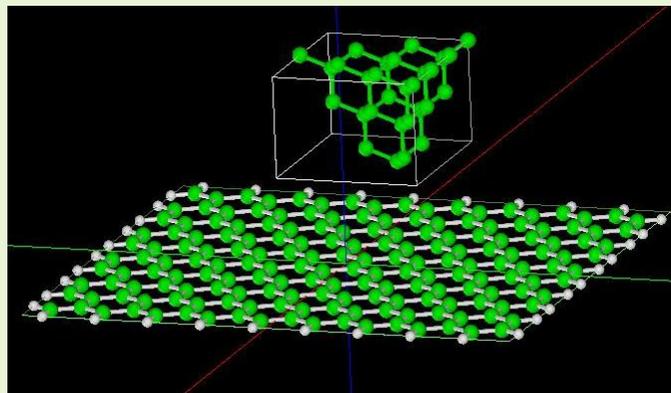
カーボンナノチューブ探針による、4つのオクタン分子鎖の構造最適化AFMフォースカーブシミュレーション
この例では試料構造の変形を考慮に入れた計算を行います。

【CG】力最小モード

CG

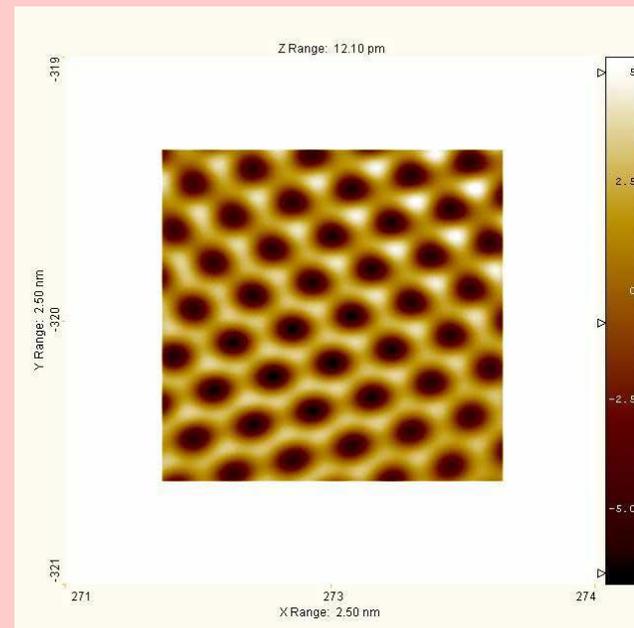
平面上の各位置において、探針に作用する力の値が負の極小になる探針高さを求めます。(水中計算は対応していません。)

ダイヤモンド探針による、グラフェンシート
の力最小モードAFMシミュレーション



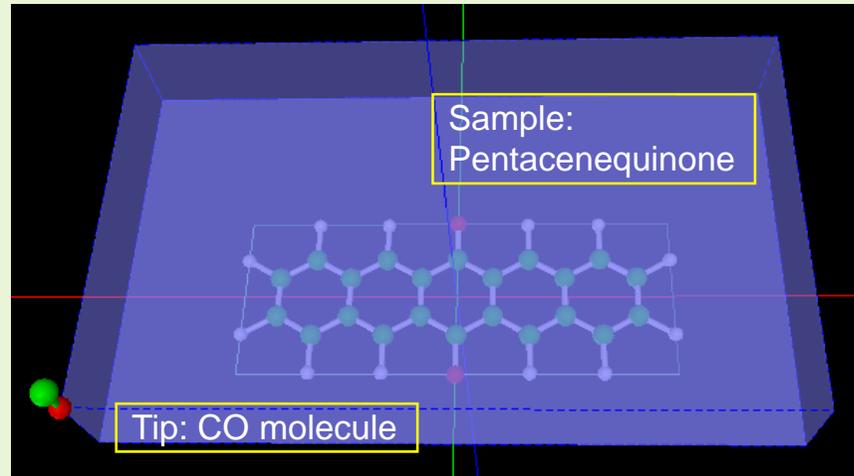
cf. Experiment

Highly oriented pyrolytic graphite
AFM contact mode.

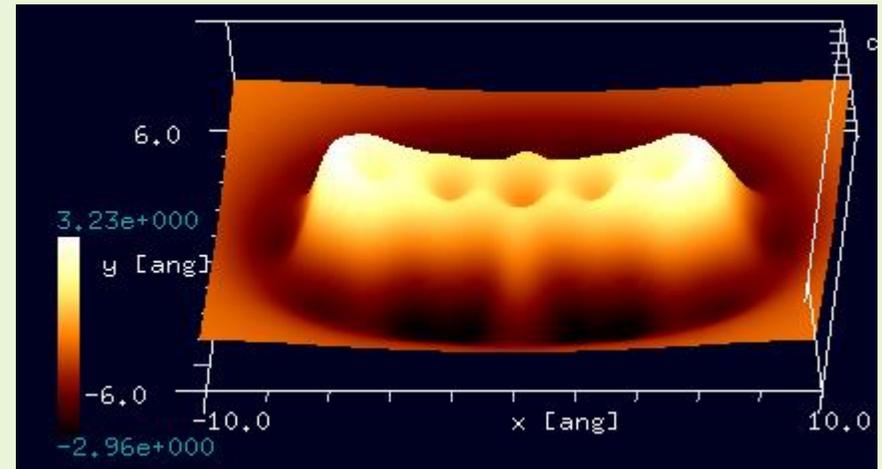
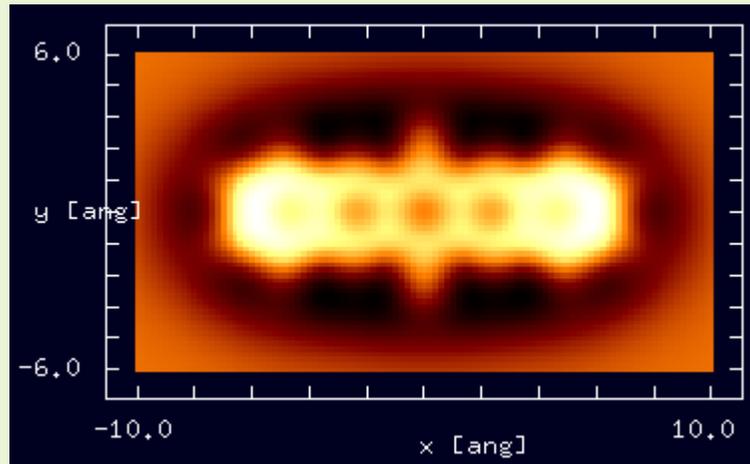


Group for Physics of Ordered Nanostructures and
New Materials in Photonics
<http://www.graphene.ac.rs/eq-AFM.html>

【CG】ペンタセンキノン分子の周波数シフトAFM像シミュレーション



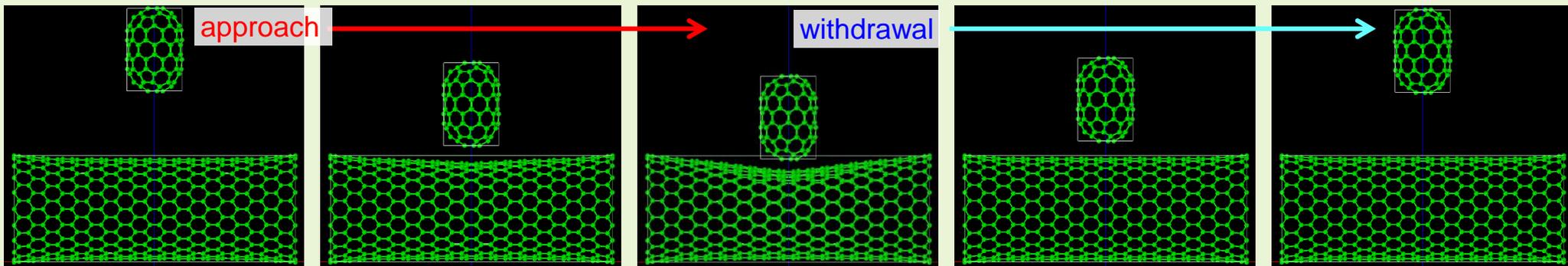
試料モデルを空間に固定。



周波数シフト像の計算結果。左:2D表示、右:3D表示。

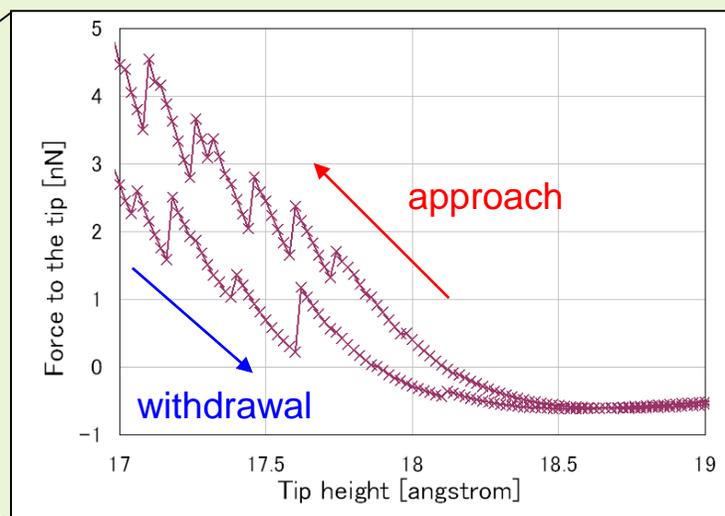
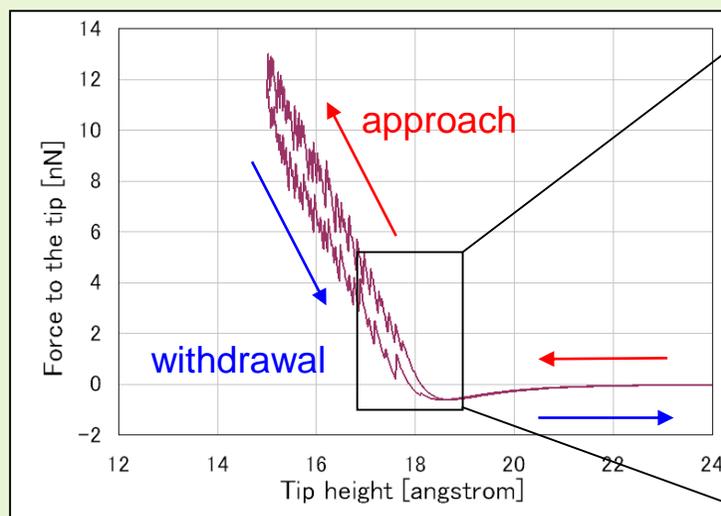
ペンタセン骨格が見える。また、中央の二つの酸素原子の位置にも形状が見られる。

【CG】CNTに対するフォースカーブのヒステリシス



Tip: capped SWCNT,
diameter = 7.99 Å,
length = 12.08 Å,
Atomic configuration is fixed.

Sample: SWCNT,
diameter = 15.57 Å,
length = 40.95 Å,
both edges are fixed in space,
the others can be relaxed.



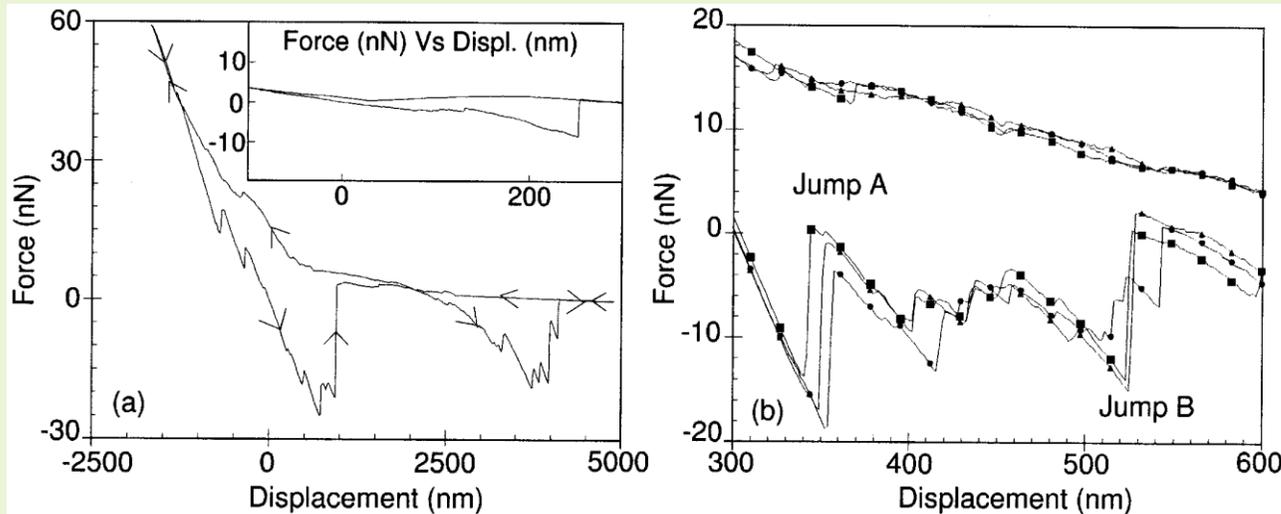
フォースカーブ(右は拡大図)

探針が試料を押し込むときのフォースカーブと、試料から離れるときのフォースカーブが異なる。すなわちヒステリシスが発現した。斥力のカーブにはジグザグ構造が見られる。接近させるときは斥力が少しずつ高くなり、あるところで急激に斥力が弱くなる。これが繰り返される。斥力が弱くなる場所では試料のCNT構造の緩和が起こっていると想定される。ただし、具体的にどのような構造変化が斥力の緩和をもたらしているか、そこまではリプレイ動画を見ても分からなかった。

(参考)CNTに対するフォースカーブのヒステリシス、実験例

Experiment

S. Decossas et al., Europhys. Lett., **53** (6), pp. 742-748 (2001).



測定環境:

大気中、室温、湿度40%

装置:

Digital Dimension 3100 AFM

カンチレバーのばね定数:

0.58 or 0.06 N/m

探針:

Si_3N_4 探針、先端の半径20-50nm

試料:

絡まったMWCNTのカーペット

典型的な直径はおよそ25 nm

長さは数百nmから数 μm

MWCNTカーペットに対して、 Si_3N_4 探針によるフォースカーブの測定を行い、粘性や弾性を調査したもの。探針が試料を押し込んでから離れようとするとき、CNTが探針にくっついてくる。1000 nmにおいて、探針が試料から離れるときに力の急激なジャンプが現れる。探針になおくっついていて、2000 nm以上のフォースカーブの形状の原因になる。

SPMシミュレータで再現することはできない。

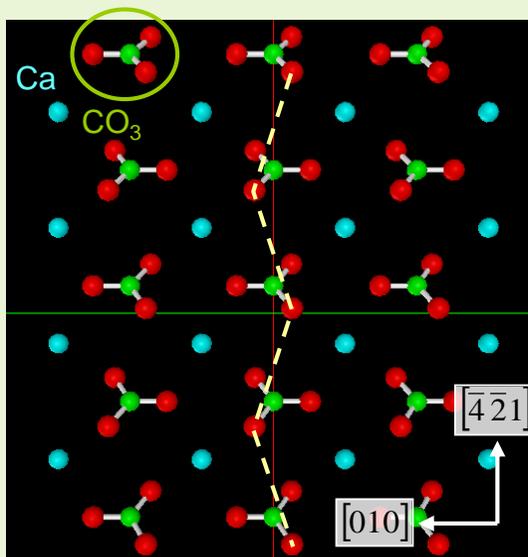
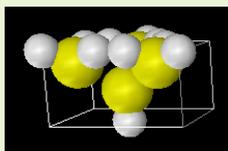
- FemAFMでは試料形状の大きな変化を扱うことができない。
- CG/MDで扱うには系のサイズが大きすぎる; 1000 nmものスケールを扱うのは現実的に不可能。
- 試料の一部が探針にくっついて剥がれることは想定していない。

【CG】方解石(calcite, CaCO_3)の周波数シフトAFM像

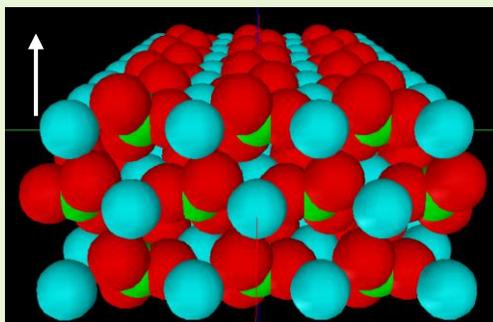
Simulation

Calcite ($10\bar{1}4$) 面の第1層を上から見た図

探針: シリコンモデル (Si_4H_{10})



点線のように、ジグザグ状に酸素原子が突き出ている。



試料: Calcite ($10\bar{1}4$) 面モデル

カンチレバー

ばね定数: 40 N/m

周波数: 160 kHz

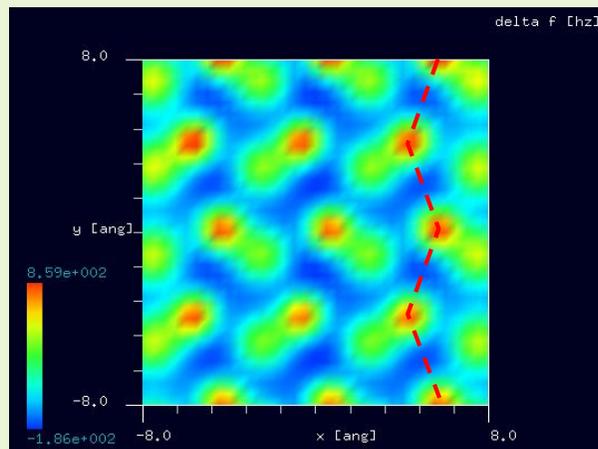
振幅: 6 Å

計算した高さの範囲:

試料表面から測り1.8 ~ 4.8 Å

真空中計算

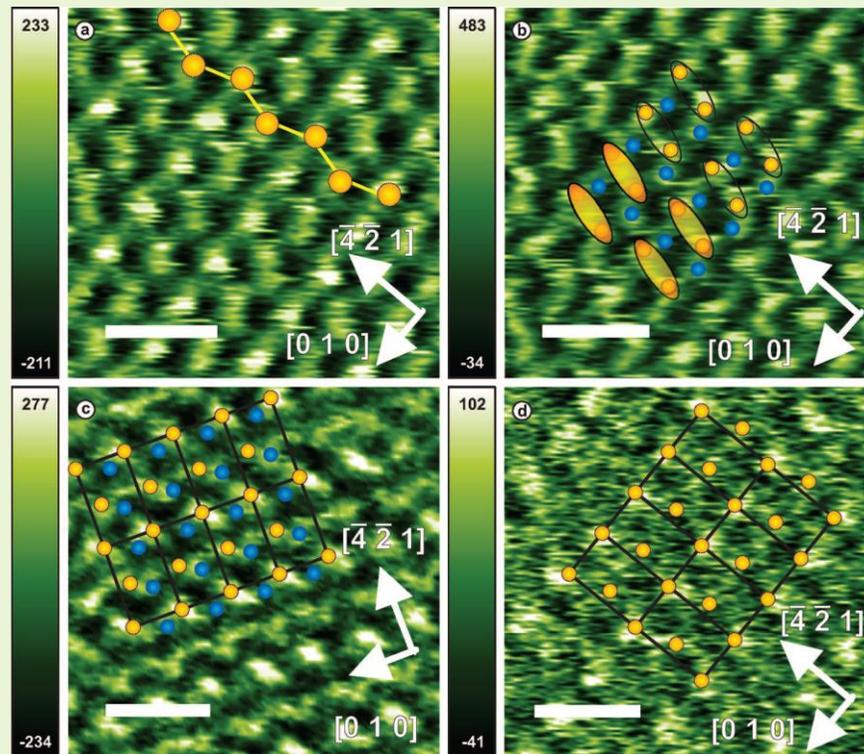
高さ一定・周波数シフト像モード



周波数シフト像

Experiment

FM-AFM of calcite ($10\bar{1}4$) in 1 M KCl solution.

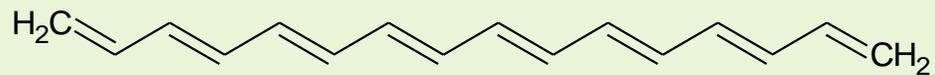


S. Rode, N. Oyabu, K. Kobayashi, H. Yamada, and A. Kuhnle, *Langmuir* **25**, 2850 (2009).

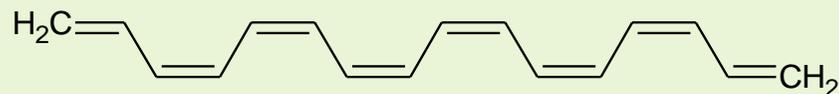
赤色の点は酸素原子の位置であり、これらを縦に結ぶと酸素原子のジグザグ構造が現れる。

黄色の点はCa原子の位置であり、長方形の格子を形成している。

【CG】ポリアセチレン分子の周波数シフトAFM像

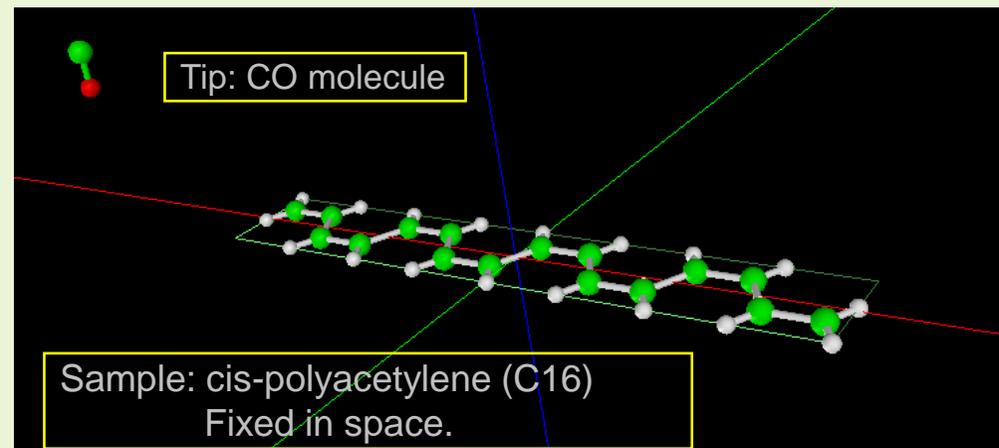
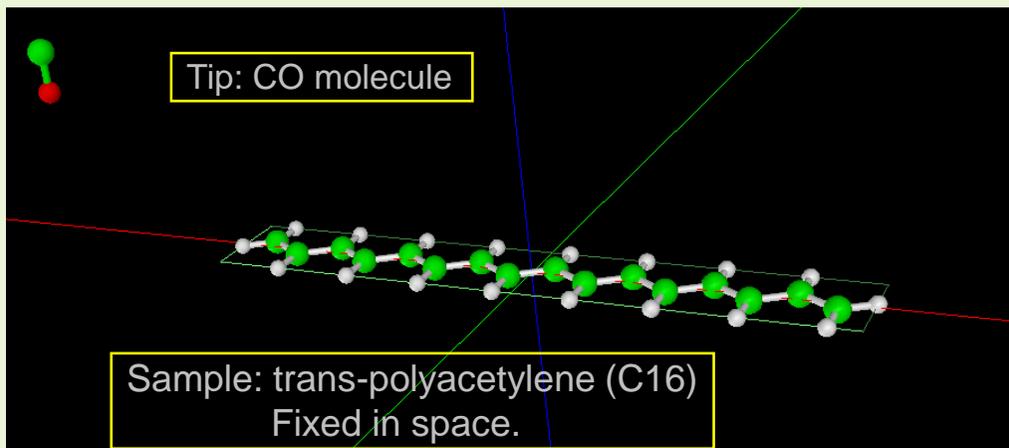


trans-polyacetylene (C16)

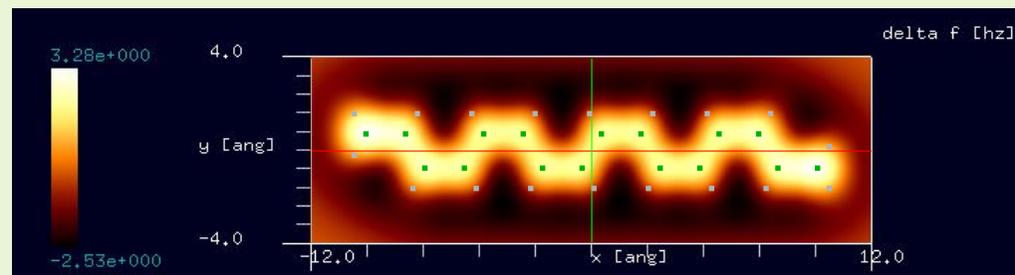
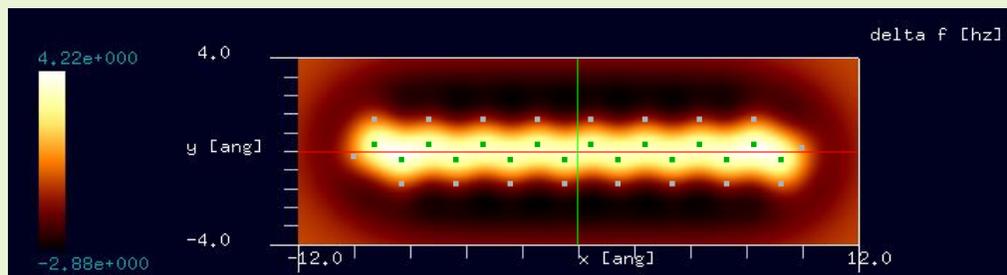


cis-polyacetylene (C16)

(We assumed the same C-C bond lengths for both model.)

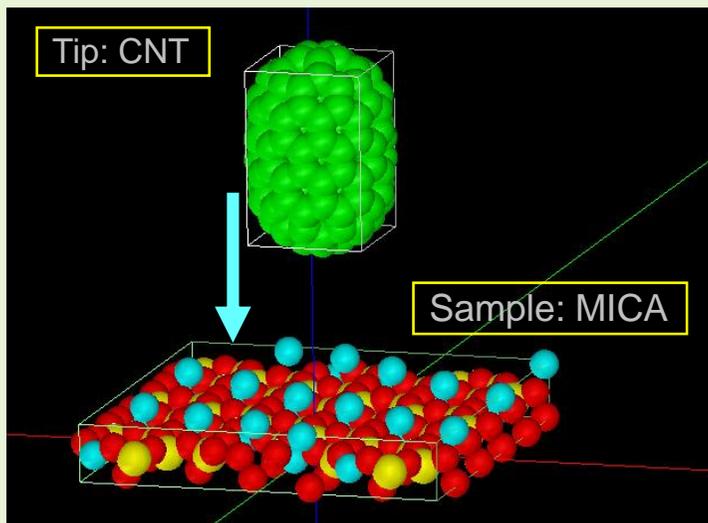


Setup configurations

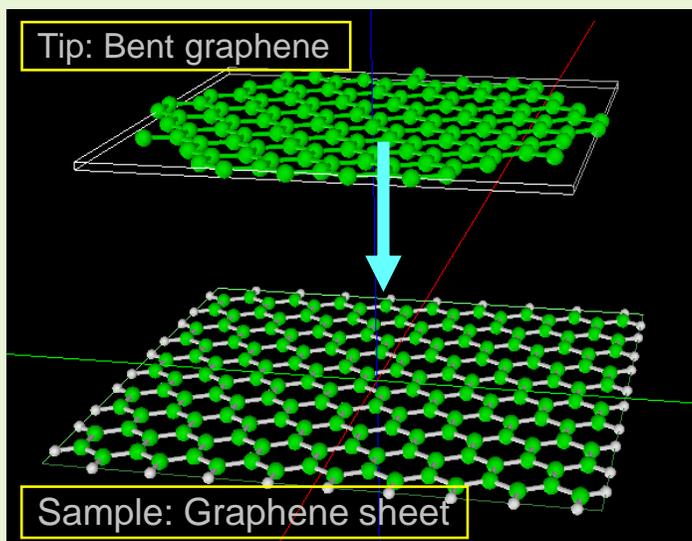


Simulated frequency shift AFM image

【CG-RISM】水中のフォースカーブシミュレーション

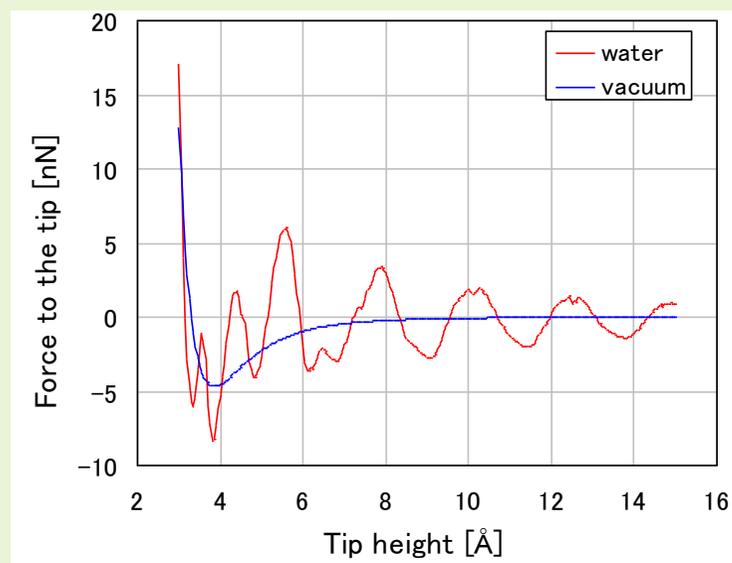
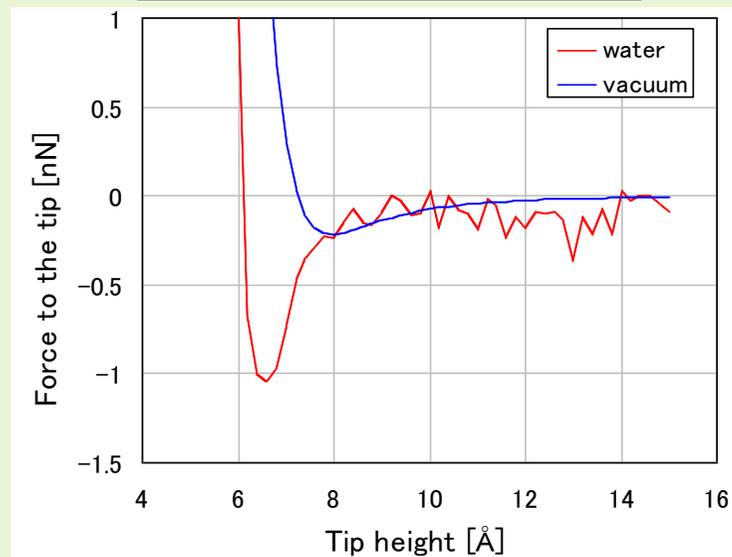


CNT tip approaches a mica in water



Bent graphene approaches a graphene sheet in water

Simulated force curve



水中の場合、水和構造による振動的振舞いが現れる。

(参考)MICAのフォースカーブ

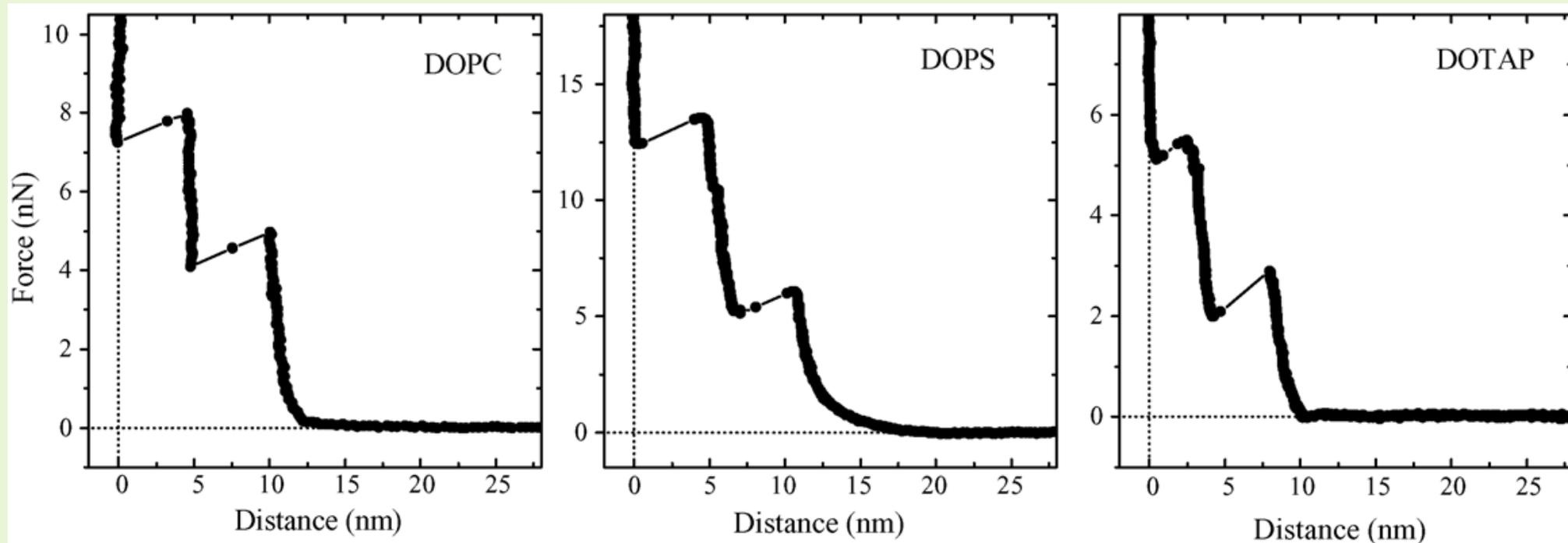
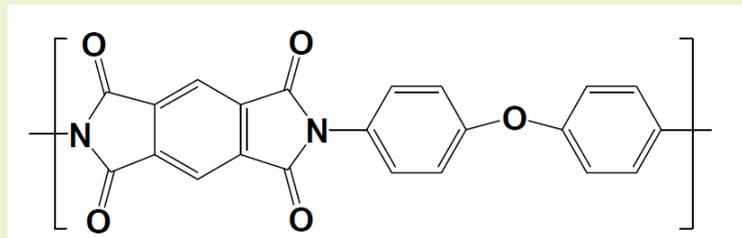


Fig. 36. Typical force-vs.-distance curve measured on a planar mica surface in buffer after exposure to 1,2-dioleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DOPC), 1,2-dioleoyl-sn-glycero-3-phospho-L-serine (DOPS), and 1,2-dioleoyl-3-trimethylammonium-propanechloride (DOTAP) vesicles. The AFM tips were first coated with chromium and gold and then with a monolayer of mercapto undecanol ($\text{HS}(\text{CH}_2)_{11}\text{OH}$). For details see Ref. [738].

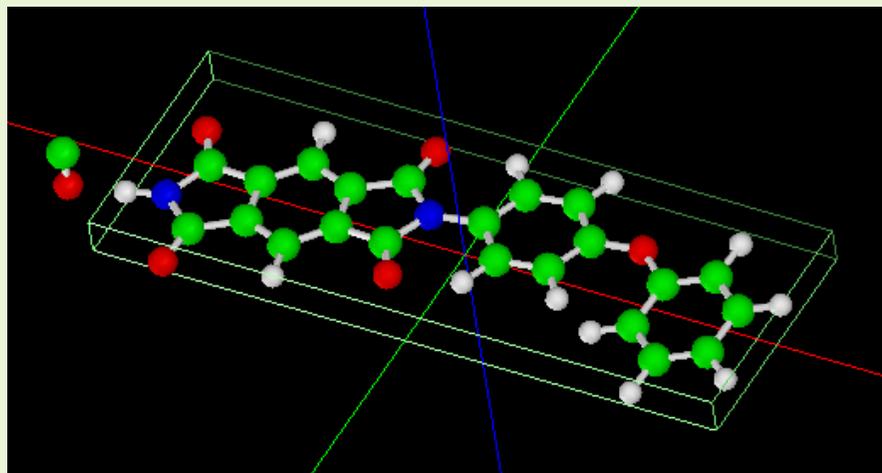
Hans-Juergen Butt et. al, Surface Science Reports 59 (2005) 1–152.

Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications

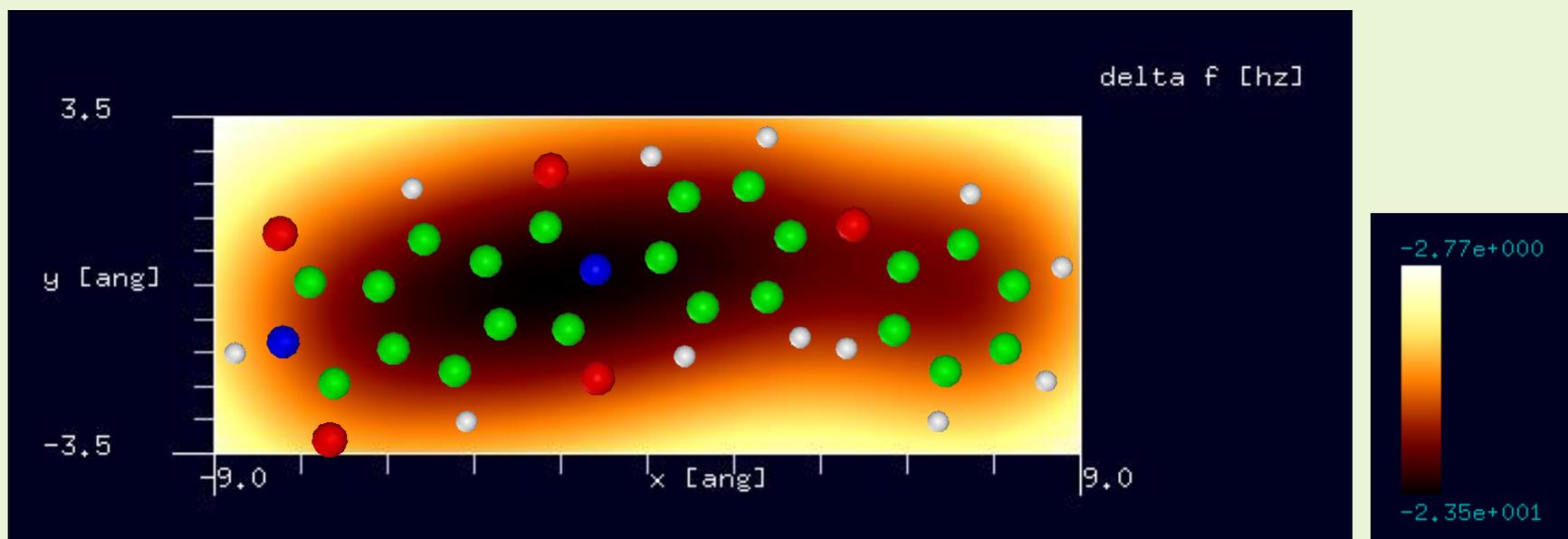
【CG】カプトン(Kapton)[ポリイミド(polyimide)の一種]



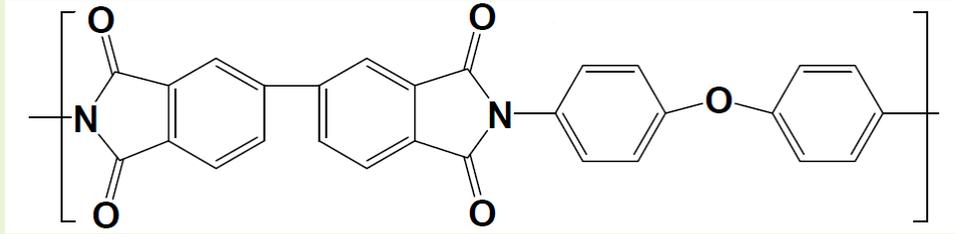
CO探針を使用
モノマーで計算



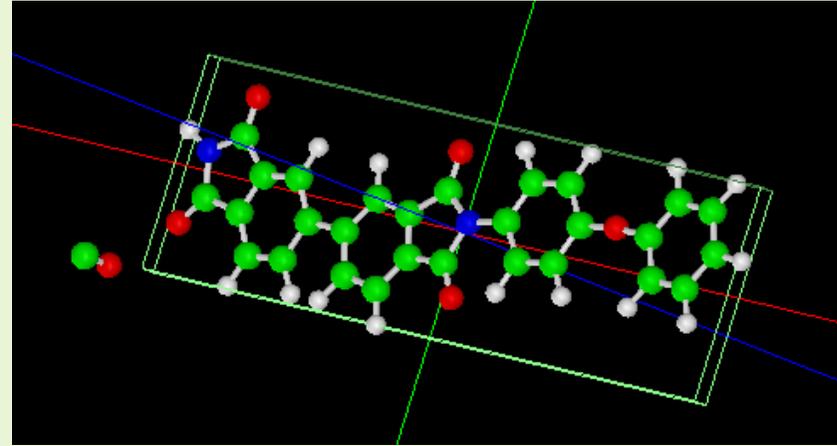
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.5 Å
周波数のずれは -2.35×10^1 Hzから -2.77 Hz



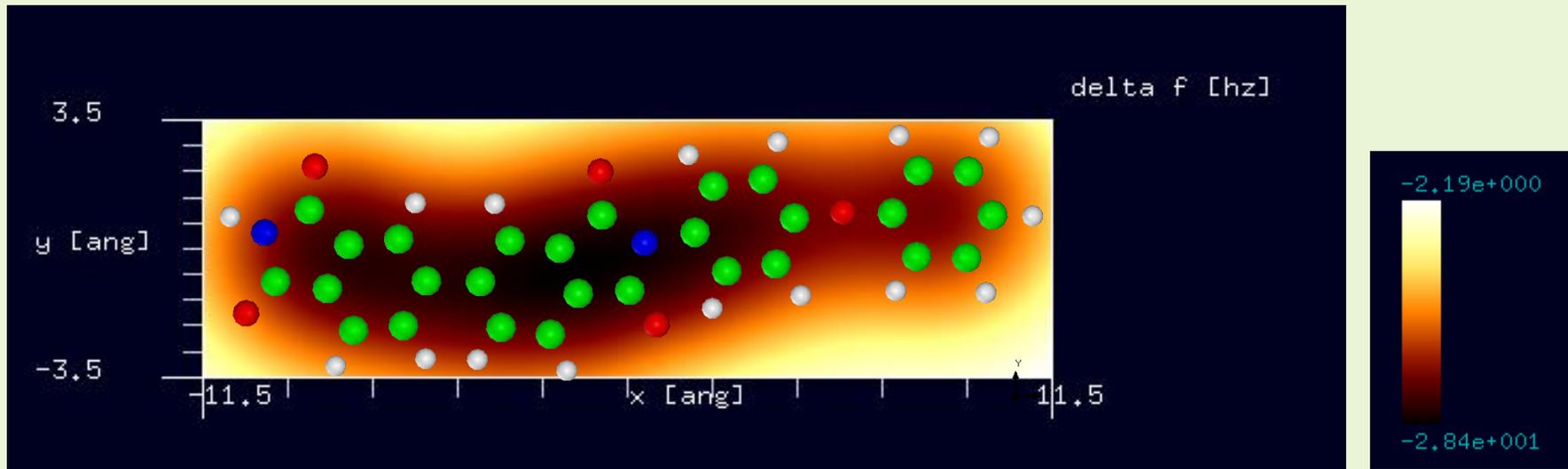
【CG】ユーピレックス-RN(Upilex-RN)[ポリイミド(polyimide)の一種]



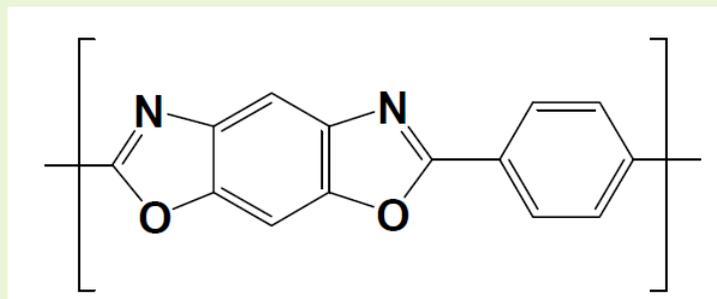
CO探針を使用
モノマーで計算



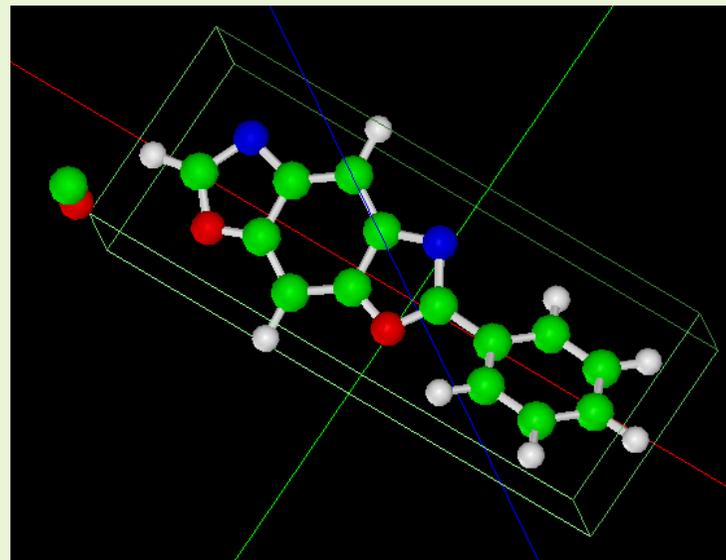
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.5 Å
周波数のずれは -2.84×10^1 Hzから -2.19 Hz



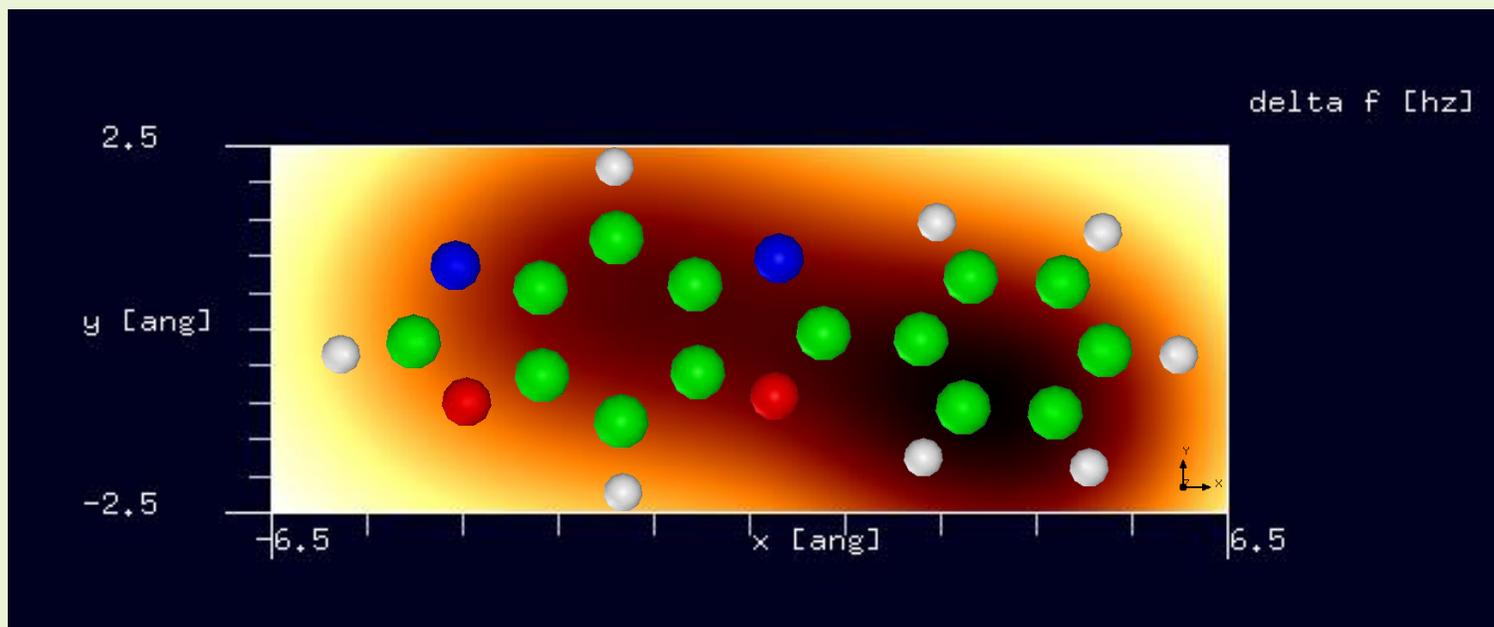
【CG】 ザイロン(Zylon)[合成繊維の一種]



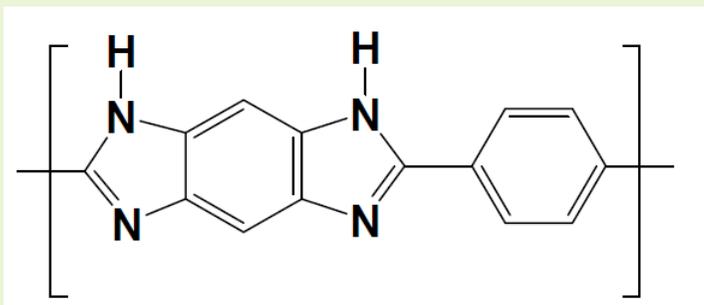
CO探針を使用
モノマーで計算



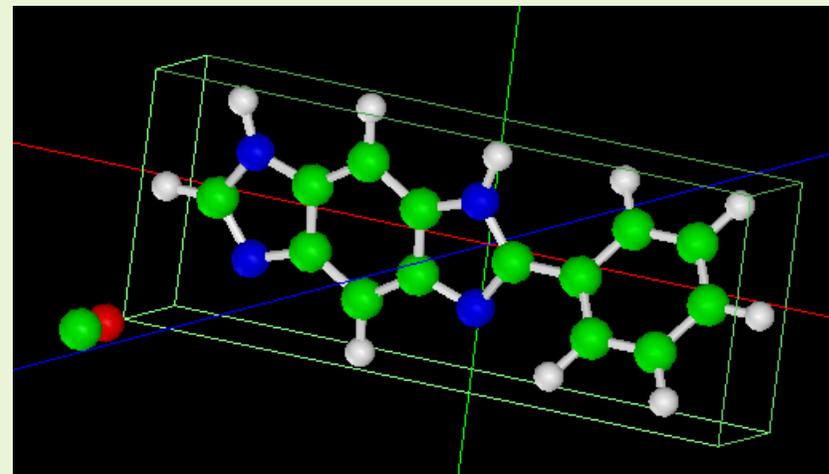
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.5 Å
周波数のずれは -1.19×10^1 Hzから -2.20 Hz



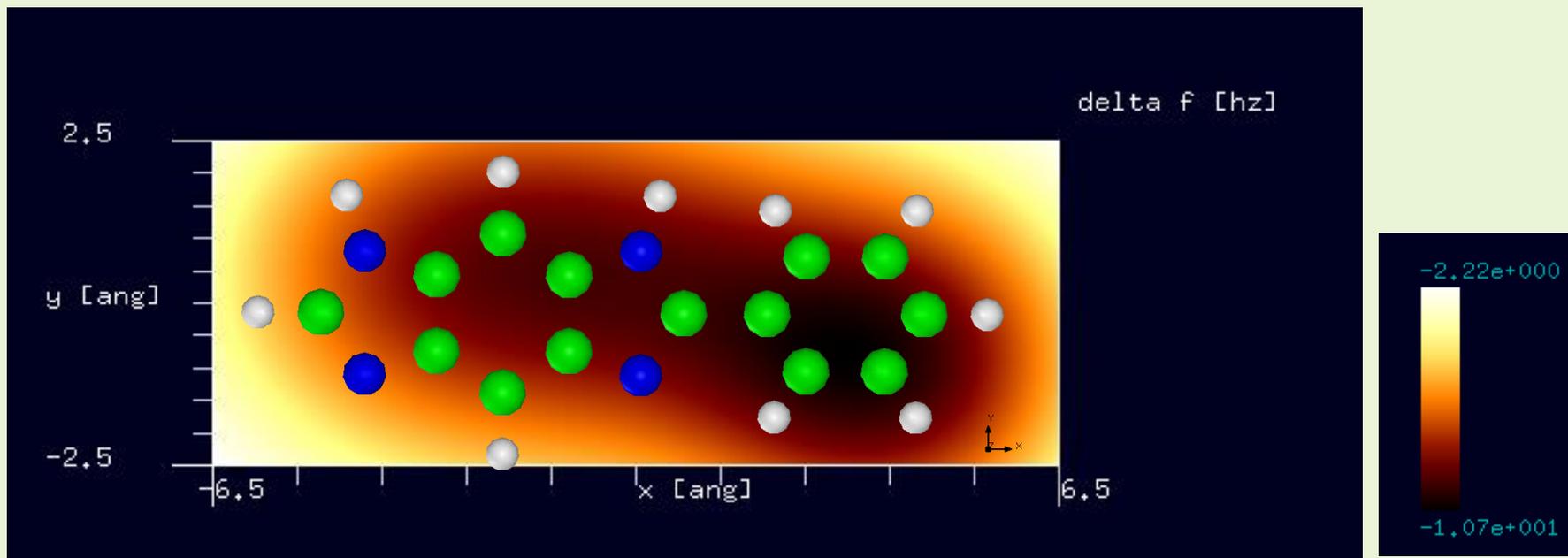
【CG】ポリベンゾイミダゾール(PBI)[合成繊維の一種]



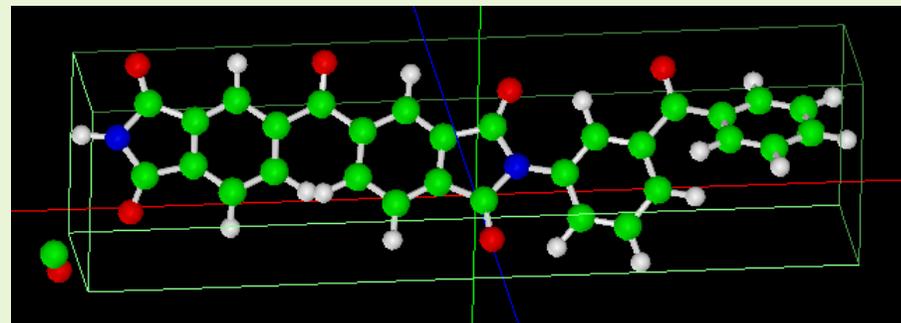
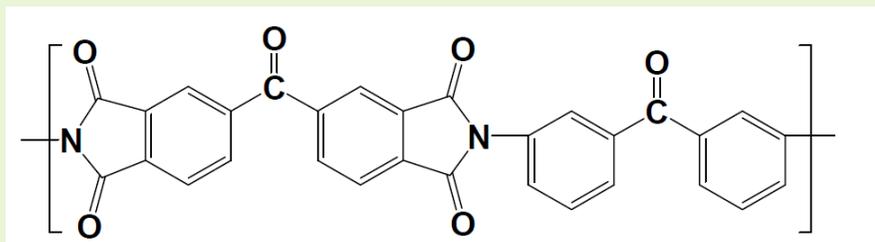
CO探針を使用
モノマーで計算



周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.7 Å
周波数のずれは -1.07×10^1 Hzから -2.22 Hz

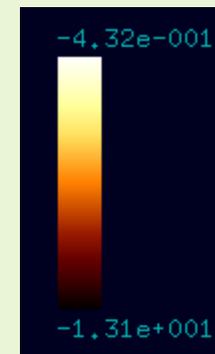
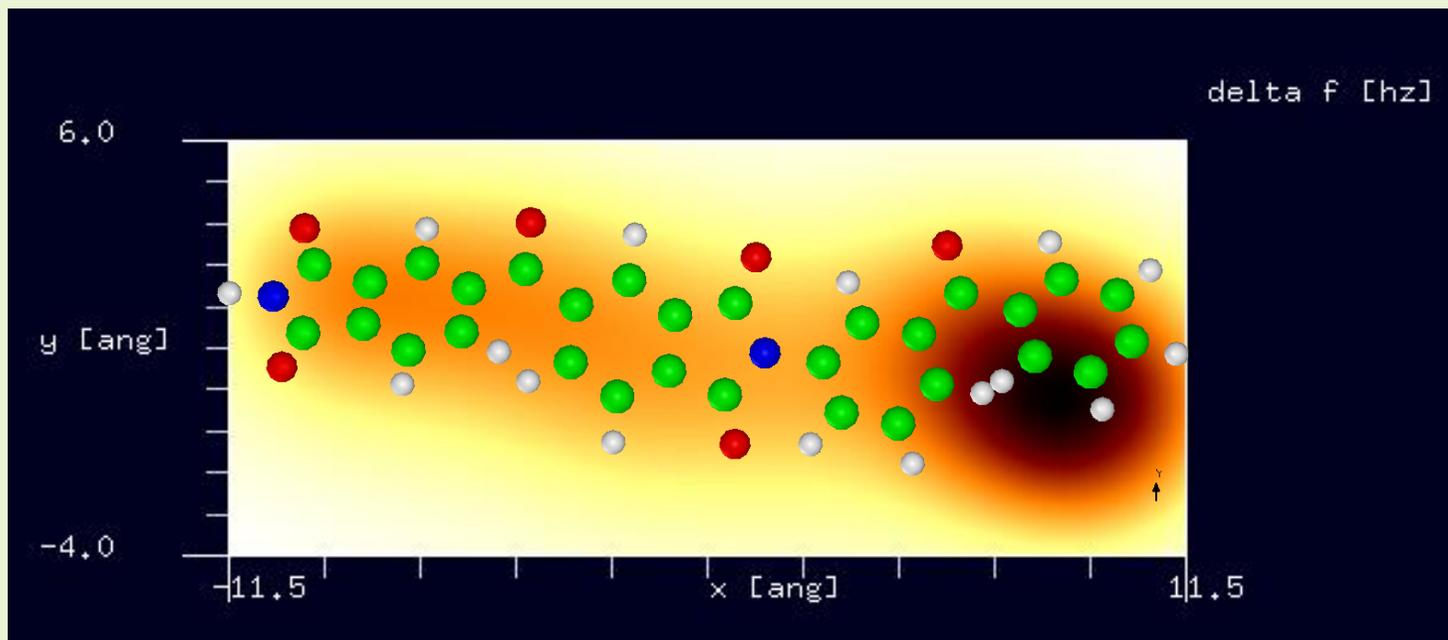


【CG】高耐熱性ポリイミド接着剤Larc-TPI

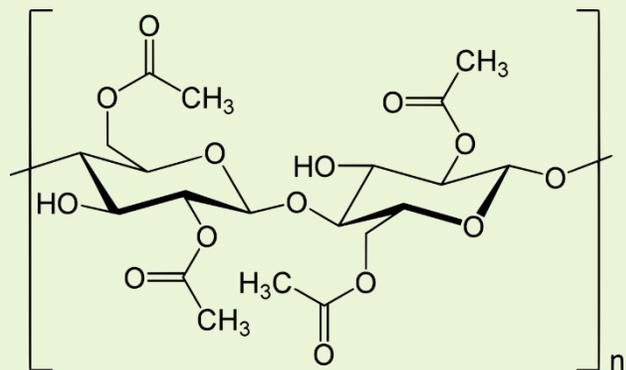


CO探針を使用
モノマーで計算

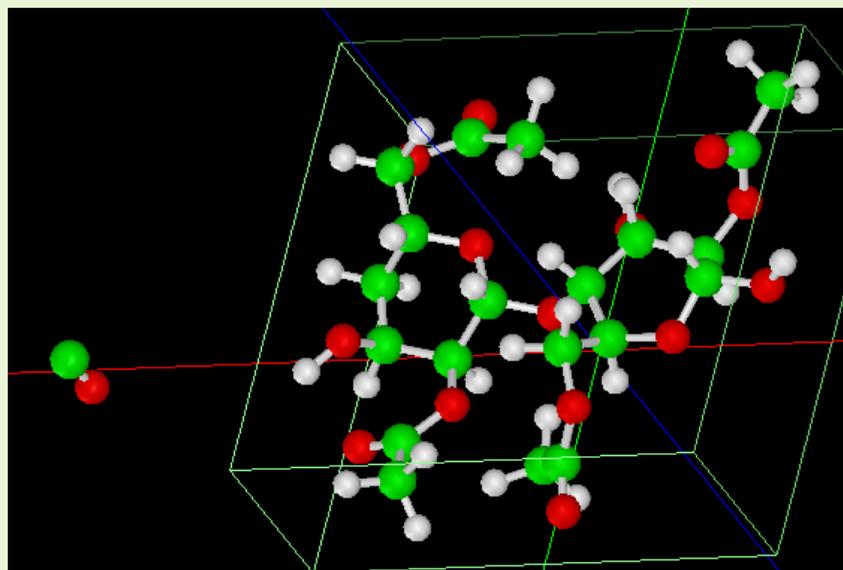
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.3 Å
周波数のずれは -1.31×10^1 Hzから -4.32×10^{-1} Hz



【CG】ジアセテート(diacetate)[アセテート繊維の一種]



CO探針を使用
モノマーで計算

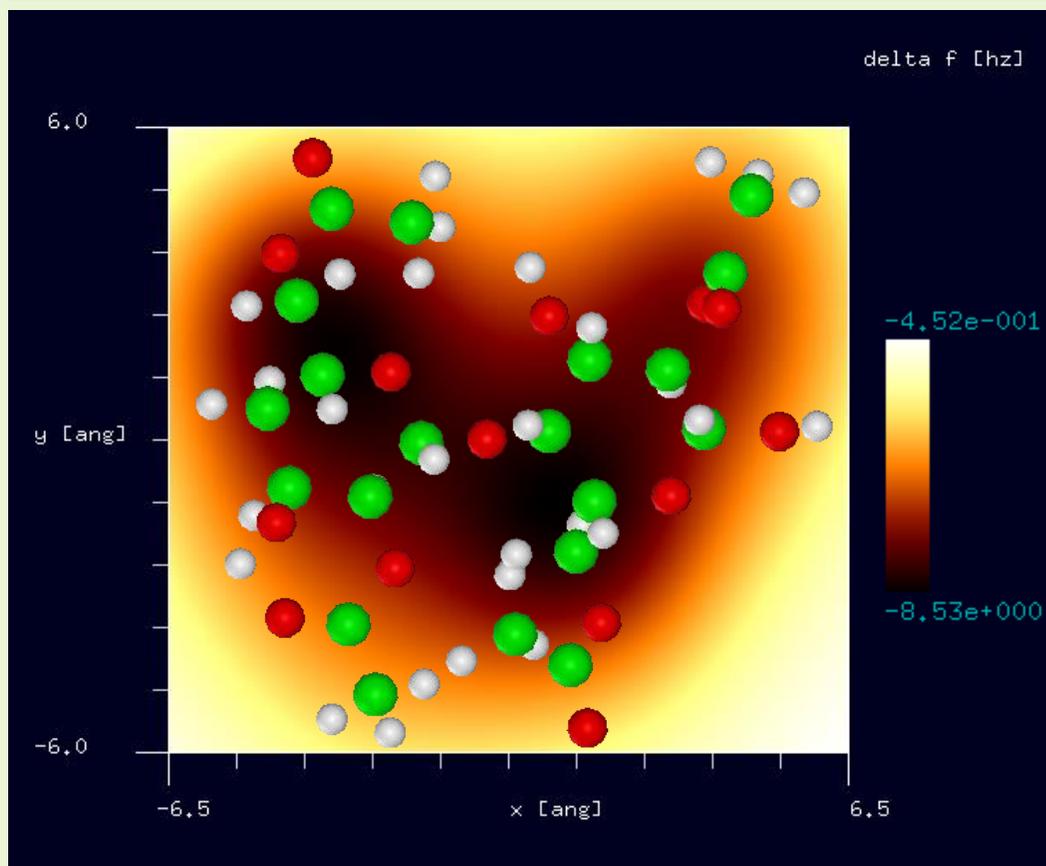


周波数シフトAFM画像:

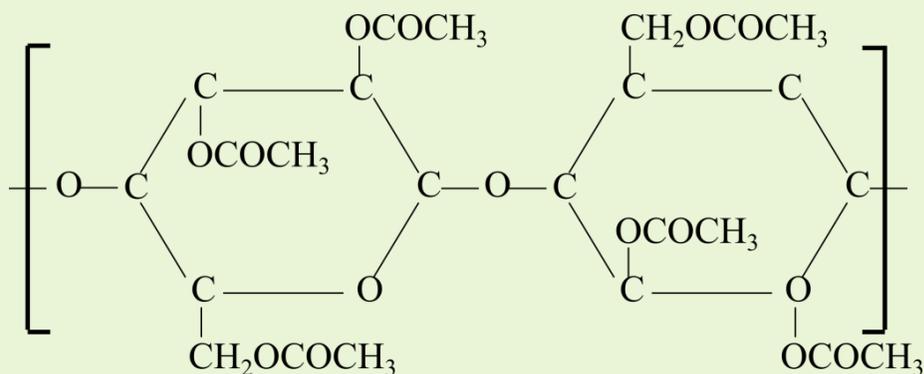
探針振動の共鳴周波数25kHz,

探針と試料の最短距離4.6 Å

周波数のずれは -8.53 Hzから -4.52×10^{-1} Hz



【CG】トリアセテート(triacetate)[アセテート繊維の一種]



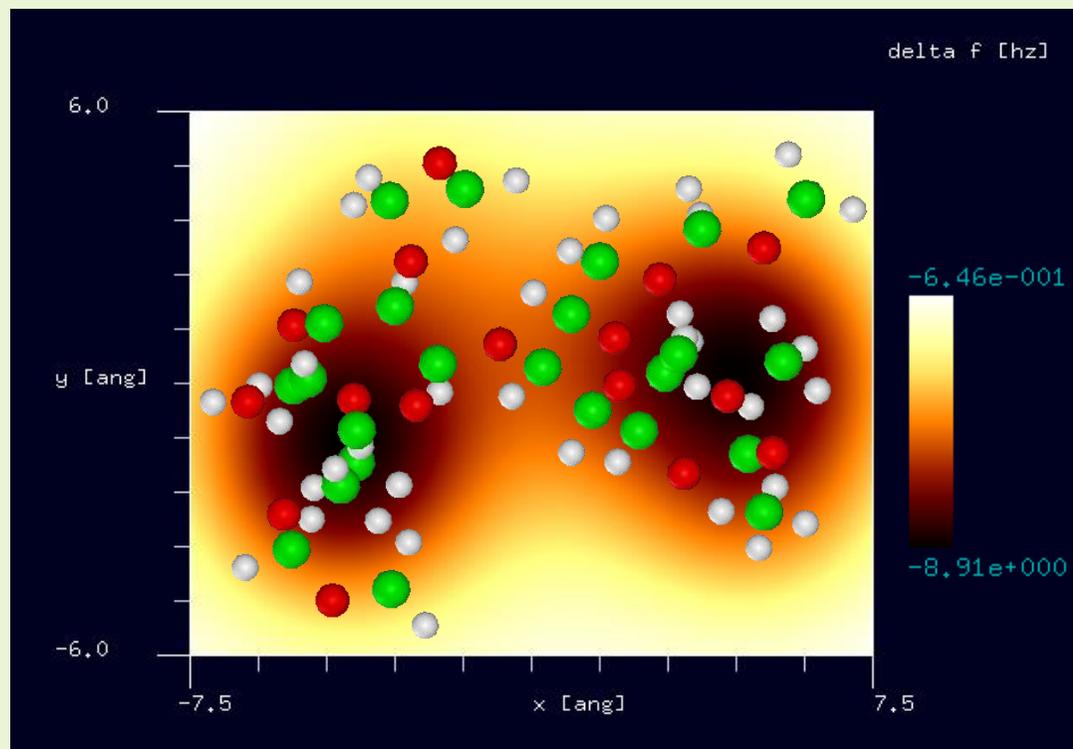
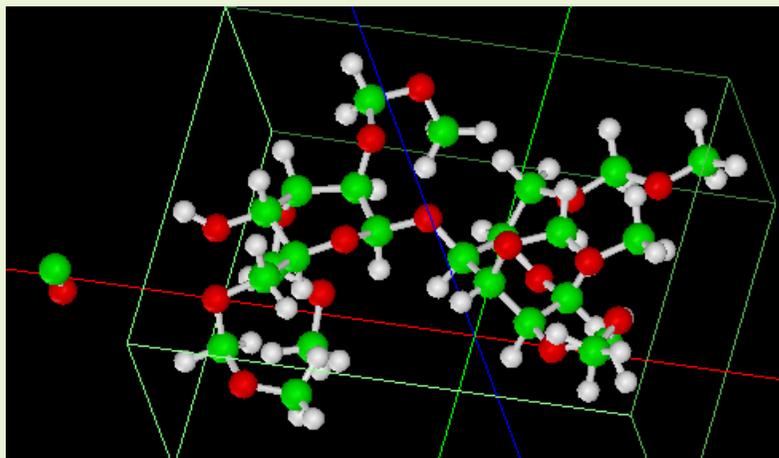
周波数シフトAFM画像:

探針振動の共鳴周波数25kHz,

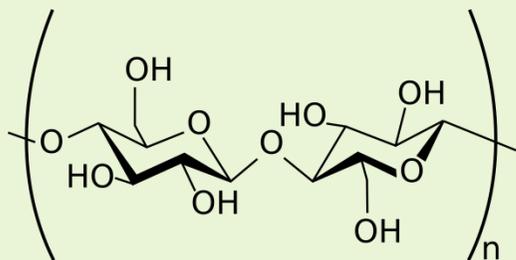
探針と試料の最短距離4.3 Å

周波数のずれは -8.91 Hzから -6.46×10^{-1} Hz

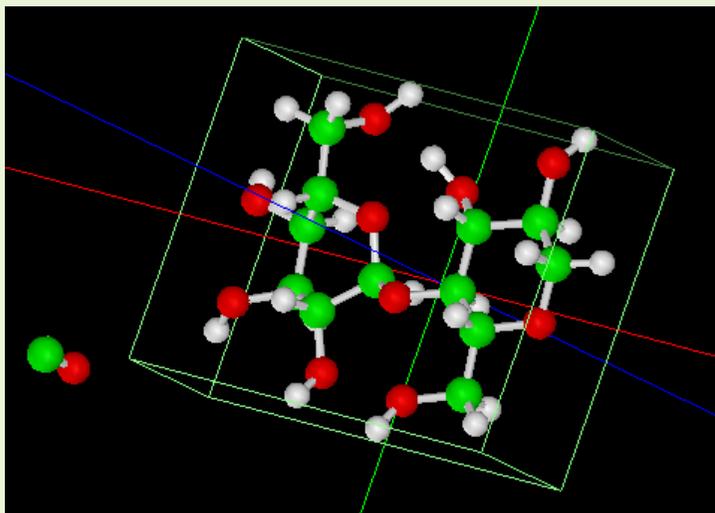
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算



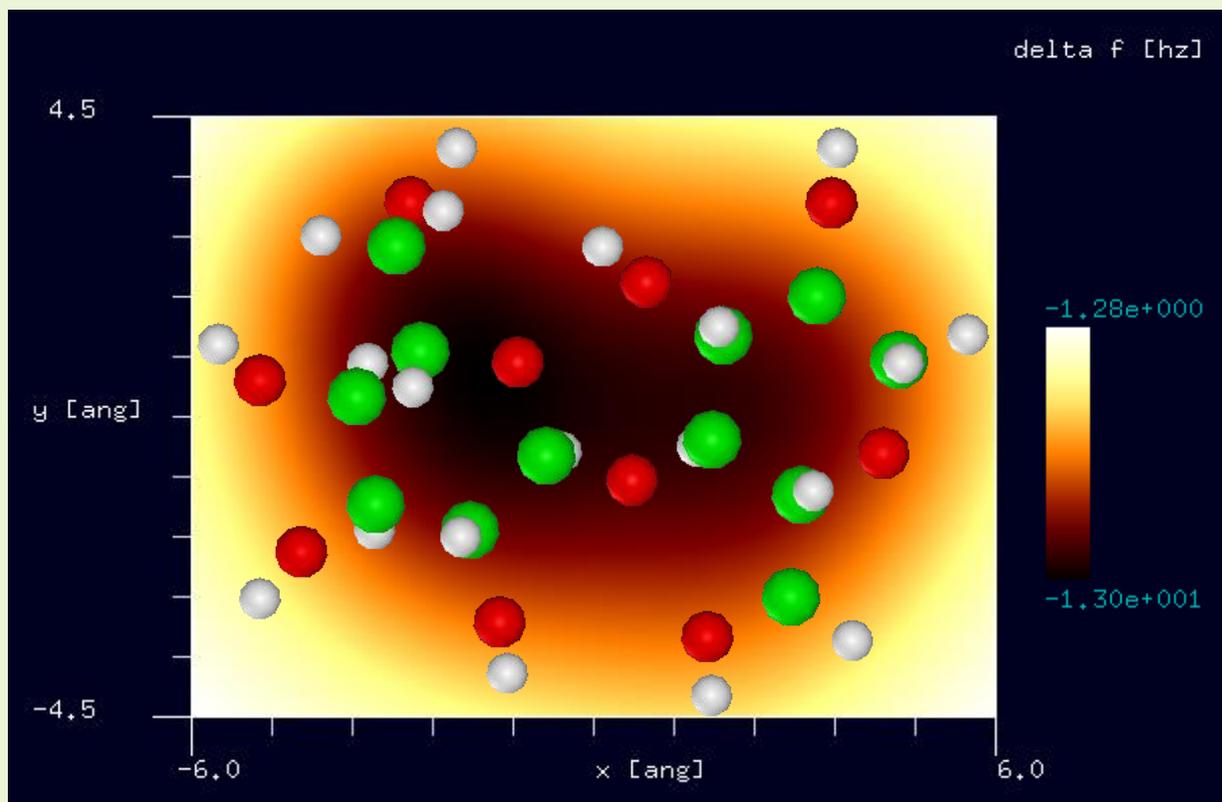
【CG】セルロース(cellulose)[アセテート繊維の一種]



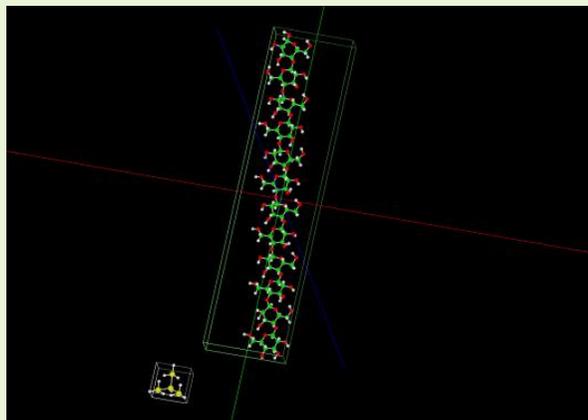
CO探針を使用
モノマーで計算



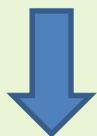
周波数シフトAFM画像:
探針振動の共鳴周波数25kHz,
探針と試料の最短距離4.4 Å
周波数のずれは -1.30×10^1 Hzから1.28 Hz



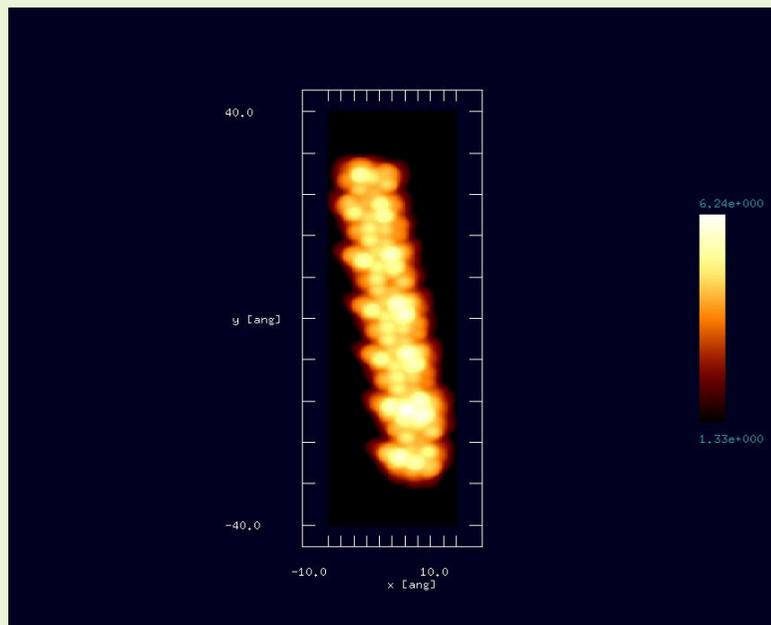
【CG】セルロースのカー定モードAFM像



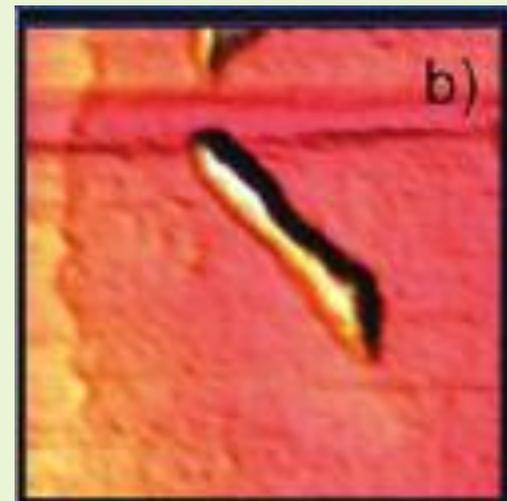
セルロース試料
シリコン探針



CGソルバー
カー定モードAFM像



実験例

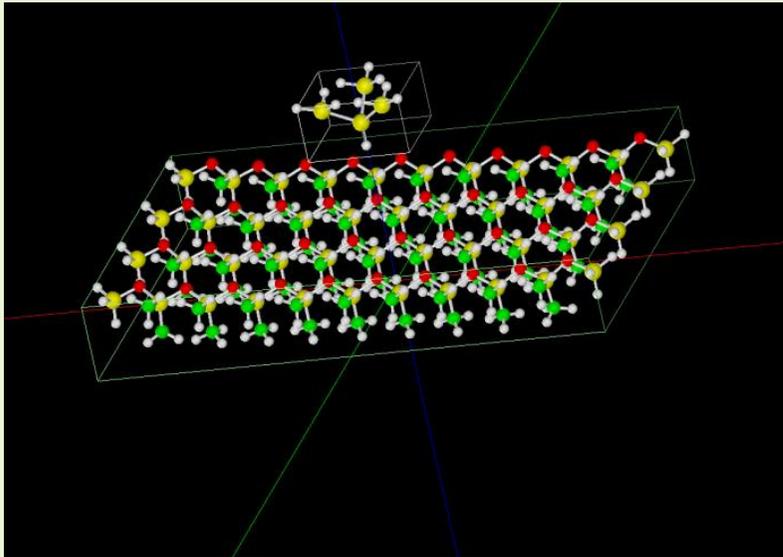


langmuir 26, 6, 4480 (2010)

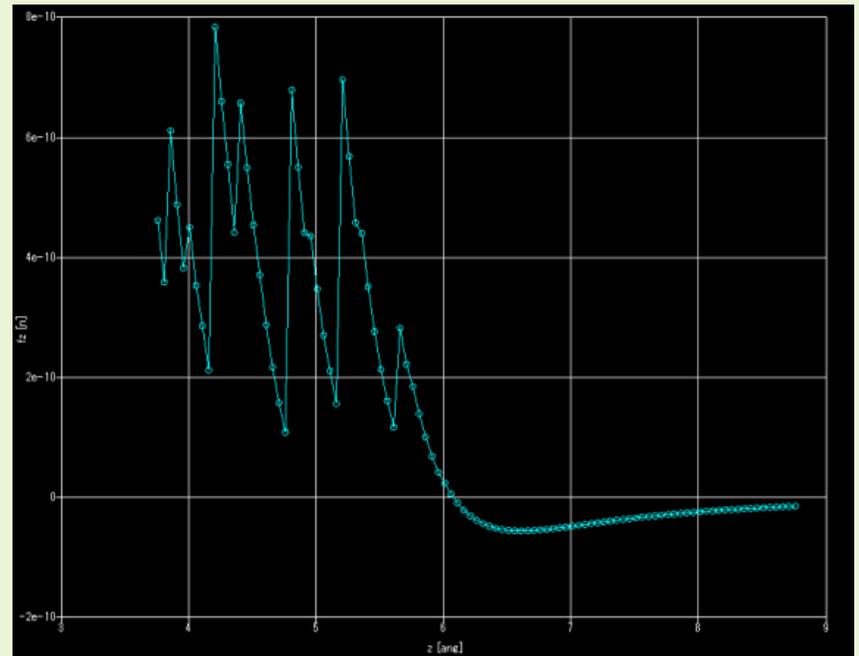
Tappingモード

【CG】シリコンゴムのフォースカーブ

試料: シリコンゴム
探針: シリコン



CGソルバー
フォースカーブ



【MD】原子分子ナノ材料AFM像シミュレータの活用事例

MD

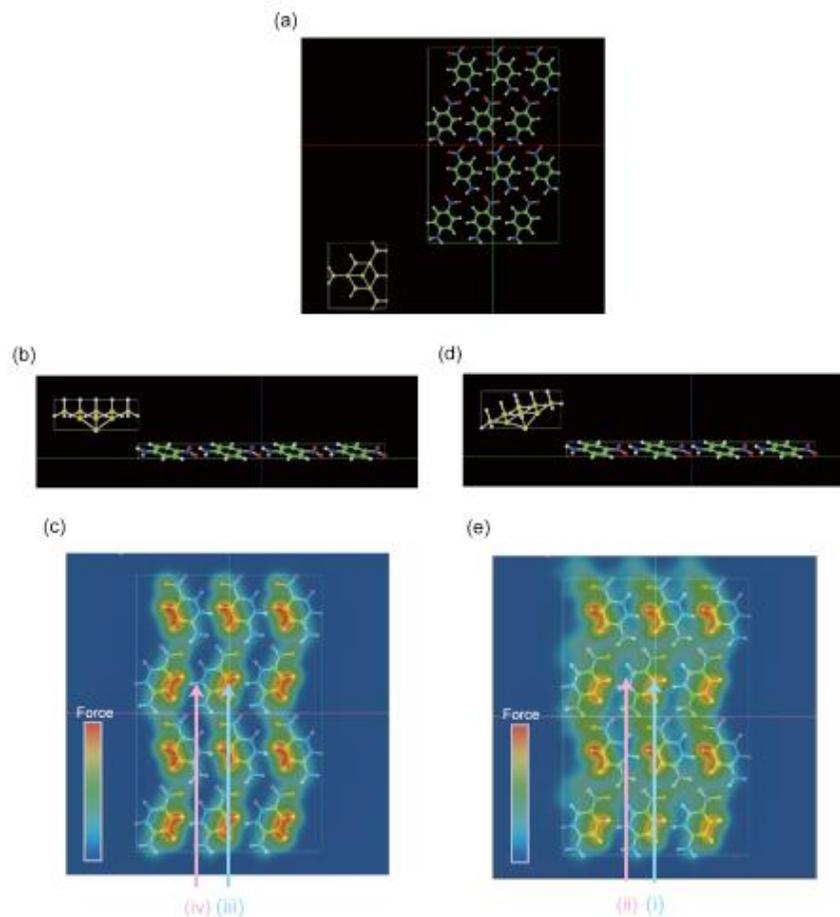


Figure S1. *p*-Nitroaniline (101) surface and Si_{10} tip. Top and side views of the symmetric tip are shown in panels a and b. The simulated tip-surface force distribution is in panel c. The tip was tilted by 17° as shown in panel d and the force simulated with the tilted tip is shown in panel e.

神戸大学大学院理学研究科化学専攻
大西・木村研究室にて活用

(Nishioka et al., J. Phys. Chem. C 117, 2939-2943 (2013).)

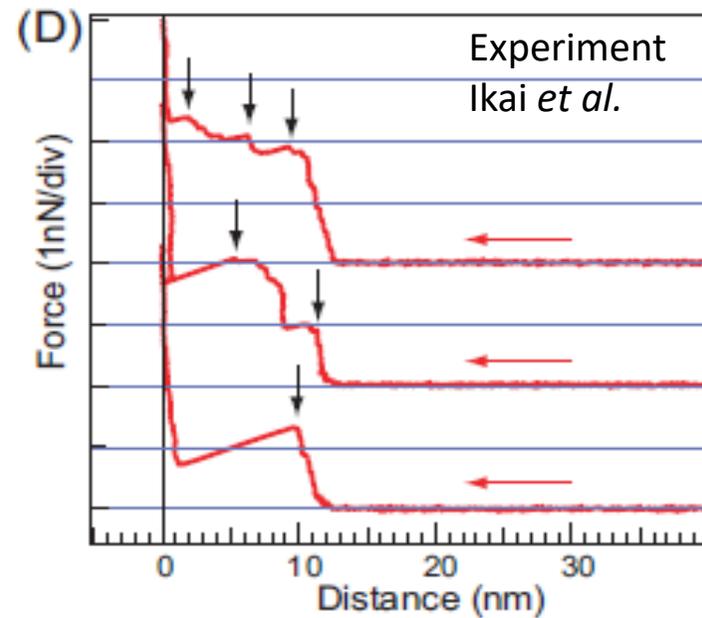
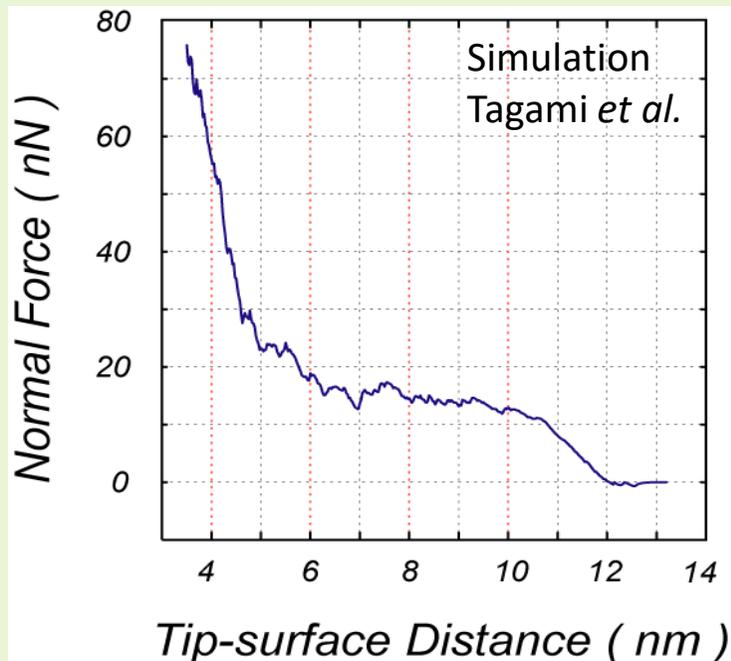
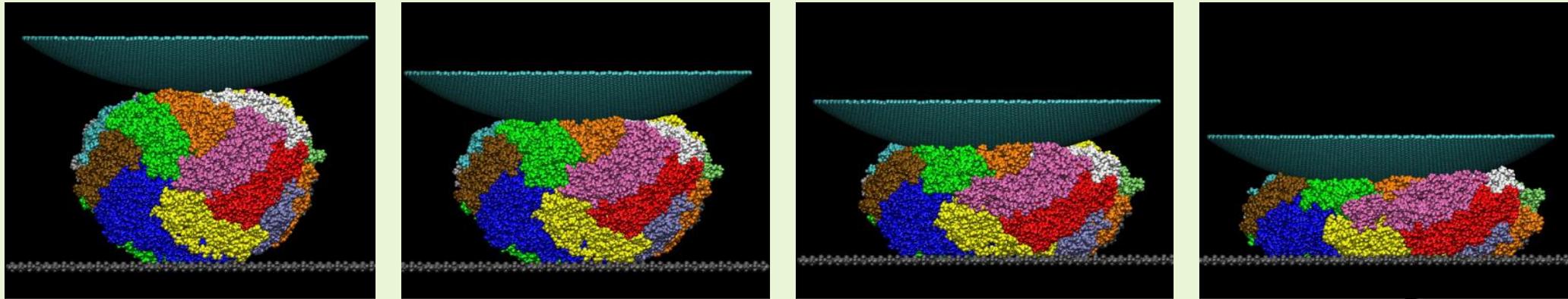
左下: 弊社「分子動力学AFM像シミュレータ」による、*p*-ニトロアニリン結晶表面のフォースマップ

(上記論文のSupporting Informationに掲載)

測定された一定周波数シフト形状像の解釈を行う場面で用いられ、形状像を大きく変える主な原因が探針先端の傾きによるものであるという考察に理論的な支持を与えた

【MD】 apo-ferritinの圧縮実験

MD たんぱく質分子に関するナノ力学実験



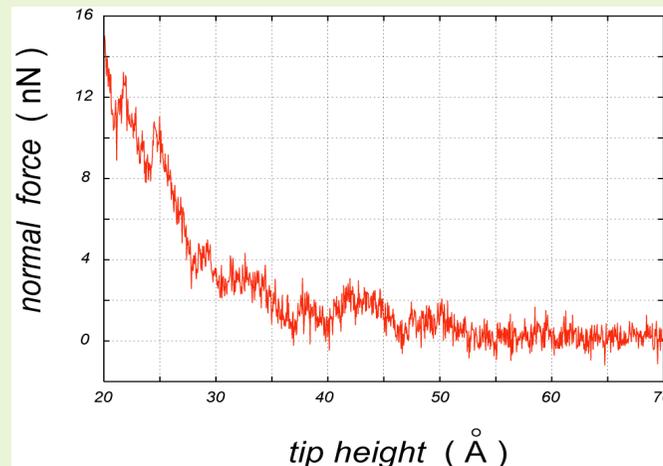
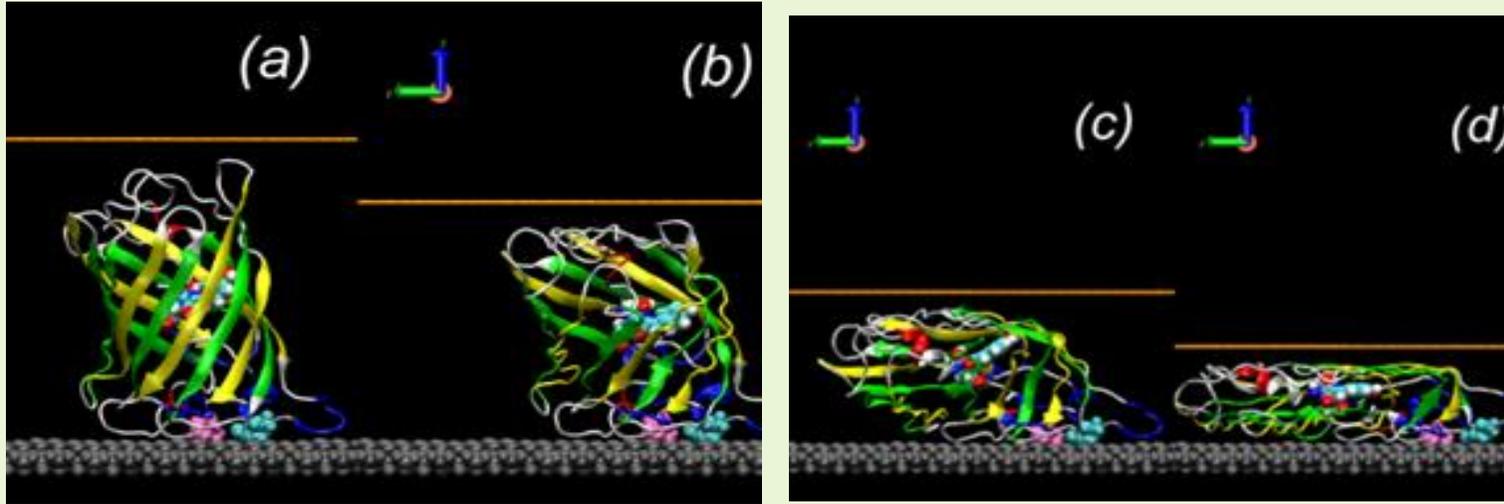
K. Tagami, M. Tsukada, R. Afrin, H. Sekiguchi and A. Ikai,
e-J. Surf. Sci. Nanotech. 4, 552-558 (2006).

【MD】 GFPの圧縮実験

MD たんぱく質分子に関するナノ力学実験

GFP = Green Fluorescent Protein

圧縮のMDシミュレーション



Q. Gao, K. Tagami, M. Fujihira and M. Tsukada, Jpn. J. Appl. Phys., 45, L929 (2006).

【MD】MD法によるタンパク質分子の圧縮・伸長実験

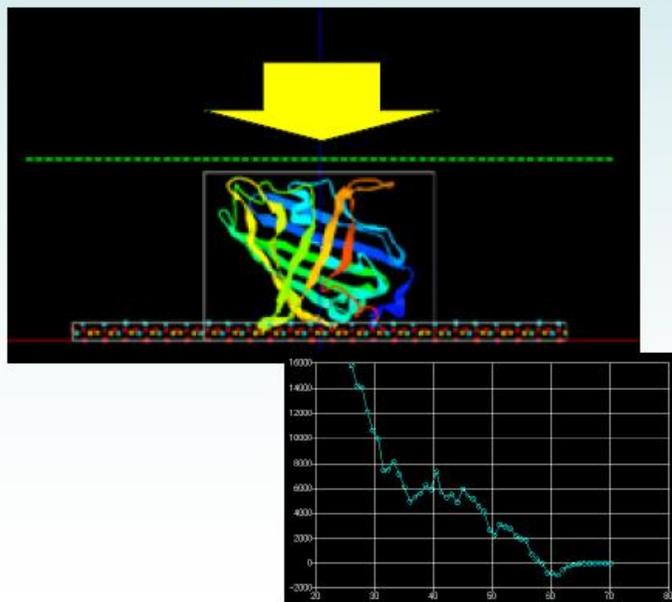
MD たんぱく質分子に関するナノ力学実験

計算例

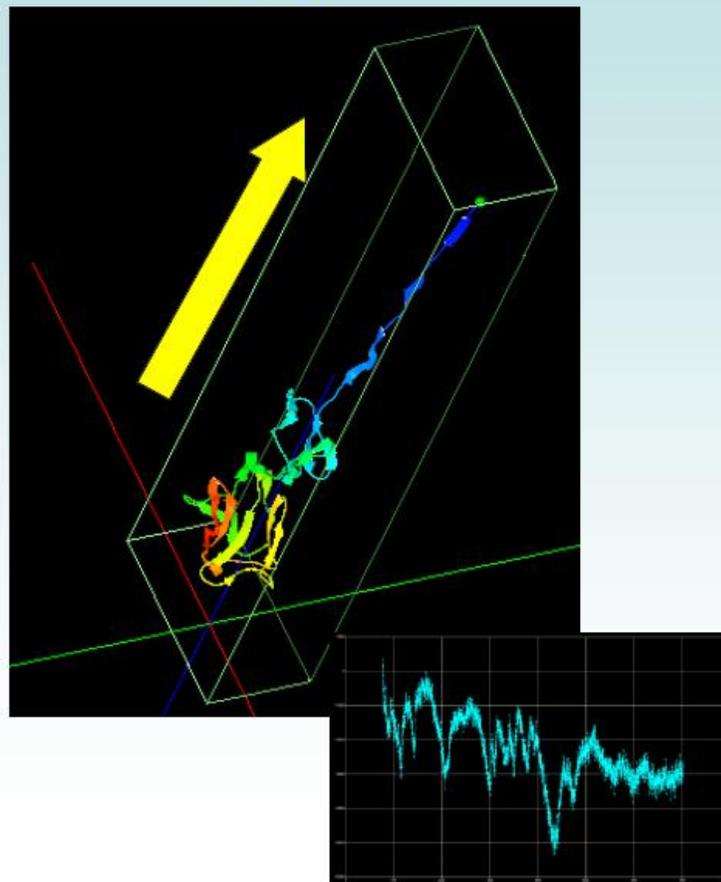
蛋白質の計算 (MD)

蛋白質を変形させながら
探針に作用する力を計算

押しつぶす



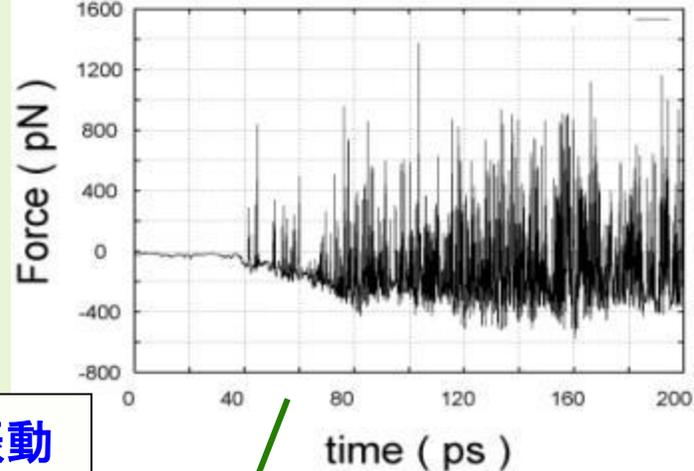
引っ張る



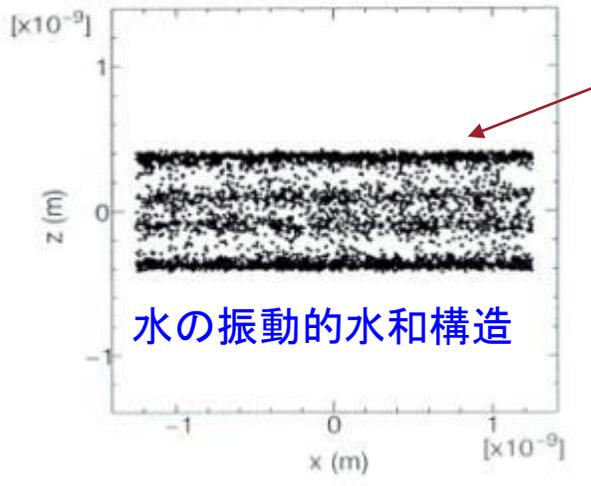
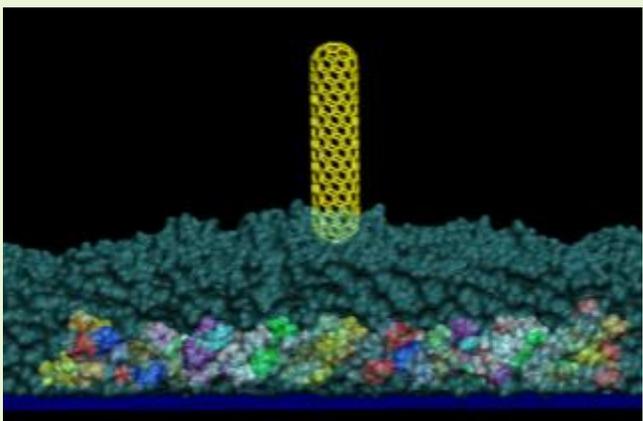
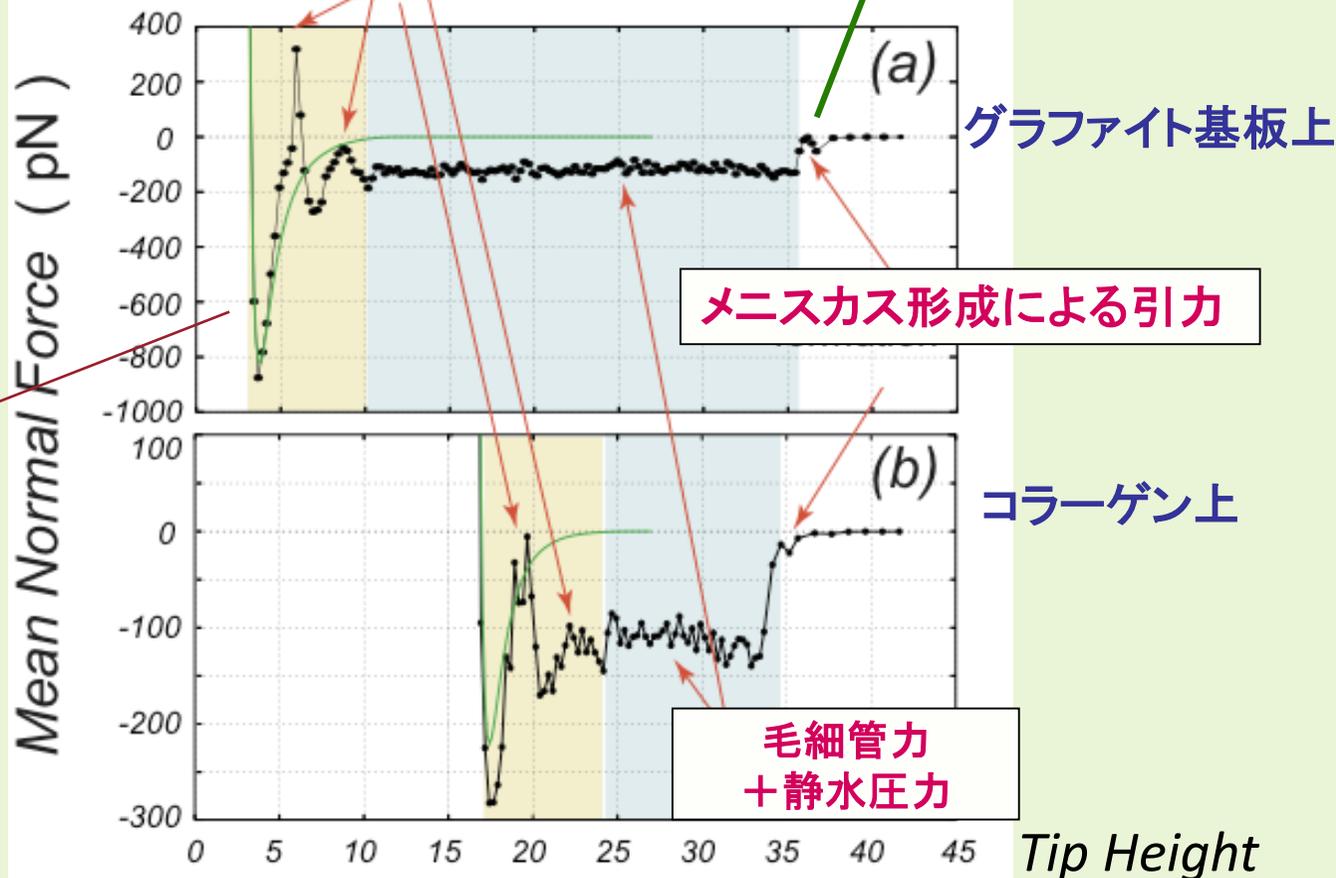
MD法によって、タンパク質分子の探針(グラファイト)による押しつぶし、および引き延ばしをシミュレートしたときのフォースカーブを計算できる。

【MD】物体近傍での水の微視的構造

MD コラーゲン@グラファイトの場合
古典分子動力学法によるAFMシミュレーション(CNT探針)



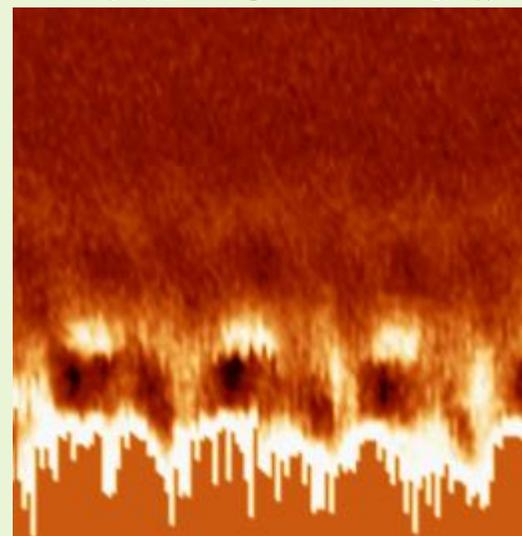
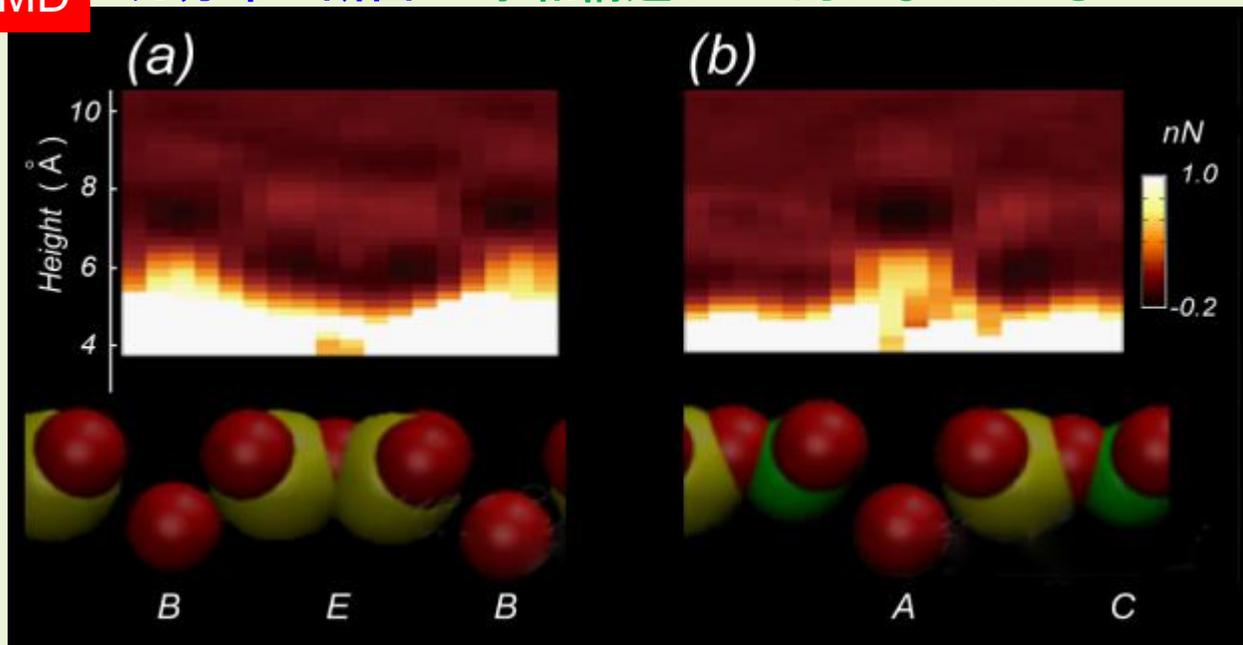
水和構造を反映した力の振動



【MD】水とマイカ表面の界面構造

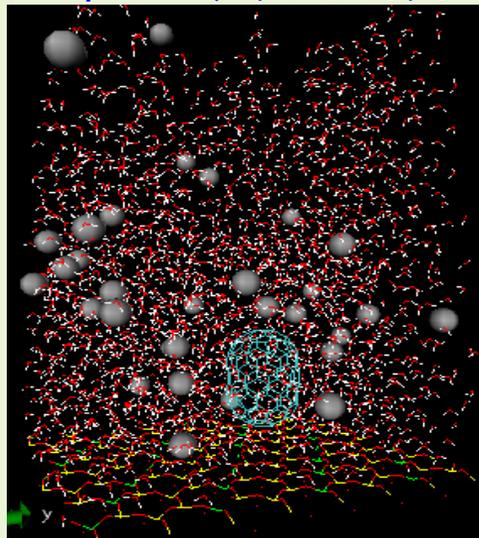
MD カ分布の断面 水和構造が3D的になっている

AFM実験 京大山田教授

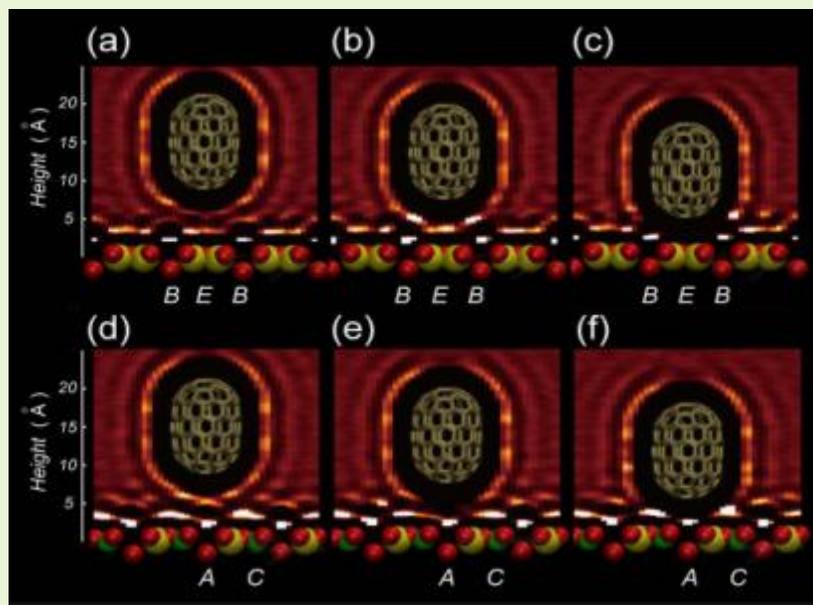
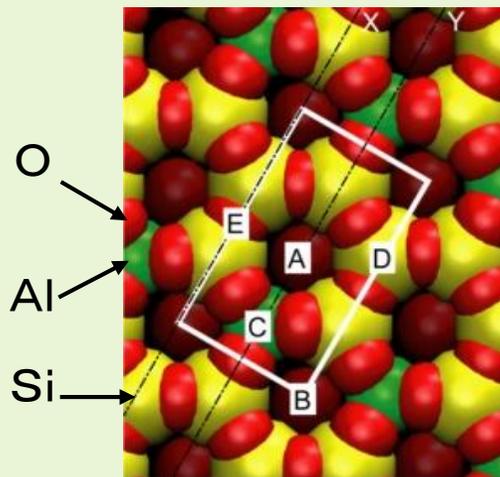


水分子の分布

MD中のスナップショット



マイカ試料モデル

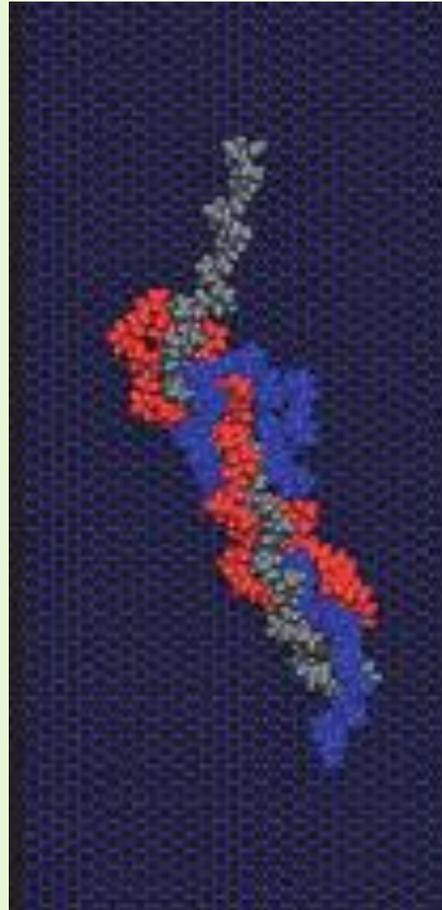
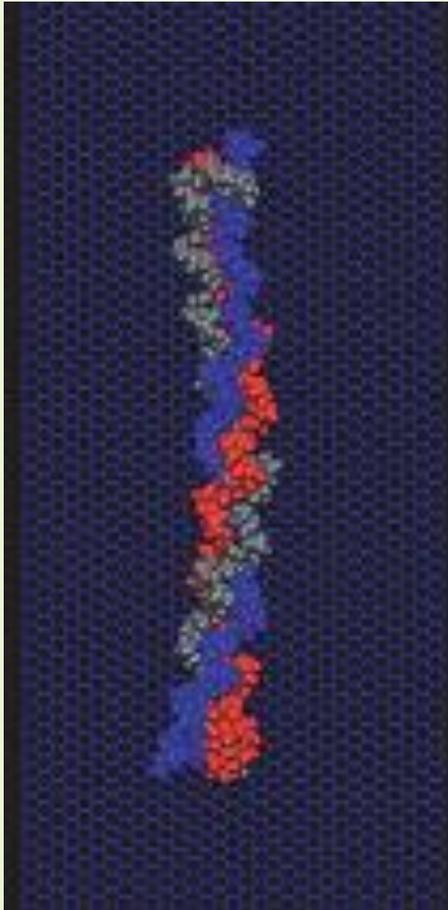


【MD】HOPG基板上のコラーゲンのAFMシミュレーション

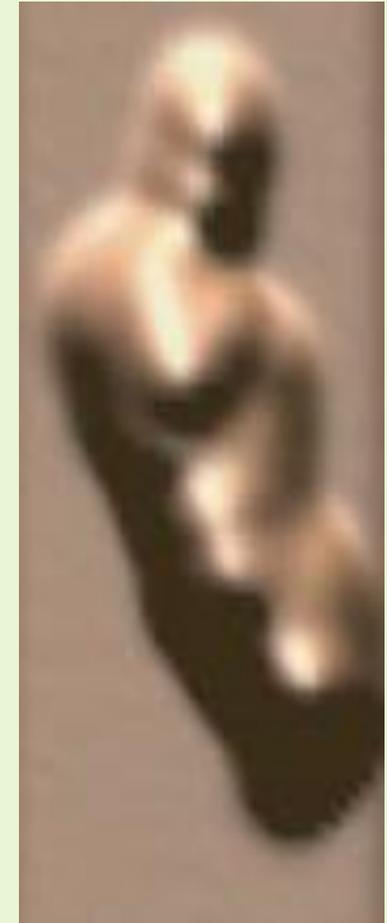
Example of AFM imaging simulation

AFM imaging of collagen adsorbed to the HOPG substrate

Molecular model



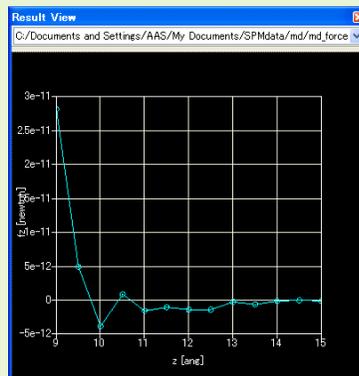
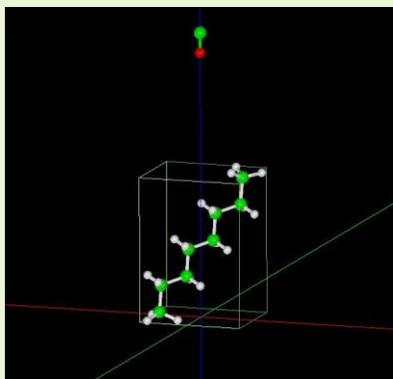
Simulation result



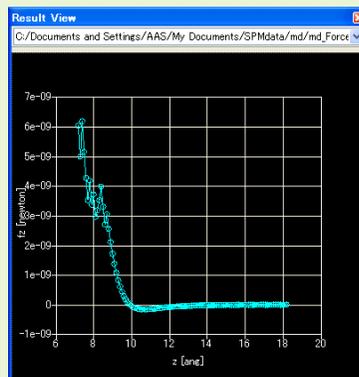
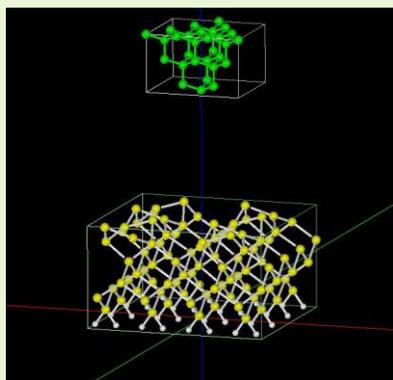
【MD】フォースカーブ測定モード

MD

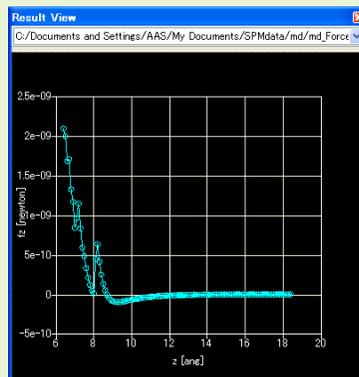
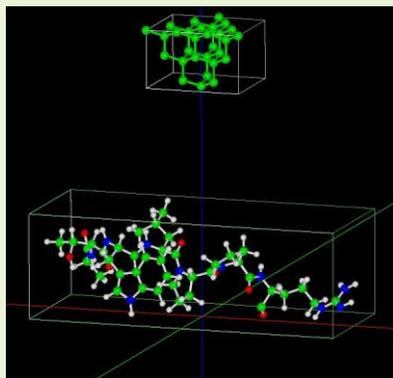
あるxy位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します。



オクタン分子のフォースカーブ



Si(001)表面のフォースカーブ

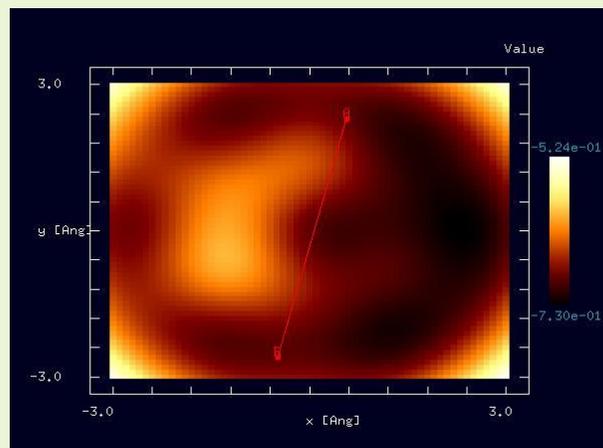
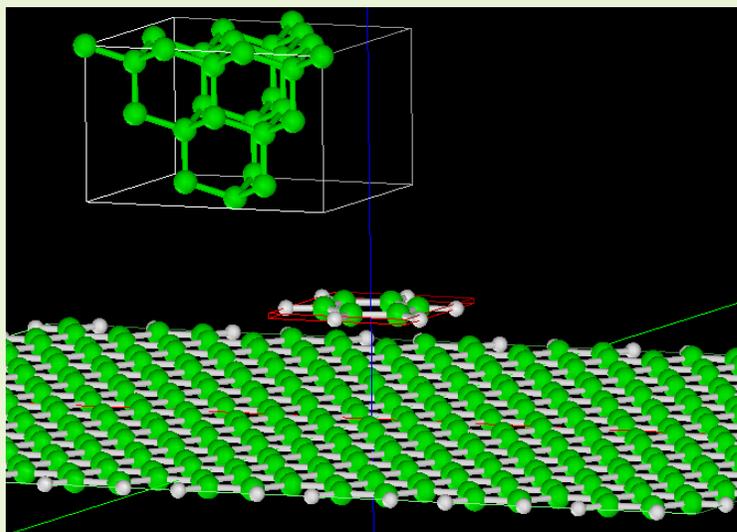


抗血管新生ペプチドのフォースカーブ

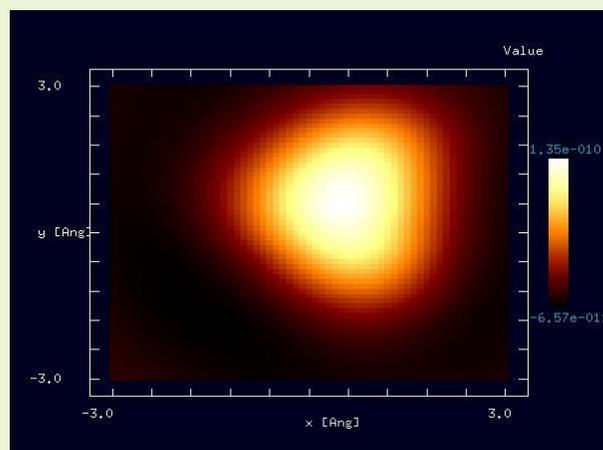
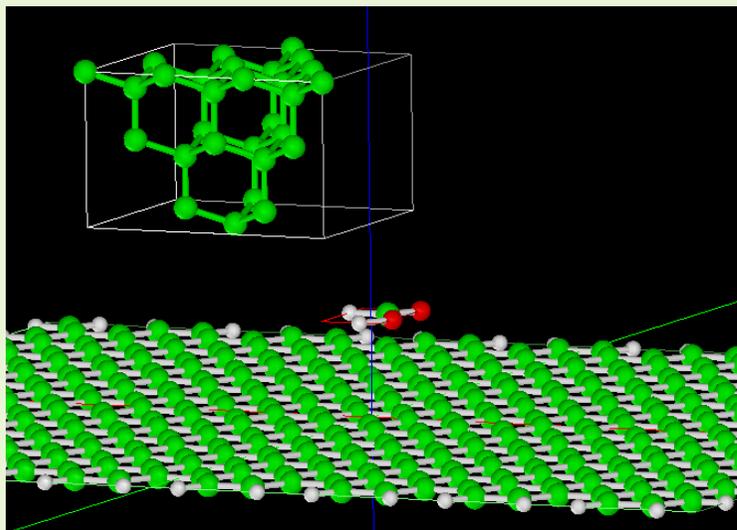
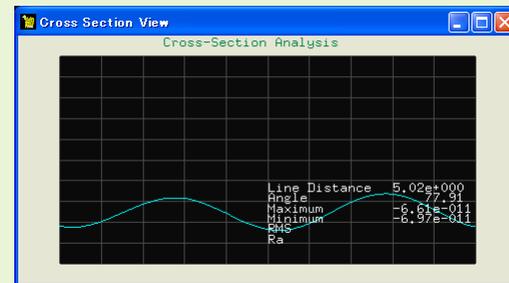
【MD】高さ一定モード

MD

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。



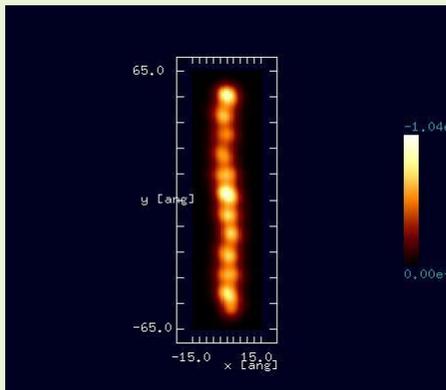
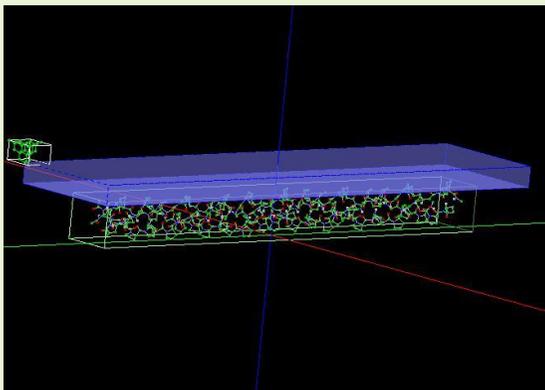
高さ一定モードでHOPG基板上のベンゼンを走査し、探針に作用する力を計算します。



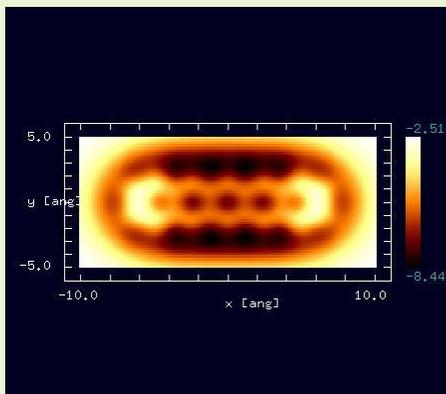
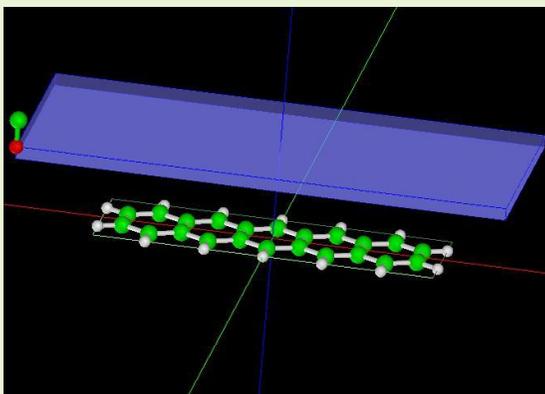
高さ一定モードでHOPG基板上の蟻酸を走査し、探針に作用する力を計算します。

【MD】高さ一定・ノンコンタクトモード

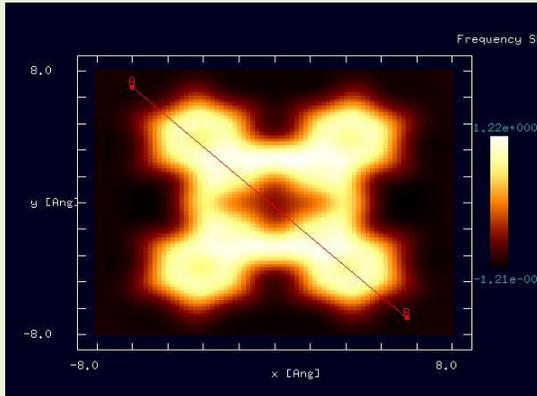
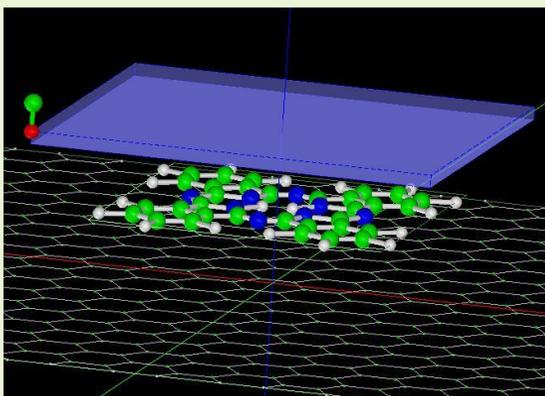
MD 探針を振動させながら高さ一定で平面上を走査し、周波数シフトを計算します。



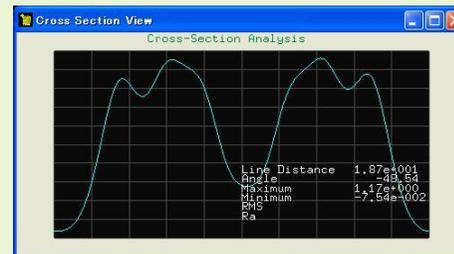
ノンコンタクトモードでコラーゲン分子を走査したときの、周波数シフト像を計算します。



ノンコンタクトモードでペンタセン分子を走査したときの、周波数シフト像を計算します。

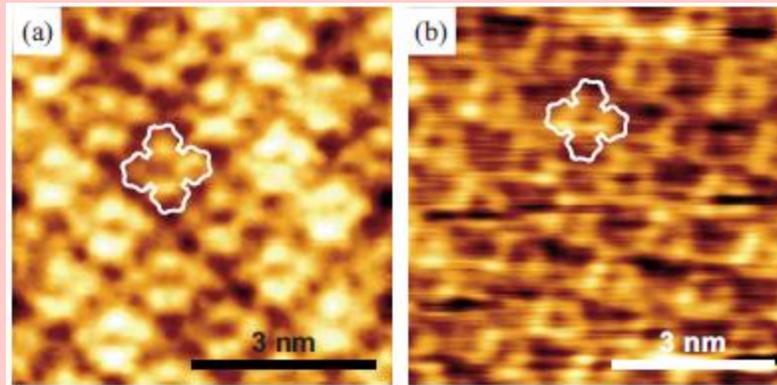


ノンコンタクトモードでフタロシアニン分子を走査したときの、周波数シフト像を計算します。



【MD】高さ一定・ノンコンタクトモード(参考)

cf. Experiment



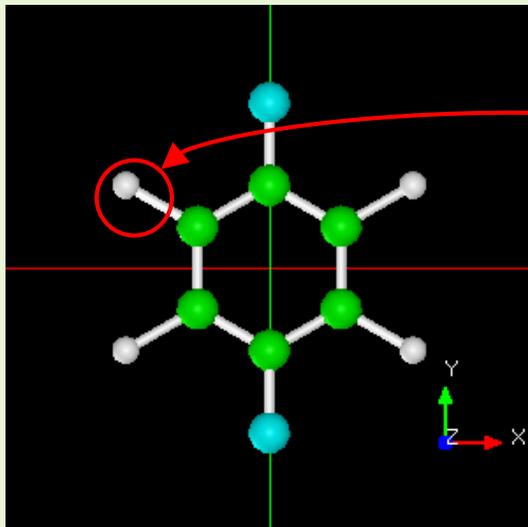
Topographic images of CuPc monolayers on Au(111) surfaces obtained by FM-AFM. (a) 6x6 nm², $\Delta f = -450$ Hz. (b) 7x7 nm², $\Delta f = -134$ Hz.

T. Ichii et al, Journal of Applied Physics 107, 024315 (2010).

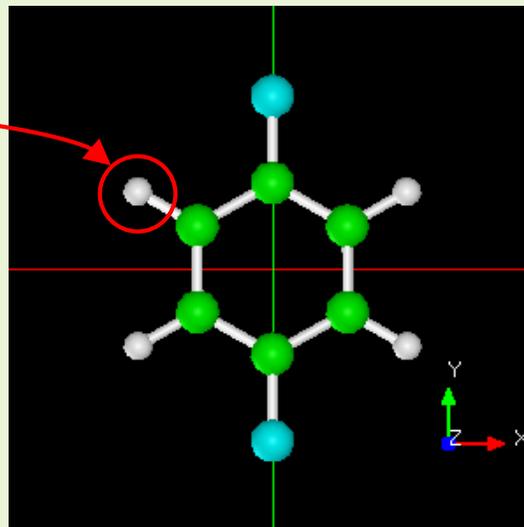
【MD】緩和計算

MD 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。

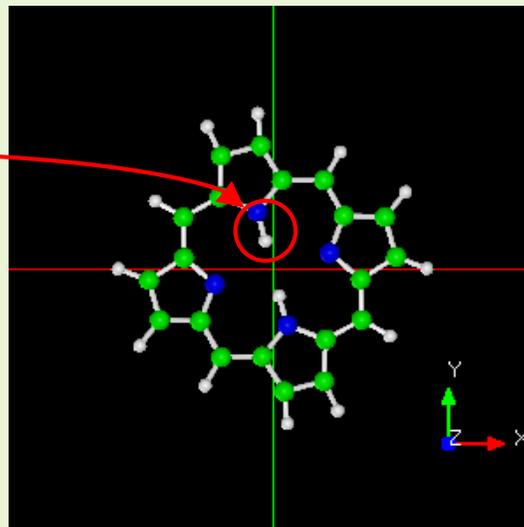
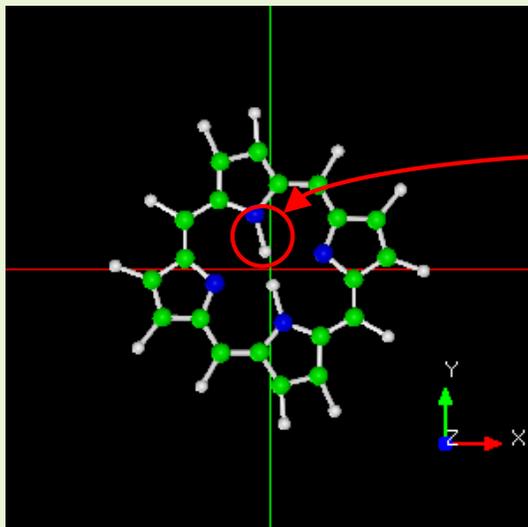
緩和計算前



緩和計算後

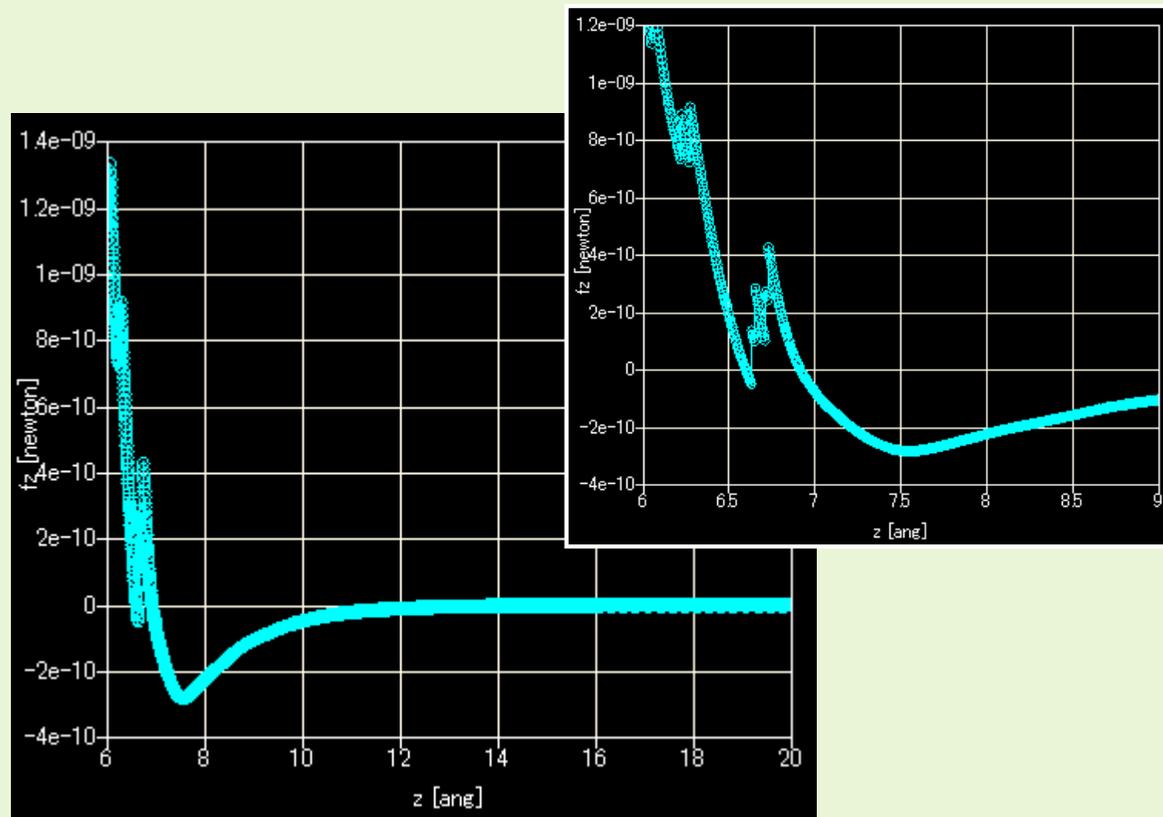
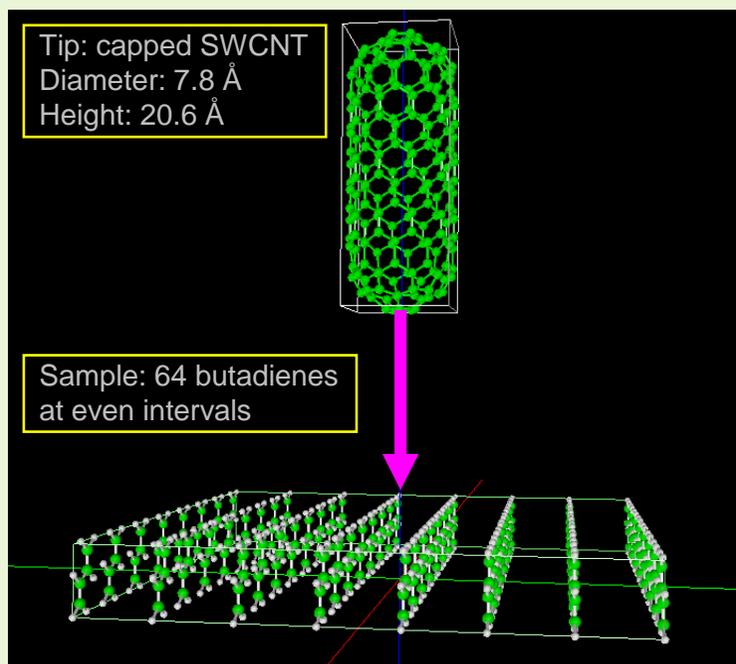


ジクロロベンゼン



ポルフィリン

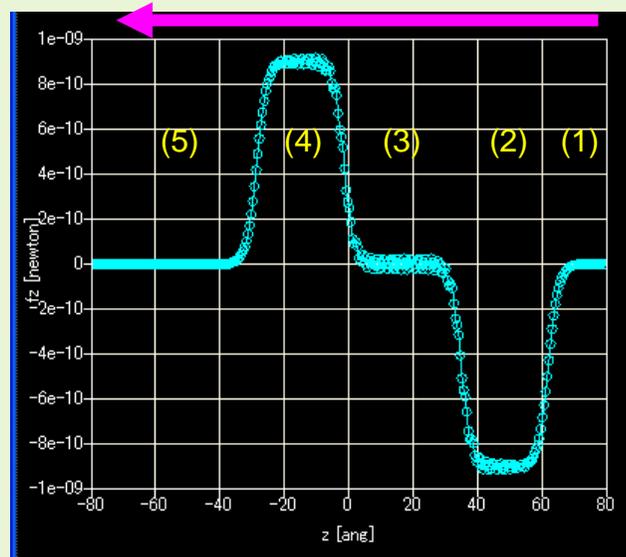
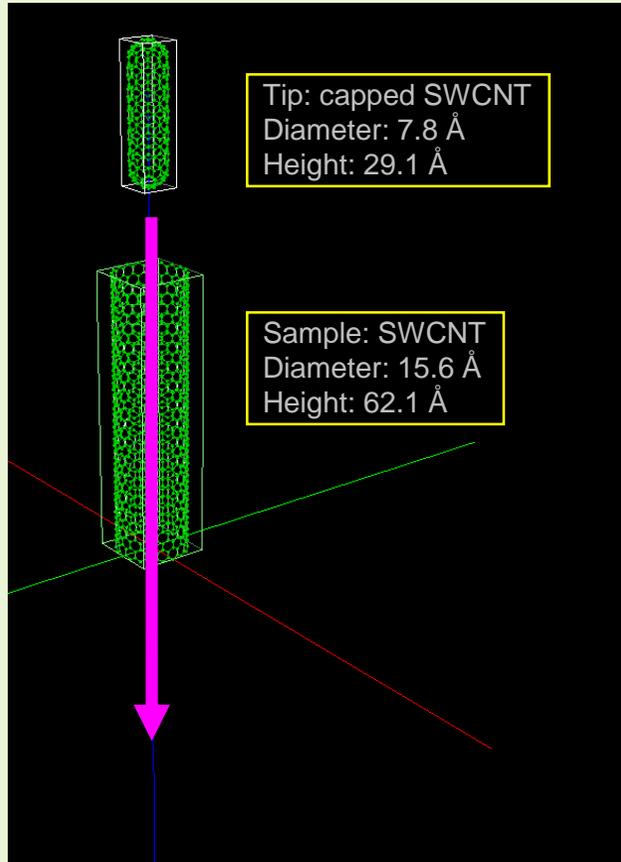
【MD】ブタジエン分子を基板上に並べ、CNT探針を接近させてフォース・カーブを測定



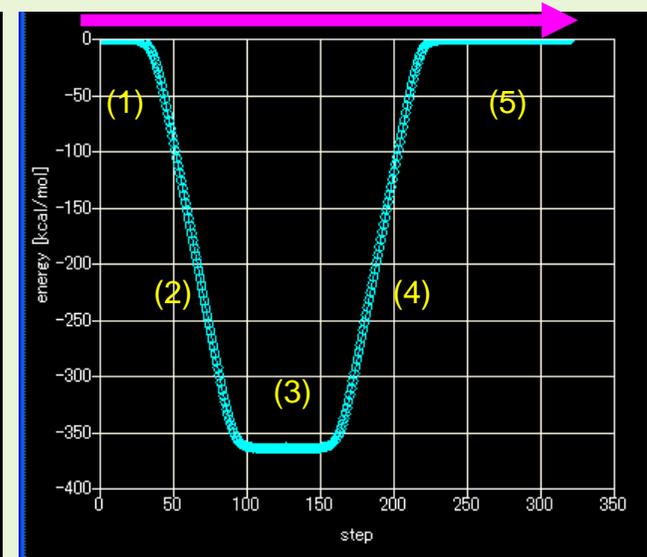
フォースカーブの計算結果。右上は拡大図。
横軸は探針モデルの底部のz座標、縦軸はz軸上向きを正として探針が受ける力を表す。

探針の高さが7.5 Å付近で最も引力が高くなるようなフォースカーブが得られた。さらに接近させると探針－試料間の斥力が強くなっていく。所々にその斥力が急激に弱くなる箇所が見られる。これは、探針からの強い斥力によって試料の分子構造が変形したためと考えられる。

【MD】 細いCNT探針を太いCNT試料の内部に差し込んで、フォース・カーブを測定する



フォースカーブ。
横軸は探針モデルの底部のz座標、縦軸はz軸上向きを正として探針が受ける力を表す。



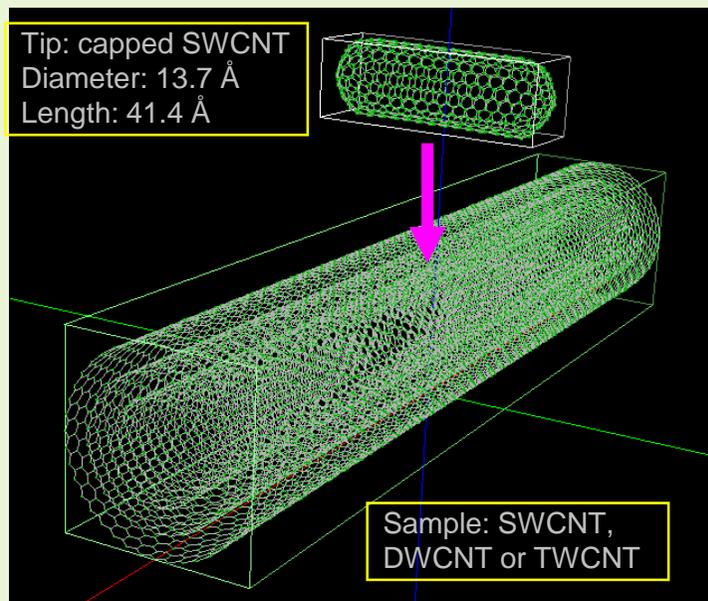
エネルギーの変化。
横軸はシミュレーションのステップ数、縦軸は系のエネルギーを表す。

- (1) 細いCNTと太いCNTとの間に相互作用がない領域。
- (2) 細いCNTが太いCNTに入り込んでいく領域。
- (3) 細いCNTが太いCNTに完全に包まれ、筒の内部を移動している領域。
- (4) 細いCNTが太いCNTから出て行く領域。
- (5) 細いCNTと太いCNTとの間に相互作用がない領域。

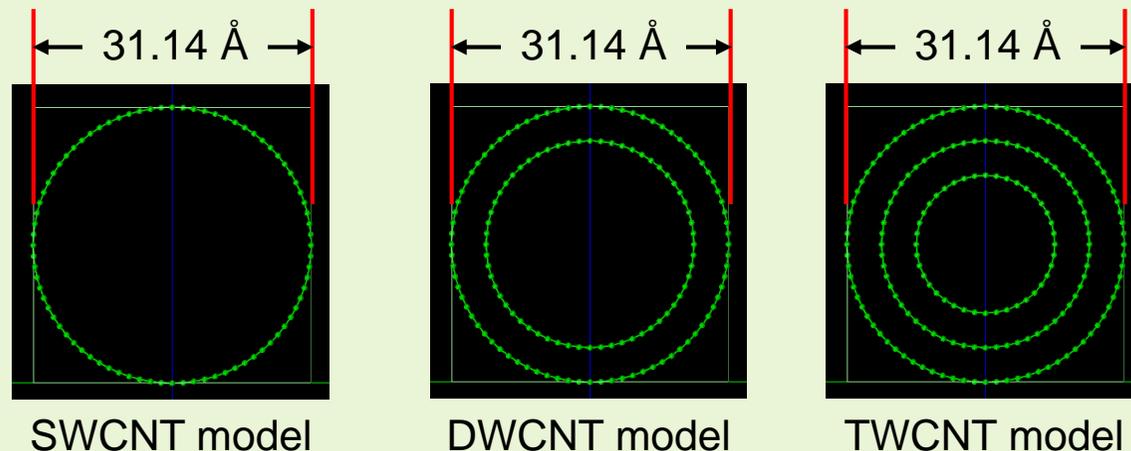
(2)と(4)では力の向きが逆転している。どちらの場合も細いCNTを太いCNTへ引き入れようとする力が働いている。つまり、細いCNTが太いCNTの内部に存在するほうがエネルギー的に安定であることを意味している。

(3)の領域では、細いCNTが筒の内部を移動している間、探針が受けるz方向の力が非常に小さい。つまり、筒の内部にいる限りz方向には自由に動きやすいことを意味している。

【MD】1層、2層、3層カーボンナノチューブの側面を押し込んでフォース・カーブを測定(1/2)



Cross section of sample models



Interlayer distance = 3.89 Å^(*1).

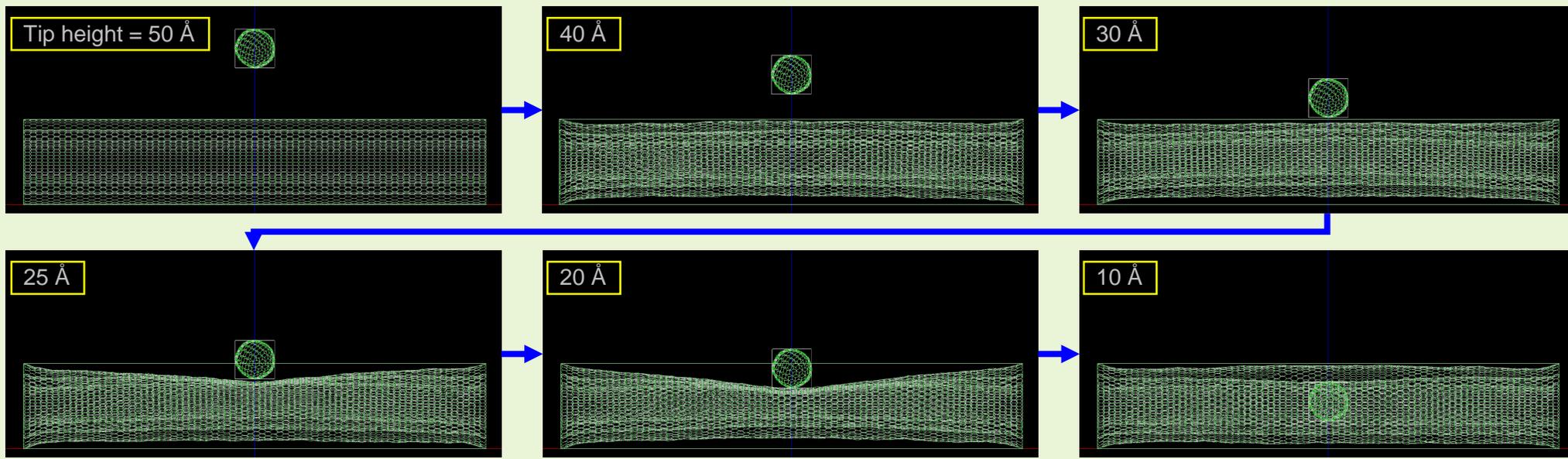
The sample models can be deformed,
but the atoms at both edges can not.
The tip model can not be deformed.

MM3 force field parameter
Atom ID 2 (C_{sp2} alkene) was assigned.

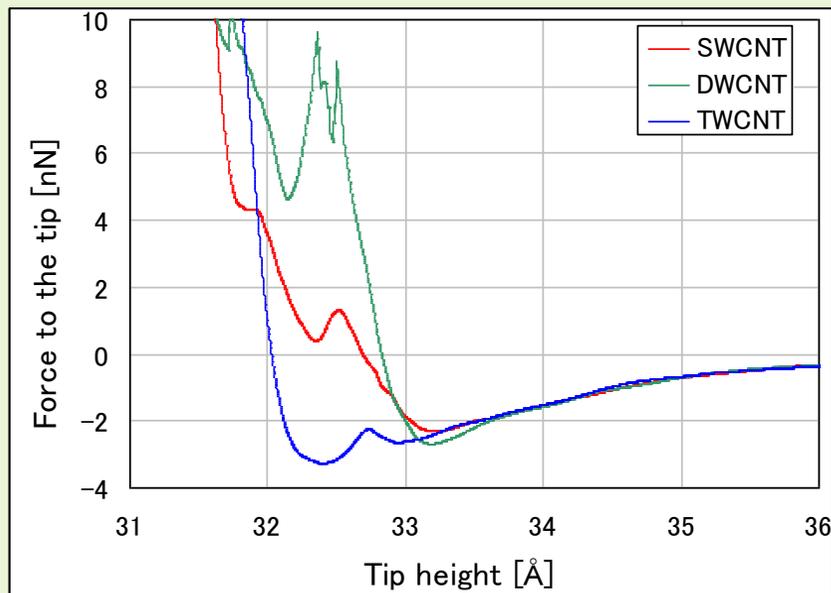
	Chiral Vector	Diameter(Å)	Length (Å)
1 st CNT (Outermost)	(40, 0)	31.14 Å	168.03 Å
2 nd CNT	(30, 0)	23.35 Å	168.03 Å
3 rd CNT (Innermost)	(20, 0)	15.57 Å	168.03 Å

(*1) A little larger than the mesured distance 3.4 Å [1].
[1] Sumio Iijima, Nature 354 (1991) 56.

【MD】1層、2層、3層カーボンナノチューブの側面を押し込んでフォース・カーブを測定(2/2)



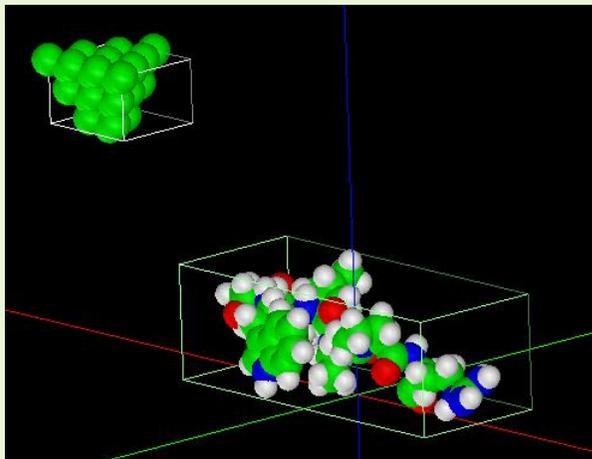
Bankrupted



探針が試料に近づくと、探針が受ける力は引力から斥力に転じる。斥力のカーブがSWCNTでは緩やかなのに対してDWCNT, TWCNTでは急激に立ち上がる。つまり、SWCNTは横から押し込まれると弱く反発するのに対して、DWCNTやTWCNTは強く反発する。内側にあるCNTが支えとなって反発力を強めていると推察される。

【MD】抗血管新生ペプチドのAFM像シミュレーション

シミュレートモデル



探針: ダイヤモンド探針

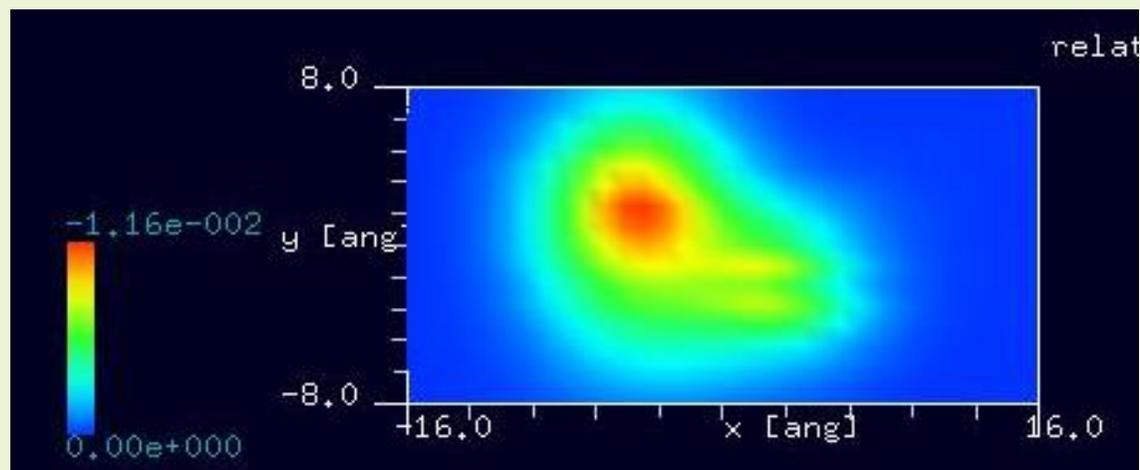
試料: ペプチドATWLPPR

(PDB: 2jp5)

スキャンエリア: $32 \text{ \AA} \times 16 \text{ \AA} \times 5 \text{ \AA}$

分子の変形を考慮に入れた、
周波数シフトAFM像シミュレーション

N端側のA, T残基を固定。他は変形可。



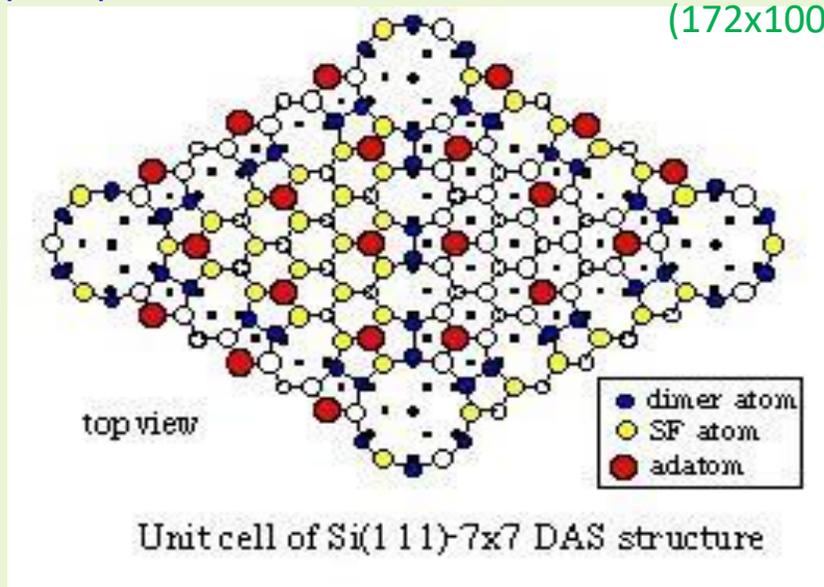
【DFTB】 Bardeenの摂動法とDFTB法によるSTM像のシミュレーション

-トンネル電流の計算-

$$I(\mathbf{R}, V) = \frac{2\pi e}{\hbar} \int_{E_F^L}^{E_F^R} \sum_{ii'jj'} G_{ii'}^S(E) J_{ij'}(\mathbf{R}) G_{jj'}^T(E + eV) J_{ji}(\mathbf{R}) dE$$

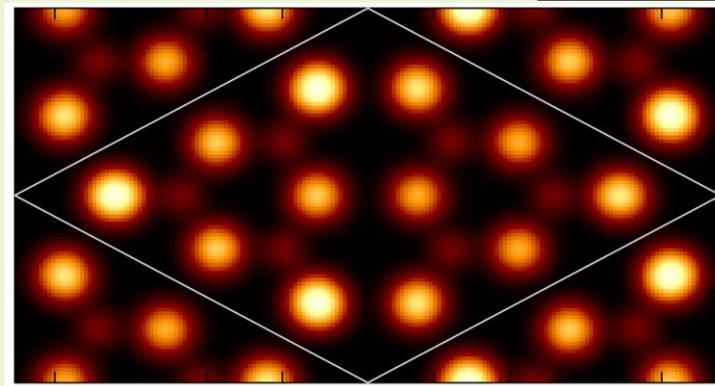
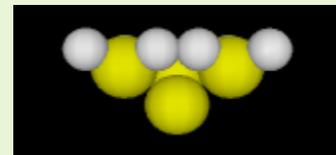
Si(111)-7x7 DAS 構造

計算時間 1.5 時間
(172x100 pixels)

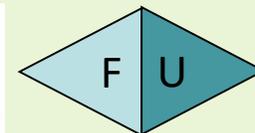
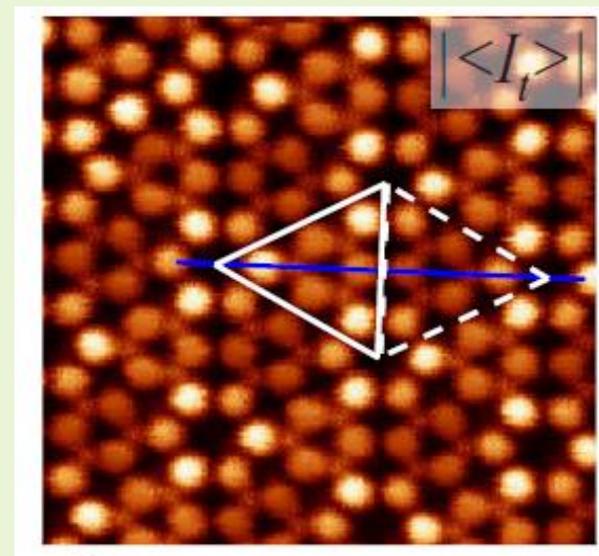


DFTB STMシミュレーション

Si₄H₉ tip; 探針高さ = 4.0 Å



実験 by Sawada et al. (2009)

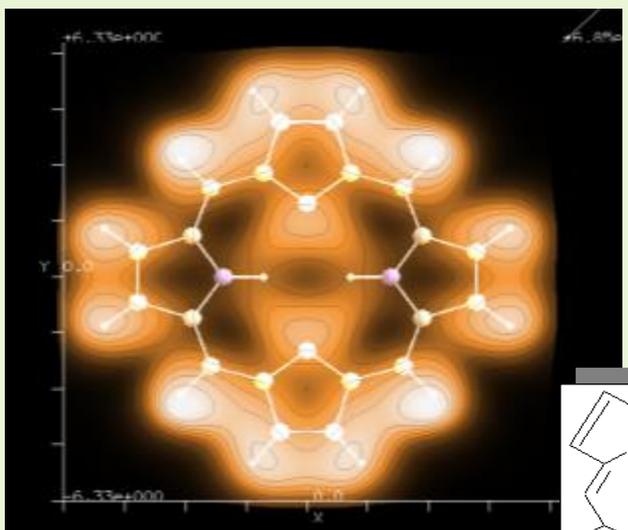
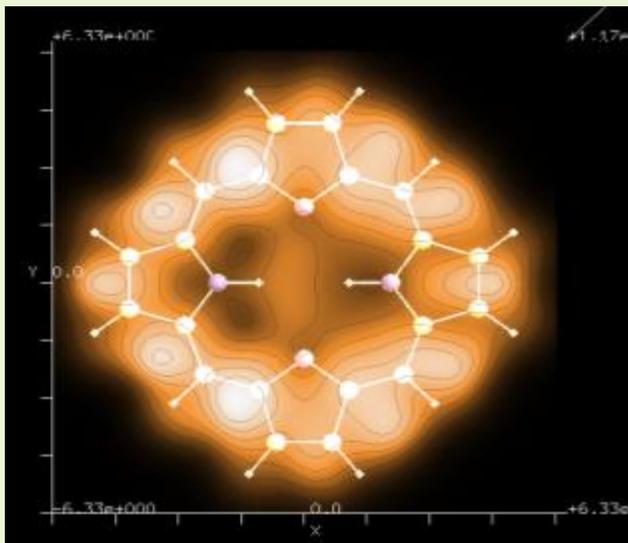


F領域とU領域の明るさの違いを再現
レストアトムがわずかに見えることを再現

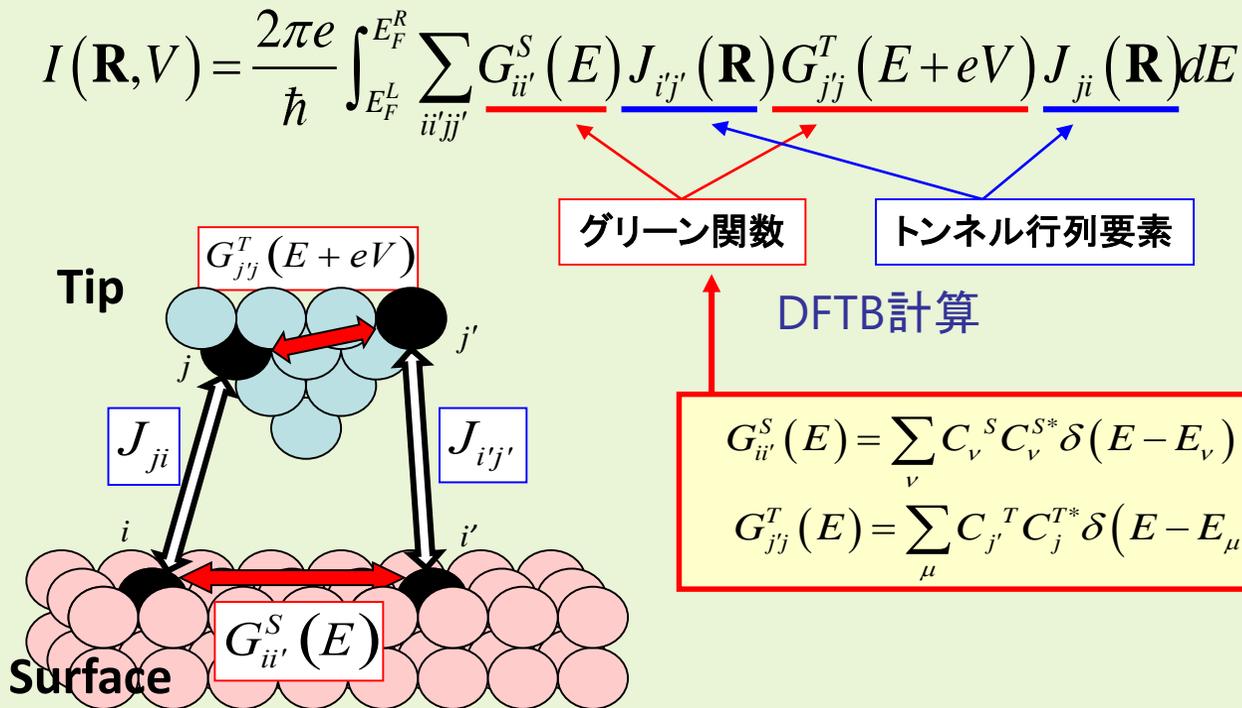
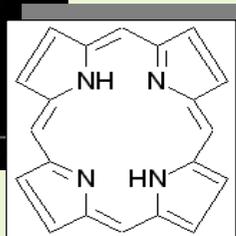
【DFTB】ポルフィリンのSTM像

DFTB (W tip : 6s,5d orbitals)

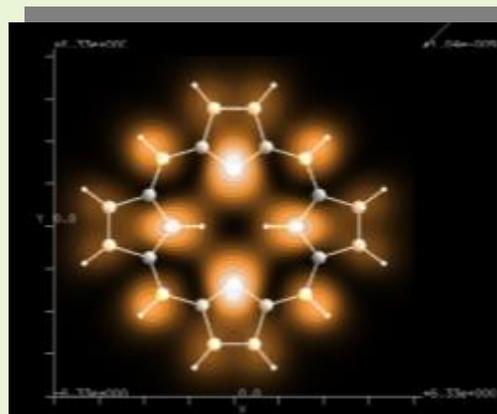
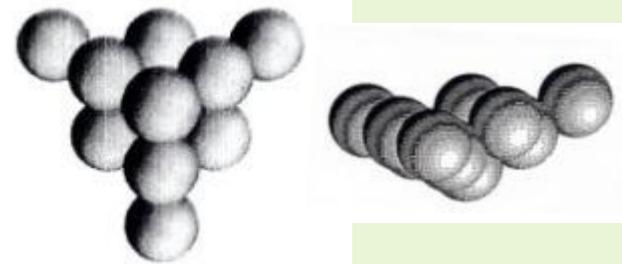
STM 像のシミュレーション



(W tip: 6s orbital)



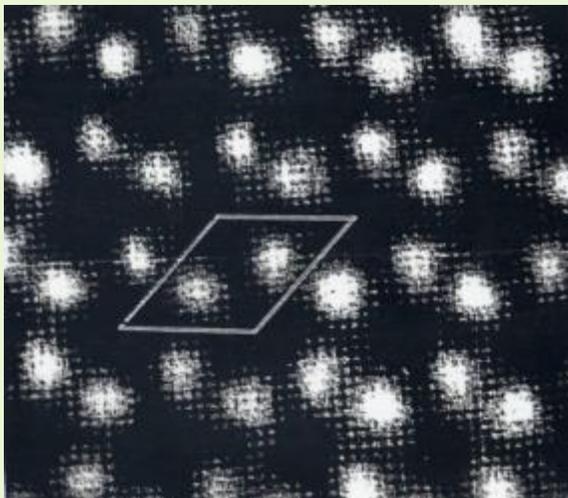
W₁₀[111] 探針模型



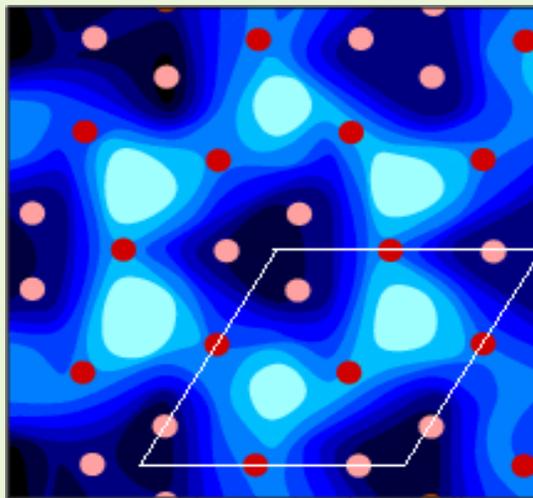
【DFTB】SPMは対象の何をどう見るのか？

Si $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 表面の場合

STM 実験



STM 理論

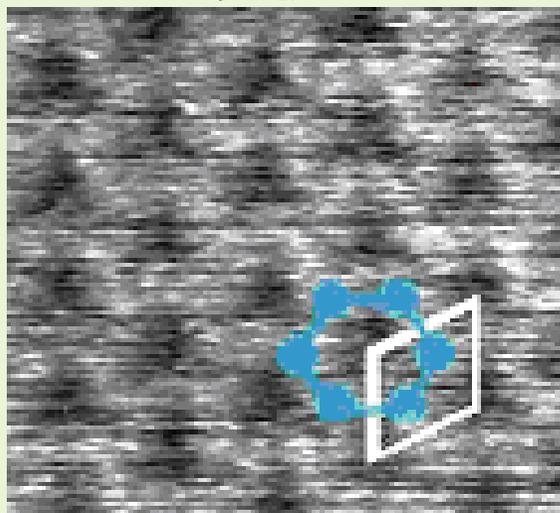


S. Watanabe, M. Aono and M. Tsukada, Phys. Rev. B. 44, 8330 (1991)

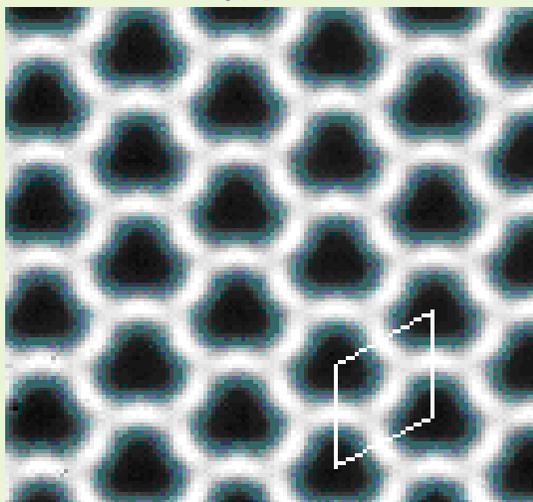
同じ表面だが
STM像とAFM像は
全く異なる??

STM 像は、非占有波動関数の
振幅を見ている。

ncAFM 実験



ncAFM 理論

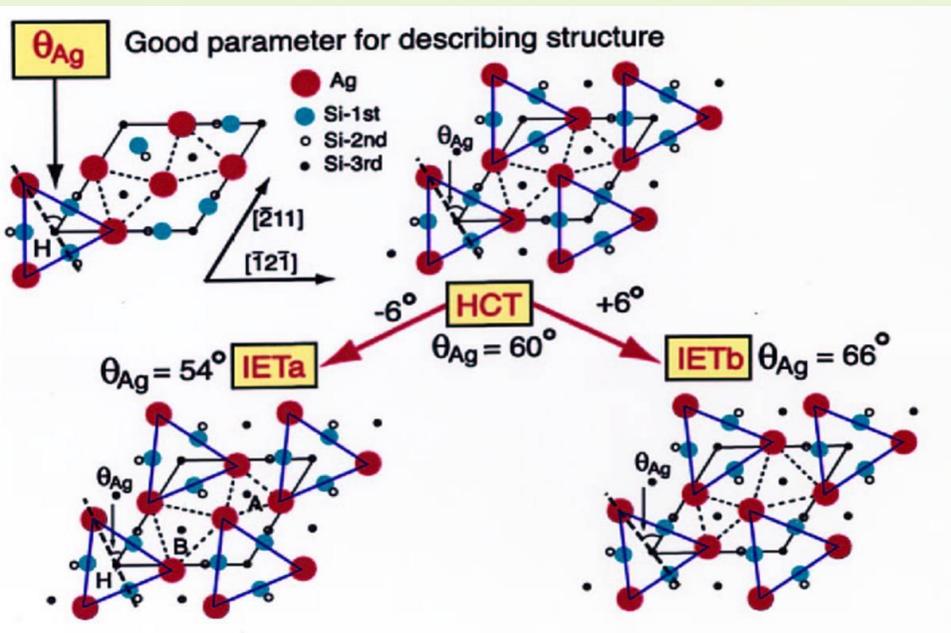


N. Sasaki, S. Watanabe, M. Tsukada, Phys. Rev. Lett. 88, 046106 (2002).

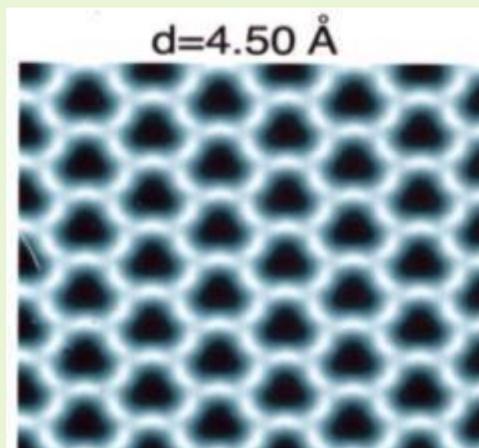
AFM像の再現は、理論計
算によって再現される
が.....

【DFTB】Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 表面のncAFM像の温度依存性

N. Sasaki, S. Watanabe, M. Tsukada,
Phys. Rev. Lett. 88, 046106 (2002).

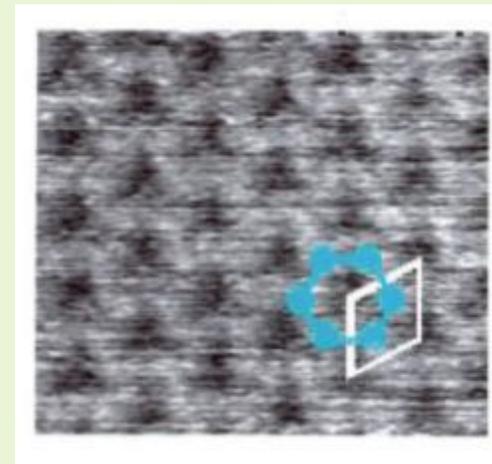


理論

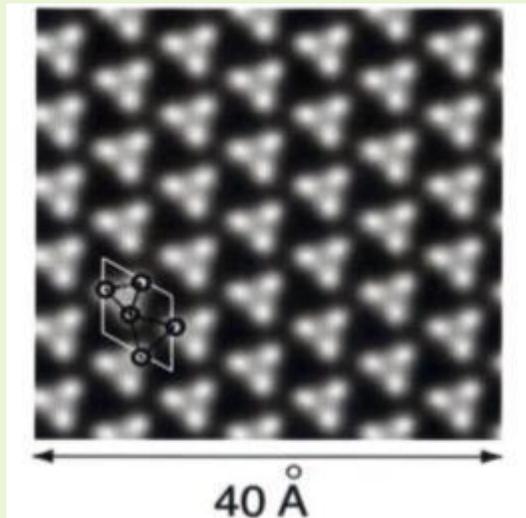


実験

By Prof. Morita $T=300K$

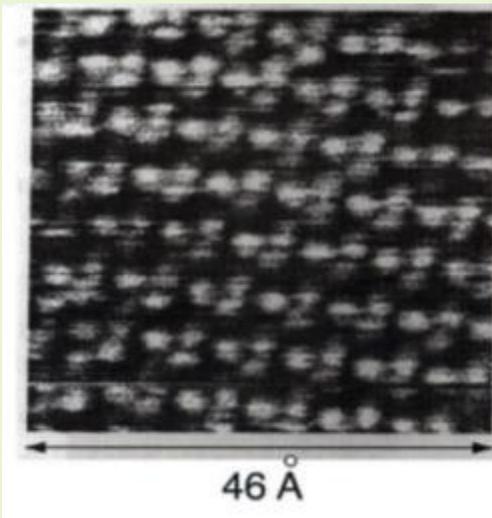


理論



実験

By Prof. Morita $T=6.2K$



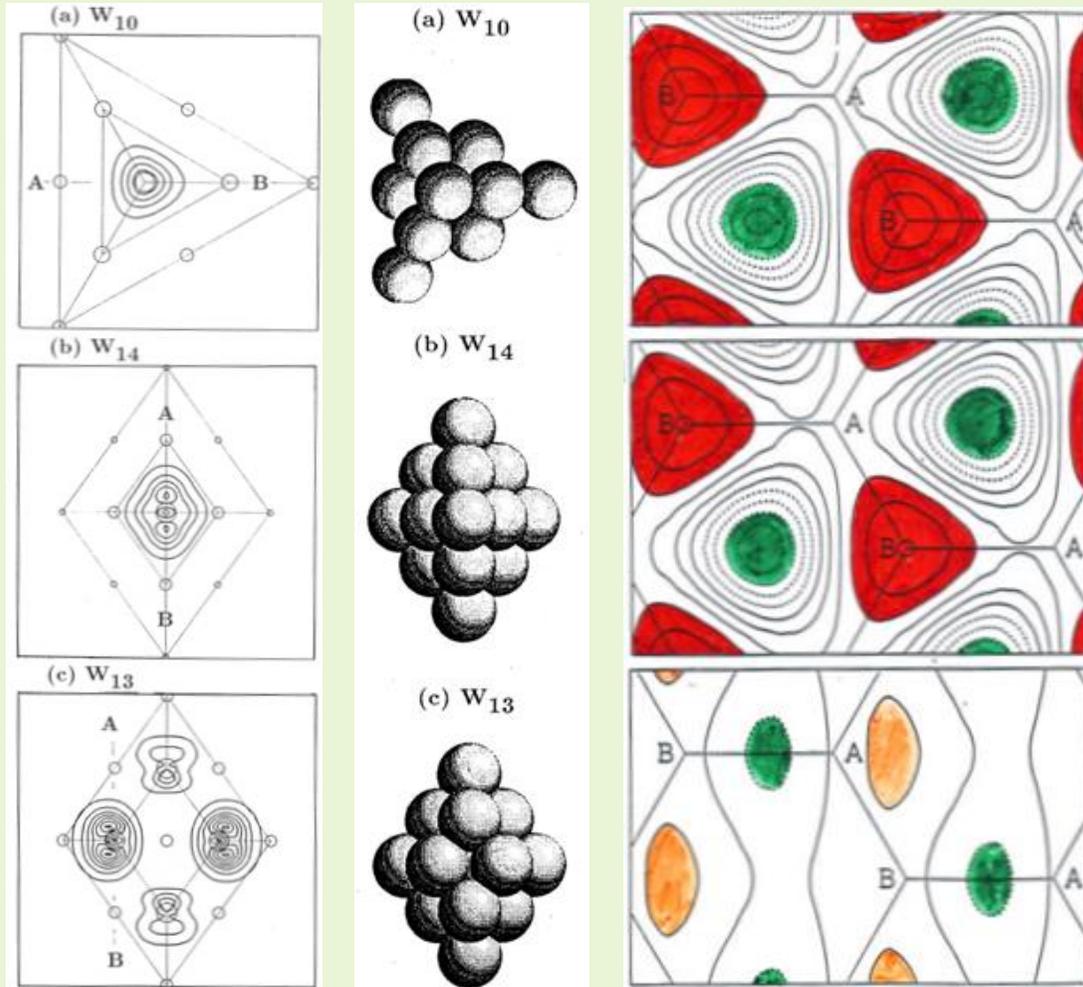
温度依存性は最外層銀原子の
構造揺らぎによって説明できる。



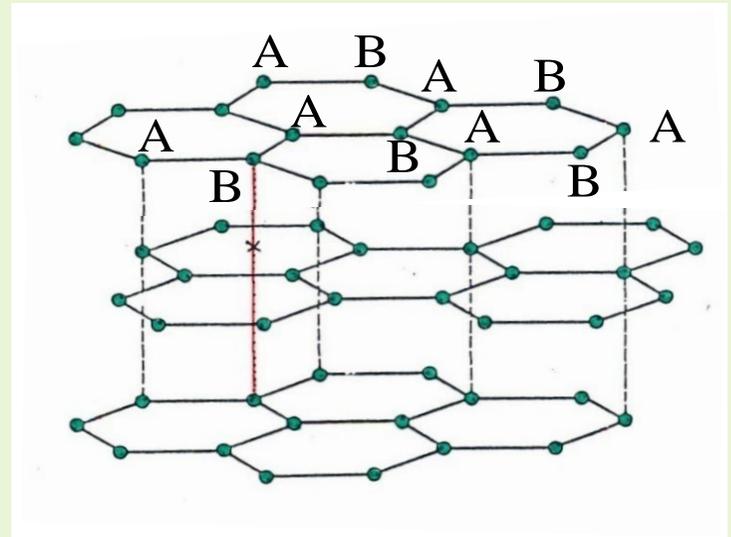
実験と理論の良い
一致が見られた。

【DFTB】探針形状の効果

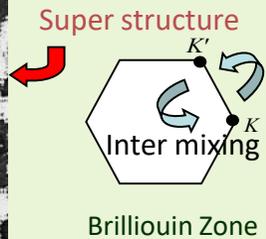
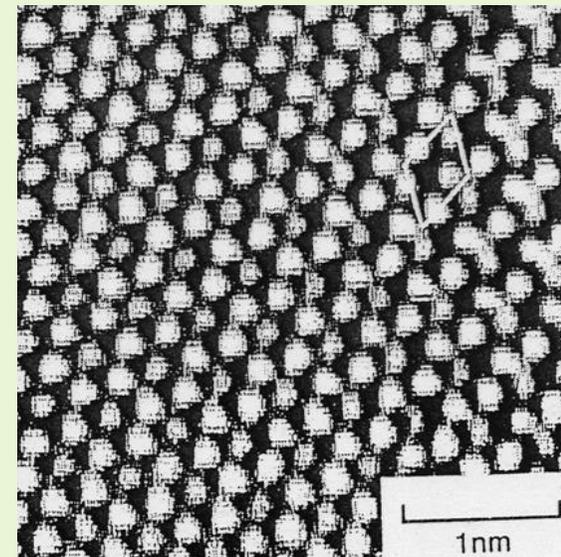
グラファイトのSTM像の場合



N. Isshiki, K. Kobayashi, M. Tsukada,
J. Vac. Sci. Technol. B 9(2), 475 (1991).



Nakagawa et al., Proc. Ann. Meeting of
The Phys. Soc. Jpn, (1989) 374

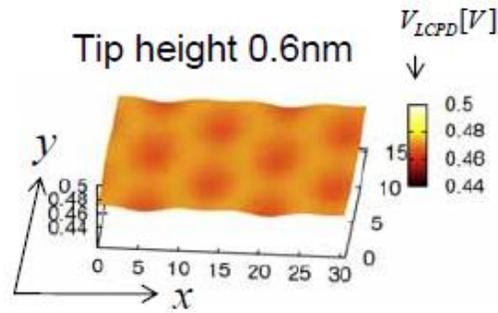


Brillouin Zone

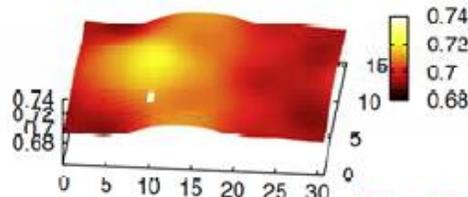
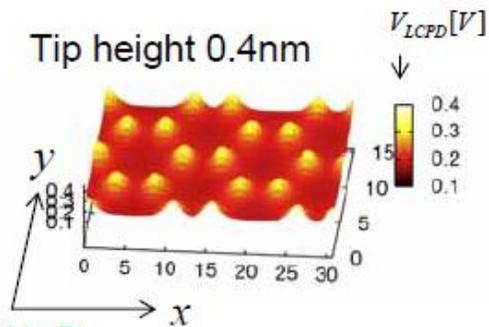
【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像

DFTB

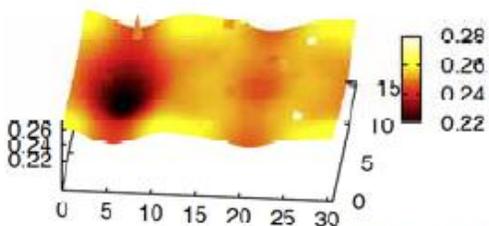
-局所接触電位差の分布像-



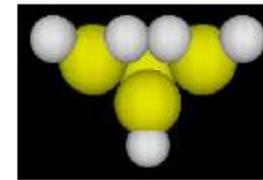
Si(100)c(4x2)



Al in Si(100)c(4x2)

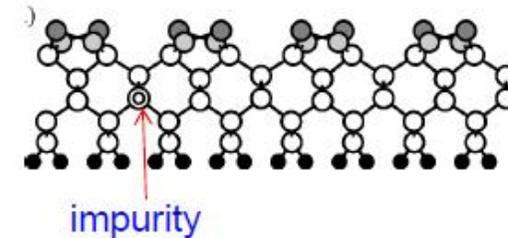
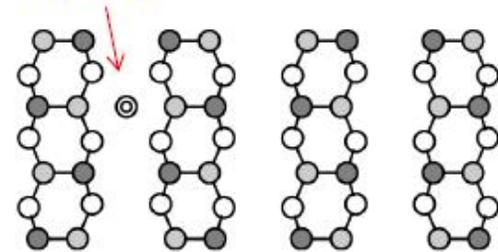


P in Si(100)c(4x2)



Si₄H₉ tip

impurity

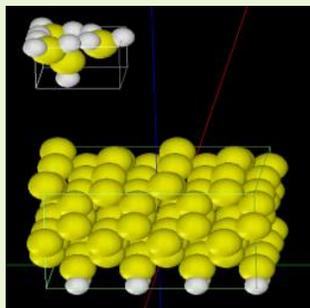


impurity

A.Masago et al, Phys. Rev. B 82 (2010)195433

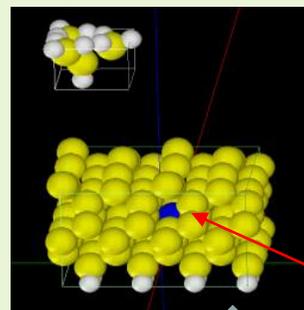
試料表面のごく浅い部分に不純物を持っているとしたシリコン表面を、KPFMで走査したときのシミュレーション結果。不純物の表面位置に原子スケールよりもやや大きいスポットが現れている。また、試料表面の原子によるスポットも確認することができる。

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像



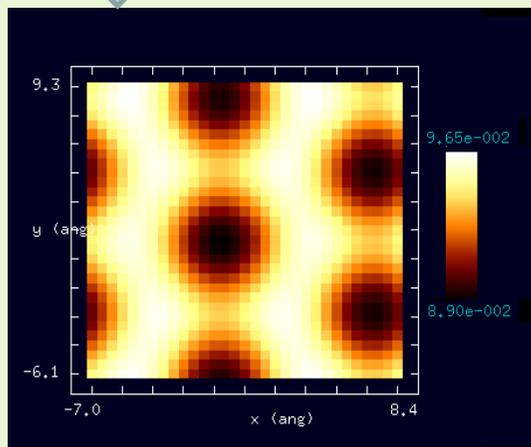
探針: H-Si₄H₁₀
試料表面: Si(001)-c(4x2)

探針-試料間の距離: 6 Å

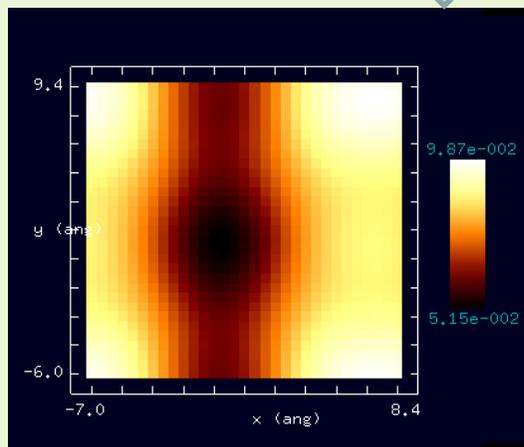


探針: H-Si₄H₁₀
試料表面:
Si(001)-c(4x2)に
窒素原子をドーブしたもの

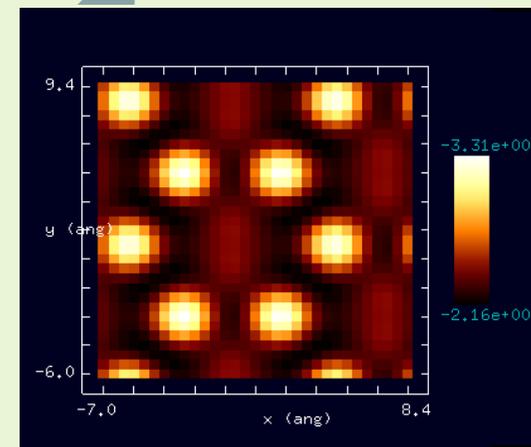
窒素原子



KPFM 局所接触電位差像
窒素原子ドーブなし



KPFM 局所接触電位差像
窒素原子ドーブあり
窒素をドーブすることで、
局所接触電位差が
マイナスにシフトしている。

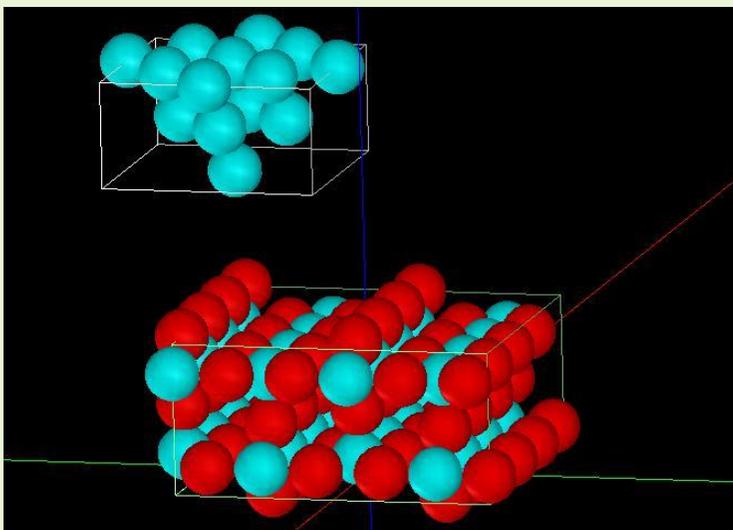


AFM 周波数シフト像
窒素原子ドーブあり
周波数シフト像では
原子の高さを反映した像が
得られている。

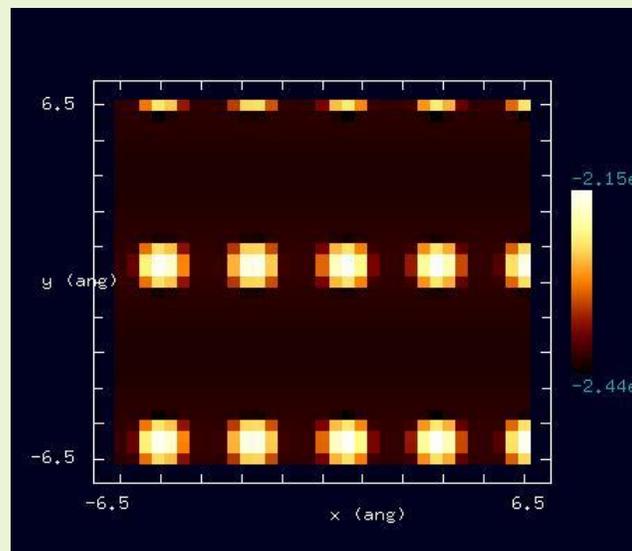
【DFTB】TiO₂(110)表面のLCPD像

DFTB KPFMを用いて、TiO₂(110)表面のLCPD像を計算

探針: Pt₁₄
試料表面: TiO₂(110)



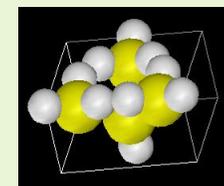
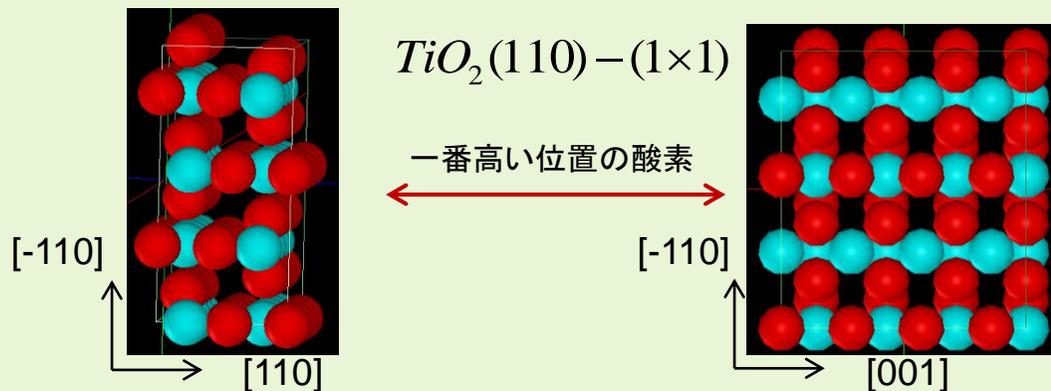
探針・試料モデル



LCPD像のシミュレーション結果

【DFTB】TiO₂(110)面のAFM, KPFM観察とシミュレーション

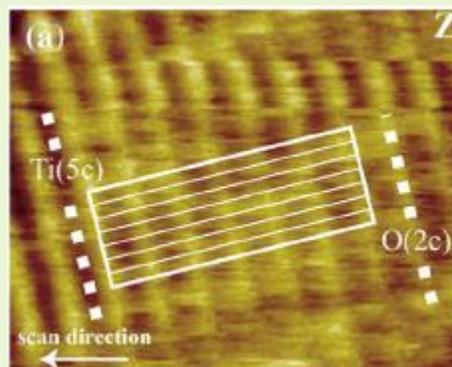
探針: Si₄H₁₀
試料: TiO₂(110)-(1x1)



Si₄H₁₀

探針

実測画像



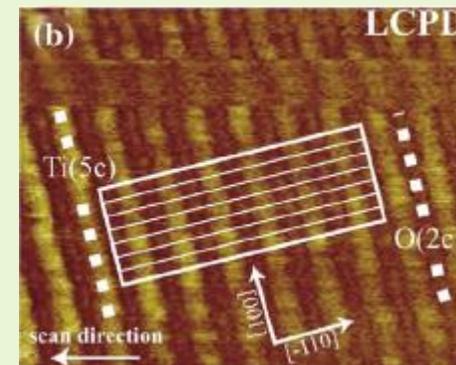
AFM



Surface Science Reports, 66, (2011),1-27

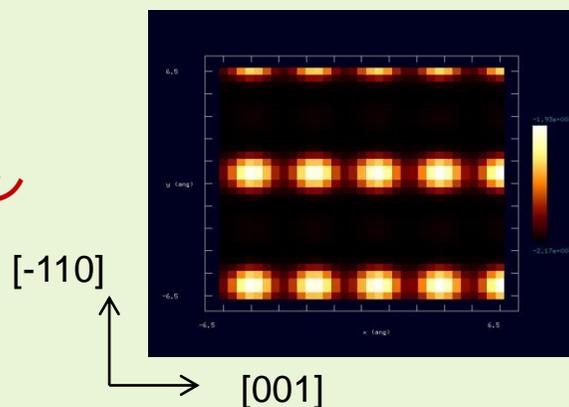


KPFM

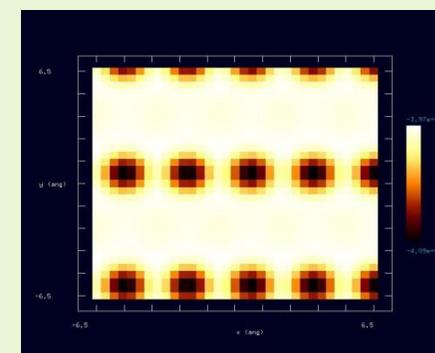
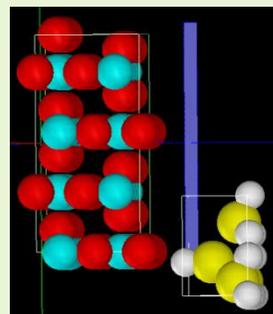


DFTB

シミュレーション
結果



AFM 探針-試料間の距離3.5 Å

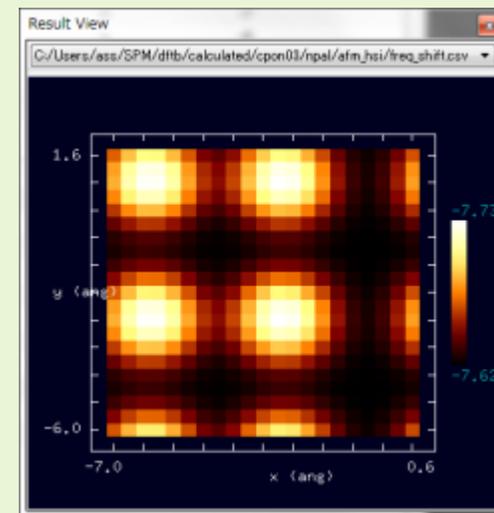
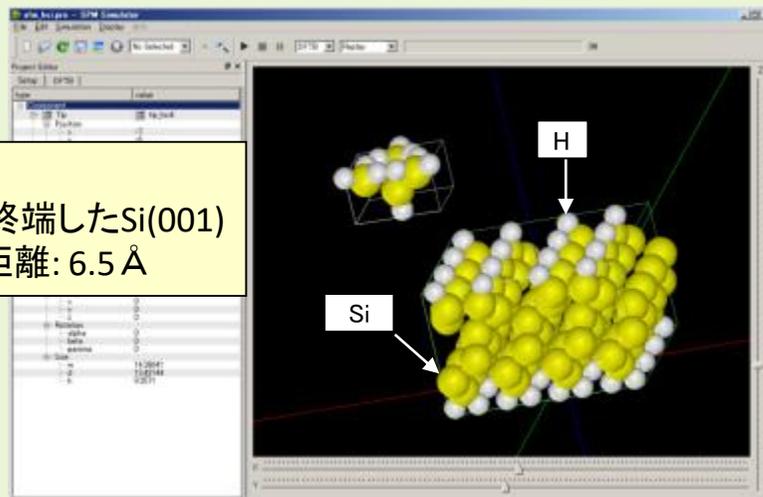


KPFM 探針-試料間の距離2.5 Å

【DFTB】周波数シフトAFM像、KPFM像の計算例

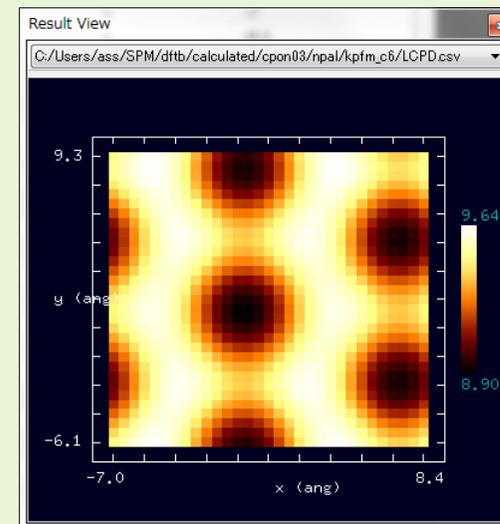
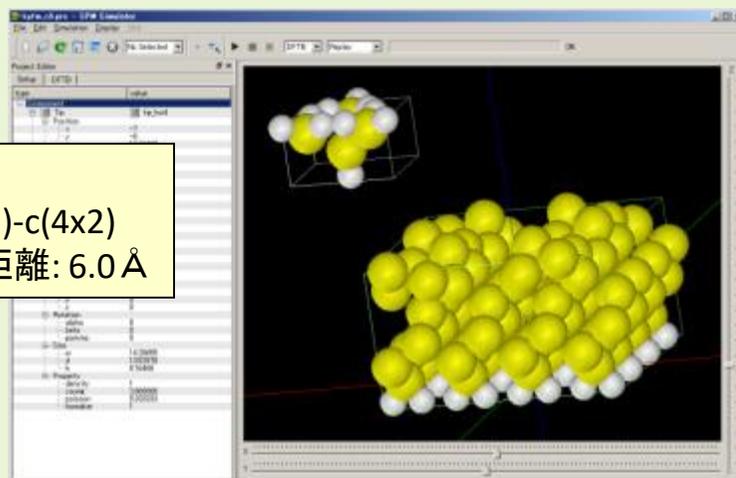
DFTB 周波数シフト像のシミュレーション

探針: Si_4H_{10}
試料表面: 水素終端したSi(001)
探針-試料間の距離: 6.5 \AA



DFTB 接触電位差像のシミュレーション

探針: Si_4H_{10}
試料表面: Si(001)-c(4x2)
探針-試料間の距離: 6.0 \AA

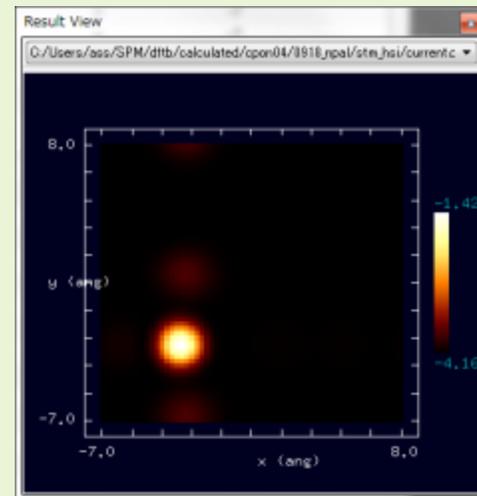
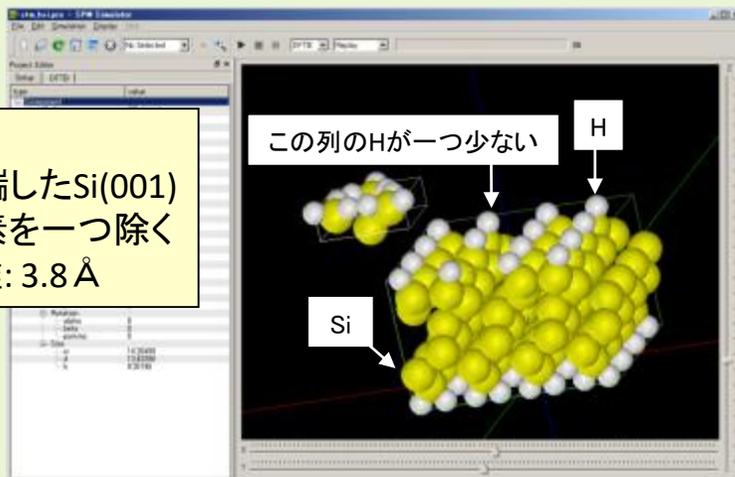


表面のアップダイマーを繋ぐようにした電位差の大きい領域が見られる。

【DFTB】トンネル電流像、トンネル電流スペクトルの計算例

DFTB トンネル電流像 (STM) のシミュレーション

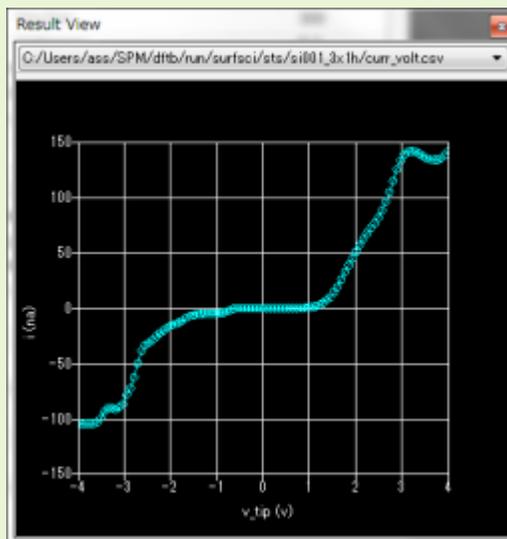
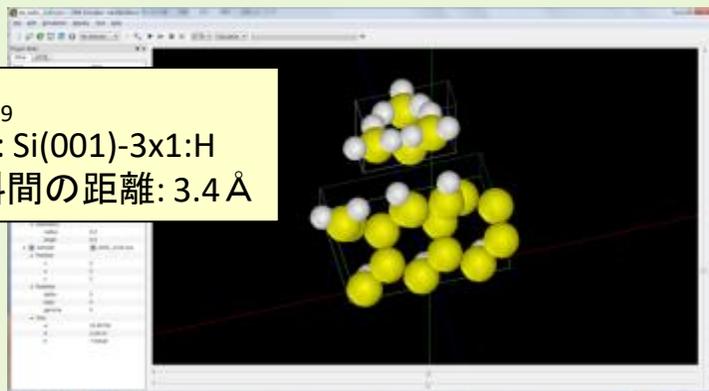
探針: Si_4H_9
試料表面: 水素終端した $\text{Si}(001)$
表面から水素を一つ除く
探針-試料間の距離: 3.8 \AA



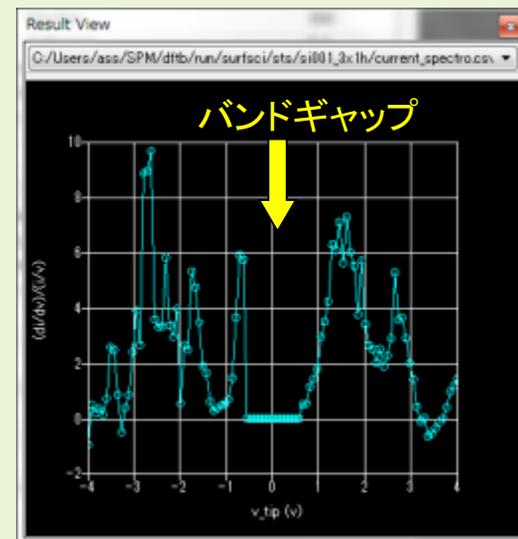
水素が抜けている位置にダングリングボンドがあることにより、電流値が大きくなるのが分かる。

DFTB トンネル電流スペクトル (STS) の計算

探針: Si_4H_9
試料表面: $\text{Si}(001)-3 \times 1:\text{H}$
探針-試料間の距離: 3.4 \AA



I-V特性曲線



$(dI/dV)/(I/V)$ vs. V

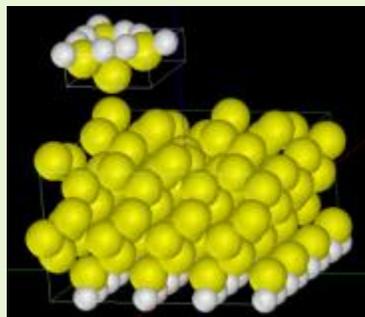
横軸は試料に対する探針の電圧

【DFTB】 Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション

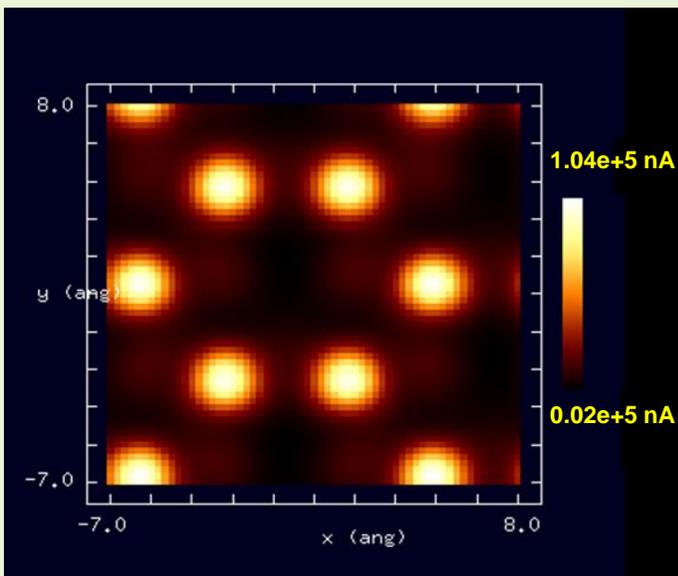
DFTB

探針・試料モデル

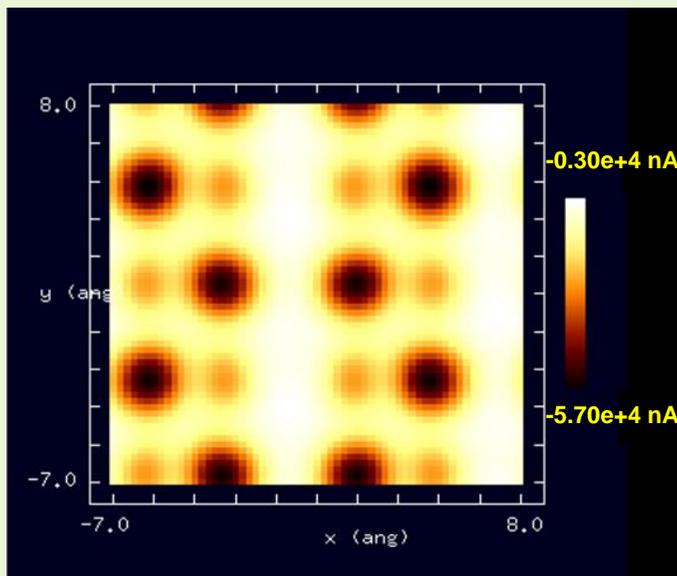
探針: Si_4H_9
試料表面: Si(001)-c(4x2)
探針-試料間の距離: 2.32 Å



STM像の計算結果



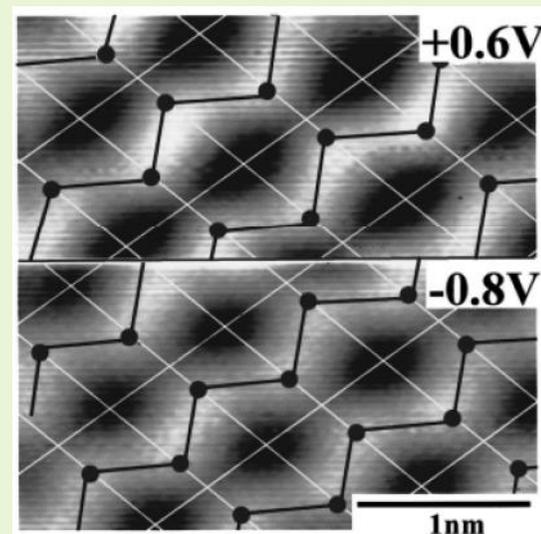
バイアス電圧 +1.0V



バイアス電圧 -1.0V

バイアスによって、蜂の巣構造が反転

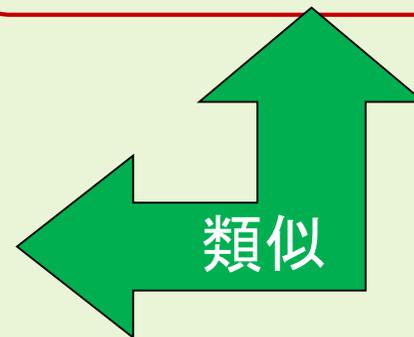
実験



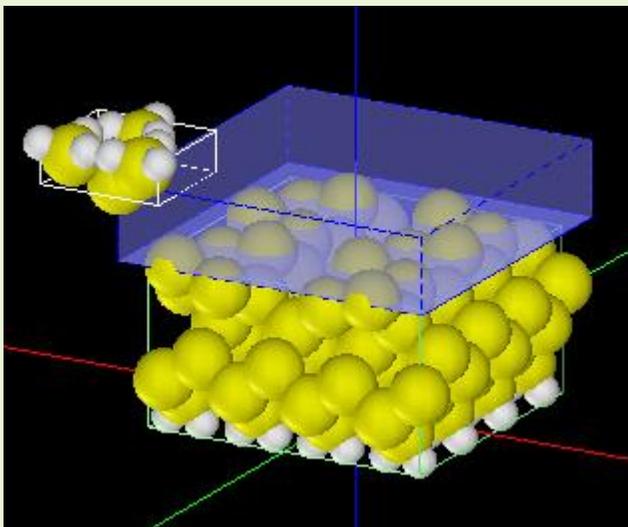
Si(001) 表面のトンネル電流像

バイアスの正負によって蜂の巣構造が反転することが知られている。

K. Hata, S. Yasuda, and H. Shigekawa, Phys. Rev. B **60**, 8164 (1999).



【DFTB】 Constant height STM image of Si(001)-c(4x2)

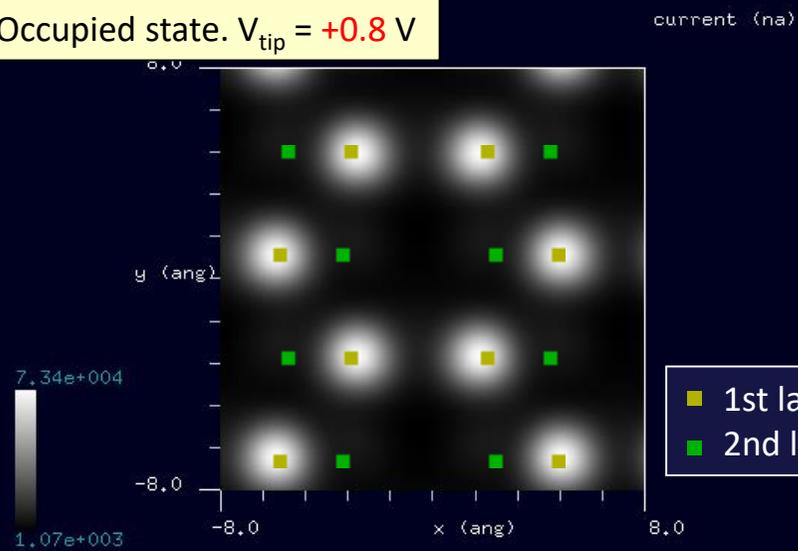


探針: Si_4H_9
試料: Si(001)-c(4x2)結晶表面
探針高さ: 2.6 Å

六角形のハニカム構造がバイアスの正負によって反転することを再現した。

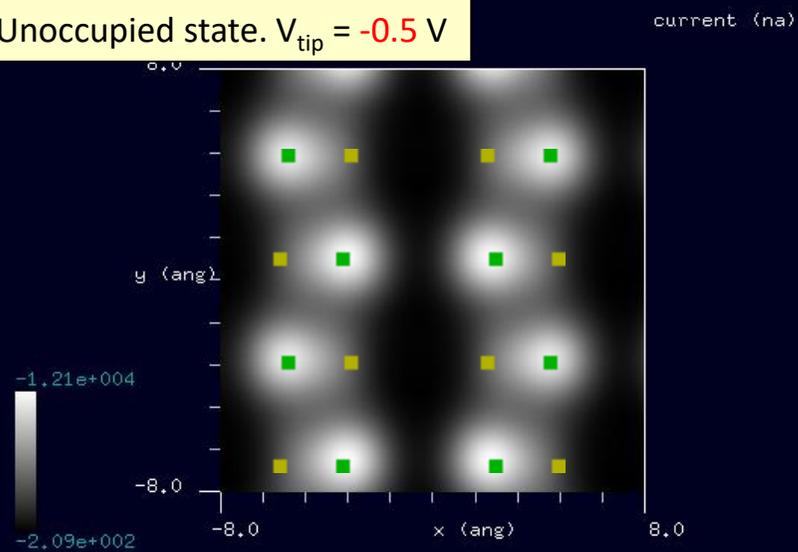
Constant height STM. Current map

Occupied state. $V_{\text{tip}} = +0.8 \text{ V}$

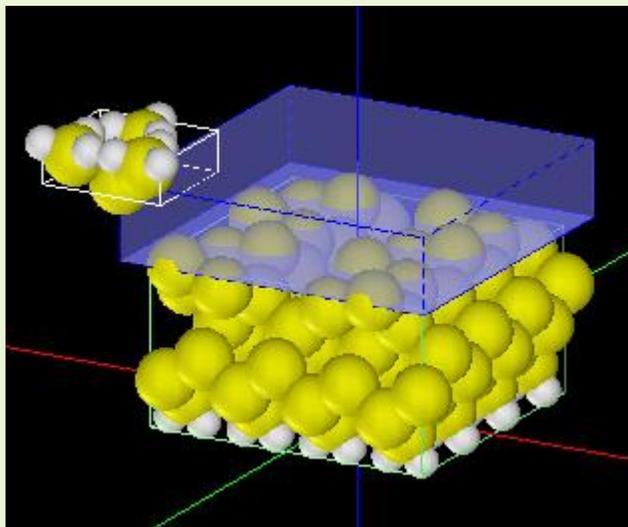


■ 1st layer
■ 2nd layer

Unoccupied state. $V_{\text{tip}} = -0.5 \text{ V}$



【DFTB】 Constant current STM image of Si(001)-c(4x2)



探針: Si_4H_9

試料: Si(001)-c(4x2)結晶表面

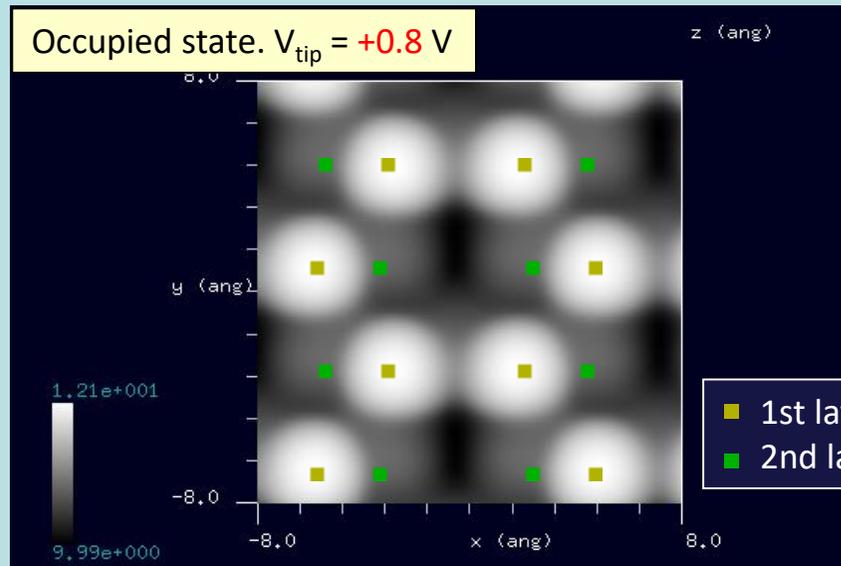
Current = 6000 nA

for both calculations

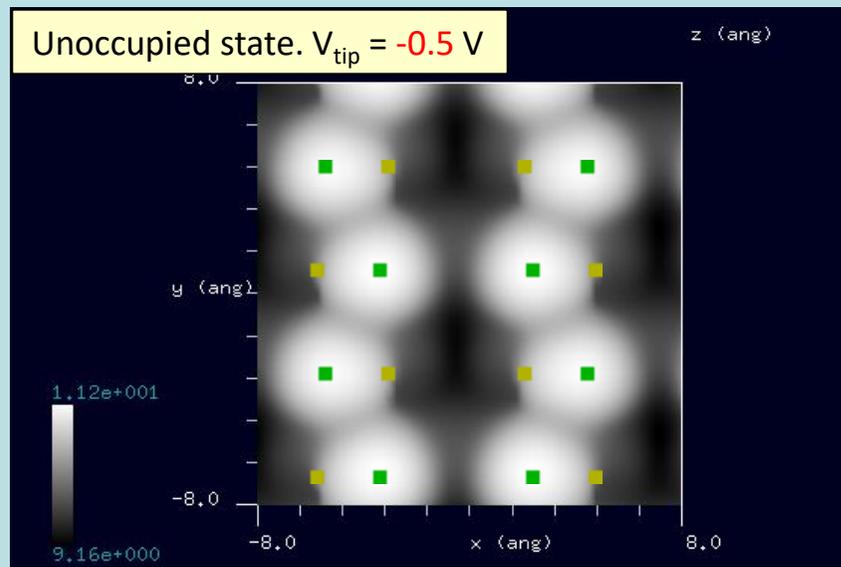
六角形のハニカム構造がバイアスの正負によって反転することを再現した。

Constant current STM topography

Occupied state. $V_{\text{tip}} = +0.8 \text{ V}$

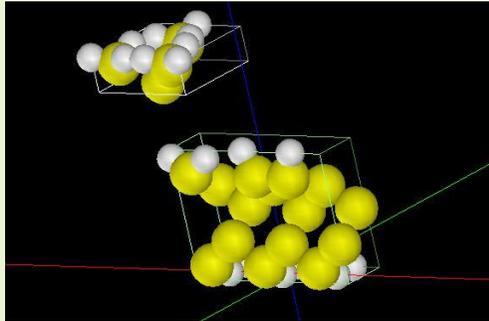


Unoccupied state. $V_{\text{tip}} = -0.5 \text{ V}$

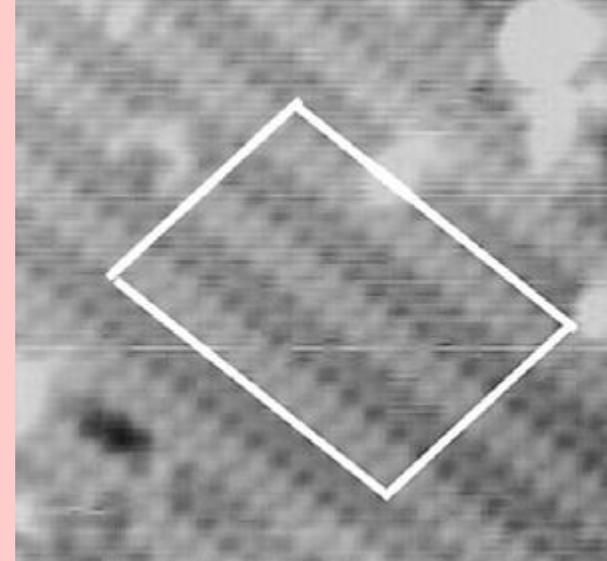


【DFTB】 Si(001)-3x1:H表面のconstant height STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant height STM
探針-試料間の距離:	3.4 Å
探針バイアス:	+2.73 V
スキャンエリア:	18.0 Å x 11.5 Å



cf. Experiment

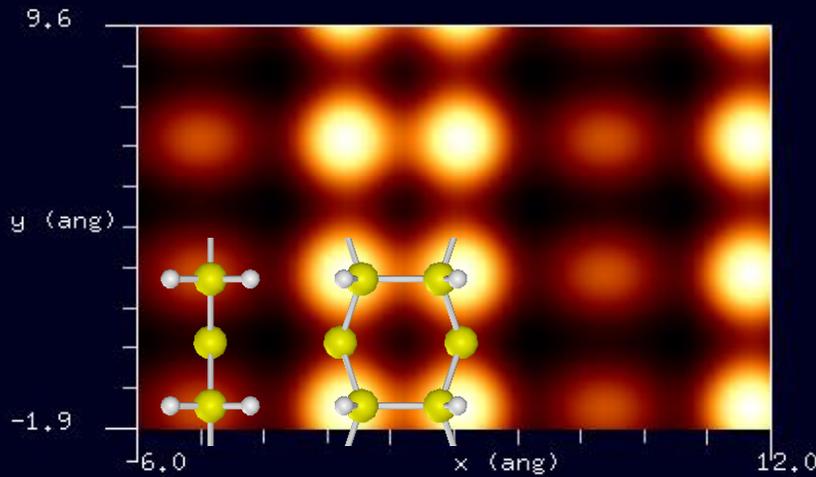


H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

九州工業大学学術機関リポジトリ

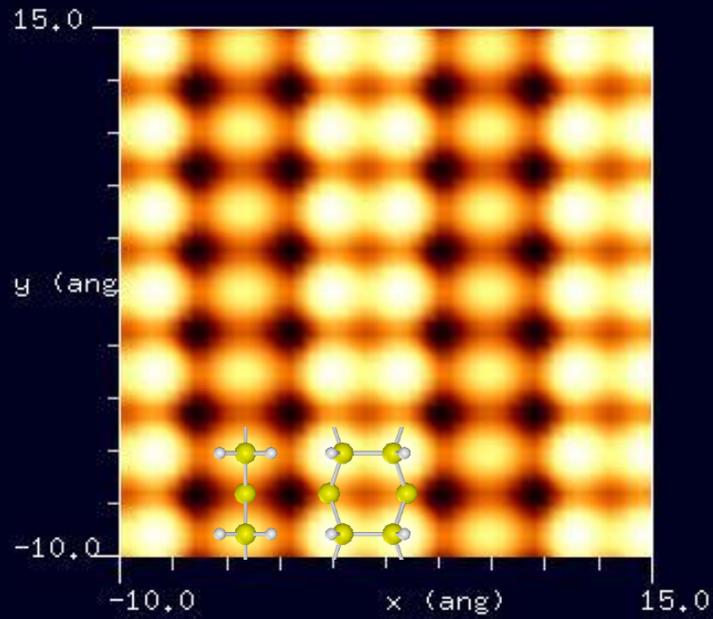
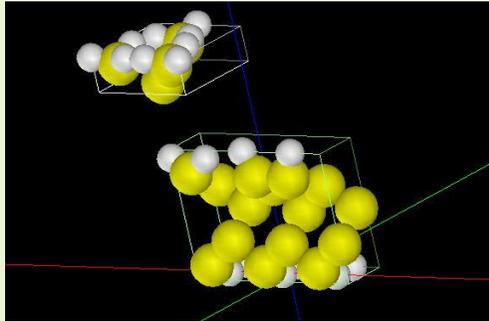
Khan, Arifur Rahman,

Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

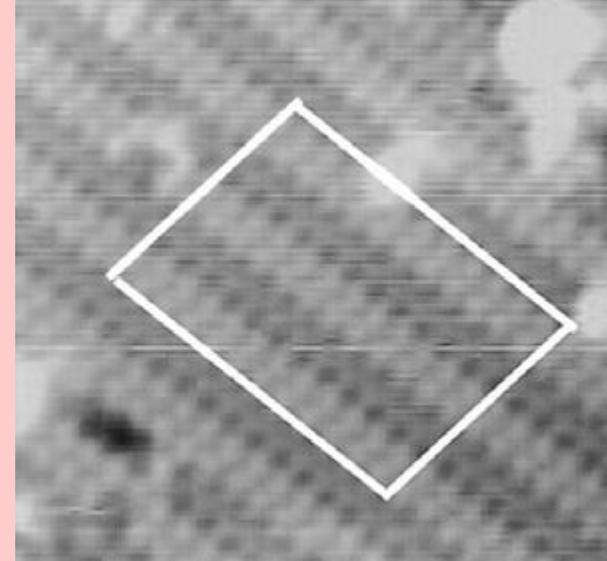


【DFTB】 Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	+2.73 V
電流値:	1000 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å



cf. Experiment



H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

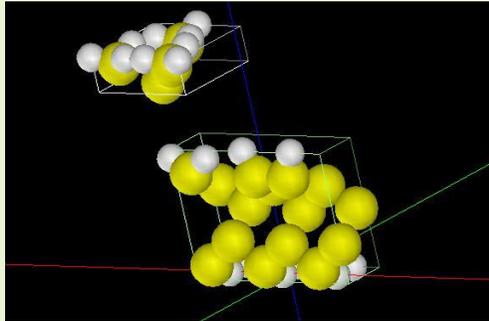
九州工業大学学術機関リポジトリ

Khan, Arifur Rahman,

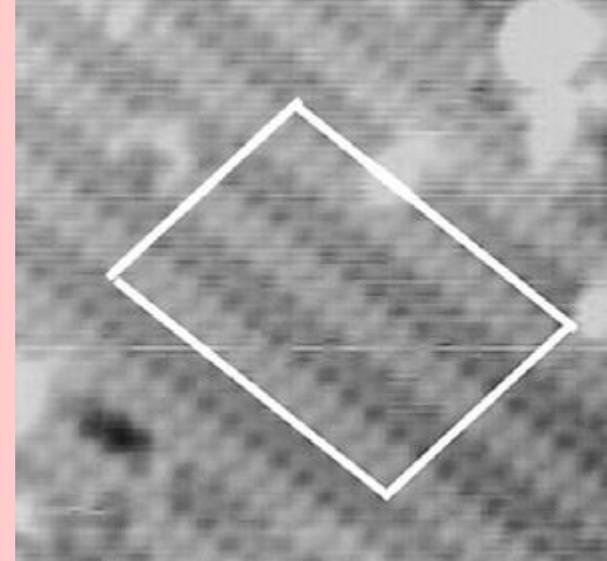
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si) surfaces. (2008)

【DFTB】 Si(001)-3x1:H表面のconstant height STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant height STM
探針-試料間の距離:	3.4 Å
探針バイアス:	+3.5 V
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å

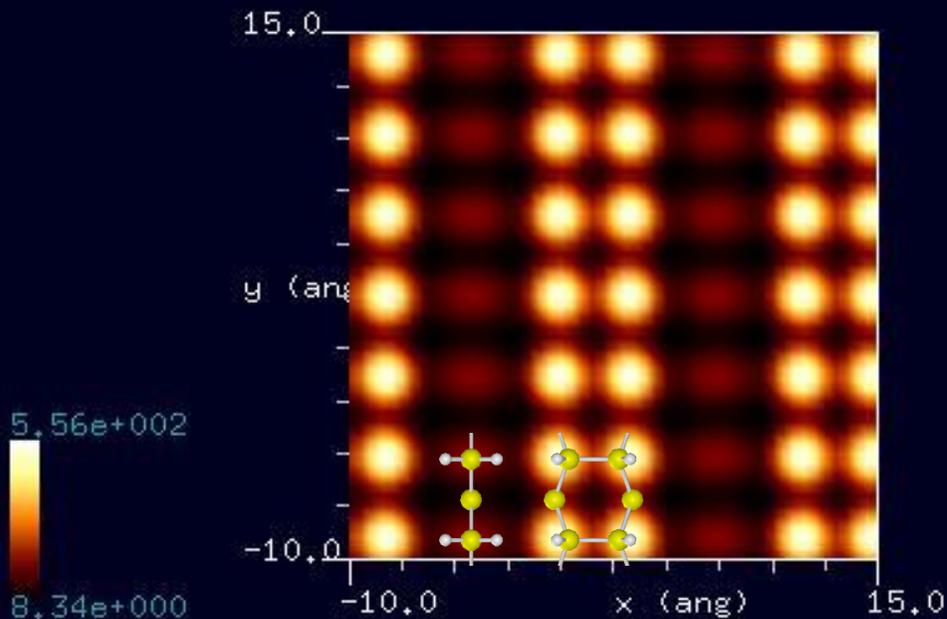


cf. Experiment



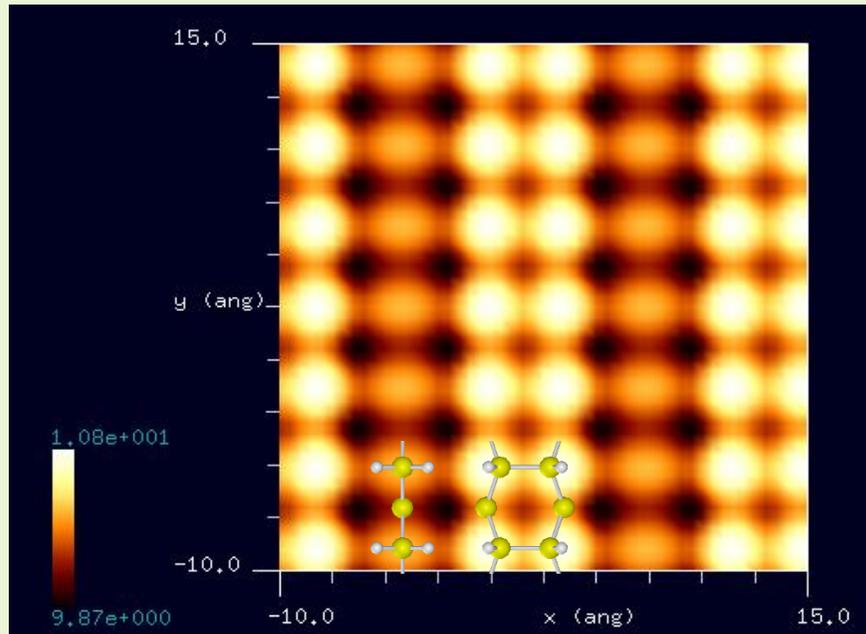
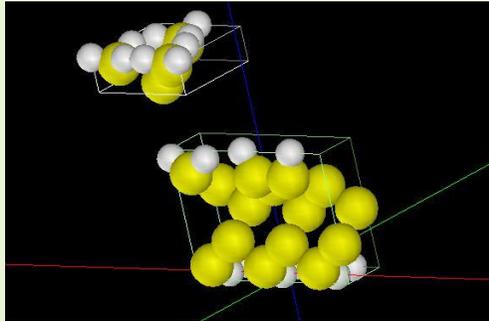
H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

九州工業大学学術機関リポジトリ
Khan, Arifur Rahman,
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

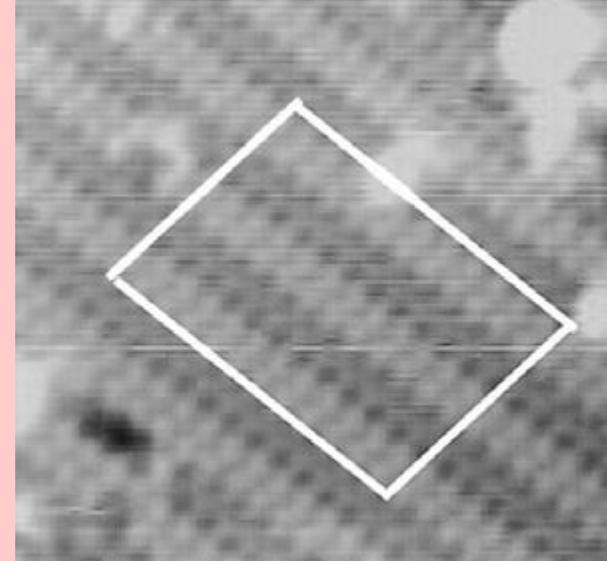


【DFTB】 Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	+3.5 V
電流値:	1000 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å



cf. Experiment

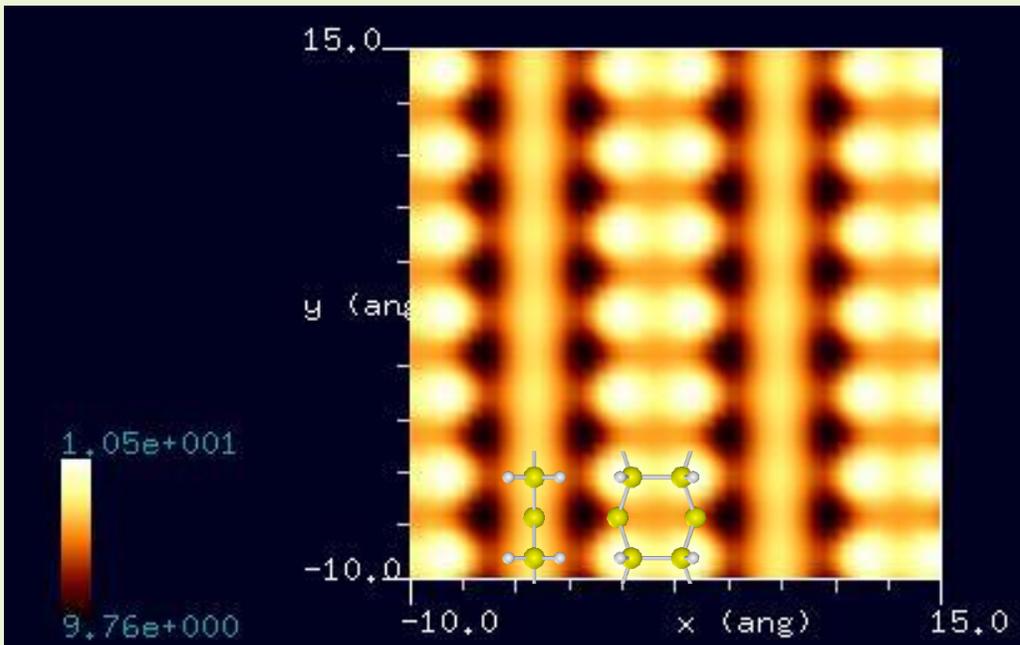
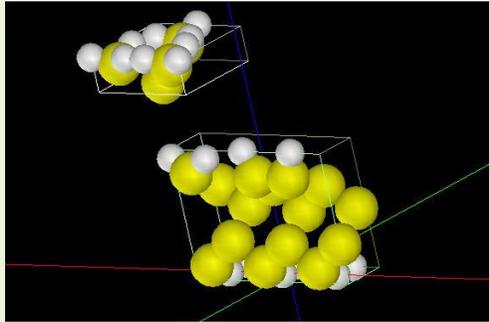


H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

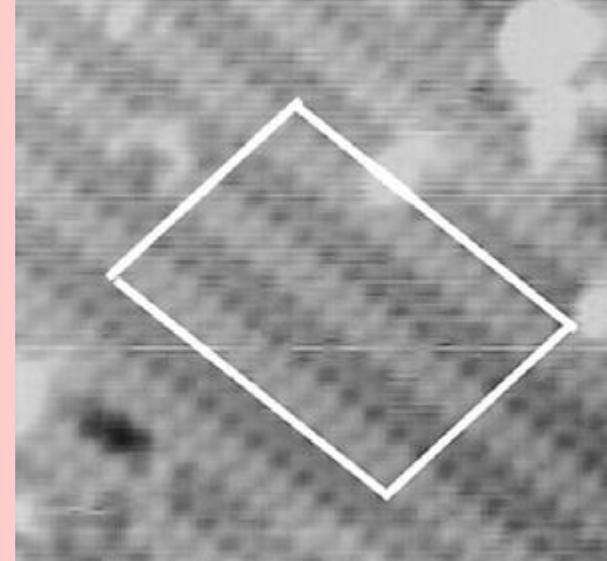
九州工業大学学術機関リポジトリ
Khan, Arifur Rahman,
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

【DFTB】 Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	-3.5 V
電流値:	1000 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å



cf. Experiment

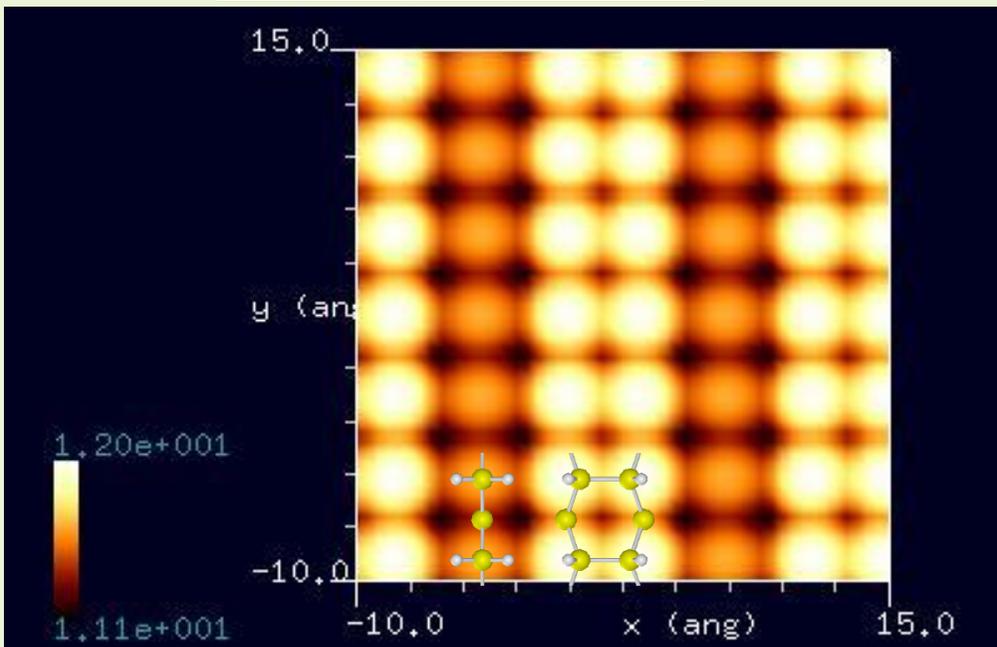
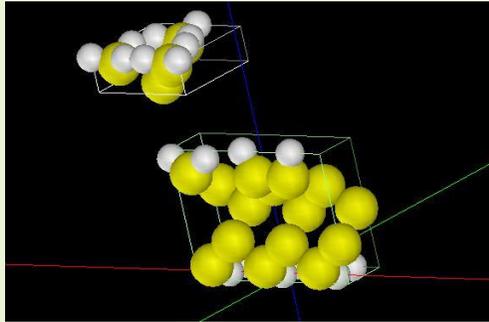


H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

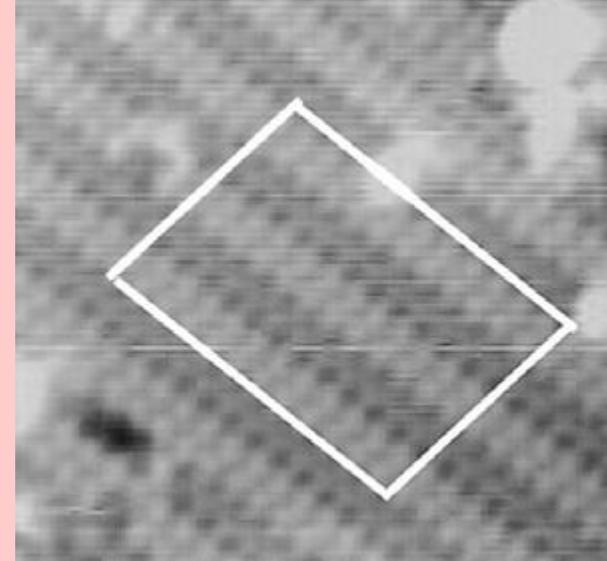
九州工業大学学術機関リポジトリ
Khan, Arifur Rahman,
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

【DFTB】 Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	-3.5 V
電流値:	1 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å



cf. Experiment



H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

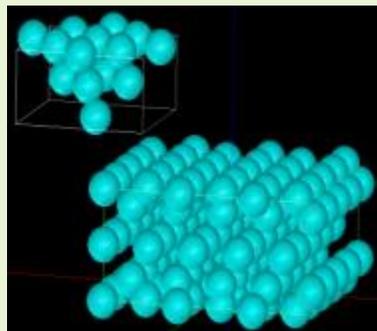
九州工業大学学術機関リポジトリ
Khan, Arifur Rahman,
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si) surfaces. (2008)

【DFTB】Au(001)再構成表面のSTM観察とシミュレーション

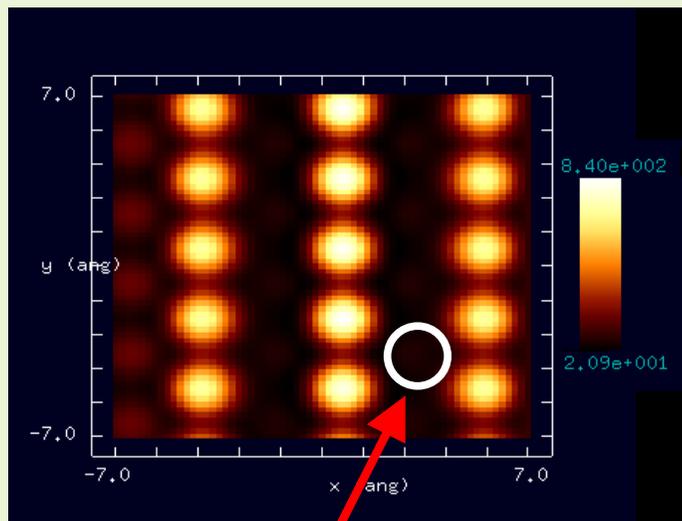
DFTB

探針・試料モデル

探針: Au₁₄
試料表面: Au(001)-5x1 reconstructed
探針-試料間の距離: 4 Å
バイアス電圧(探針の電位): +0.7 V



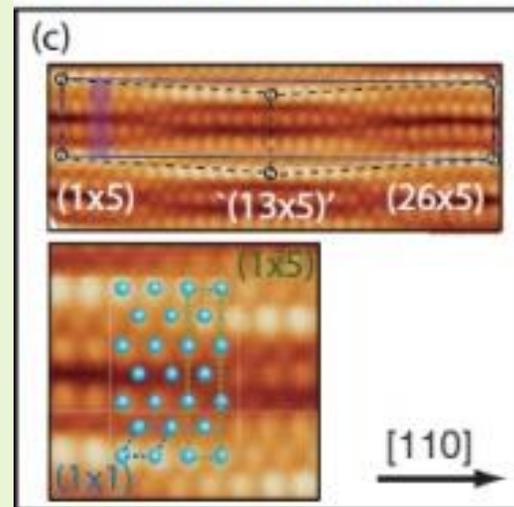
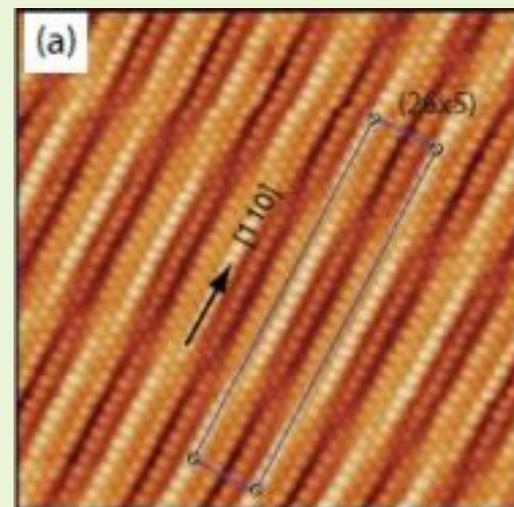
STM像の計算結果



原子は存在するのに、電流があまり流れていない。

電荷の移動が起こっている

実験

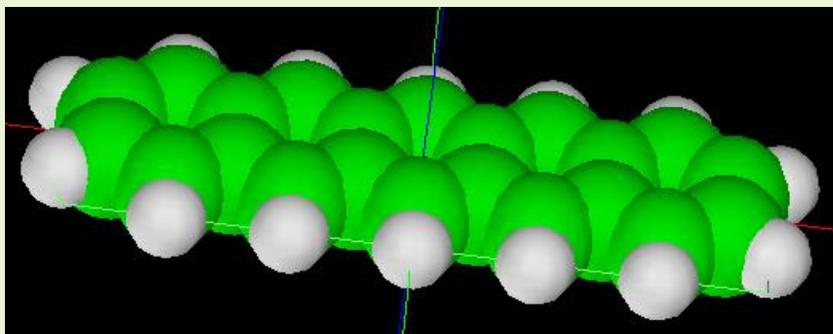


類似

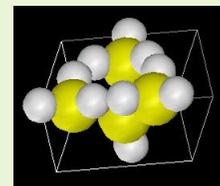
S. Bengiό *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 045426 (2012).
Au(100)-26x5 reconstructed

【DFTB】ペンタセン分子のAFM, STM観察とシミュレーション

探針: Si_4H_{10} (AFM, KPFM用)
または Si_4H_9 (STM用)
試料: ペンタセン分子

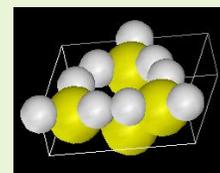


ペンタセン



Si_4H_{10}

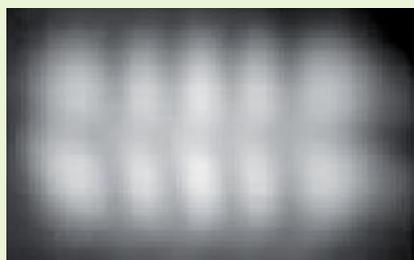
AFM, KPFM用探針



Si_4H_9

STM用探針

実測画像



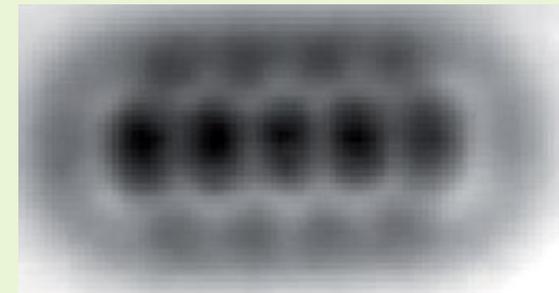
STM HOMO

Phys. Rev. Lett. 94, 026803 (2005)



STM LUMO

同左

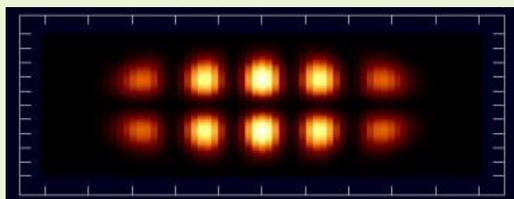


NC-AFM

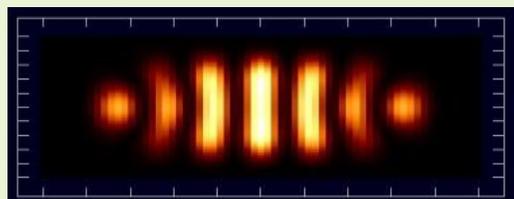
Science 325, 1110–1114 (2009)

DFTB

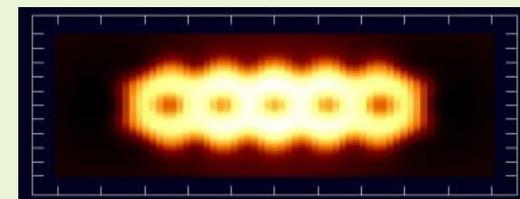
シミュレーション 結果



STM 探針-試料間の距離4.0 Å
探針のバイアス+1.0V



STM 探針-試料間の距離4.0 Å
探針のバイアス-1.0V

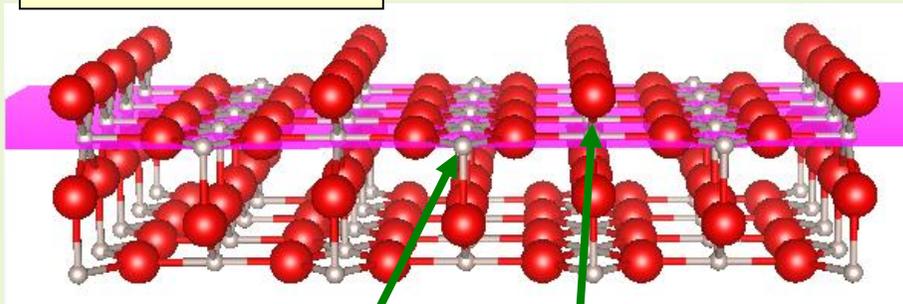


AFM 探針-試料間の距離4.0 Å

【DFTB】高さ一定モードによるRuO₂(110) 表面のトンネル電流像STMシミュレーション

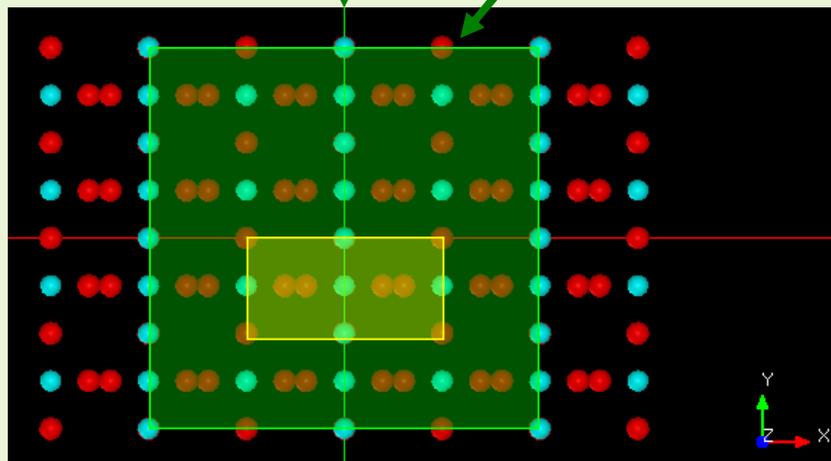
DFTB

試料表面: RuO₂(110)



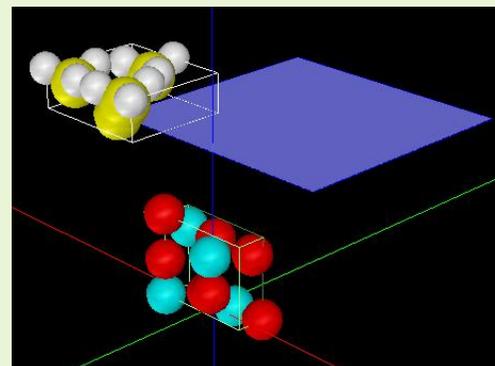
1f-cus-Ru:
(1-fold coordinatively unsaturated sites)

O_{br}: bridging oxygen



並進対称性によって拡張した試料モデルを上から見た図。
黄色の枠が単位格子。緑色の枠がスキャンエリアを表す。

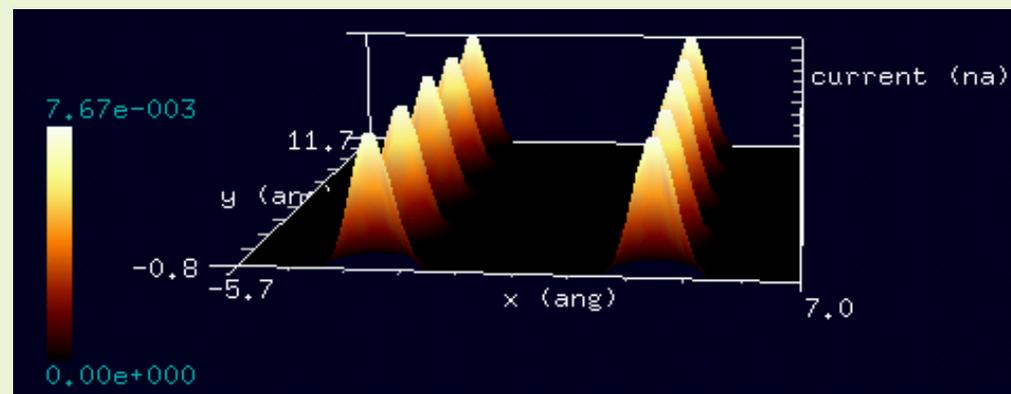
探針・試料モデル



探針: Si₄H₉
試料表面: RuO₂(110)
探針高さ: 8.5 Å
探針バイアス: +0.01 V

試料の原子構造として最小ユニットだけ用意し、
xy方向へは並進ベクトルで自在に拡張する。

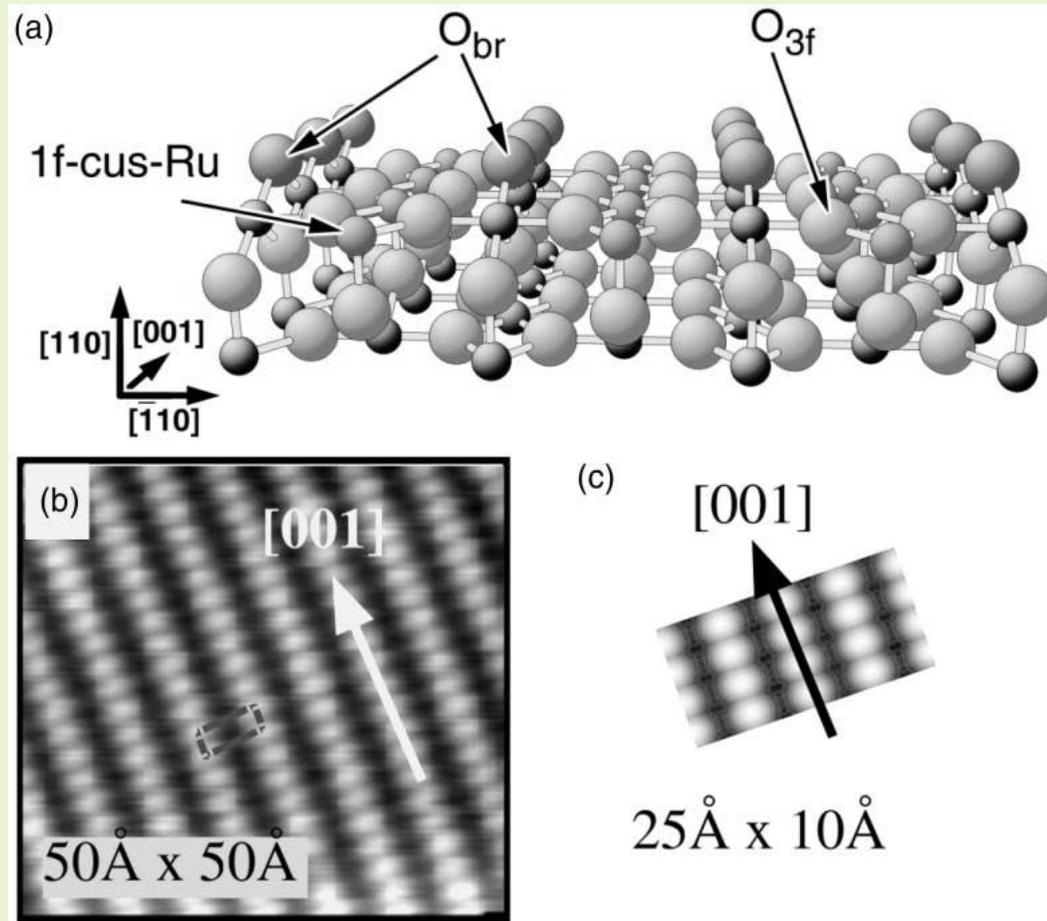
高さ一定モード、トンネル電流像の計算結果



電流値0.0~0.00767 nA

【DFTB】 Constant current モードによるRuO₂(110) 表面のSTM観察

Experiment



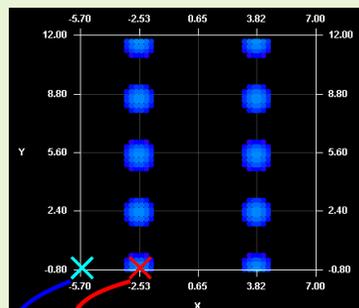
Experimental STM image (constant current mode, taken at RT) of a stoichiometric RuO₂(1 1 0) surface: 50 Å x 50 Å, U = -0.01 V, I = 0.46 nA.

H. Over, A. P. Seitsonen, E. Lundgren, M. Schmid and P. Varga, Surface Science 515 (2002) 143–156.

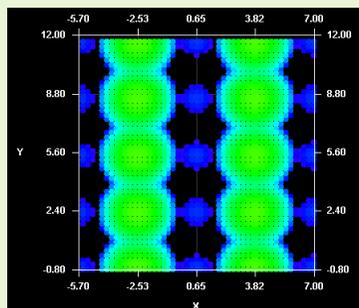
【DFTB】 Constant current モードによるRuO₂(110) 表面のSTMシミュレーション

DFTB

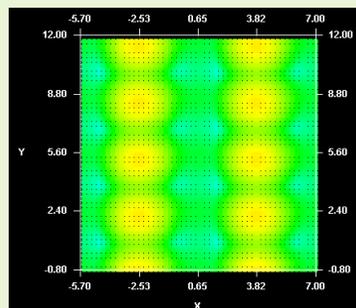
探針高さを8.5 Åから5.0 Åまで0.5 Åずつ変化させながら、バイアス一定 (+0.01 V)、高さ一定モードで得られたトンネル電流像。色の変化は対数スケールに取っており、青が0.001 nA、赤が100.0 nAに対応する。



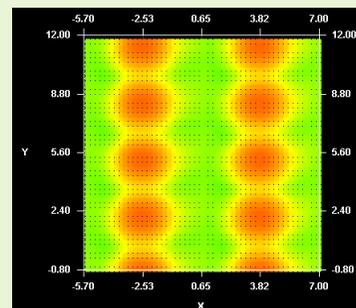
$z = 8.5 \text{ \AA}$



$z = 8.0 \text{ \AA}$

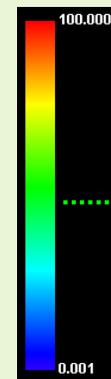


$z = 7.5 \text{ \AA}$



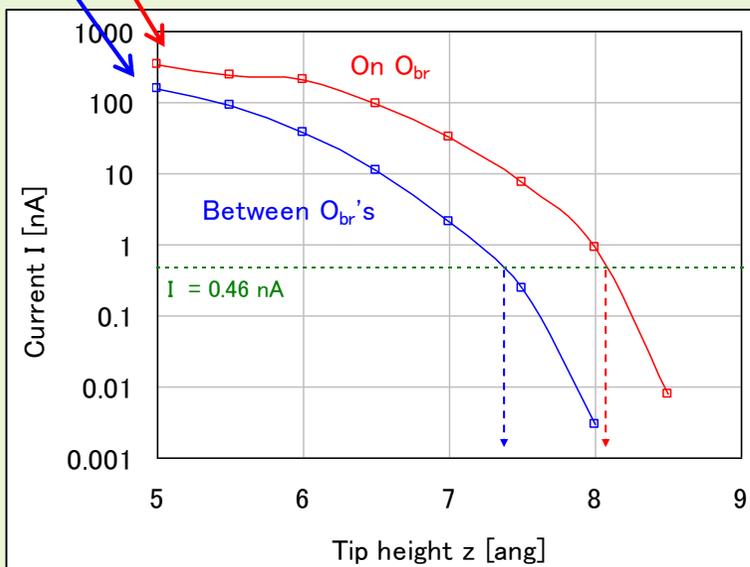
$z = 7.0 \text{ \AA}$

...



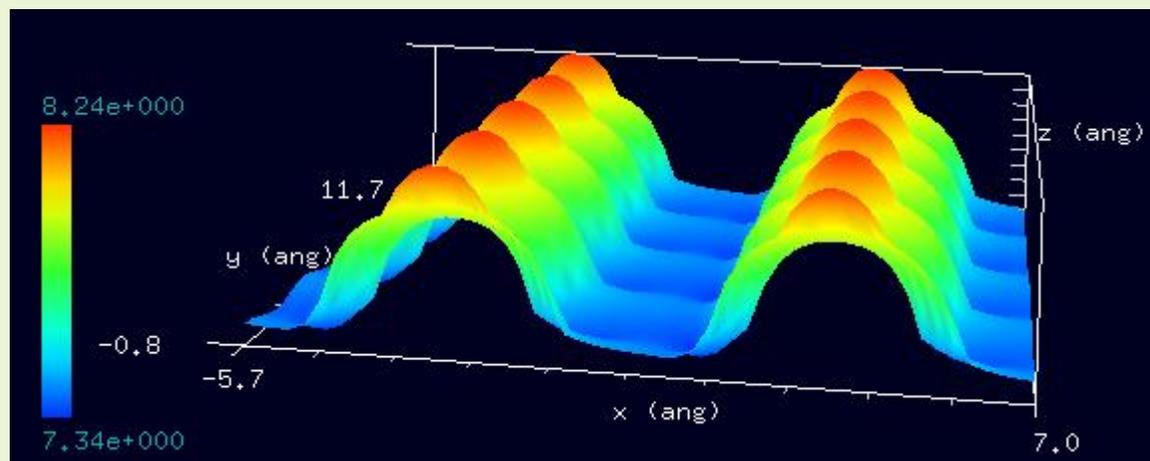
0.46 nA

対数スケール



Current vs. tip height

試験的にプログラムを組み、一定の電流 0.46 nAとなる探針高さを求めた。

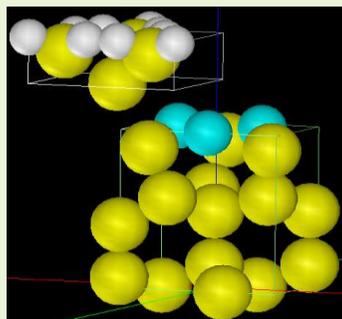


試料形状が直感的に推察できる。

Constant currentモードは今後DFTBソルバーに搭載される予定。

【DFTB】Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -AgのSTM像

Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -AgのSTM像は、正バイアスか負バイアスかで明るく観察されるサイトが変わる。

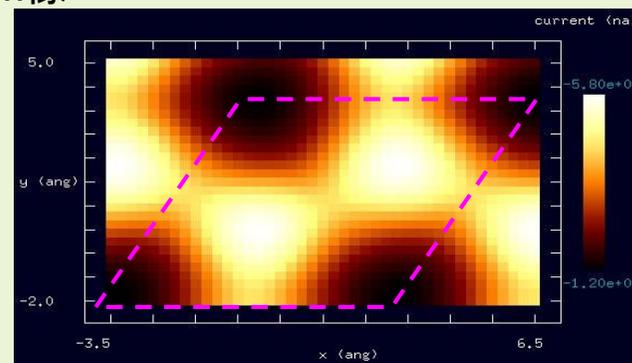


探針 (Si₄H₉) と試料

探針の電圧が負の時のSTM像

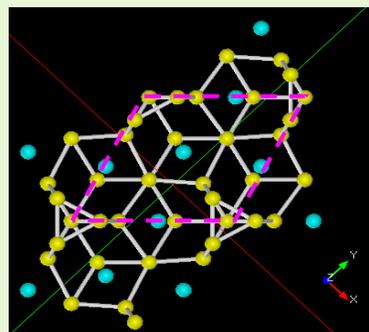


文献[1]でのSTM像
(empty state)



探針電圧:-0.1[V], 探針 - 試料間距離:3.0[Å]での
シミュレーション結果

Ag原子の3量体の成す三角形の中心が明るく観察されている。

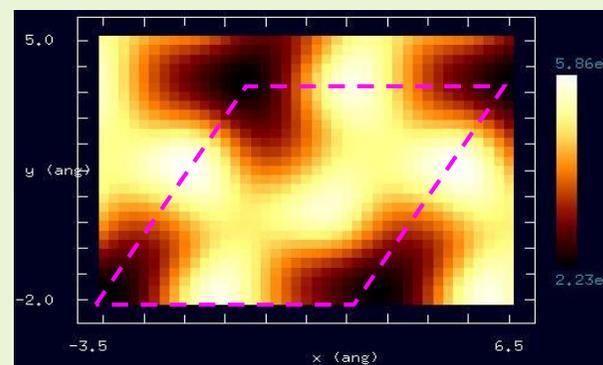


ピンクの菱形が
単位セル

探針の電圧が正の時のSTM像



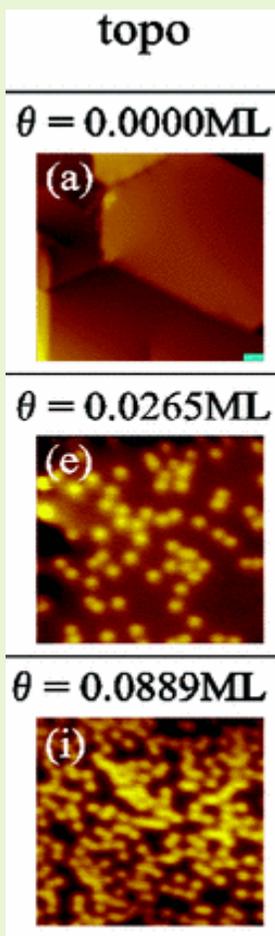
文献[1]でのSTM像
(filled state)



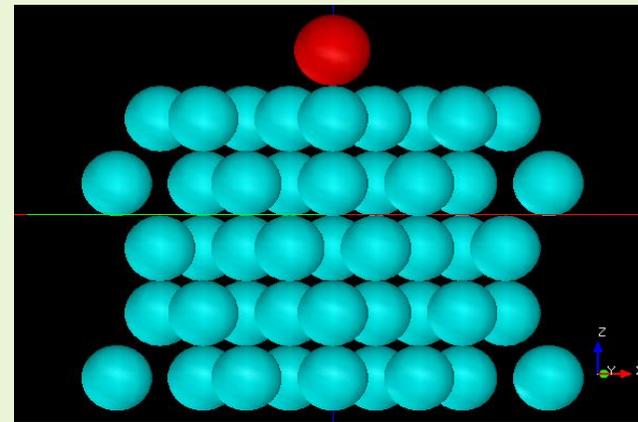
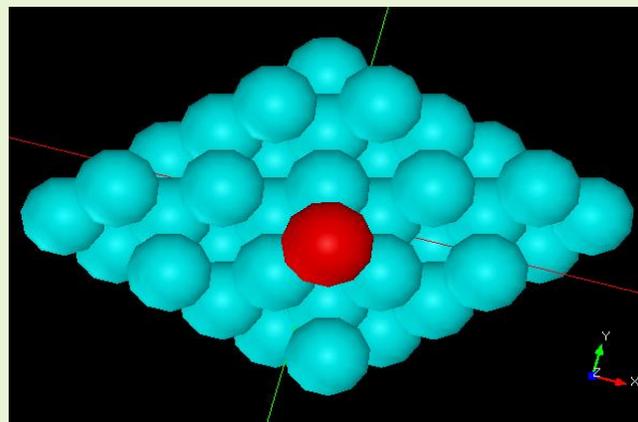
探針電圧:0.3[V], 探針 - 試料間距離:2.0[Å]での
シミュレーション結果

【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(1)

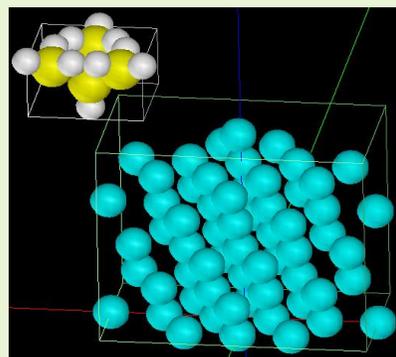
$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造4単位セルに対して1つのBiがある場合
(Ag(111)上に置いた場合)



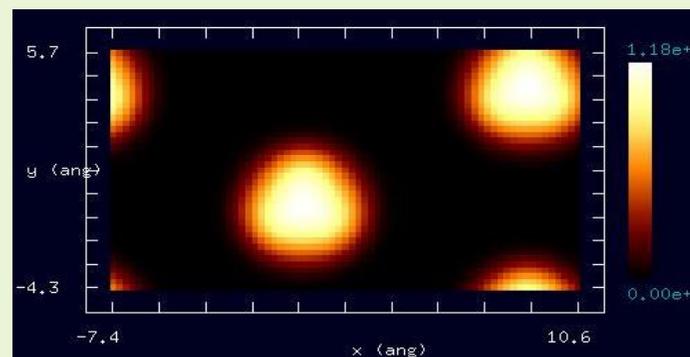
文献[2]でのSTM像
 $V_s = -0.4\text{[V]}$, $I_t = 0.3\text{[nA]}$



シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



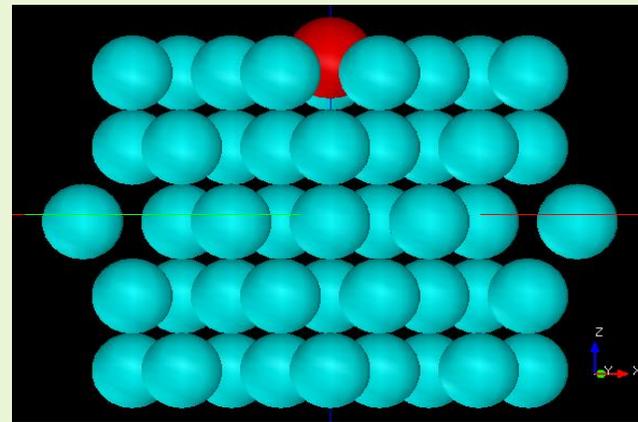
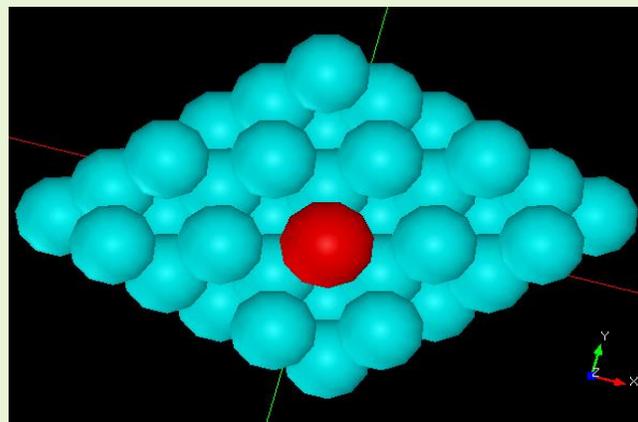
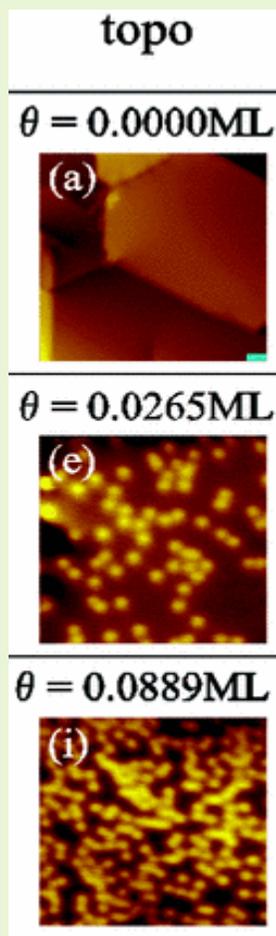
探針(Si_4H_{10})と試料



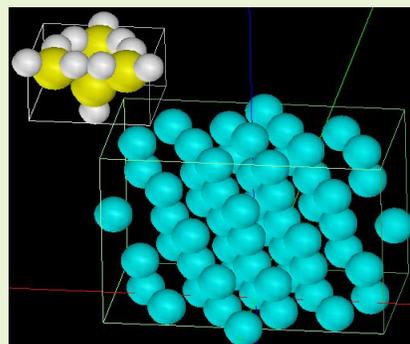
探針電圧: 0.4[V] , 探針 - 試料間距離: 3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(2)

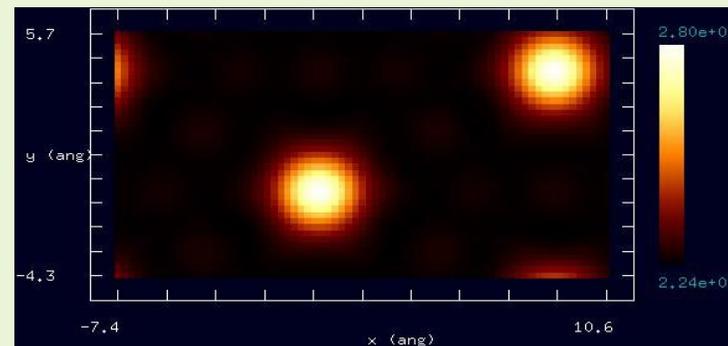
$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造4単位セルに対して1つのBiがある場合
(表面のAgと置換した場合)



シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



探針(Si_4H_{10})と試料

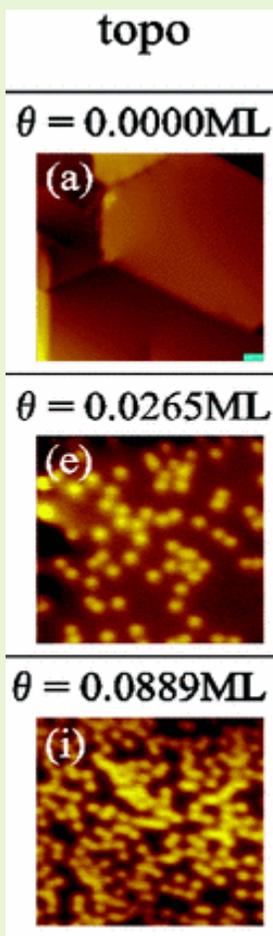


探針電圧:0.4[V], 探針 - 試料間距離:3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

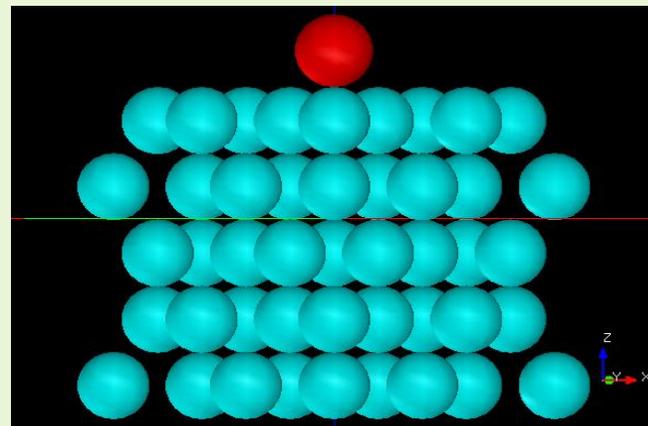
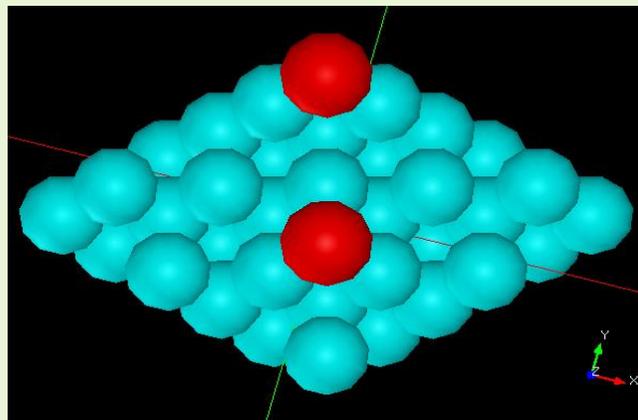
文献[2]でのSTM像
 $V_s = -0.4\text{[V]}$, $I_t = 0.3\text{[nA]}$

【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(3)

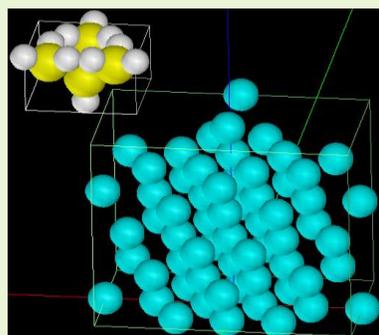
$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造4単位セルに対して2つのBiがある場合
(Ag(111)上に置いた場合)



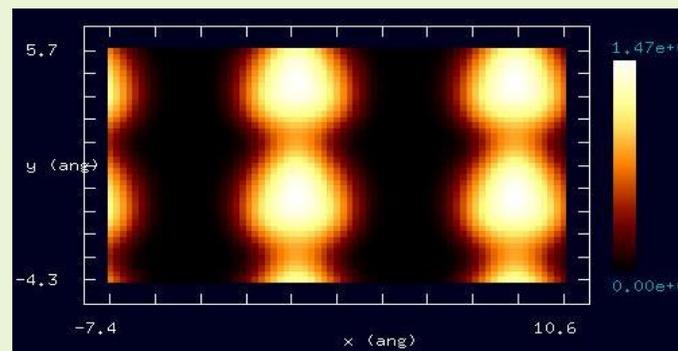
文献[2]でのSTM像
 $V_s = -0.4\text{[V]}$, $I_t = 0.3\text{[nA]}$



シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



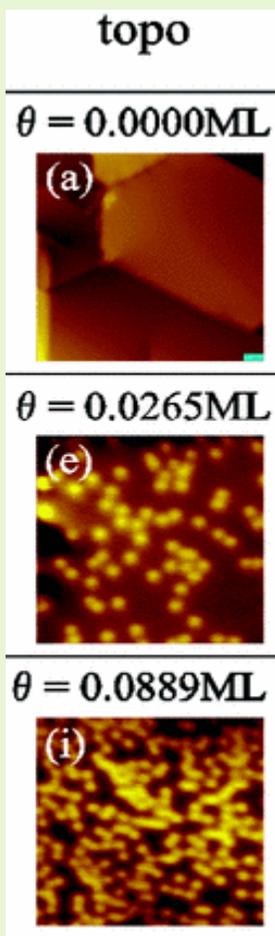
探針(Si_4H_{10})と試料



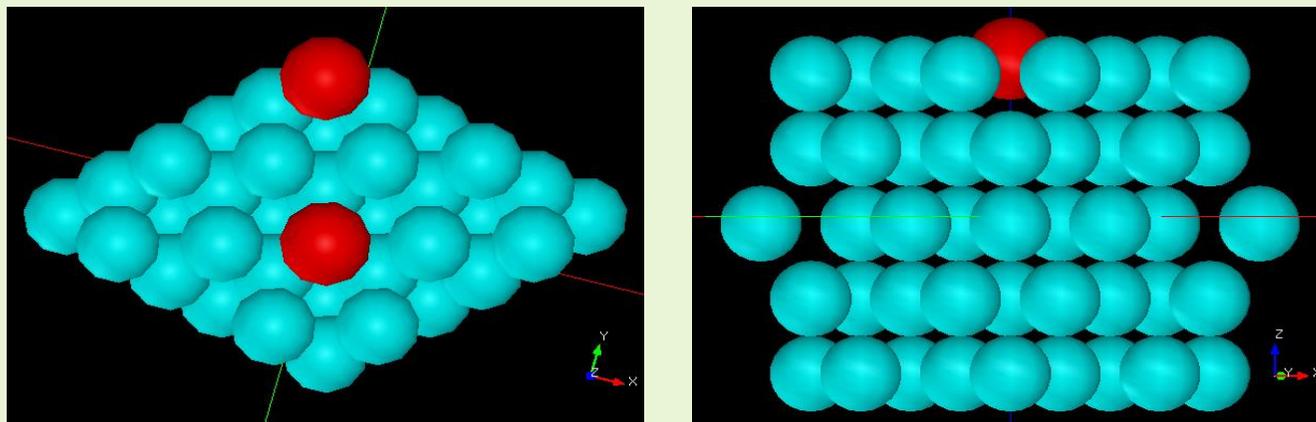
探針電圧: 0.4[V] , 探針 - 試料間距離: 3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(4)

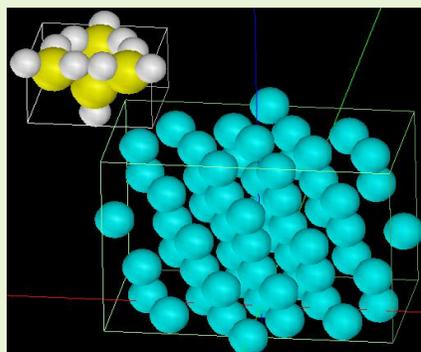
$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造4単位セルに対して2つのBiがある場合
(表面のAgと置換した場合)



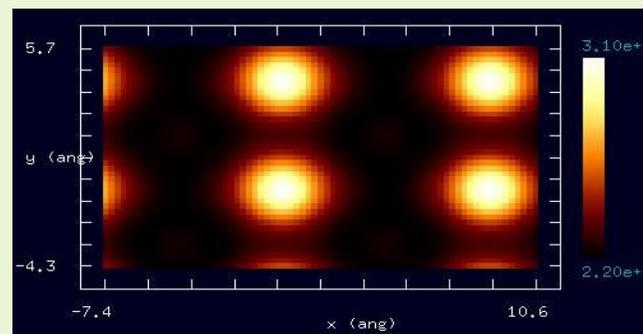
文献[2]でのSTM像
 $V_s = -0.4\text{[V]}$, $I_t = 0.3\text{[nA]}$



シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



探針(Si_4H_{10})と試料



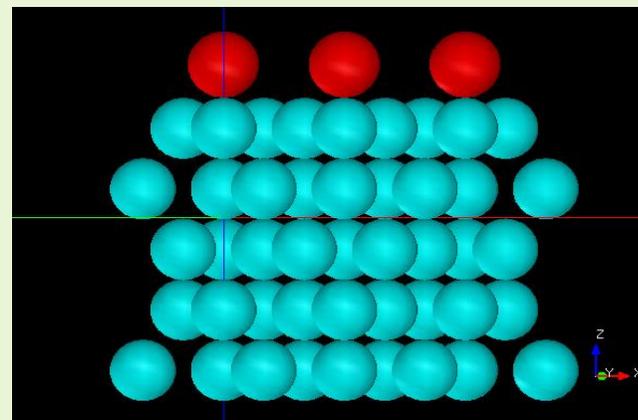
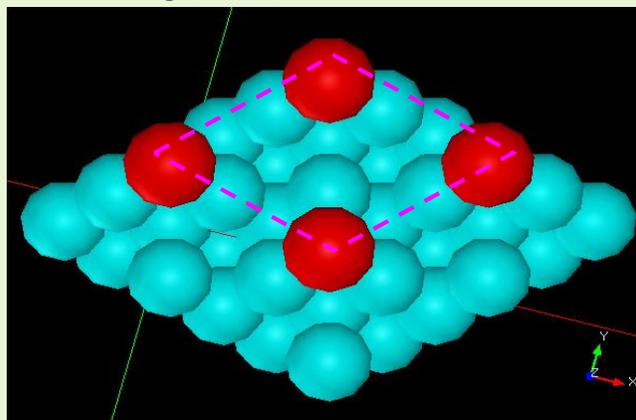
探針電圧: 0.4[V] , 探針 - 試料間距離: 3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

【DFTB】Ag(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -BiのSTM像(1)

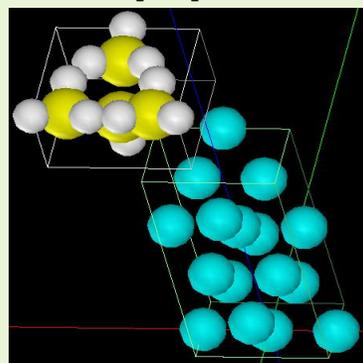
Ag(111)上にBiを置いた場合



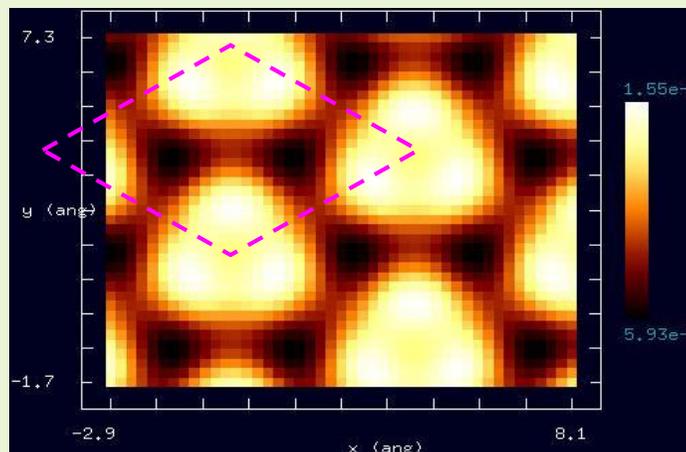
文献[3]でのSTM像
電圧記述なし,
電流0.5[nA]



シミュレーションに用いたモデル(ピンクの破線が単位セル)を上から見た図と横から見た図



探針(Si₄H₁₀)と試料



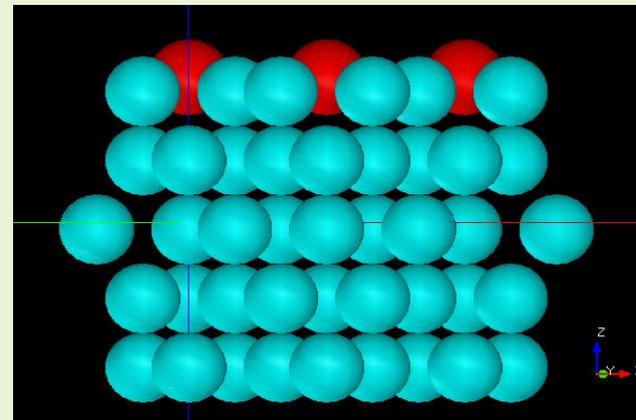
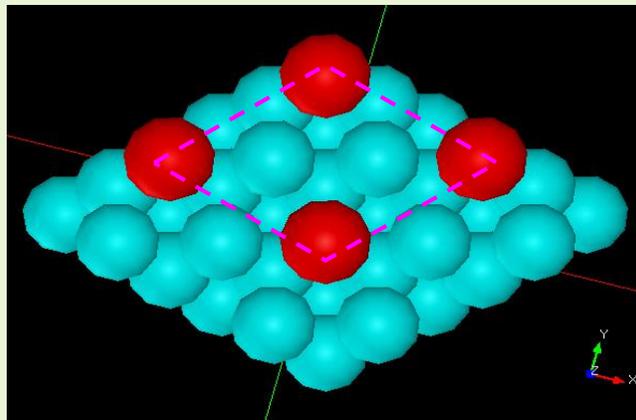
探針電圧:0.003[V],
探針 - 試料間距離:3.0[Å]での
トンネル電流像のシミュレーション結果

【DFTB】Ag(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -BiのSTM像(2)

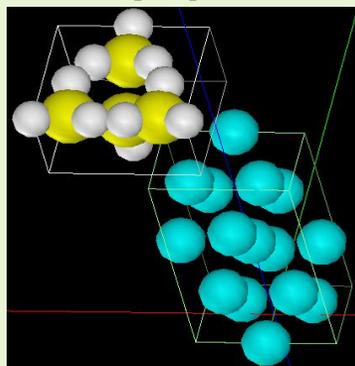
表面のAgとBiが置換した場合



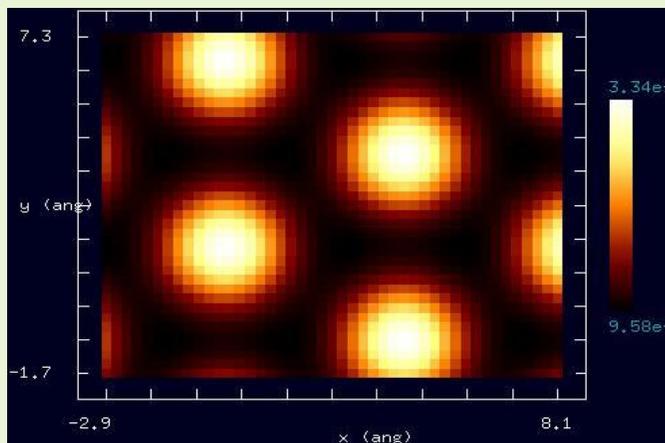
文献[3]でのSTM像
電圧記述なし,
電流0.5[nA]



シミュレーションに用いたモデル(ピンクの破線が単位セル)を上から見た図と横から見た図

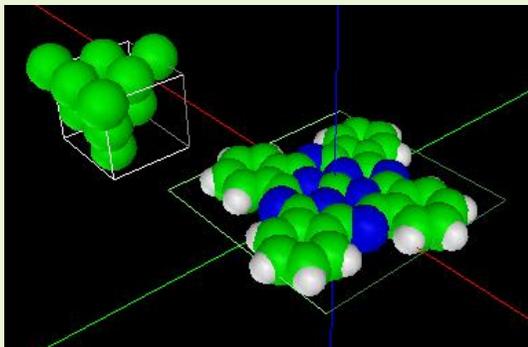


探針(Si₄H₁₀)と試料

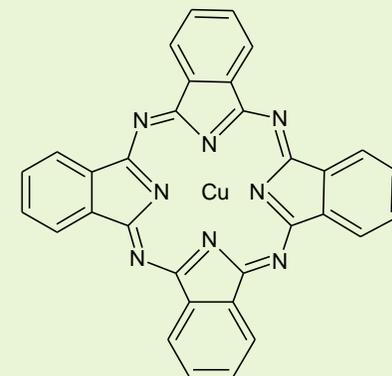


探針電圧:0.003[V],
探針 - 試料間距離:3.0[Å]での
トンネル電流像のシミュレーション結果

【DFTB】銅フタロシアニンのトンネル電流像シミュレート

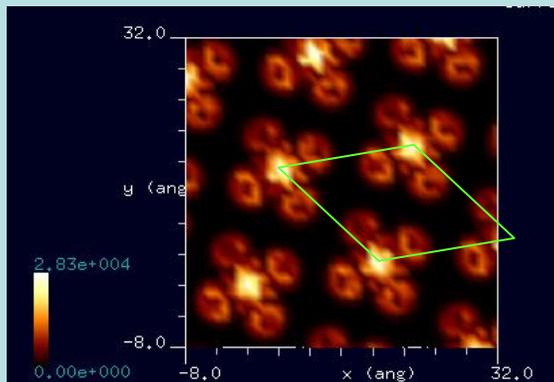


探針: Cu_{10}
試料: Cu Phthalocyanine, $\text{C}_{32}\text{H}_{16}\text{CuN}_8$.
基板は無視
手法: 高さ一定STM
探針高さ: 2.8 Å
探針バイアス: +6.0 V

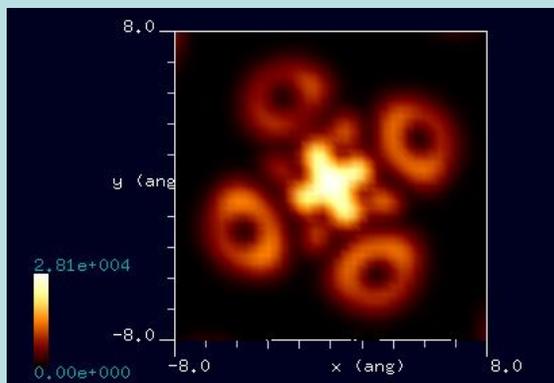


トンネル電流像のシミュレート結果

40 Å x 40 Å

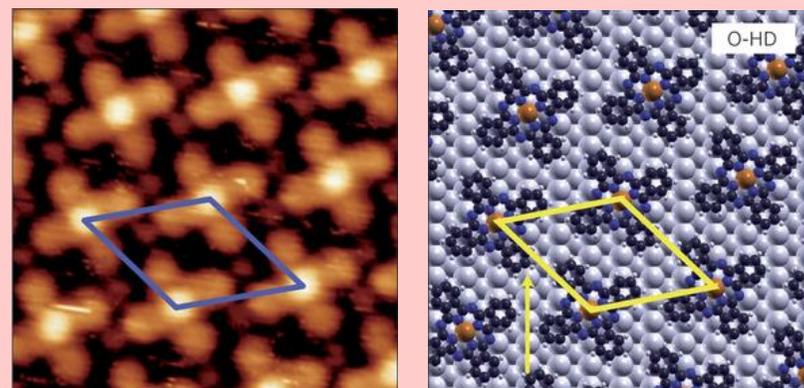


16 Å x 16 Å



cf. Experiment

探針: Pt/Ir
試料: Iron phthalocyanine on Ag (110)
手法: constant current STM

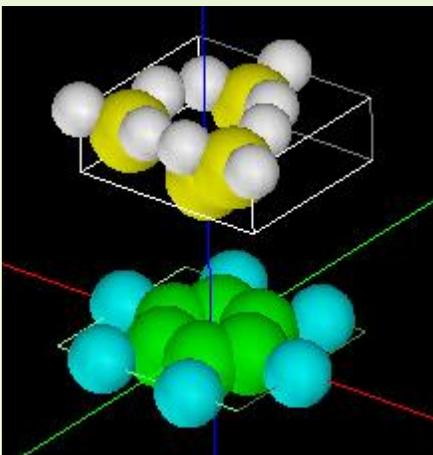


52 Å x 52 Å, $V_{\text{sample}} = -0.029$ V, $I = 0.15$ nA.

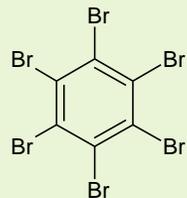
F. Sedona et al., Nature Materials 11, 970–977 (2012).

【DFTB】グラファイト上のC₆Br₆モノレイヤーのSTMシミュレーション

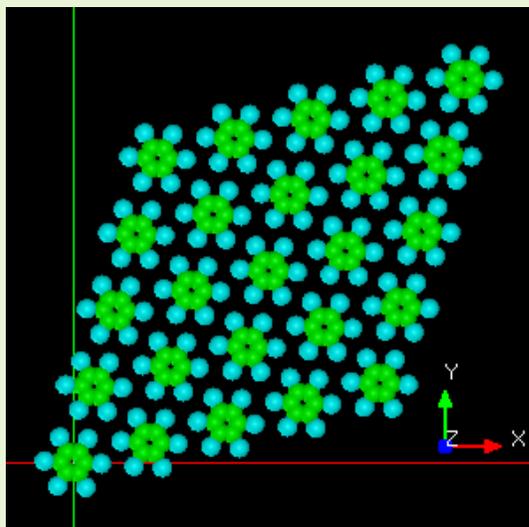
シミュレートに用いた探針・試料モデル



探針: Si₄H₉
試料: C₆Br₆ monolayer
手法: 高さ一定STM および
constant current STM
探針高さ: 2.5 – 5.5 Å
探針バイアス: +2.5 V and -2.5 V



並進対称性を踏まえて拡張した試料モデル

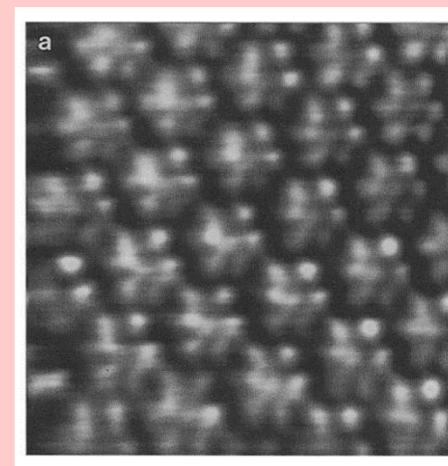


cf. Experiment

探針: Pt/Ir

試料: C₆Br₆ monolayer on graphite

手法: constant current STM



50 Å x 50 Å, $V_{\text{sample}} = -1.8$ V, $I = 1.8$ nA.

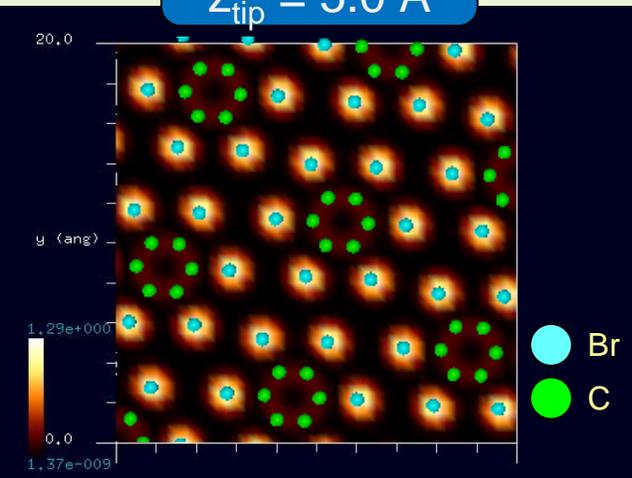
R. Strohmaier et al., Surface Science 318, L1181-L1185 (1994).

計算では基板のグラファイトを除外。Pt/Irの代わりにSi探針を使用。
Constant current モードは開発予定。ここではconstant height STM像を
複数枚用意して、数値処理によってconstant current STM像を計算した。

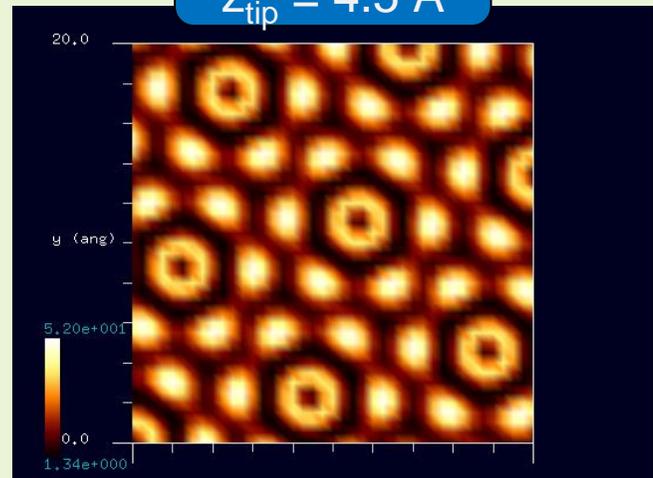
【DFTB】グラファイト上のC₆Br₆モノレイヤーのconstant height STMシミュレーション

$V_{\text{tip}} = +2.5$ V、高さ一定モード、トンネル電流像の計算結果。

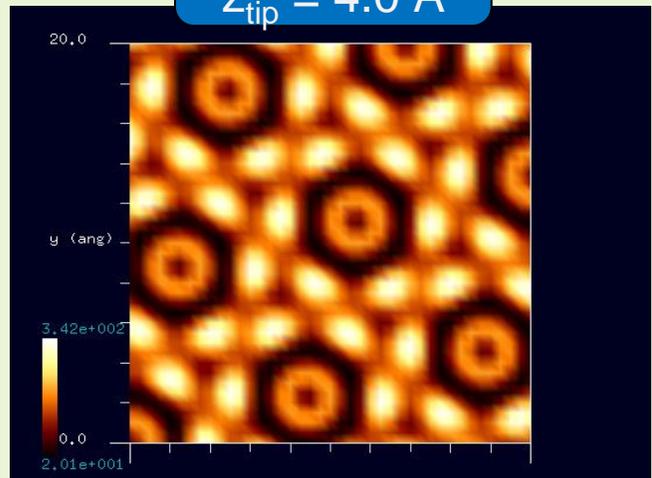
$z_{\text{tip}} = 5.0 \text{ \AA}$



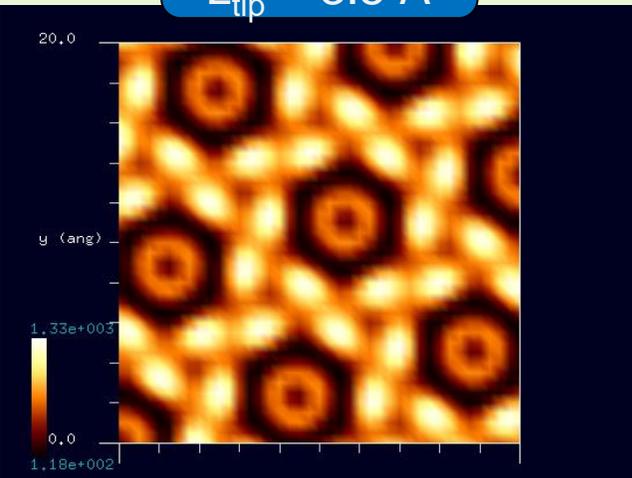
$z_{\text{tip}} = 4.5 \text{ \AA}$



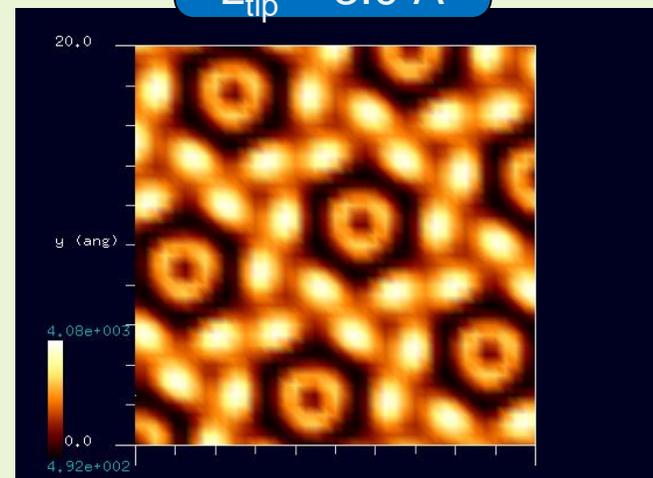
$z_{\text{tip}} = 4.0 \text{ \AA}$



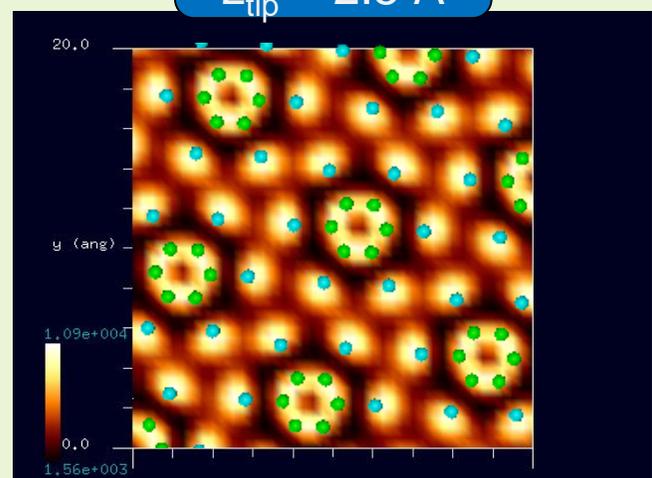
$z_{\text{tip}} = 3.5 \text{ \AA}$



$z_{\text{tip}} = 3.0 \text{ \AA}$



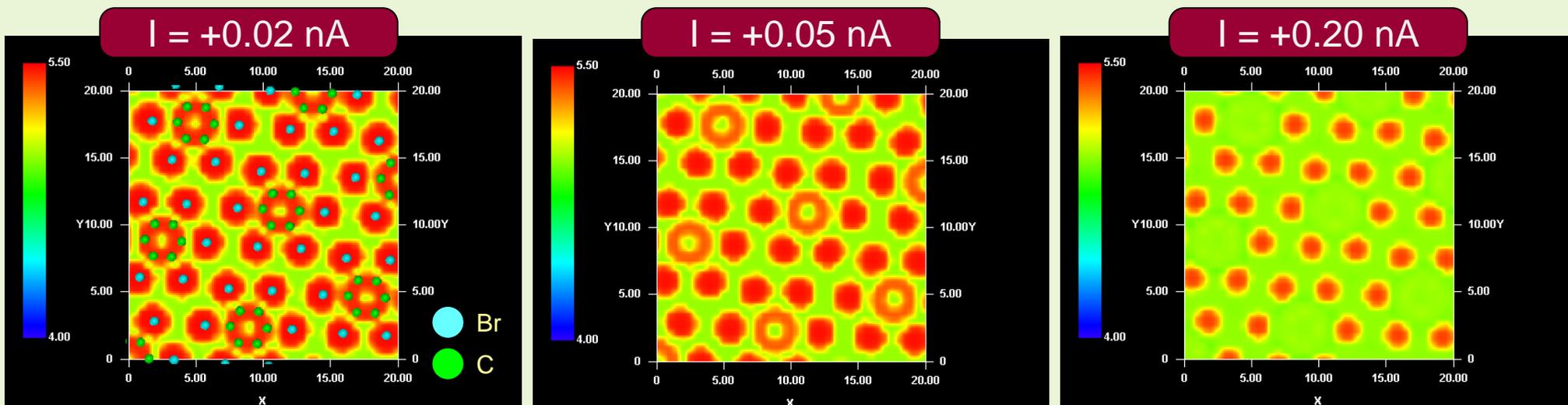
$z_{\text{tip}} = 2.5 \text{ \AA}$



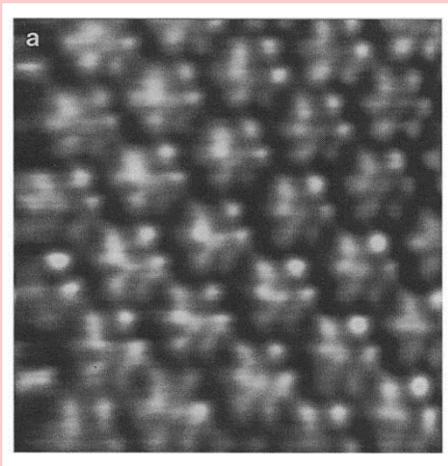
電流の単位 nA. 明るいほど電流の絶対値が大きい。

【DFTB】グラファイト上のC₆Br₆モノレイヤーのconstant current STMシミュレーション

$V_{\text{tip}} = +2.5$ Vのとき、電流値をいくつか選んでconstant current STM像を計算した。



cf. Experiment



50 Å x 50 Å, $V_{\text{sample}} = -1.8$ V, $I = 1.8$ nA。

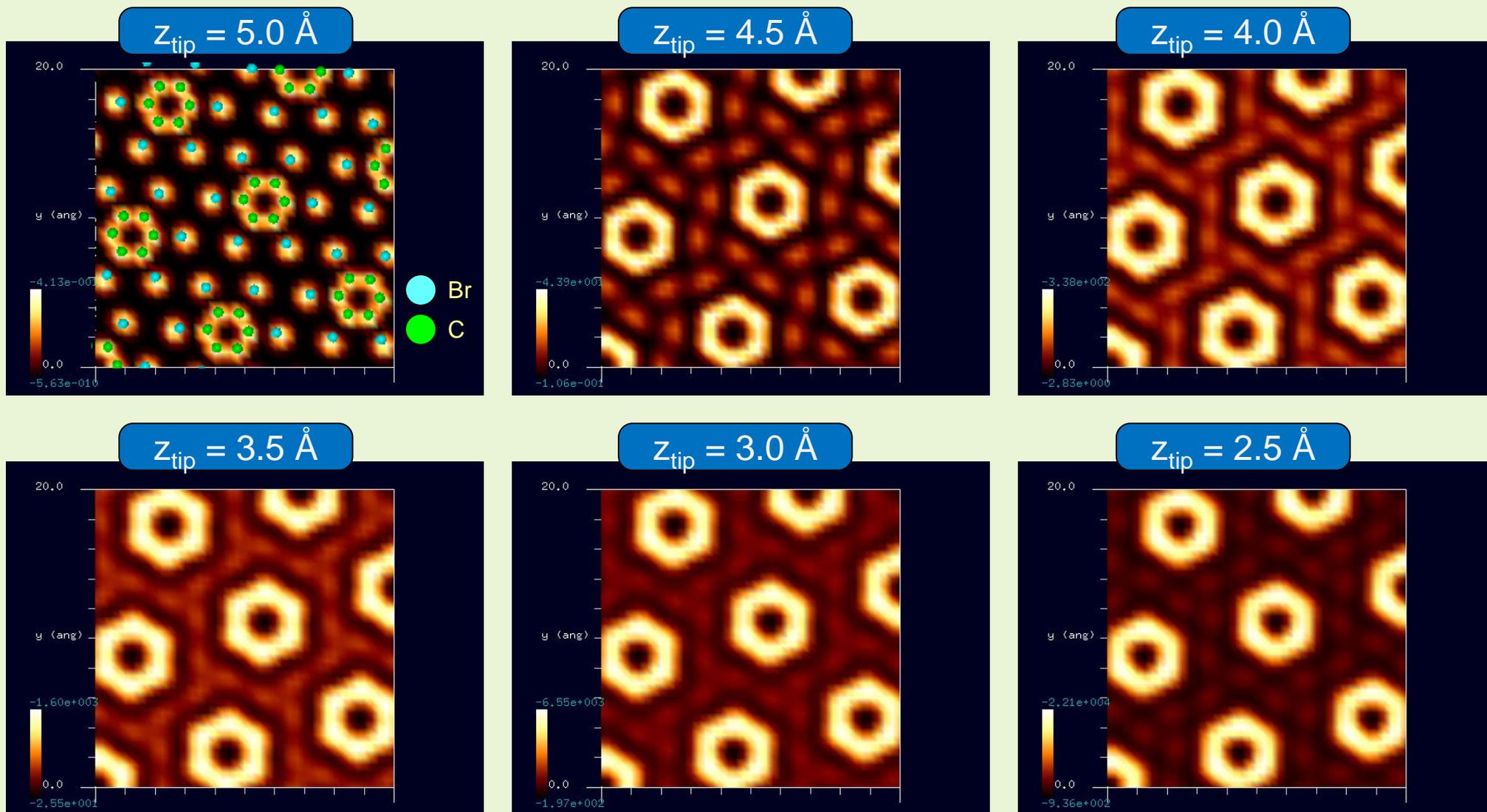
R. Strohmaier et al., Surface Science 318, L1181-L1185 (1994).

小さな電流値を選んだ場合は分子の形状が現れた。

電流値を大きく選ぶとBr原子が強調された。

【DFTB】グラファイト上のC₆Br₆モノレイヤーのconstant height STMシミュレーション

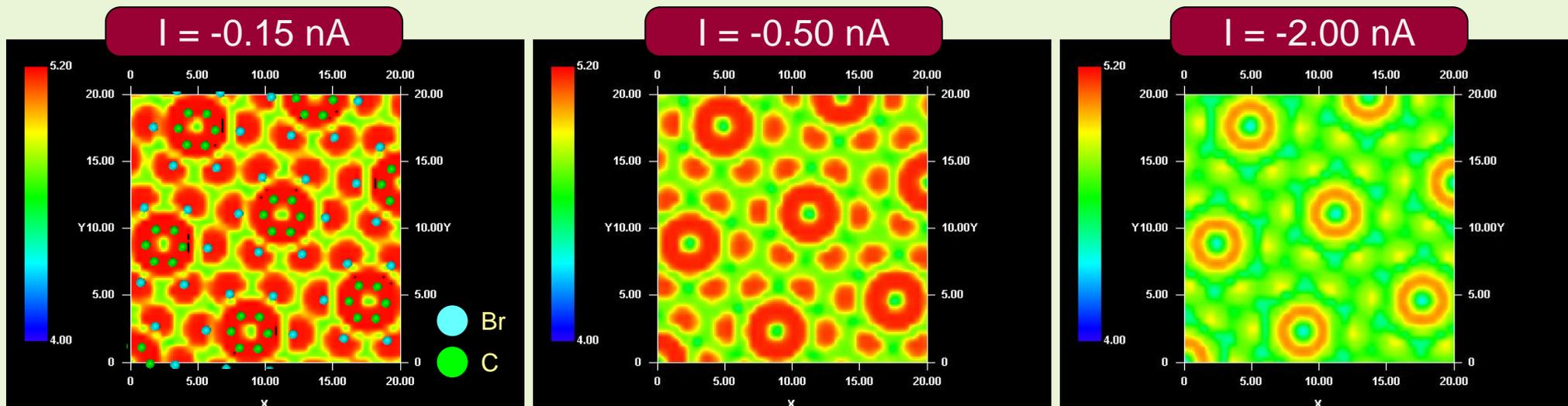
$V_{\text{tip}} = -2.5$ V、高さ一定モード、トンネル電流像の計算結果。



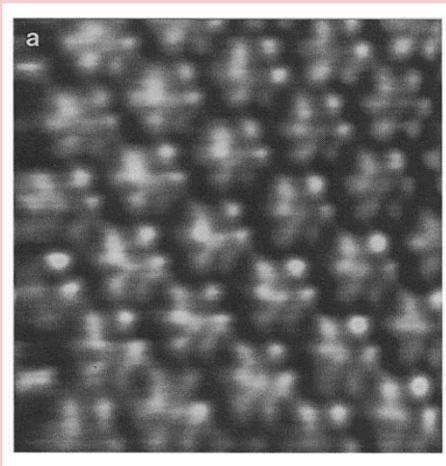
電流の単位 nA. 明るいほど電流の絶対値が大きい。

【DFTB】グラファイト上のC₆Br₆モノレイヤーのconstant current STMシミュレーション

$V_{\text{tip}} = -2.5 \text{ V}$ のとき、電流値をいくつか選んでconstant current STM像を計算した。



cf. Experiment



$50 \text{ \AA} \times 50 \text{ \AA}$, $V_{\text{sample}} = -1.8 \text{ V}$, $I = 1.8 \text{ nA}$.

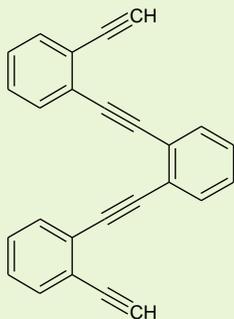
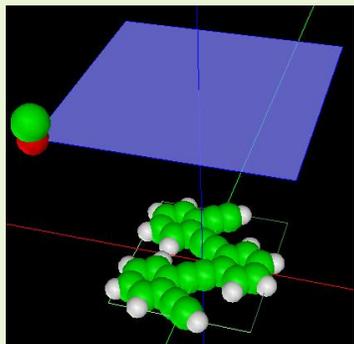
R. Strohmaier et al., Surface Science 318, L1181-L1185 (1994).

小さな電流値を選んだ場合は分子の形状が現れた。

電流値を大きく選ぶとC原子の環が強調された。

【DFTB】炭化水素C₂₆H₁₄のSTMシミュレーション

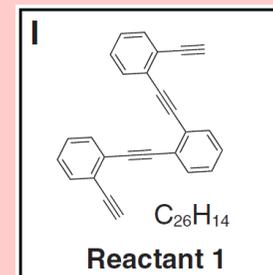
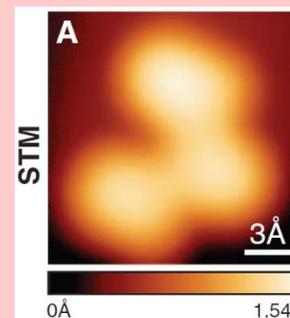
C₂₆H₁₄, 1,2-bis[2-(2-ethynylphenyl)ethynyl]benzene



探針: CO
 試料: C₂₆H₁₄ molecule
 基板は無視
 探針高さ: 2.5 – 5.0 Å
 探針バイアス: +3.0 V and -3.0 V

cf. Experiment

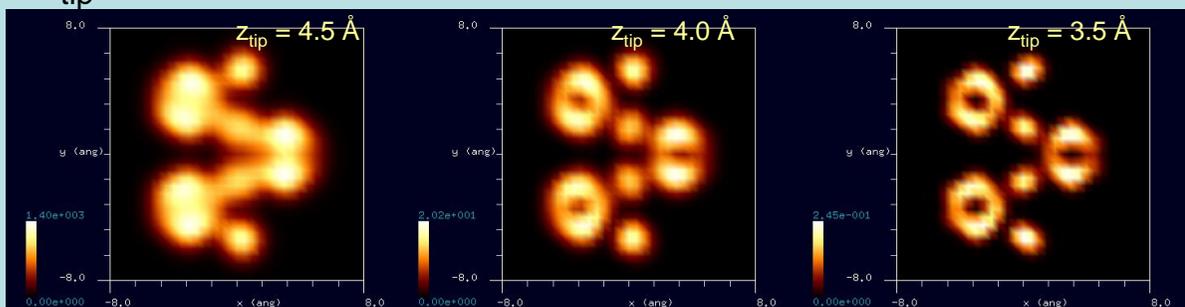
Constant current STM, I = 25 pA, V = 0.1 V



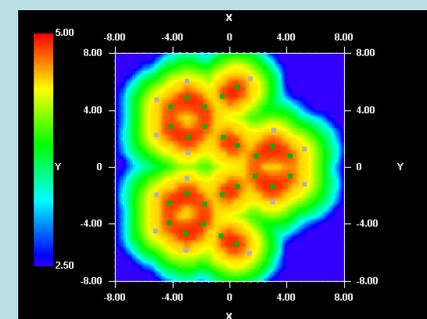
D.G. Oteyza et al., Science 340, 1434-1437 (2013).

Tunneling current images and constant current STM images for positive and negative biases.

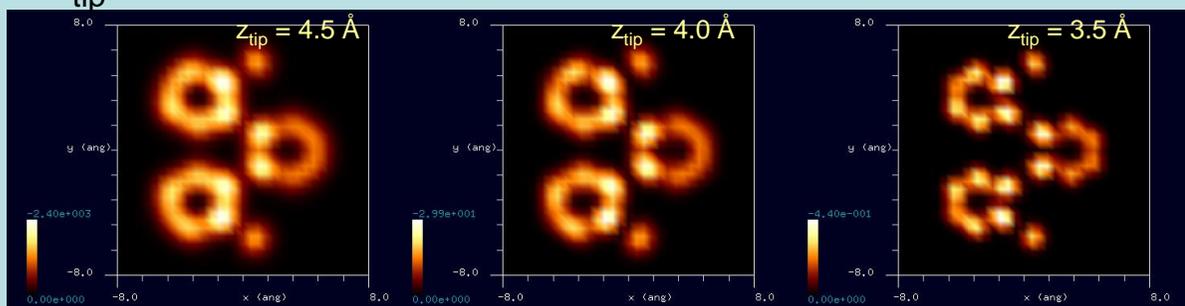
V_{tip} = +3.0 V



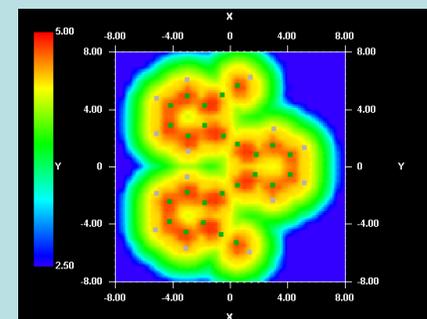
cc-STM for I = +0.05 nA



V_{tip} = -3.0 V

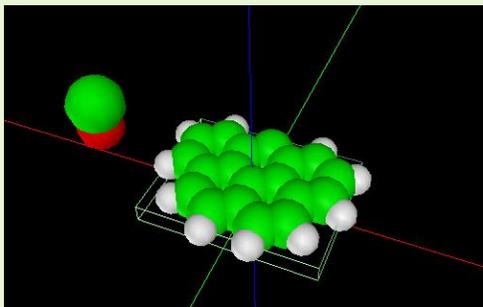


cc-STM for I = -0.10 nA



【DFTB】Olympiceneの周波数シフトAFMシミュレーション

nc-AFM simulation of an Olympicene radical, $C_{19}H_{12}$



探針: CO

試料: Olympicene radical, $C_{19}H_{11}$

基板は無視

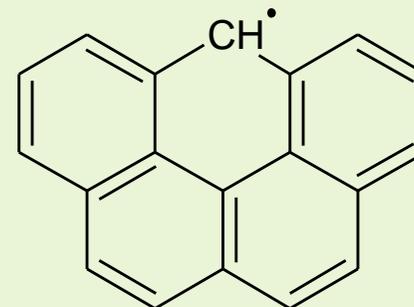
手法: 周波数シフトAFM

探針高さ: 3.4 – 6.4 Å

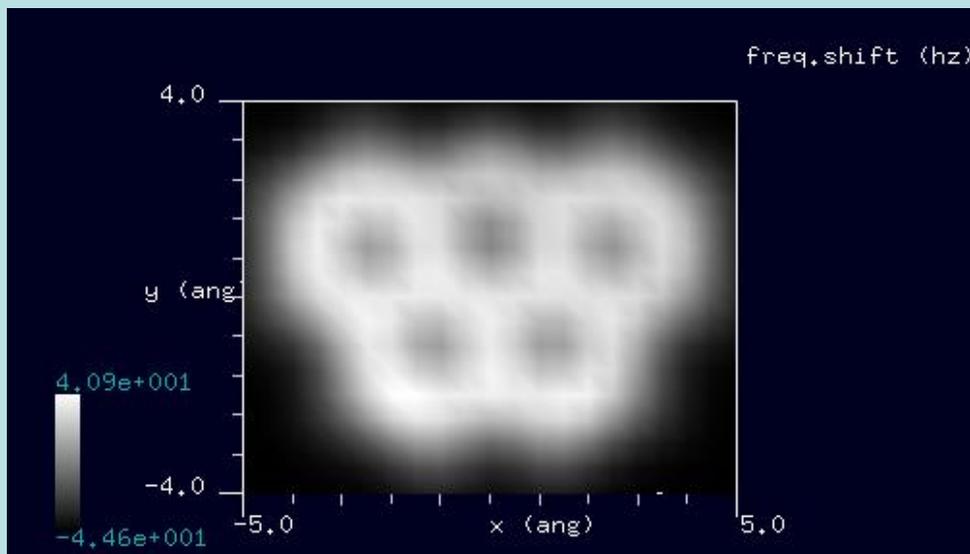
カンチレバーの振幅: 150 Å

ばね定数: 10 N/m

共鳴周波数: 200 kHz

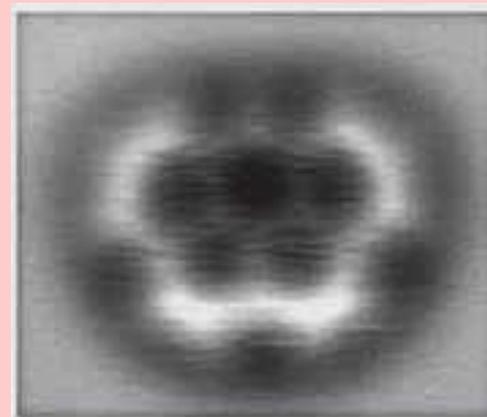


Simulated result



cf. Experiment

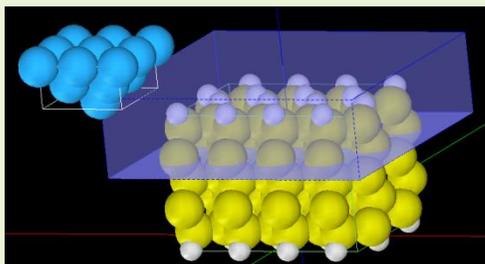
nc-AFM, Olympicene on Cu(111)



Experiment by Leo Gross et al.

Ed. by Jon Edwards, RSC NEWS, JUNE 2012,
RSC News editorial office, Thomas Graham House

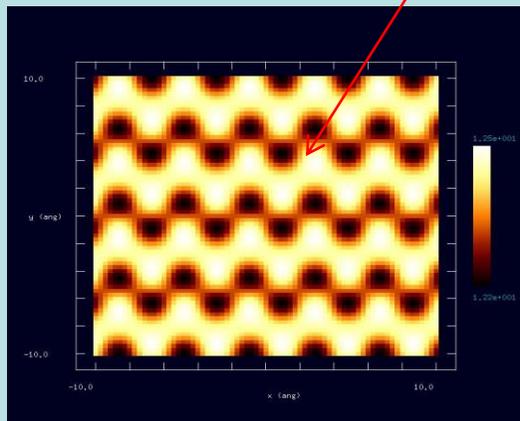
【DFTB】 Constant current STM image of Si(110):H



探針: W_{14}
試料: 水素終端されたSi(110)
手法: constant current STM

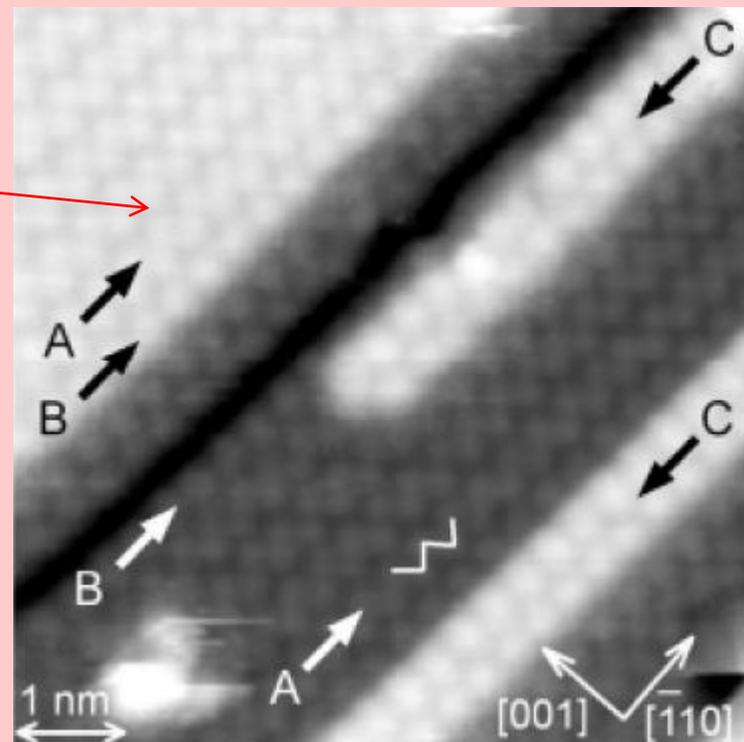
ジグザグの鎖状
構造を再現

Simulated result



探針バイアス+2.0V、電流 2000nA

cf. Experiment

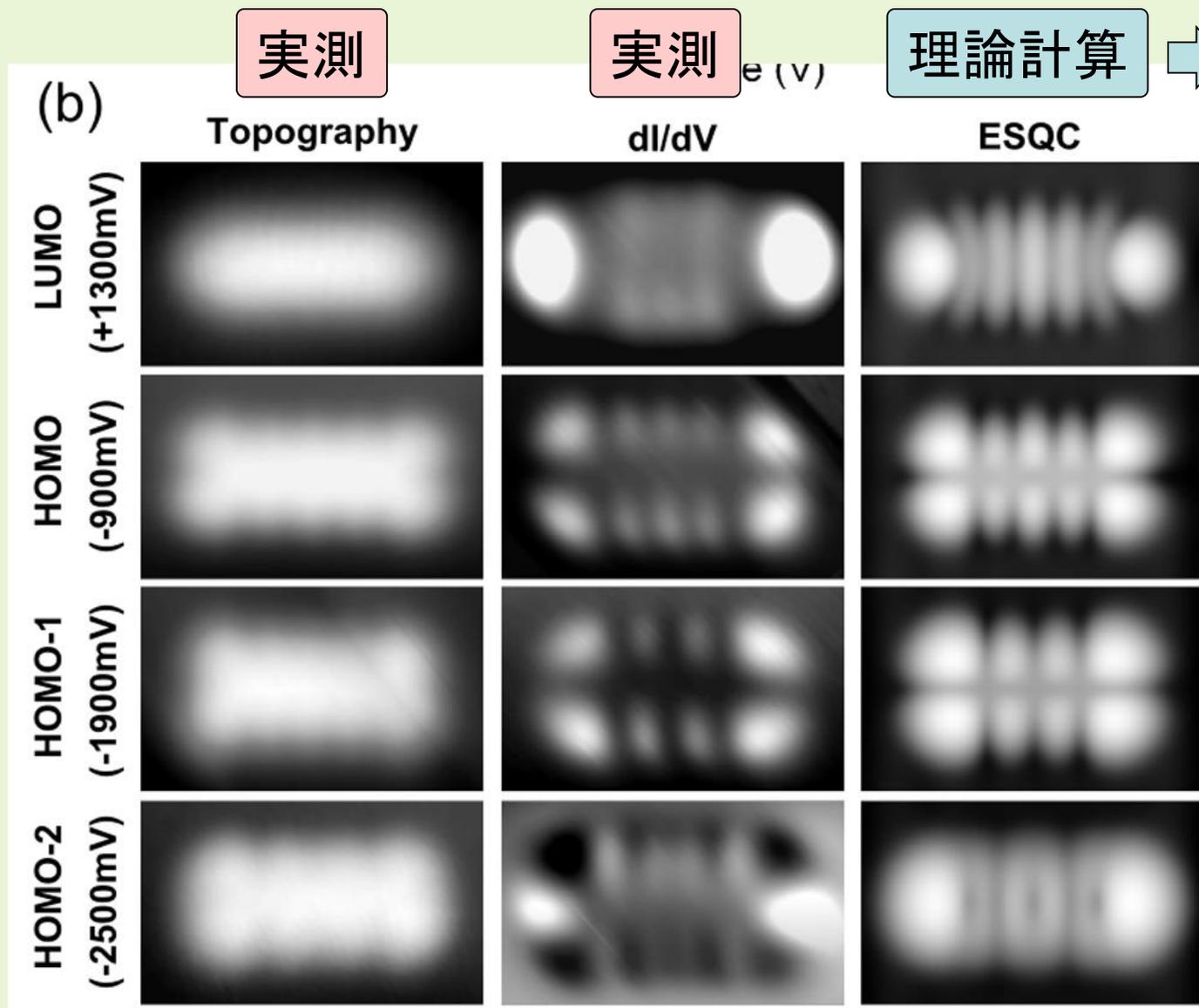


Appl. Phys. Lett. 85, 6254 (2004)

試料バイアス-2.0V、電流 0.3nA

【DFTB】 Constant current STM image of pentacene

文献より、Pentacene on Au(111)のSTM topography像およびdI/dV像



STM-elastic scattering quantum chemistry (ESQC) 分子軌道を使ったconstant current topography 計算。探針効果を含めると実測像と一致する。

[DFTB] Constant current STM image of pentacene

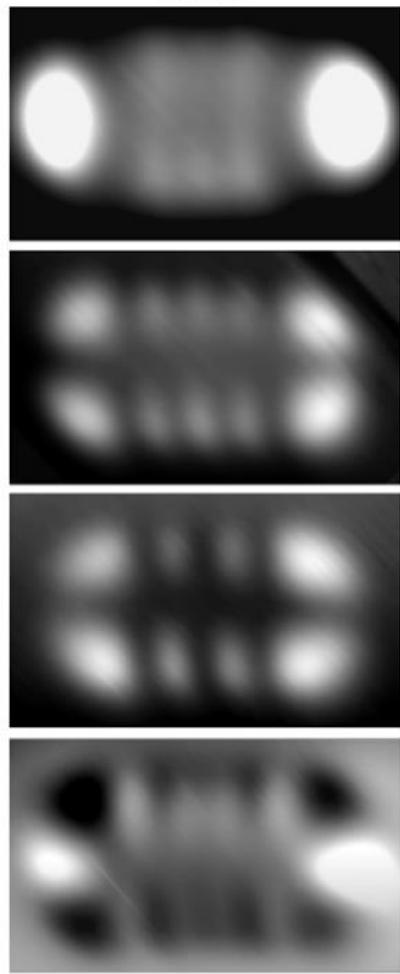
Ref. Pentacene on Au(111)

Experiment

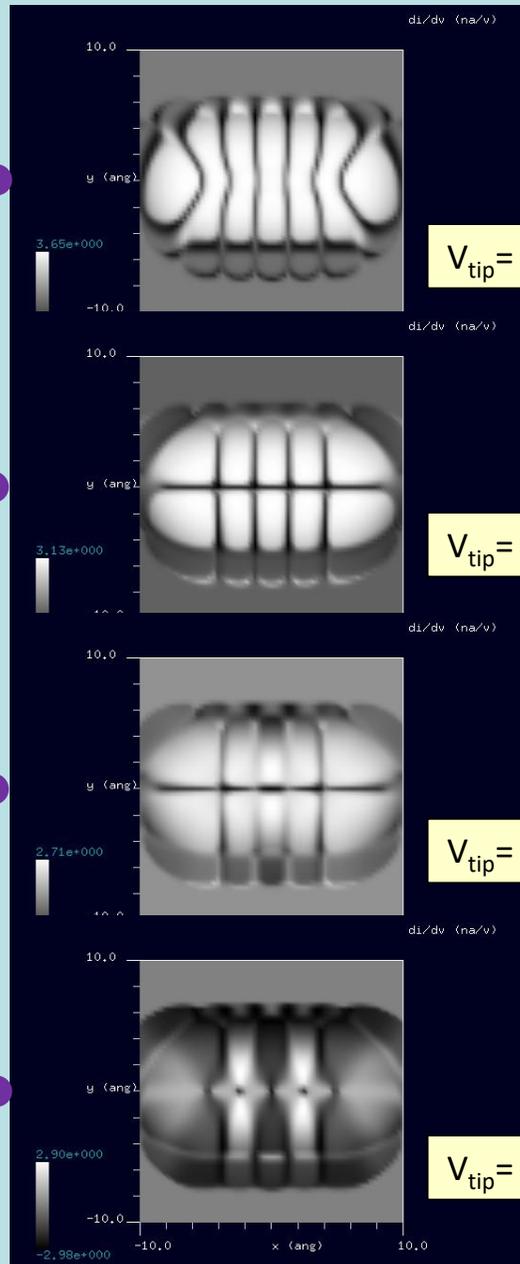
(b)

dl/dV

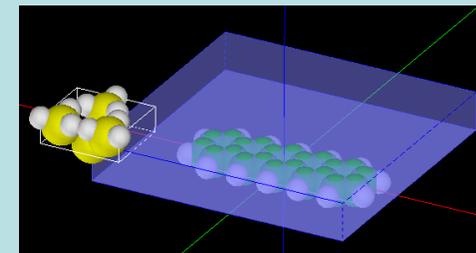
LUMO (+1300mV)
HOMO (-900mV)
HOMO-1 (-1900mV)
HOMO-2 (-2500mV)



W.-H. Soe *et al.*, PRL 102, 176102 (2009).



DFTB dI/dV map



探針: Si_4H_9
試料: Pentacene molecule.
Without substrate.
Current = 5 nA
for all calculations

[DFTB] Constant current STM image of pentacene

DFTB constant current topography

Ref. Pentacene on Au(111)

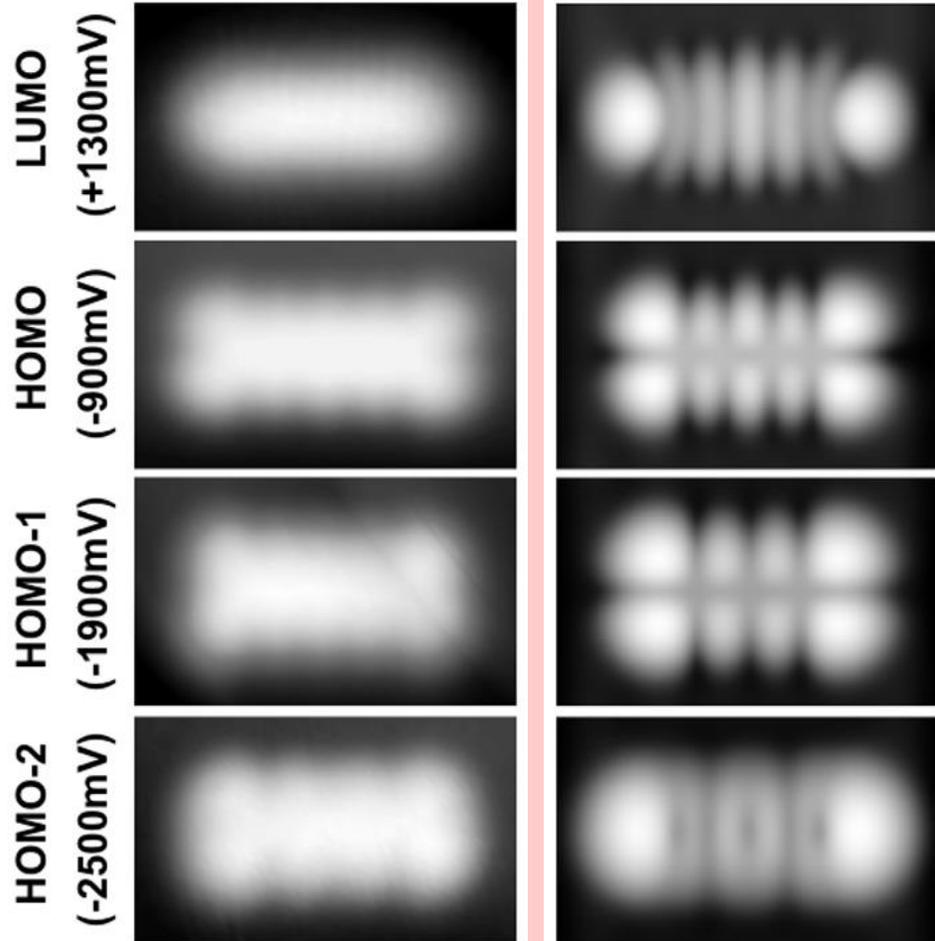
Experiment

Calculation

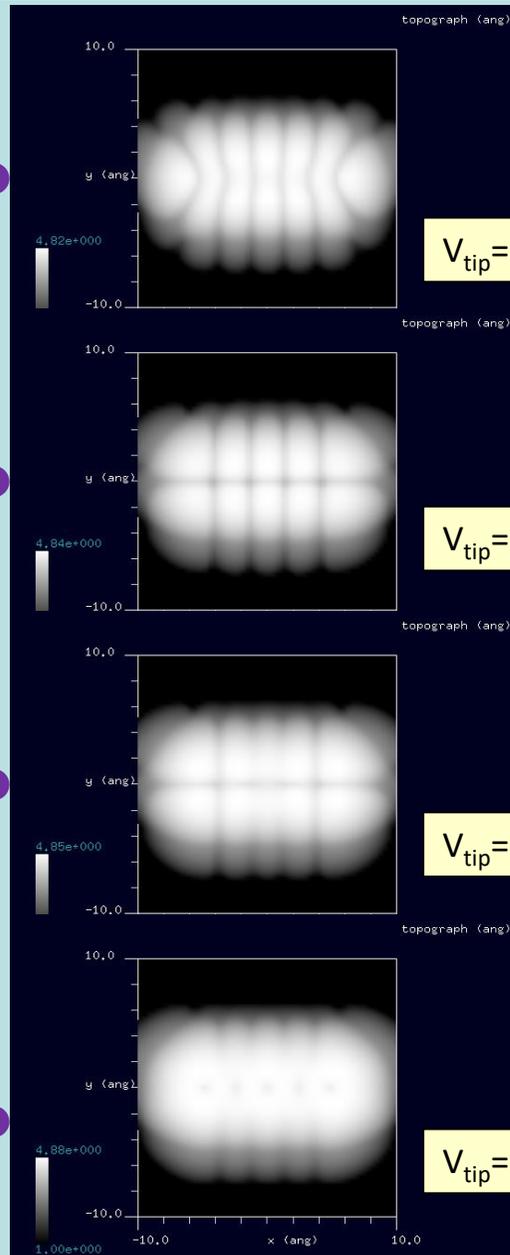
(b)

Topography

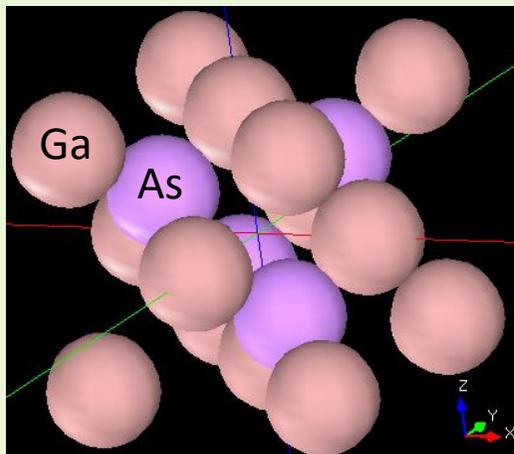
ESQC



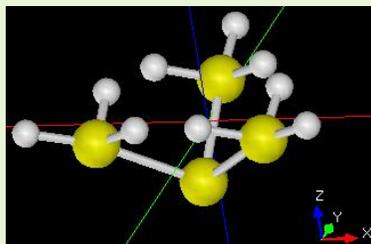
W.-H. Soe *et al.*, PRL 102, 176102 (2009).



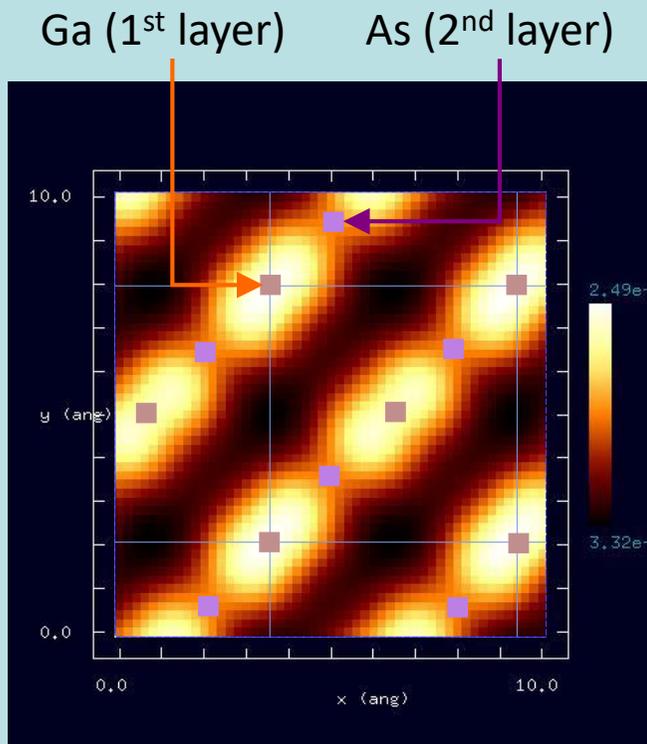
【DFTB】GaAs(100)表面のSTMシミュレーション



試料:GaAs(100)の単位格子



探針:Si₄H₉



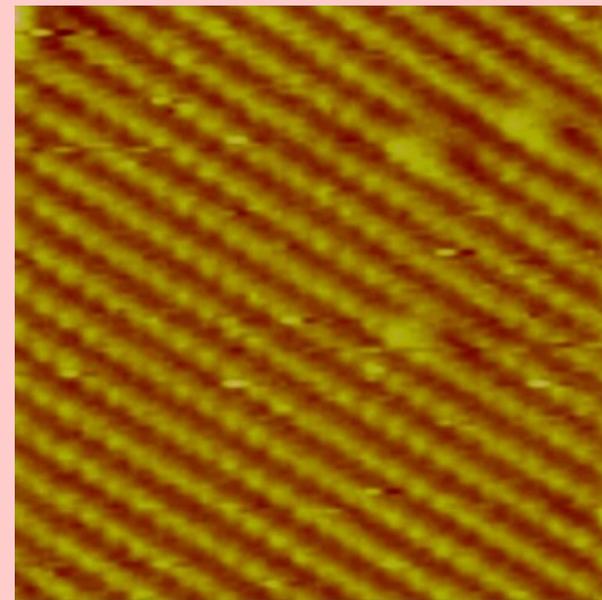
シミュレーション結果

探針 - 試料間の距離: 3.0[Å]

探針バイアス: +2.0[V]

高さ一定STM計算

cf. Experiment



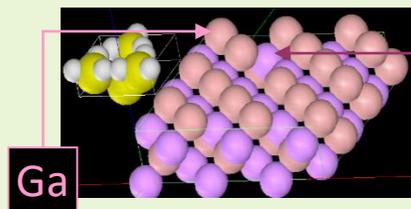
GaAs (100) surface cleaved in UHV (7.2 nm x 7.2 nm) (STM).

<http://info.ifpan.edu.pl/~wawro/subframes/Surfaces.htm>

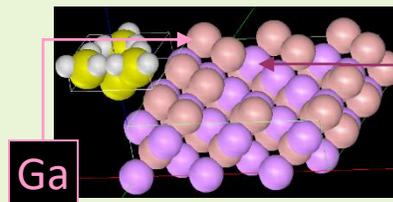
探針の種類、スキャンモード、
バイアス、電流の情報なし。

第2層目のAsの影響で電流値の高い領域が斜めになった。

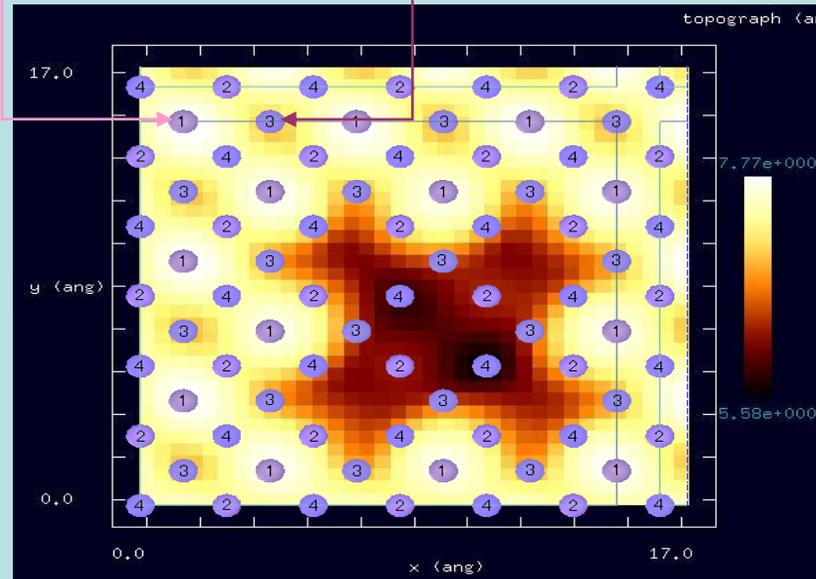
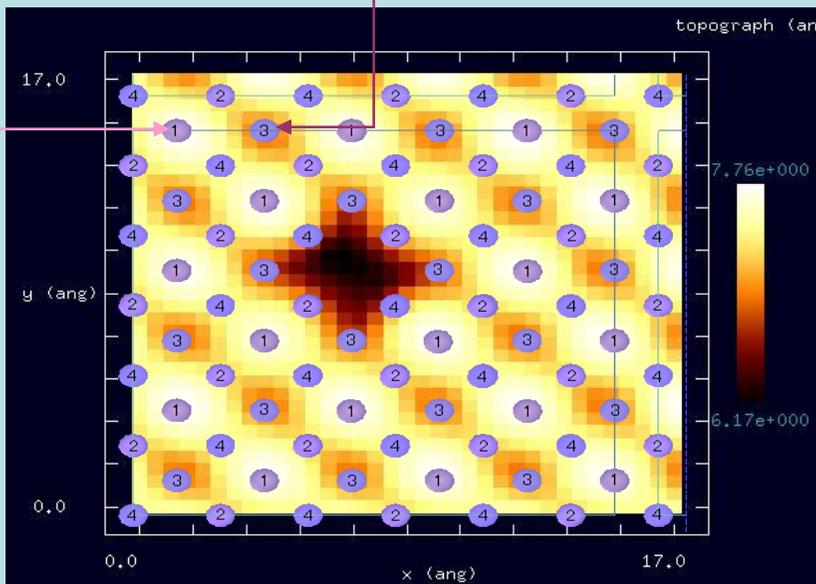
【DFTB】GaAs(100)結晶表面の欠陥のconstant current STMシミュレーション



探針: Si_4H_9
試料: GaAs(100)表面の
最表面からGa原子を
1つ除去したモデル



探針: Si_4H_9
試料: GaAs(100)表面の
最表面からGa原子を
5つ除去したモデル



シミュレーション結果

constant current モード

電流値: 10,000[nA]

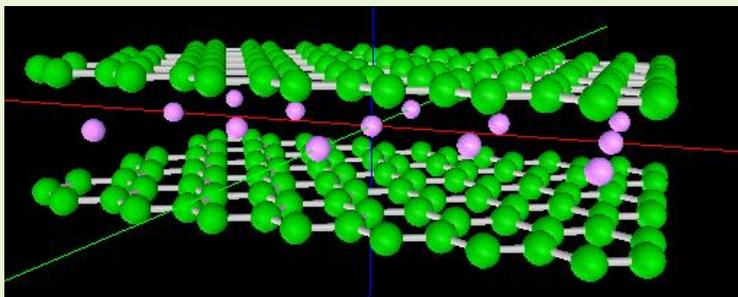
探針バイアス: 1.0[V]

範囲: 17.0[Å] × 17.0[Å]

最表面からGa原子を5つ除去すると、第2層目のAs原子の凹凸が見える

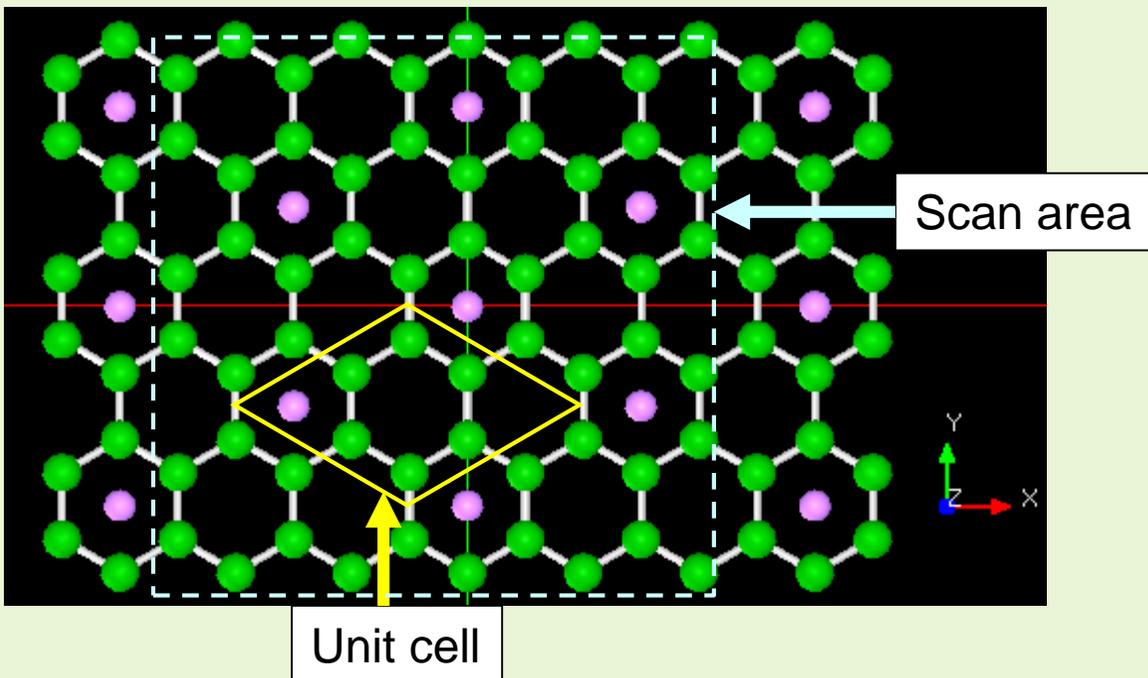
【DFTB】Li-GICのSTM像シミュレーション

Li-GIC: Liイオンのグラファイト層間化合物

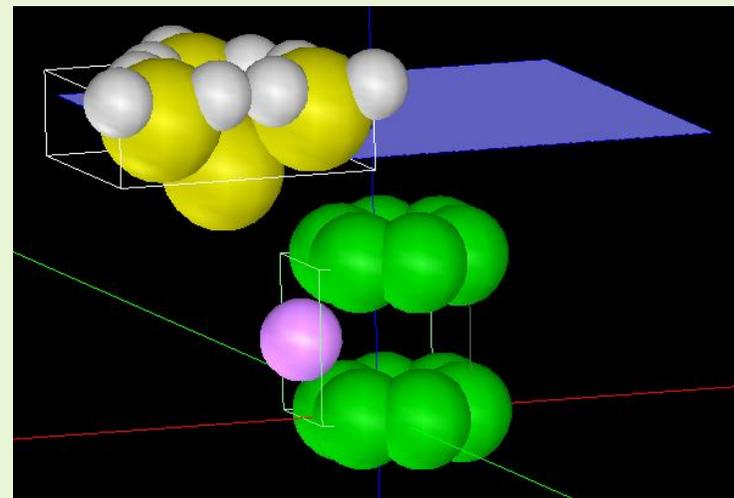


2層のグラフェンシート内に Li 原子を配置
層間距離 3.70 Å

上から見た図



シミュレートモデル



探針: Si₄H₉
試料: Li-GIC
探針高さ: 3.0 Å
スキャンエリア: 12 Å x 12 Å

探針のバイアスをいくつか選び、
高さ一定STM像をシミュレート

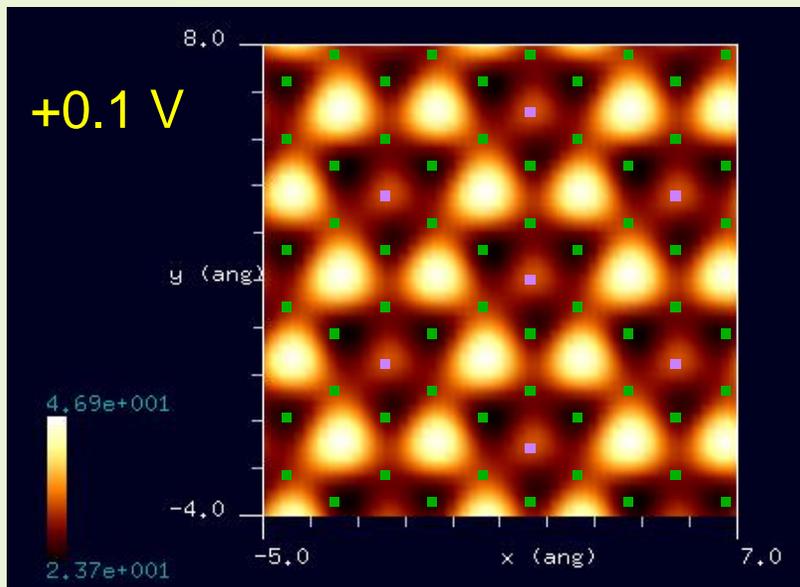
【DFTB】Li-GICのSTM像シミュレーション

探針バイアス

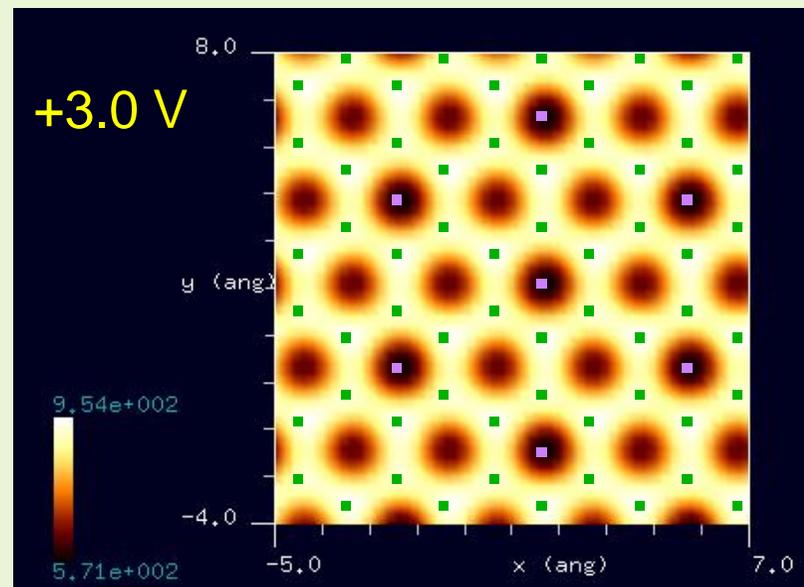
+0.1 V

電流値

強 ↑
弱 ↓



+3.0 V

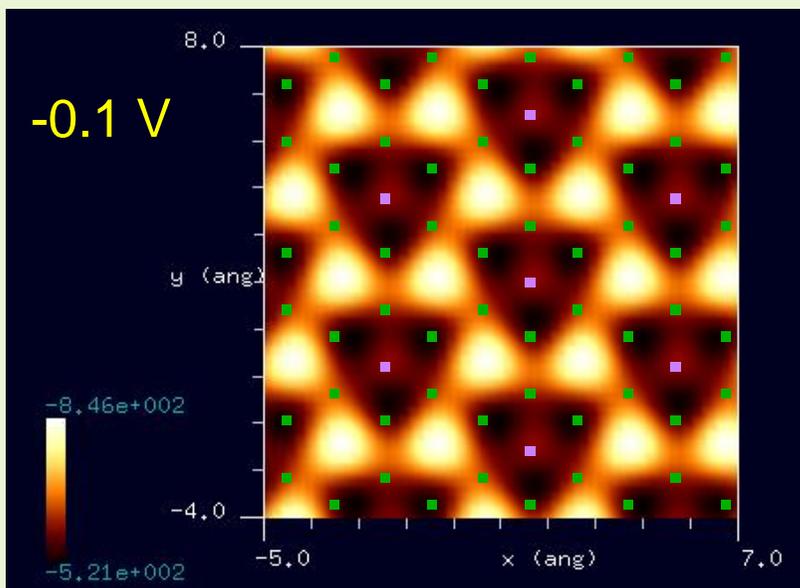


探針バイアス

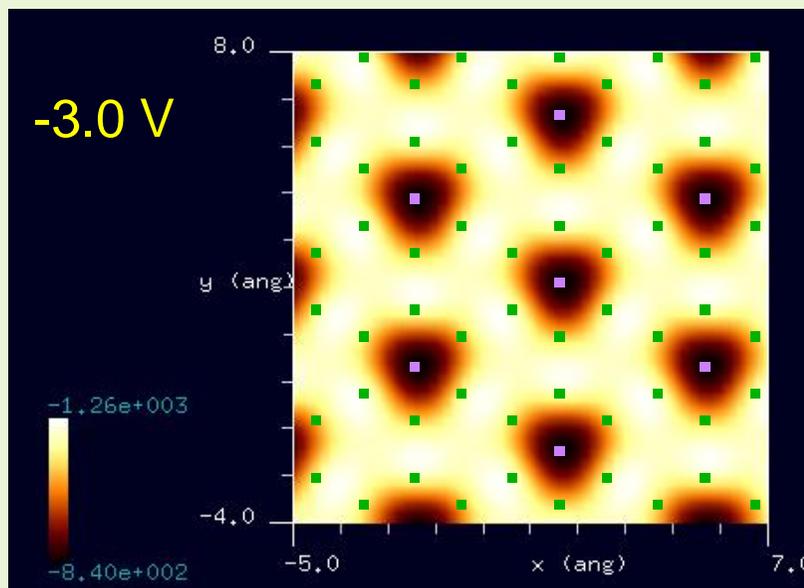
-0.1 V

電流値

強 ↑
弱 ↓



-3.0 V

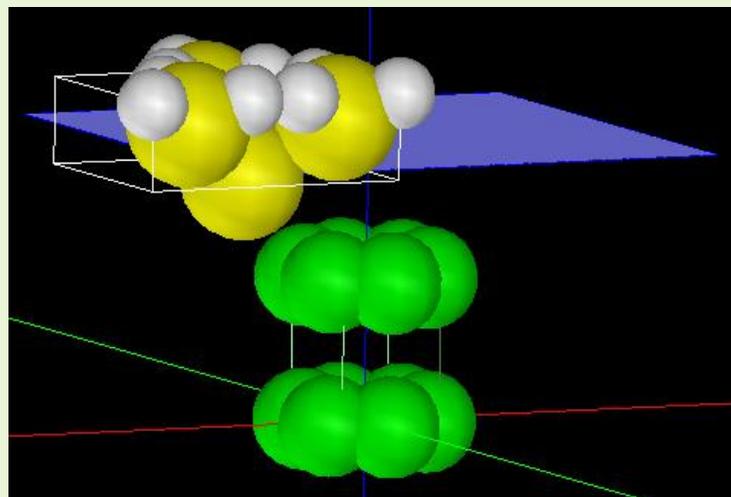


表面から2層目にあるLi原子の位置を敏感に反映したSTM像となった。

【DFTB】Li-GICのSTM像シミュレーション

比較のため、グラフェンシートのみのものでSTM像を計算した。

シミュレートモデル



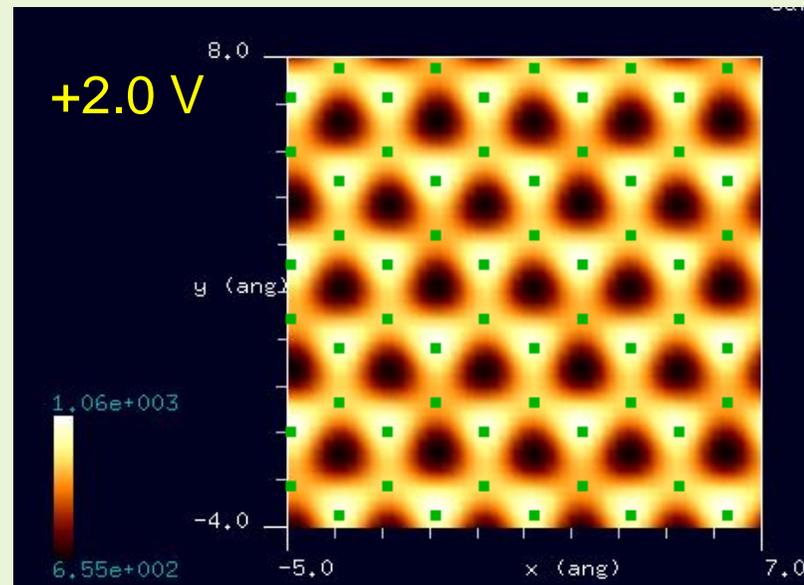
探針: Si_4H_9
試料: 2 graphene sheets
層間距離: 3.34 \AA
探針高さ: 3.0 \AA
スキャンエリア: $12 \text{ \AA} \times 12 \text{ \AA}$

探針のバイアスをいくつか選び、高さ一定STM像をシミュレート

探針
バイアス

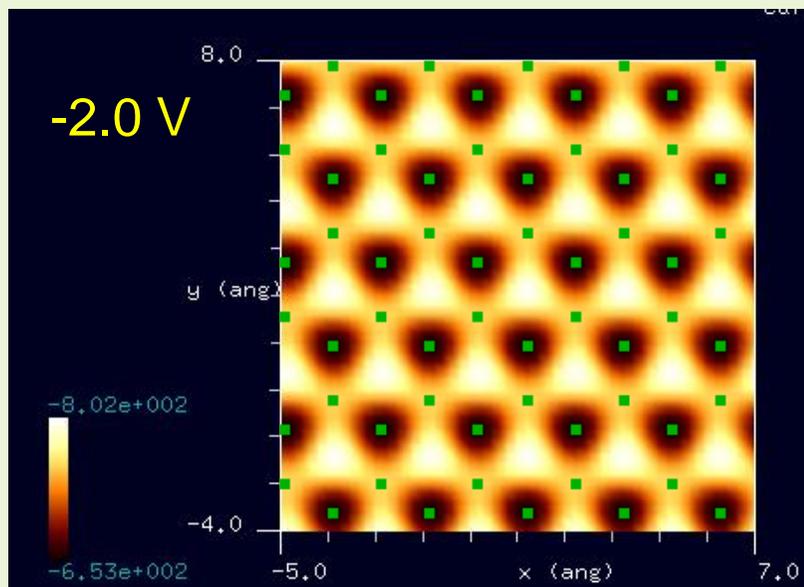
電流値

強 ↑
弱 ↓



電流値

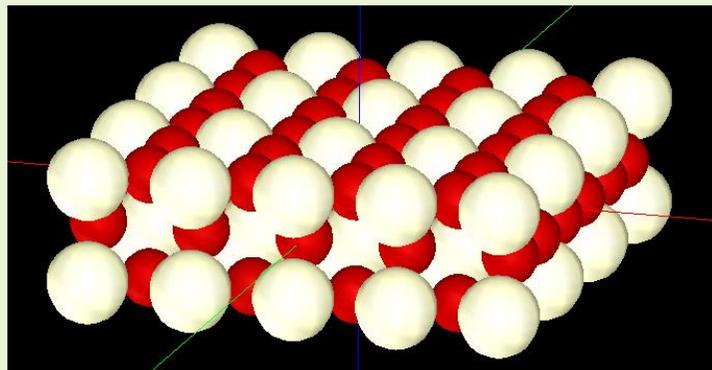
強 ↑
弱 ↓



ハニカム構造を反映したSTM像となった。バイアスの正負で電流値の強度が逆転した。

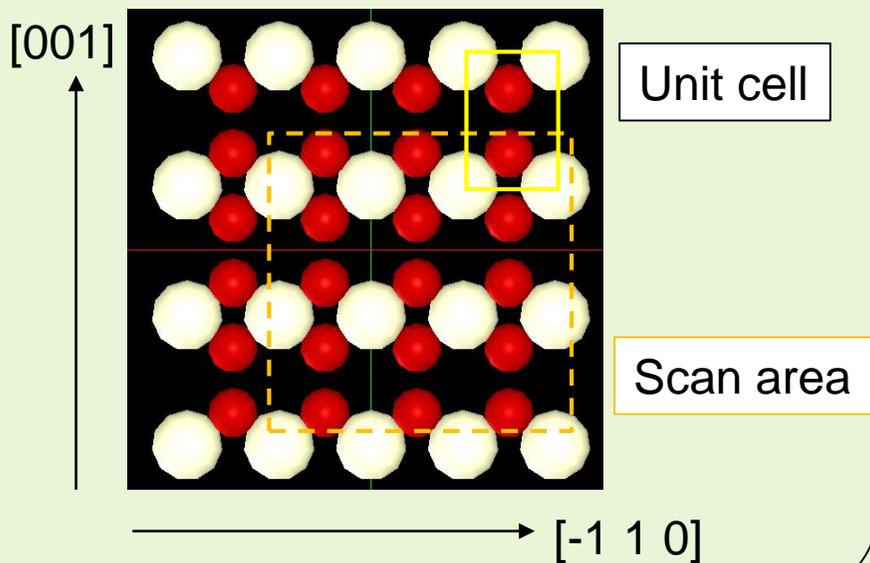
【DFTB】CeO₂ (110) 表面のSTM像シミュレーション

CeO₂ (110) 表面の構造



赤 = 酸素原子。白 = Ce原子。

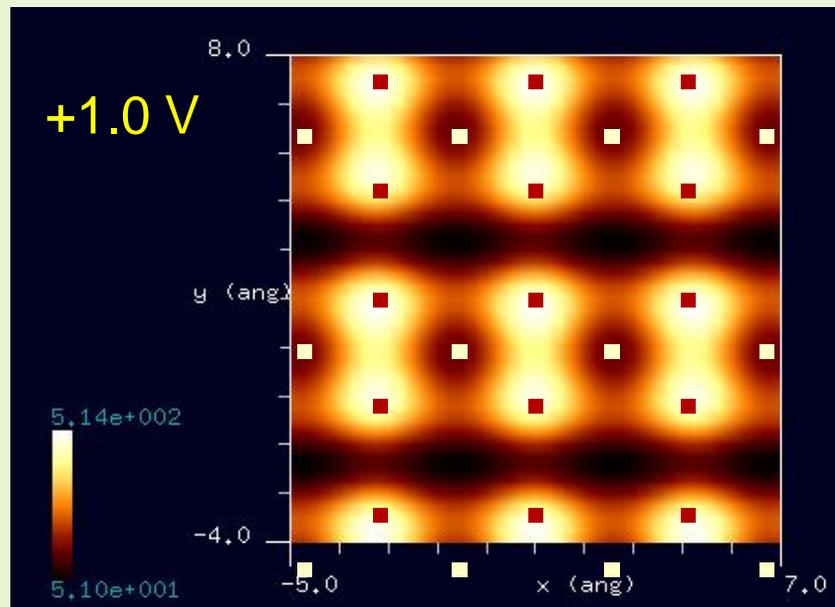
最表面の原子配置



探針
バイアス

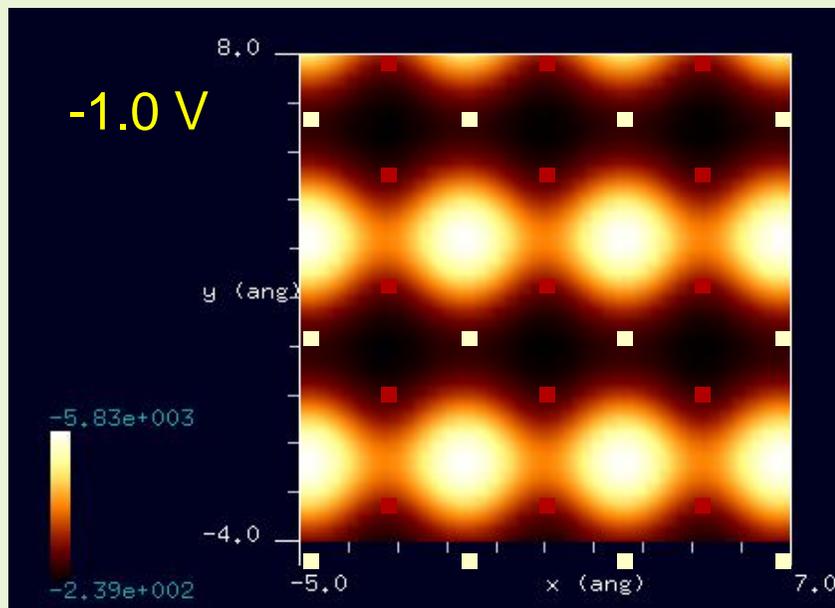
電流値

強 ↑
弱 ↓



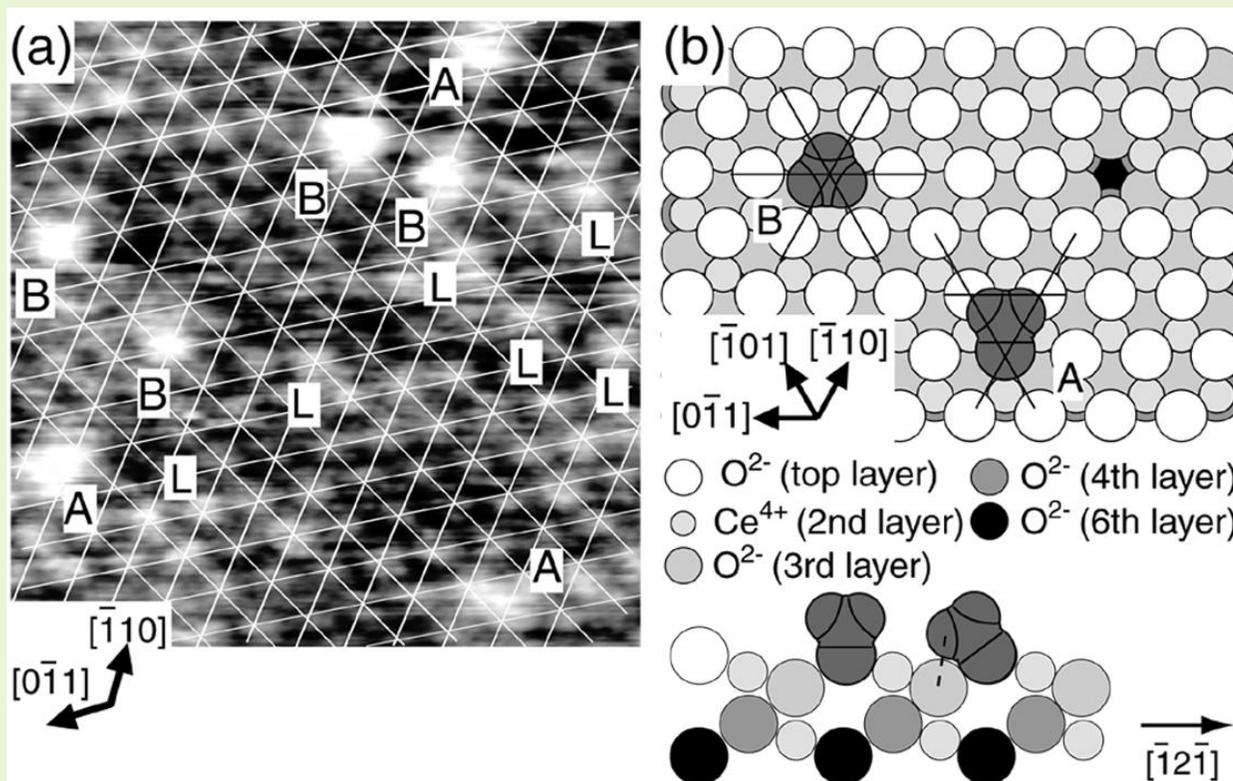
電流値

強 ↑
弱 ↓



バイアスの正負によって、趣の全く異なるSTM像が得られた。

【DFTB】CeO₂(111) 表面のnc-AFM像(参考)



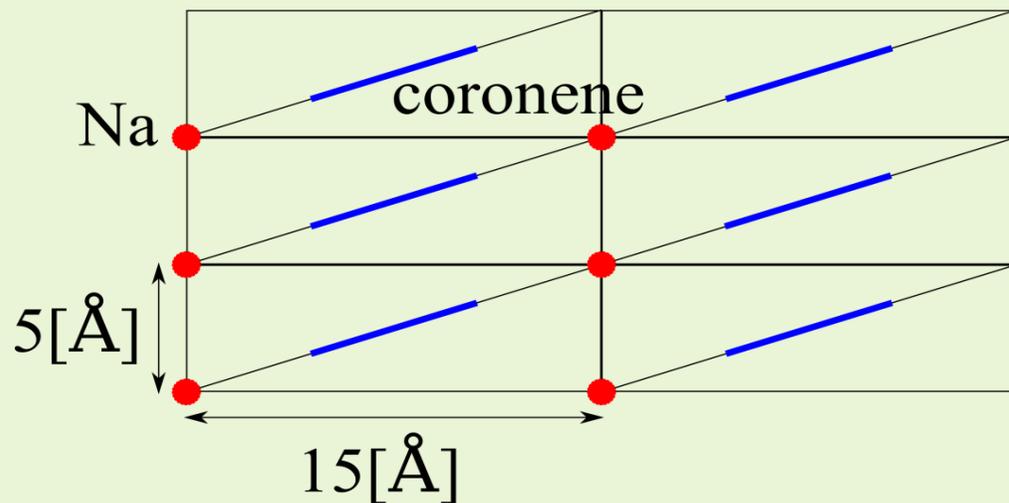
(a) CeO₂(111) 表面に室温で4.5 L メタノールを露出した後に観察された原子分解能NC-AFM 像。(5.3 × 5.3 nm², ΔA ~ 6 nm, V_s = -0.677 V, Δf ~ 194 Hz) (b) メキシ種(メタノール)の吸着サイトのモデル。

分子構造総合討論会2004講演要旨集

3B01 NC-AFM 及び STM による CeO₂(111) 表面での吸着サイト・吸着分子構造及び新規反応機構に関する研究 (東大院理) ○生井 勝康, 田澤 俊樹, 岩澤 康裕

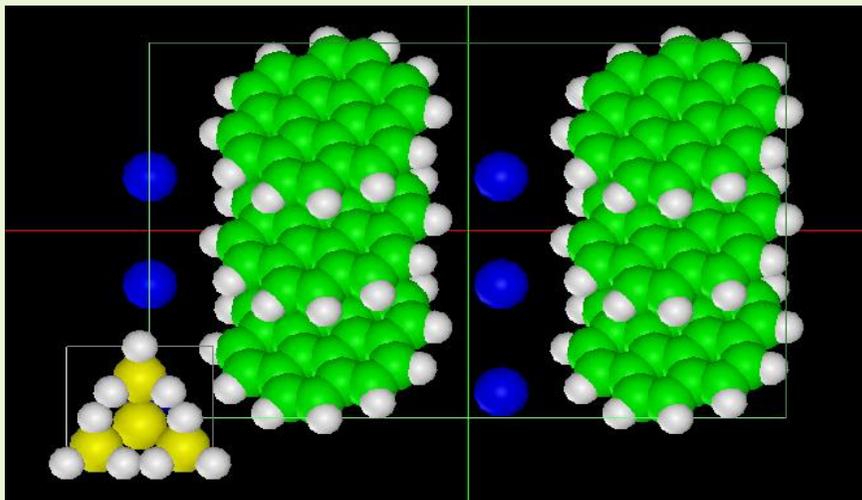
【DFTB】Au(111)面上でのcoronene分子吸着構造のSTMシミュレーション

Coronene分子およびNa原子の位置関係

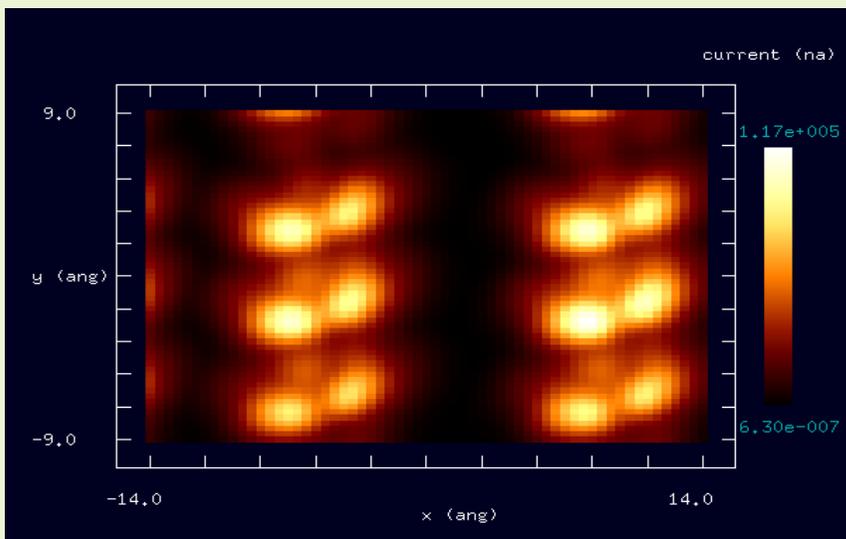


Coronene分子は、Au(111)面に対して40°傾いているとする

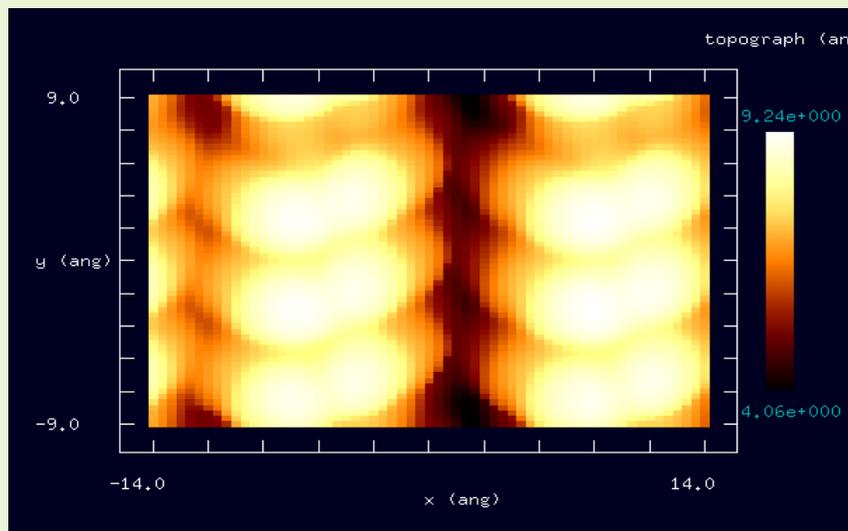
このような条件下でDFTBによりSTMシミュレーションを行う



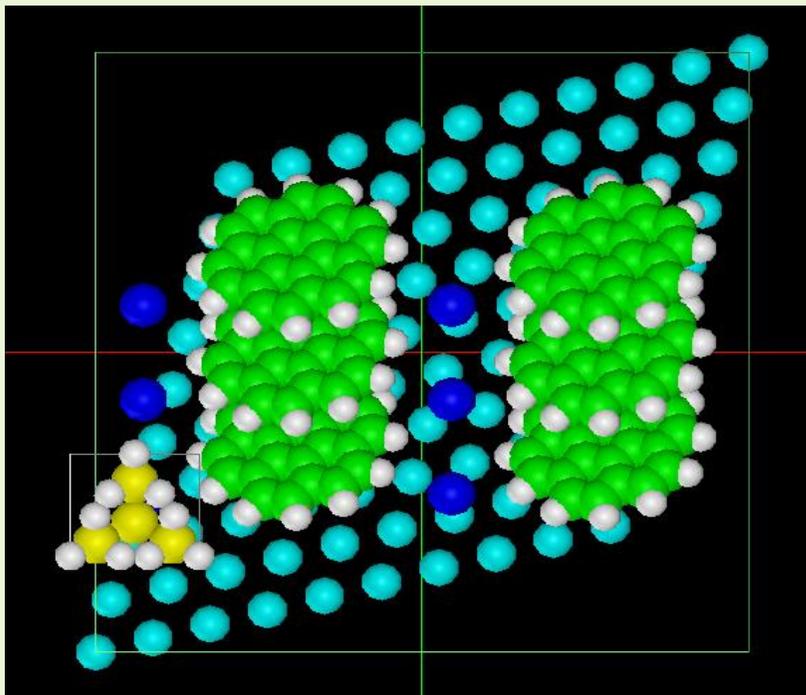
Coronene分子、Na原子を配置した図：
Au(111)面は考慮に入れずSTMシミュレーションを実行するとする。
H原子で終端されたSi探針を使用する。



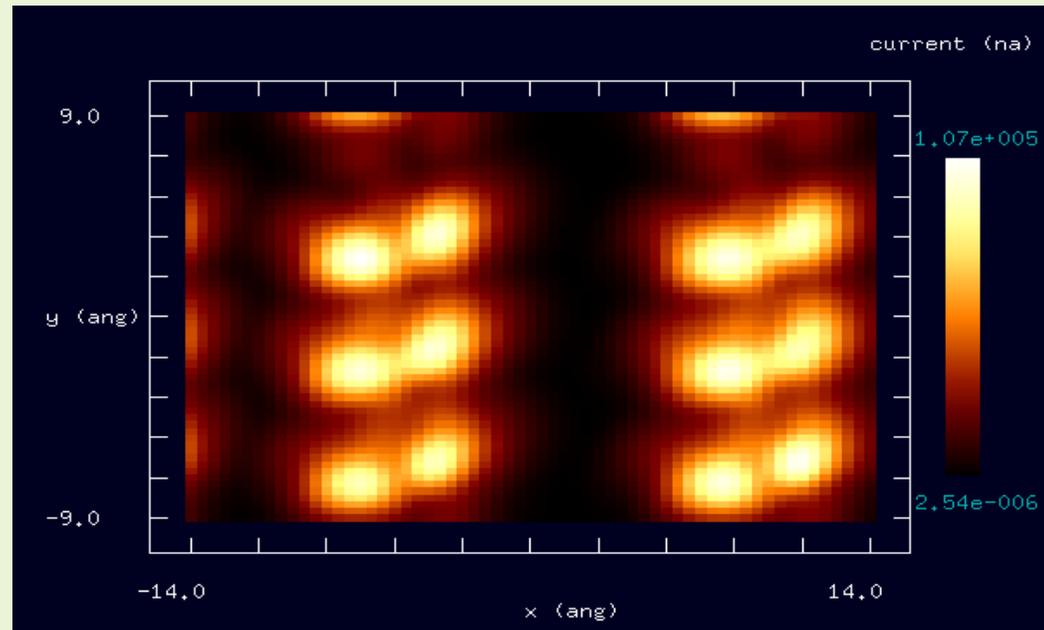
高さ一定モードでのSTMシミュレーション画像



トンネル電流値一定モードでのSTMシミュレーション画像

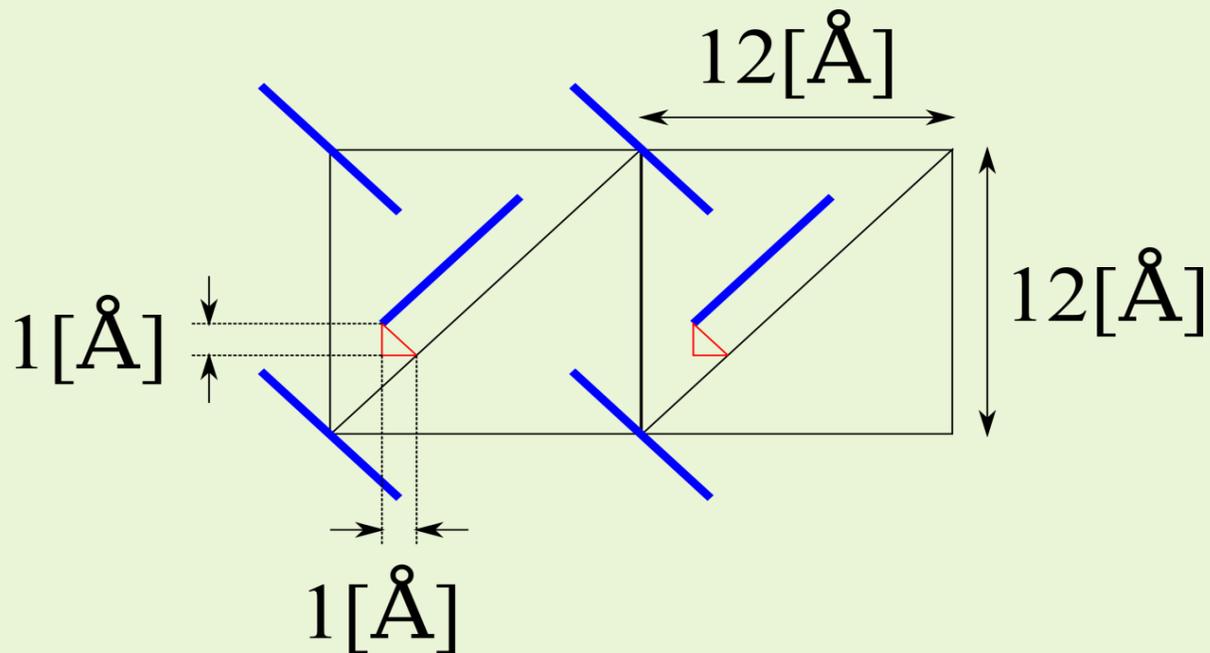


Au(111)面上にCoronene分子、
Na原子を配置した図：
H原子で終端されたSi探針を使っ
てSTMシミュレーションを実行する
とする



高さ一定モードでのSTMシミュレーション画
像

Coronene分子の位置関係

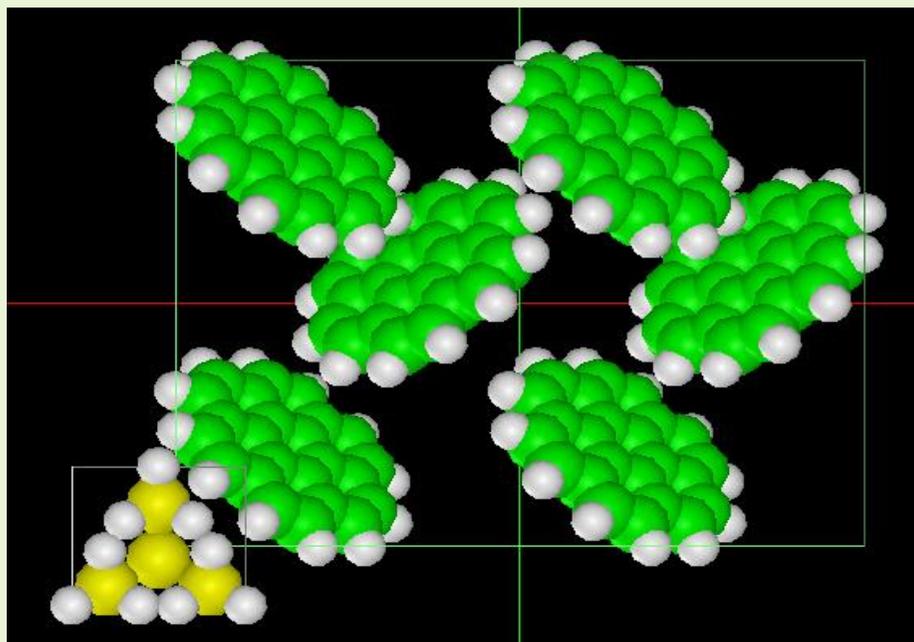


Coronene分子は、Au(111)面に対して40°傾いているとする。Coronene分子の下にアルカリ金属原子が配置されているとする。

このような条件下でDFTBによりSTMシミュレーションを行う

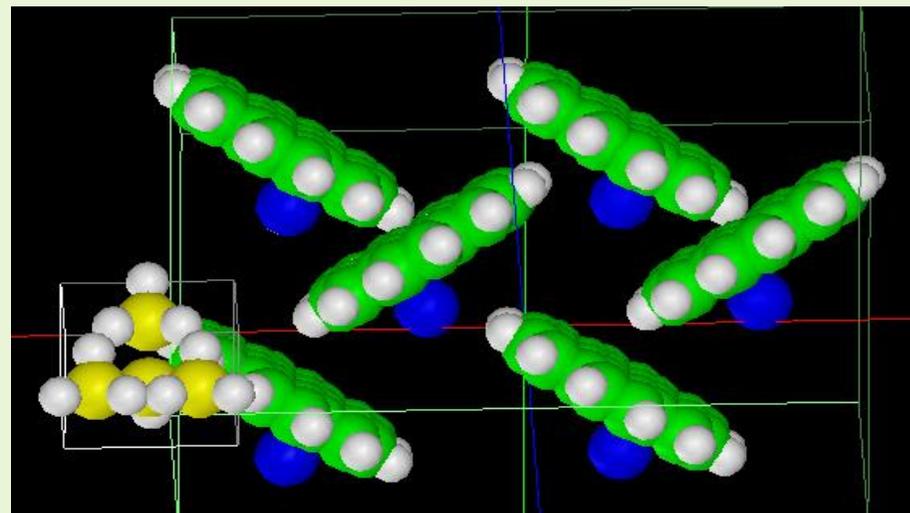
Coronene分子、Na原子を配置した図：
Au(111)面は考慮に入れずSTMシミュレーションを実行するとする。
H原子で終端されたSi探針を使用する。

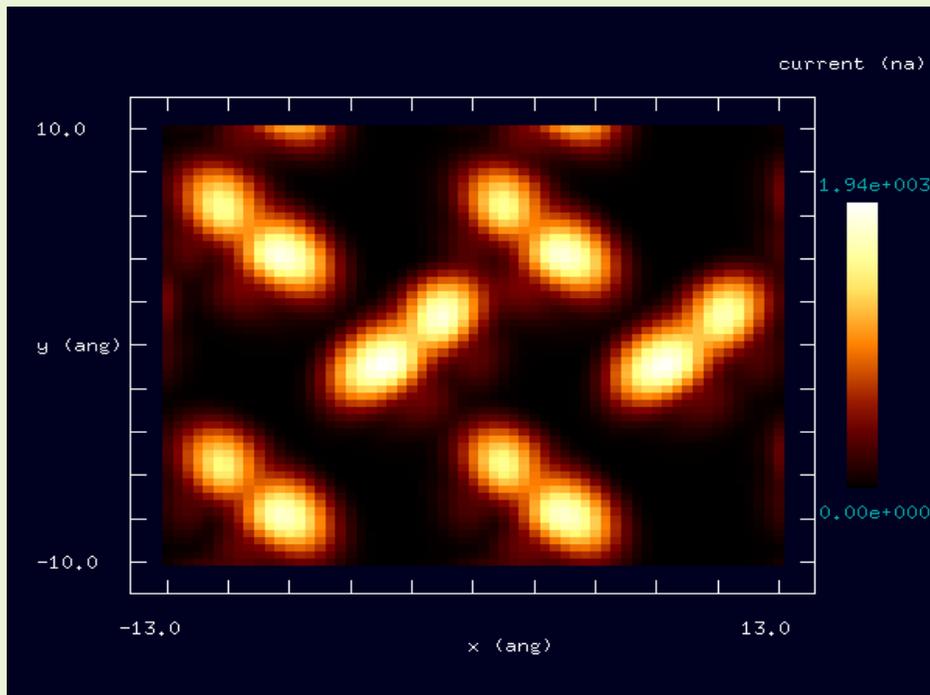
真上から見た図



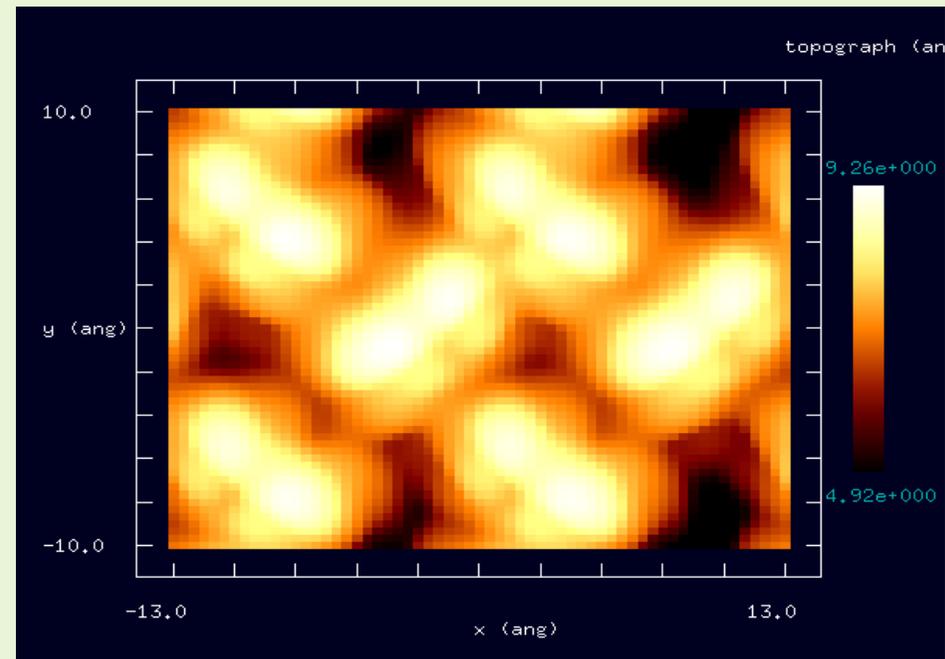
斜めから見た図

Coronene分子の下にNa原子が見えている





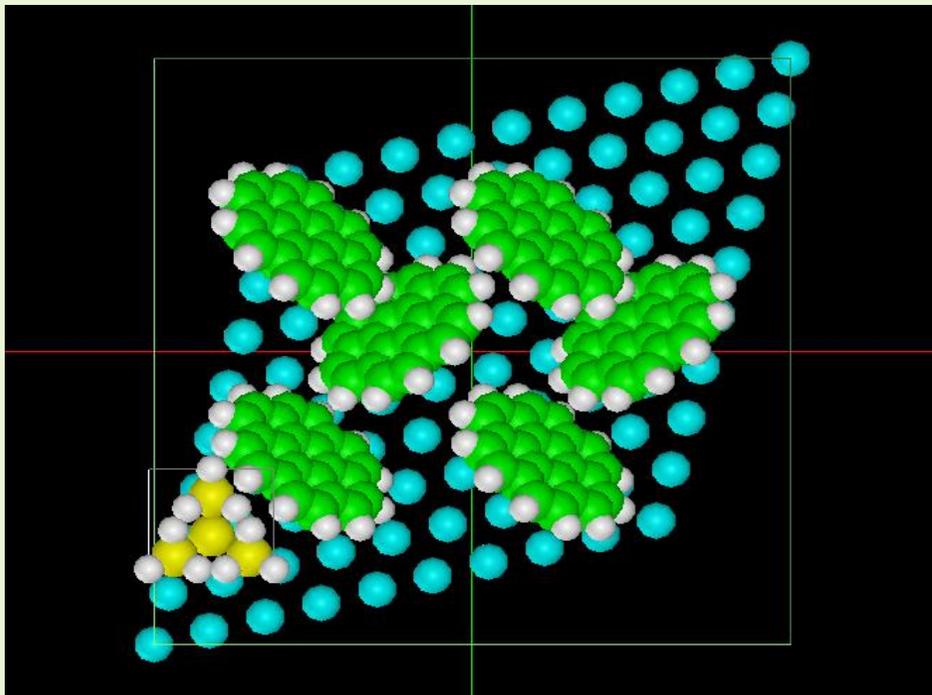
高さ一定モードでのSTMシミュレーション画像



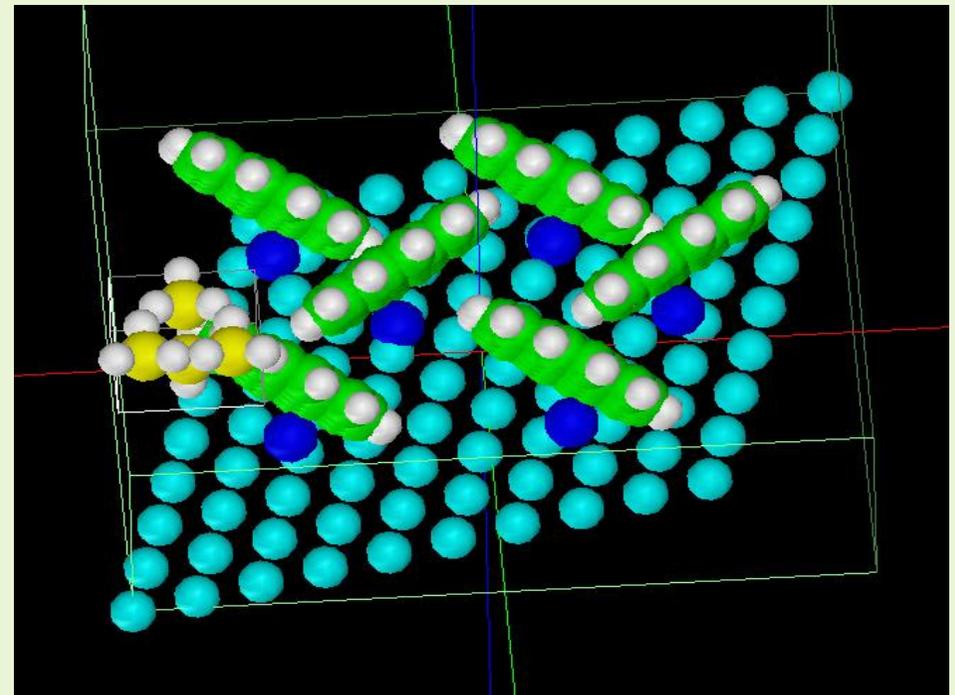
トンネル電流値一定モードでのSTMシミュレーション画像

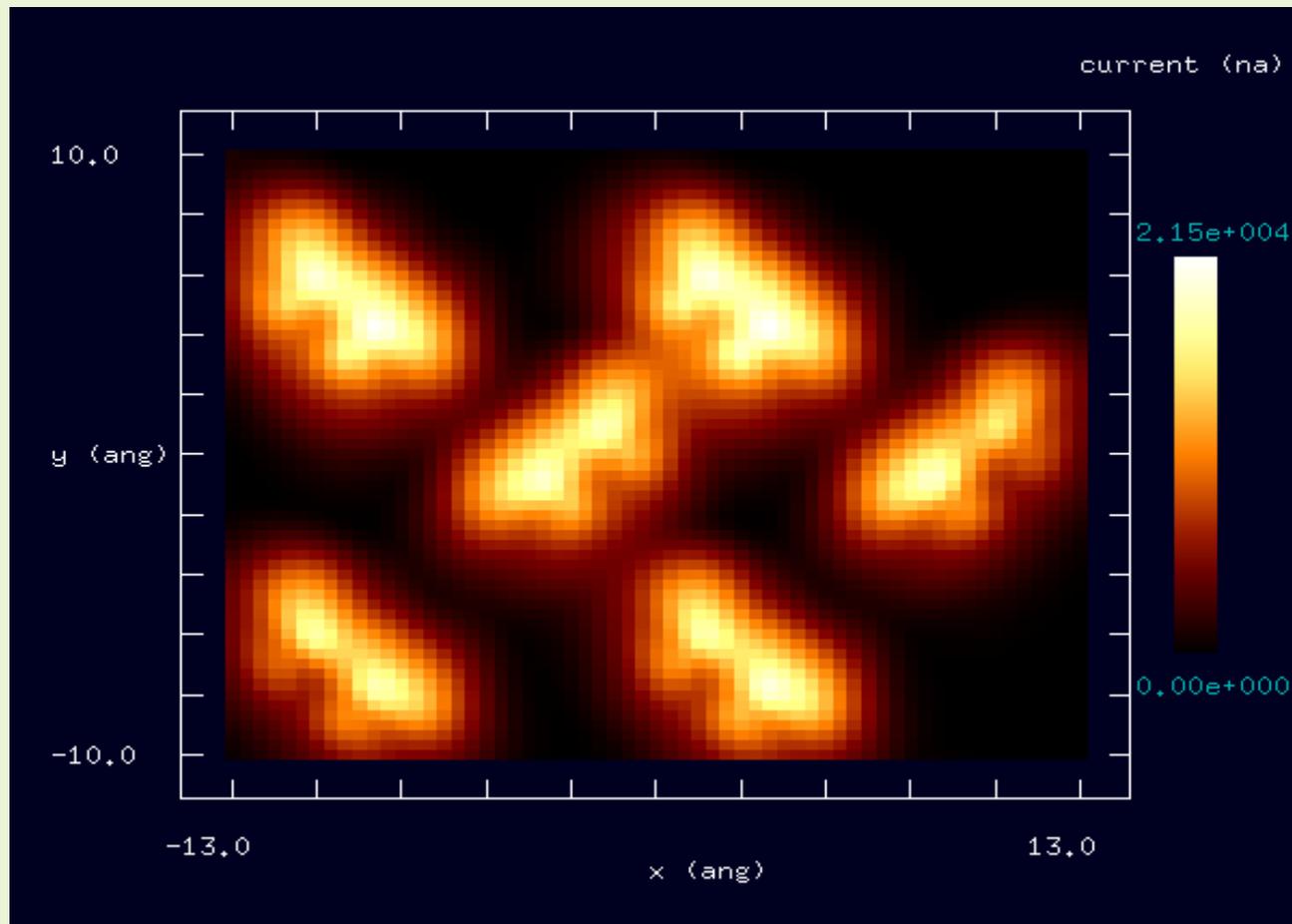
Au(111)面上にCoronene分子、Na原子を配置した図：
H原子で終端されたSi探針を使ってSTMシミュレーションを実行するとする

真上から見た図



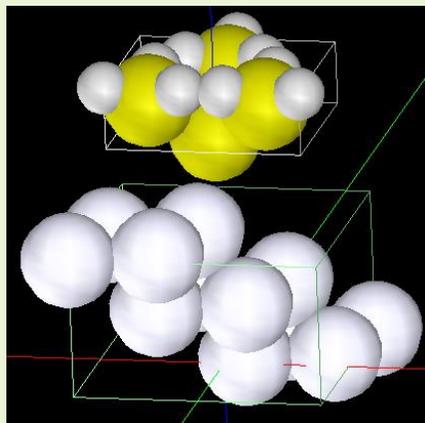
斜めから見た図
Coronene分子の下にNa原子が見えて
いる



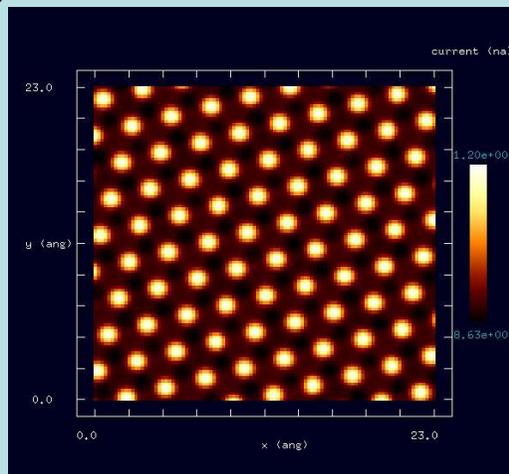


高さ一定モードでのSTMシミュレーション画像

【DFTB】Pt(111)表面のconstant height STMシミュレーション



探針 (Si_4H_9) と試料 (Pt(111))



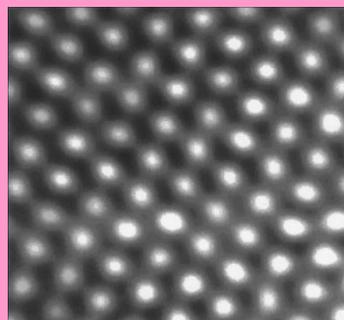
シミュレーション結果

高さ一定モード

探針 - 試料間の距離: 3.0[Å]

探針バイアス: 1.0[V]

範囲: 23.0[Å] × 23.0[Å]



実験結果

constant current STM

電流値: 1.0[nA]

範囲: 23.0[Å] × 23.0[Å]

sample bias voltages within ± 1 V

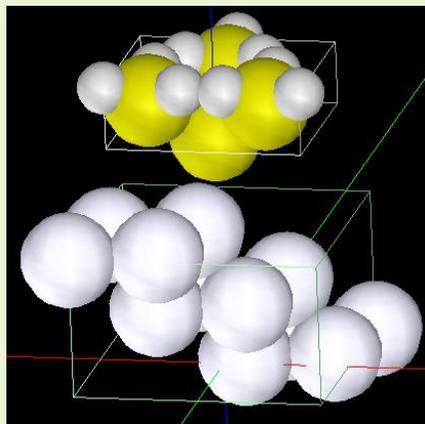
The structure and corrosion chemistry of bromine on Pt(111)

H. Xu, R. Yuro, I. Harrison

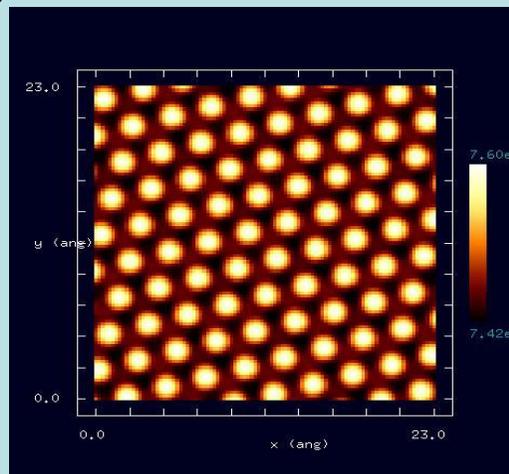
Surface Science 411 (1998) 303-315

実験結果と良く一致した

【DFTB】Pt(111)表面のconstant current STMシミュレーション



探針 (Si_4H_9) と試料 (Pt(111))



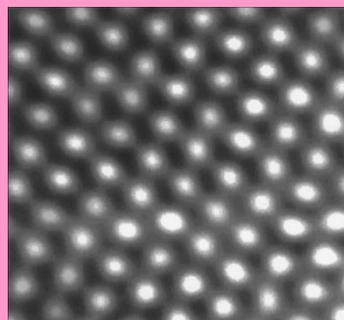
シミュレーション結果

constant current モード

電流値: 10000[nA]

探針バイアス: 1.0[V]

範囲: 23.0[Å] × 23.0[Å]



実験結果

constant current STM

電流値: 1.0[nA]

範囲: 23.0[Å] × 23.0[Å]

sample bias voltages within ± 1 V

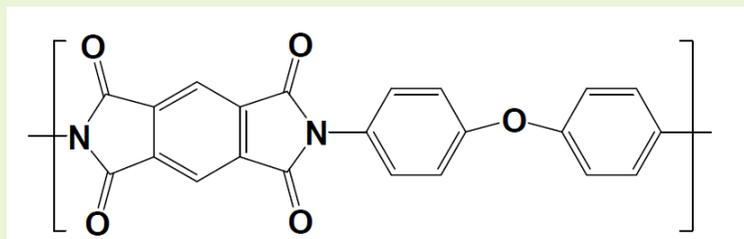
The structure and corrosion chemistry of bromine on Pt(111)

H. Xu, R. Yuro, I. Harrison

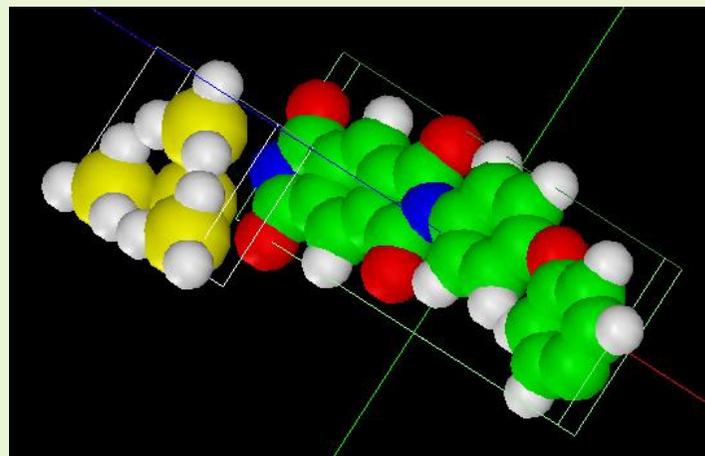
Surface Science 411 (1998) 303–315

実験結果と良く一致した

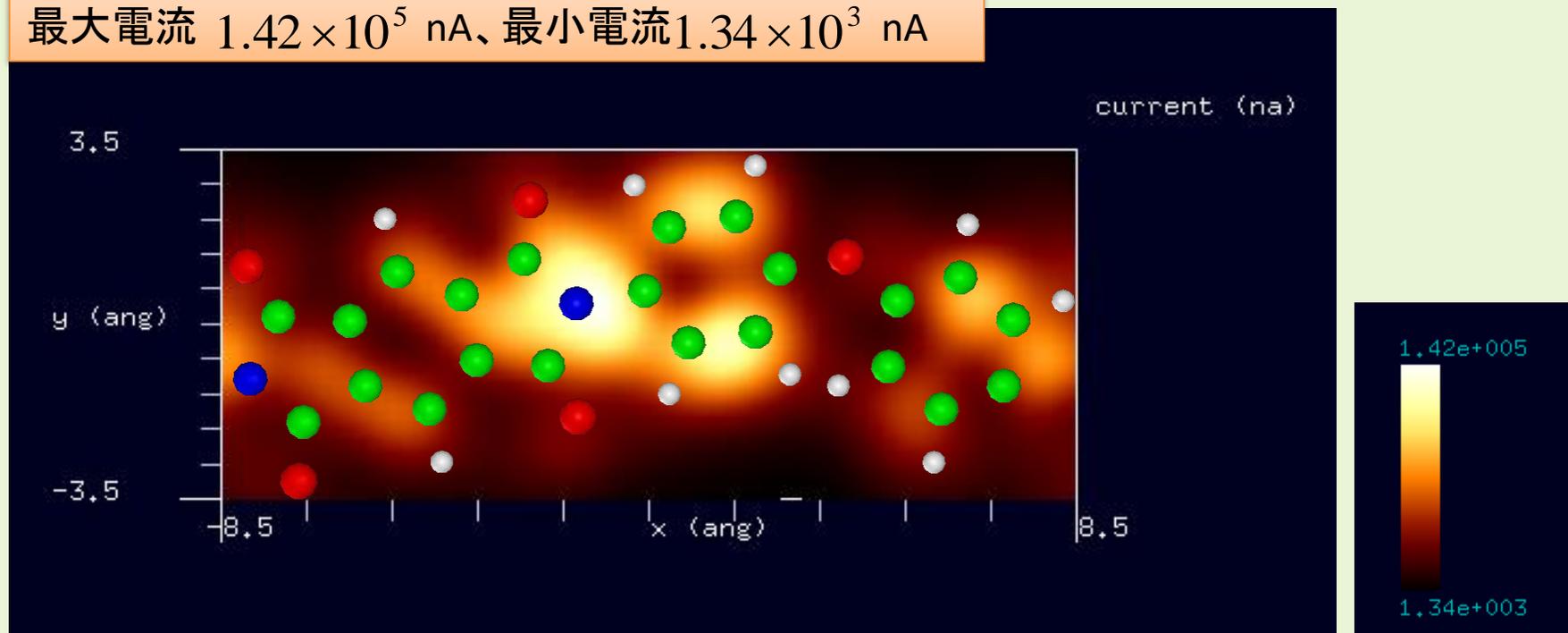
【DFTB】カプトン(Kapton)[ポリイミド(polyimide)の一種]



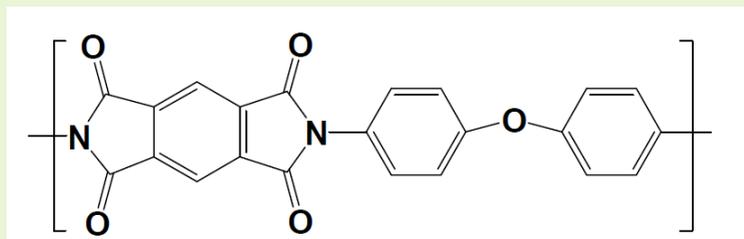
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算



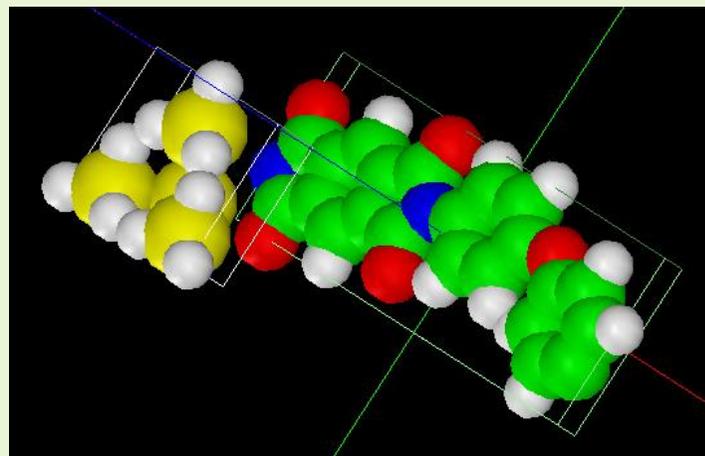
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離2.0 Å
最大電流 1.42×10^5 nA、最小電流 1.34×10^3 nA



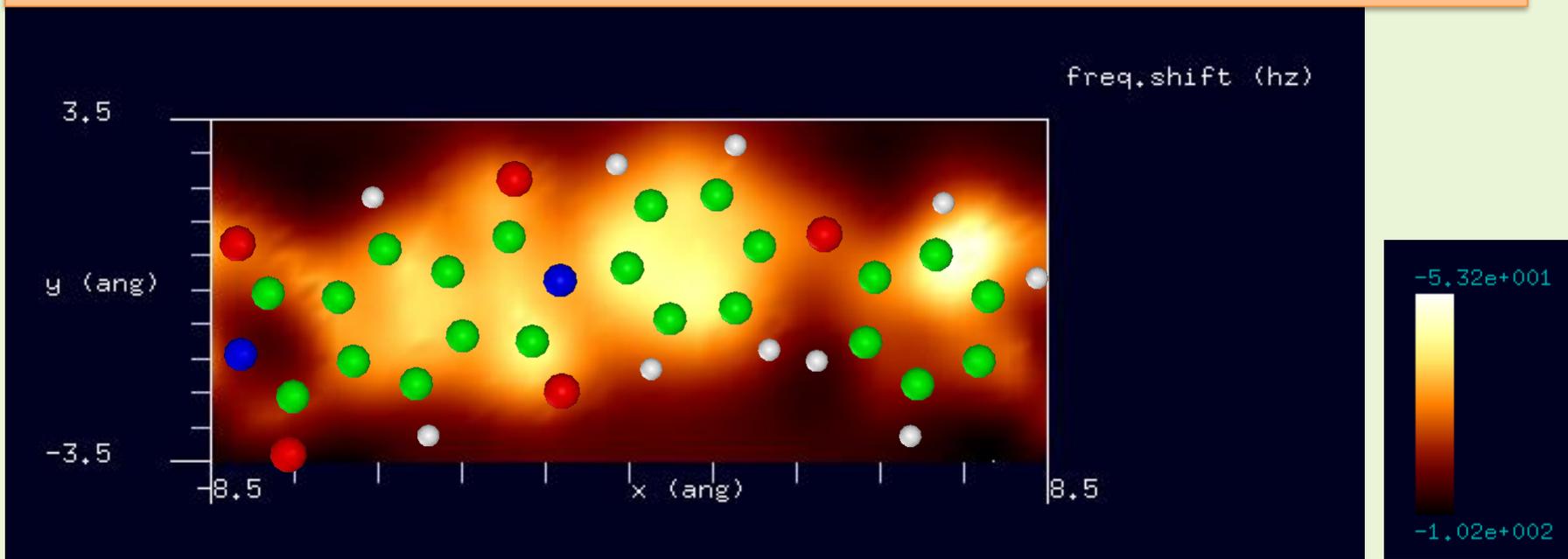
【DFTB】カプトン(Kapton)[ポリイミド(polyimide)の一種]



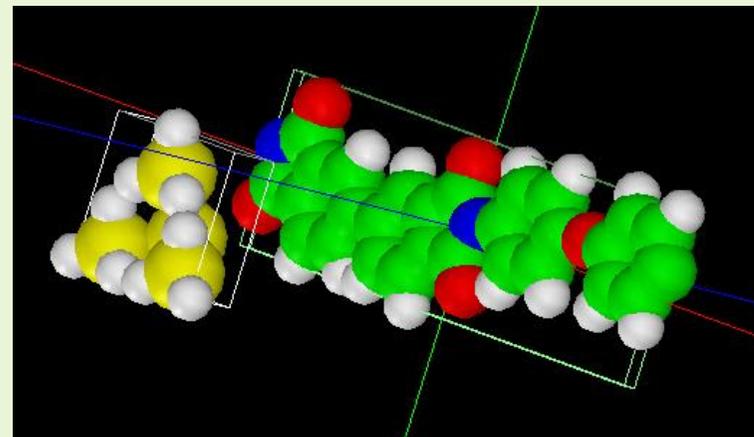
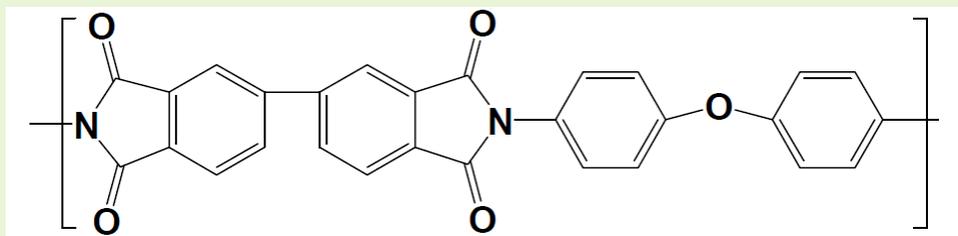
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算



周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離6.0 Å
周波数のずれは -1.02×10^2 Hzから -5.32×10^1 Hz

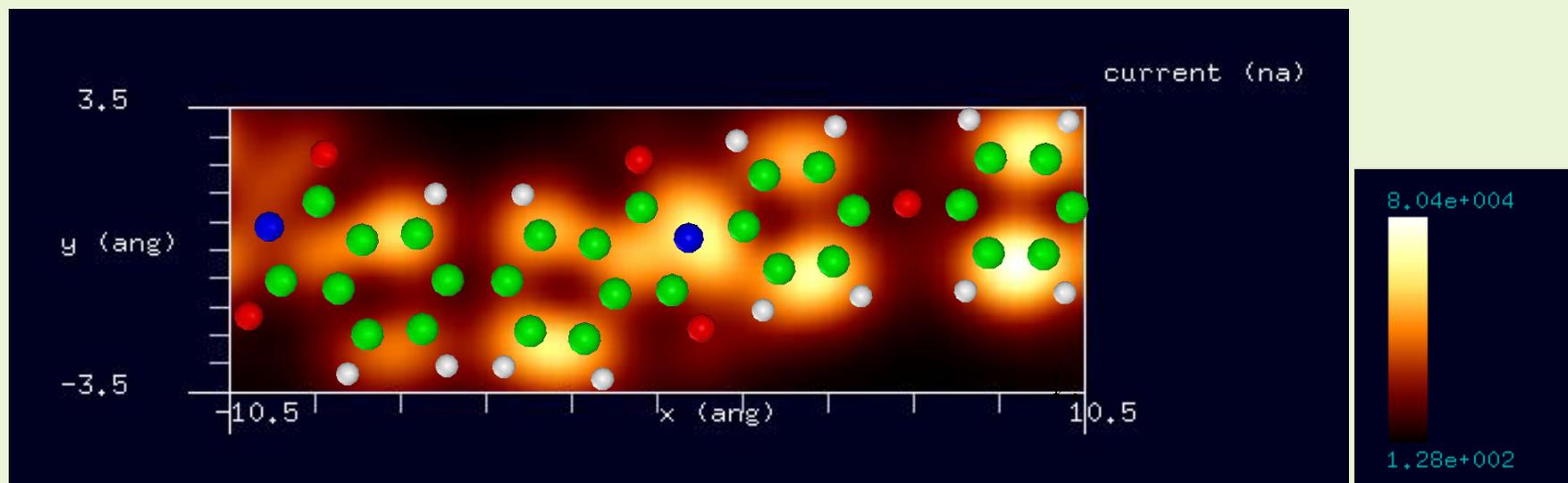


【DFTB】ユーピレックス-RN(Upilex-RN)[ポリイミド(polyimide)の一種]

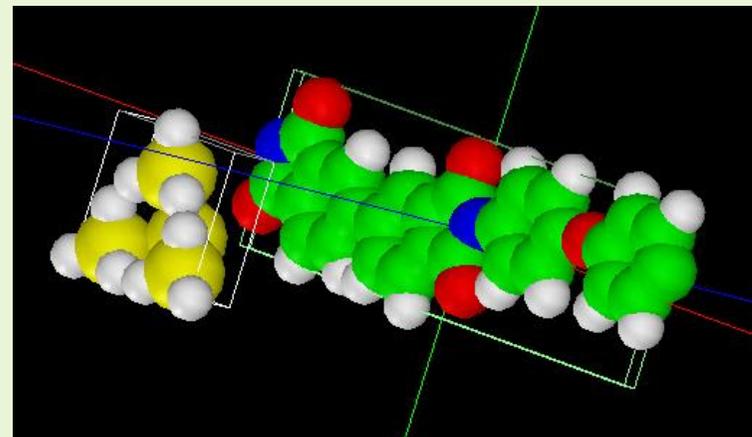
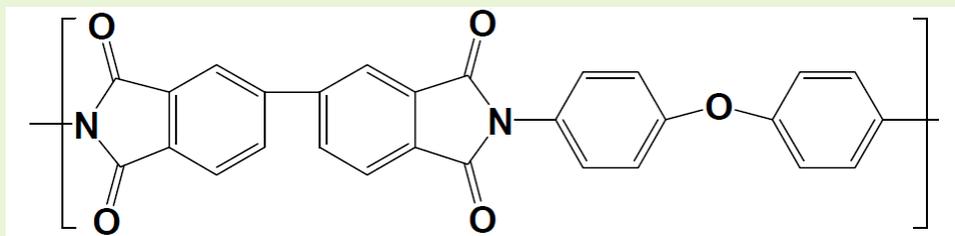


水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離2.5 Å
最大電流 8.04×10^4 nA、最小電流 1.28×10^2 nA

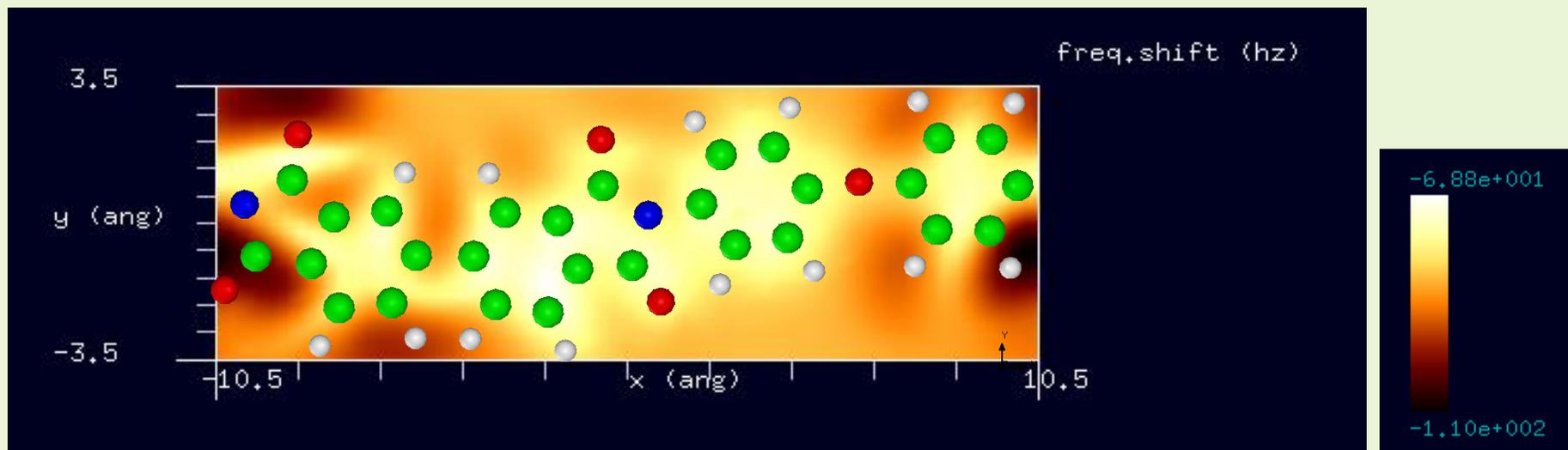


【DFTB】ユーピレックス-RN(Upilex-RN)[ポリイミド(polyimide)の一種]

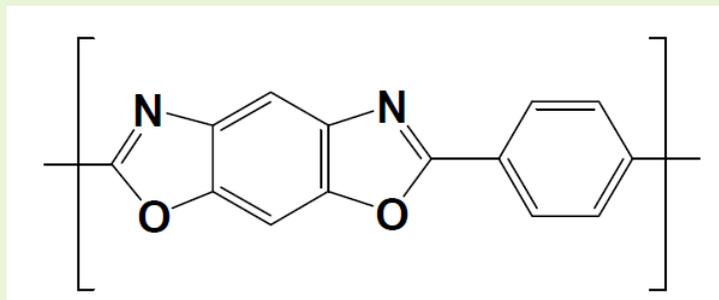


水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

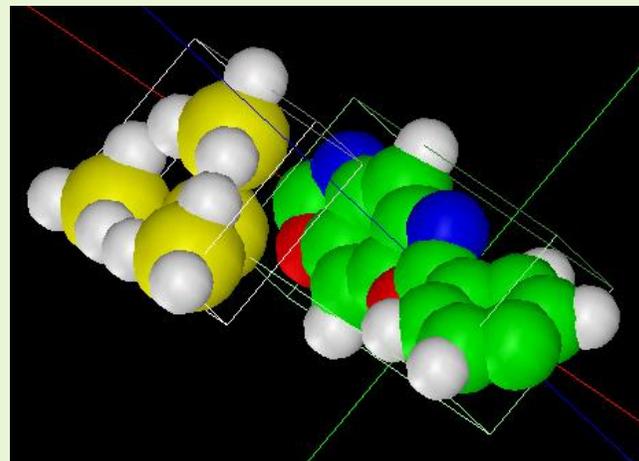
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離6.5 Å
周波数のずれは -1.10×10^2 Hzから -6.88×10^1 Hz



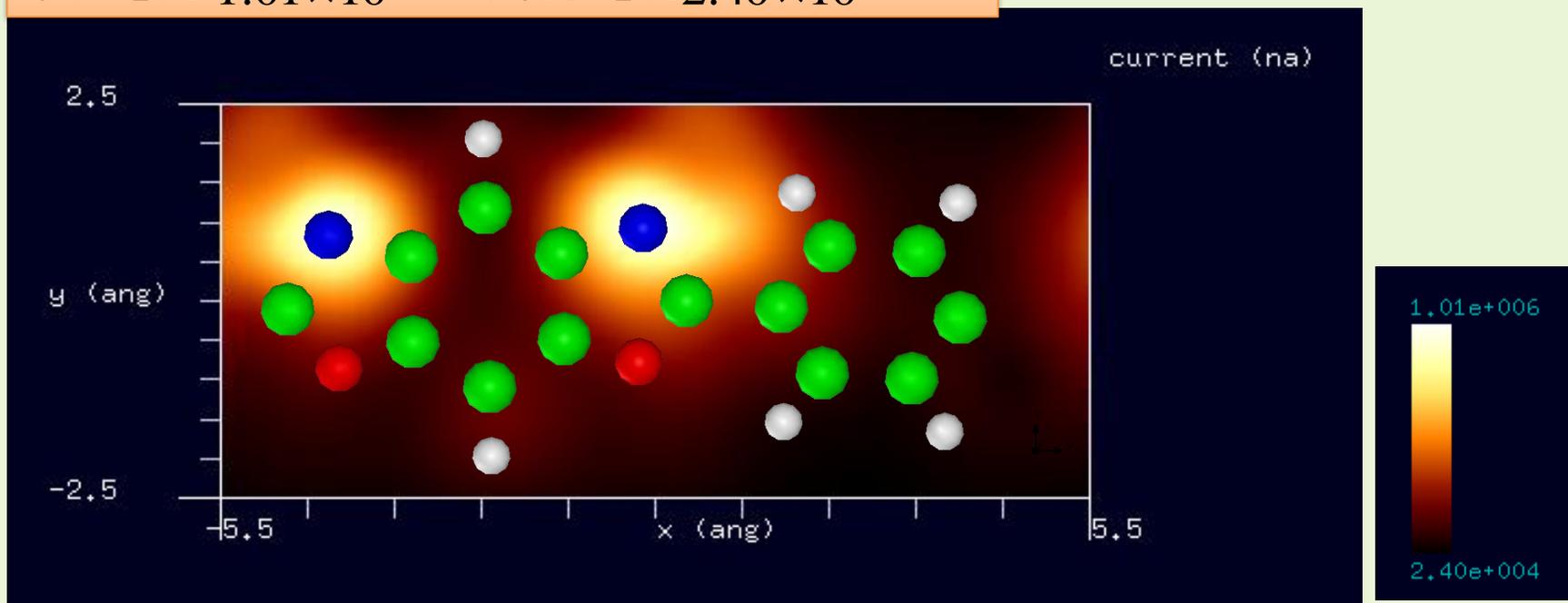
【DFTB】 ギャロン(Zylon)[合成繊維の一種]



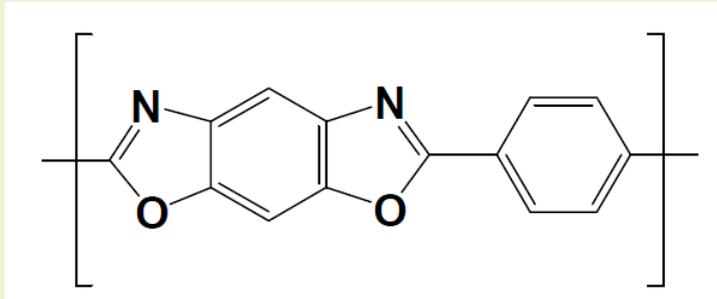
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算



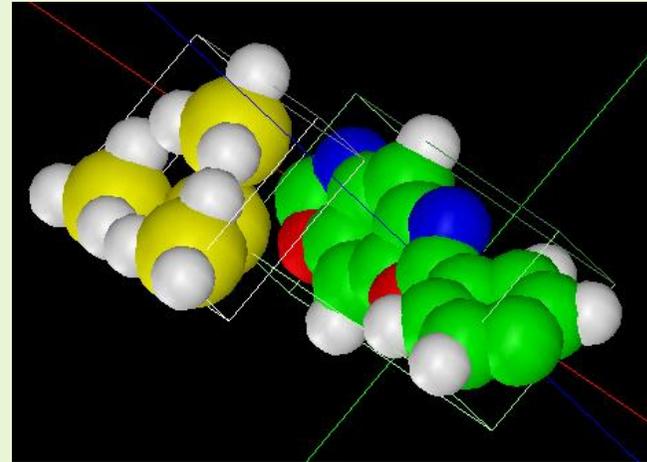
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.5 Å
最大電流 1.01×10^6 nA、最小電流 2.40×10^4 nA



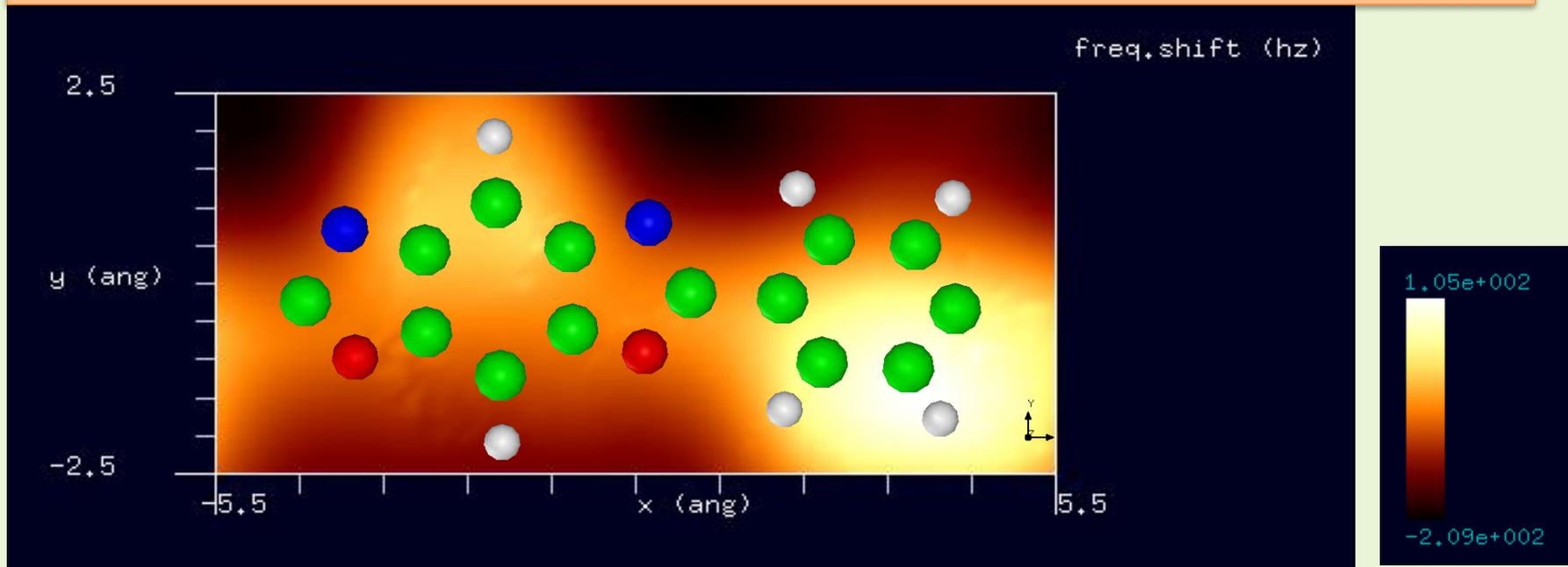
【DFTB】 ザイロン(Zylon)[合成繊維の一種]



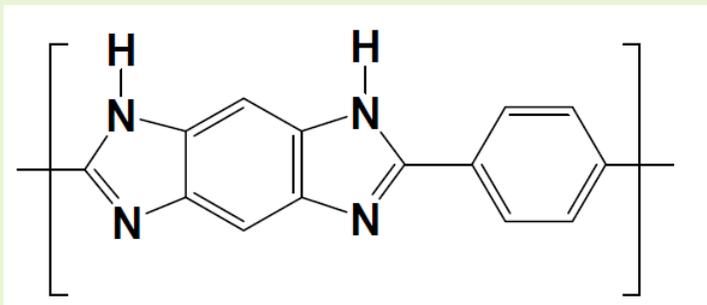
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算



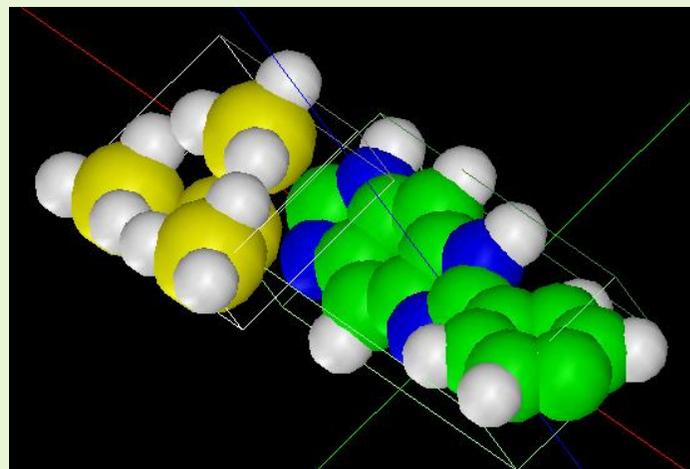
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.5 Å
周波数のずれは -2.09×10^2 Hzから 1.05×10^2 Hz



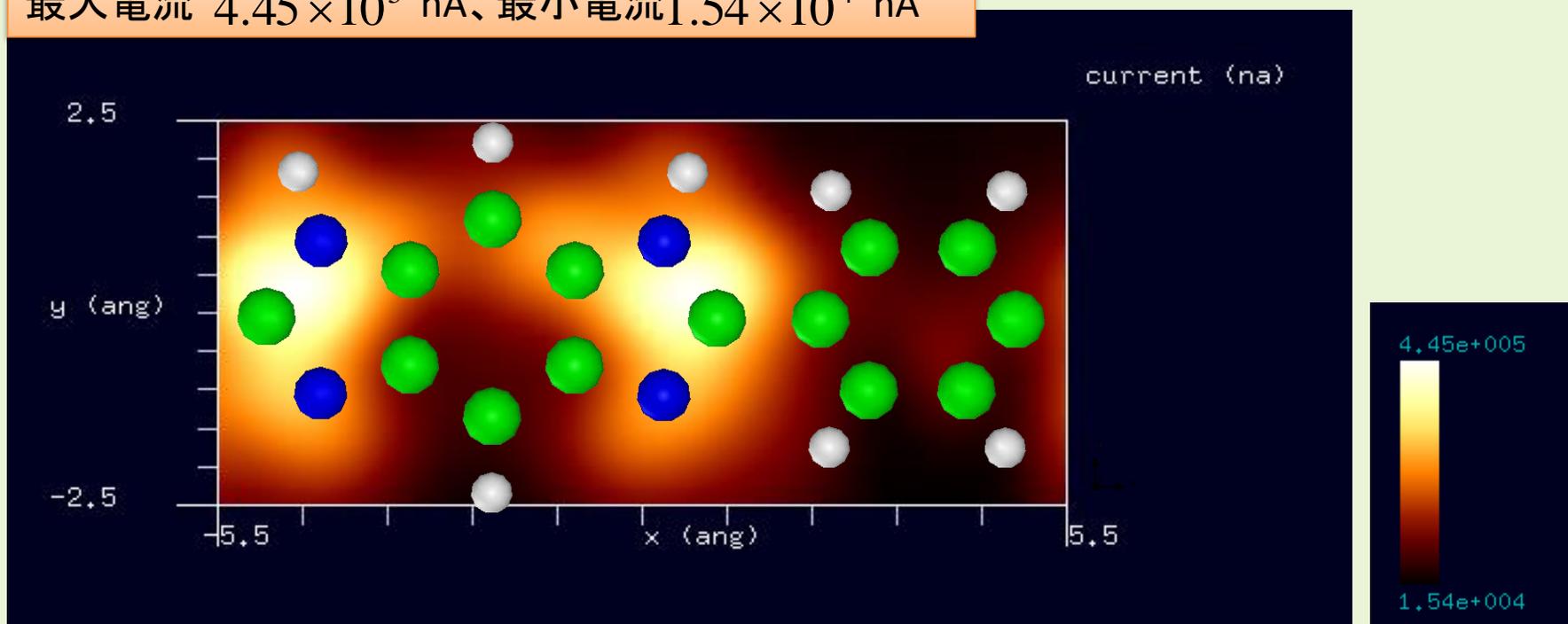
【DFTB】ポリベンゾイミダゾール(PBI)[合成繊維の一種]



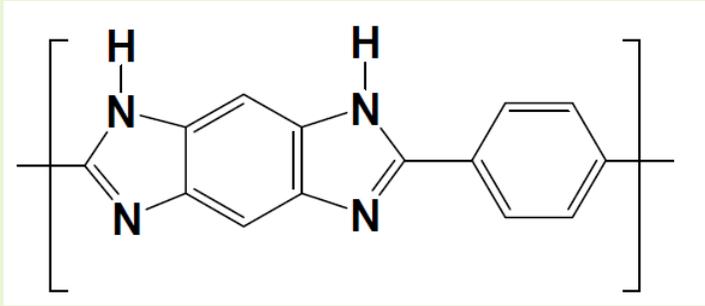
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算



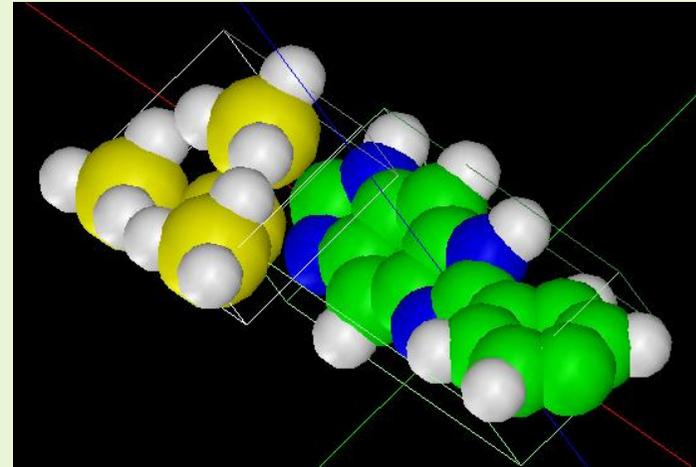
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.7 Å
最大電流 4.45×10^5 nA、最小電流 1.54×10^4 nA



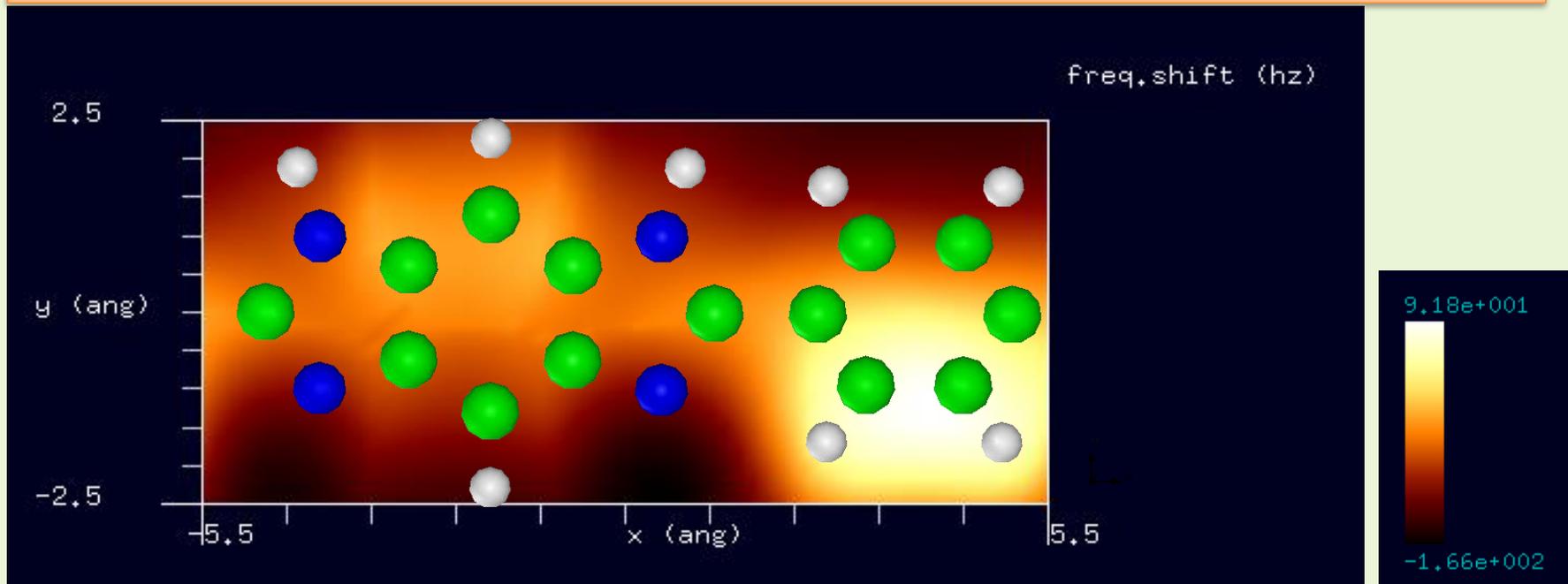
【DFTB】ポリベンゾイミダゾール(PBI)[合成繊維の一種]



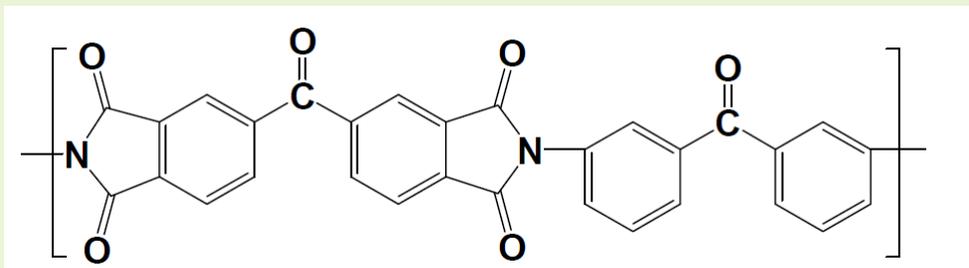
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算



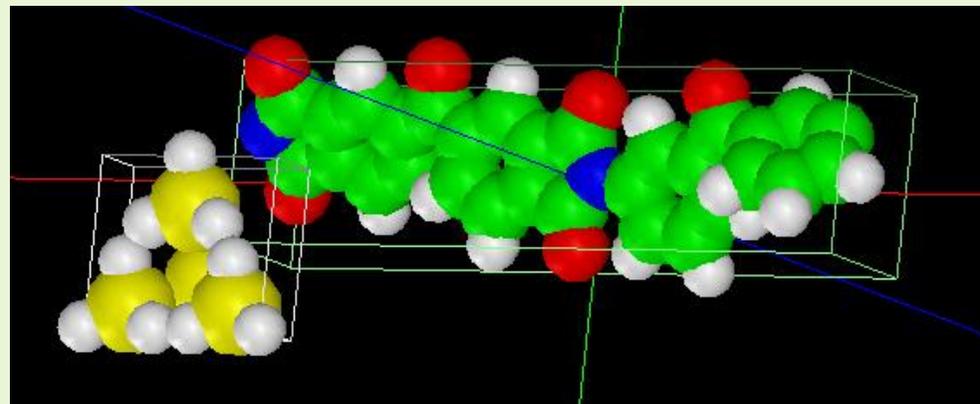
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.7 Å
周波数のずれは -1.66×10^2 Hzから 9.18×10^1 Hz



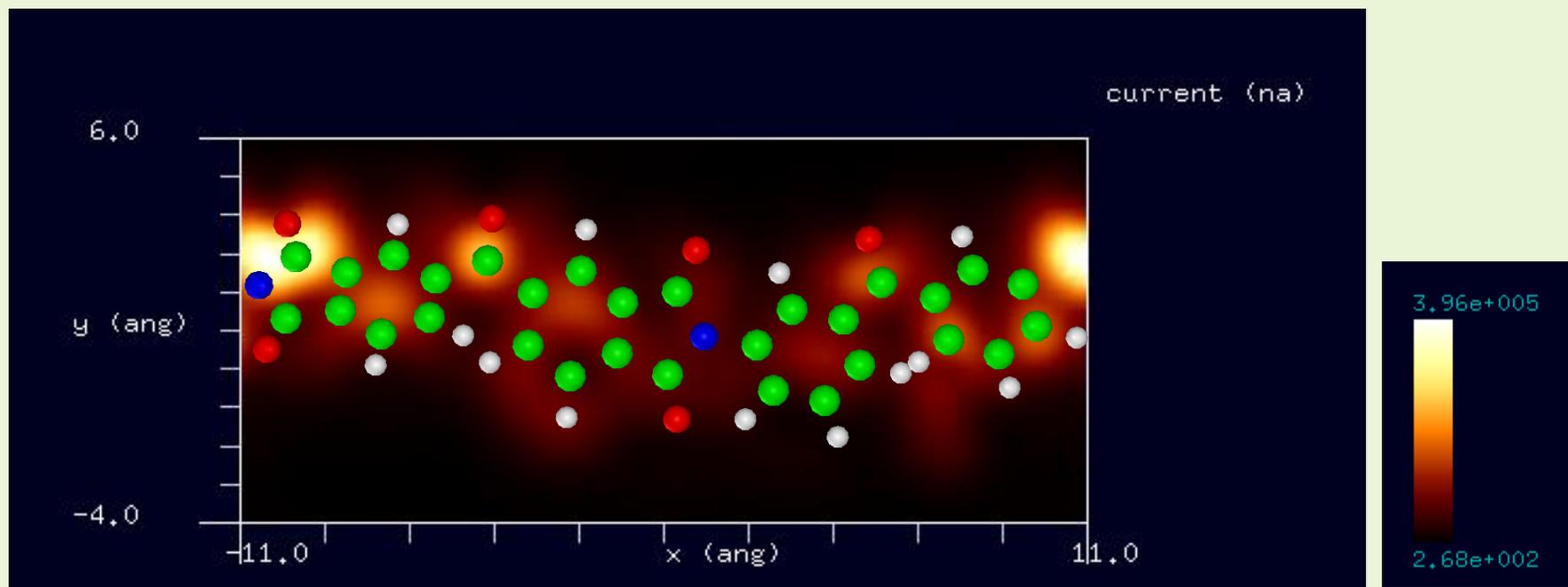
【DFTB】高耐熱性ポリイミド接着剤Larc-TPI



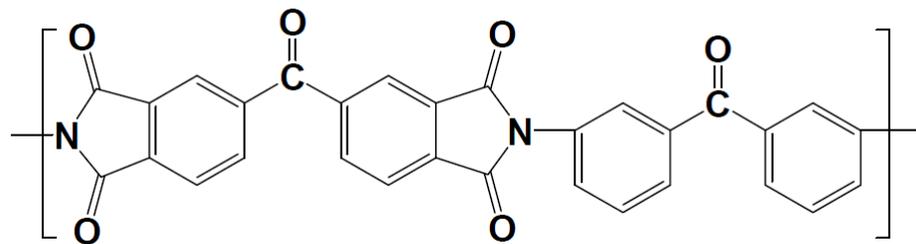
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算



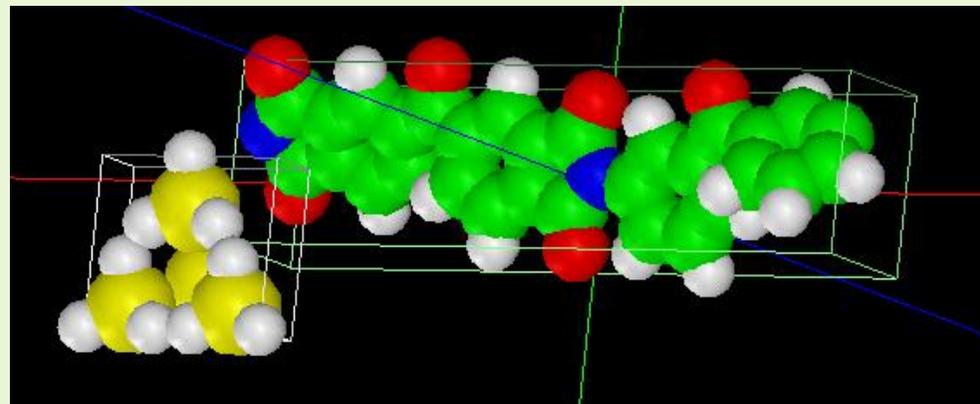
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.3 Å
最大電流 3.96×10^5 nA、最小電流 2.68×10^2 nA



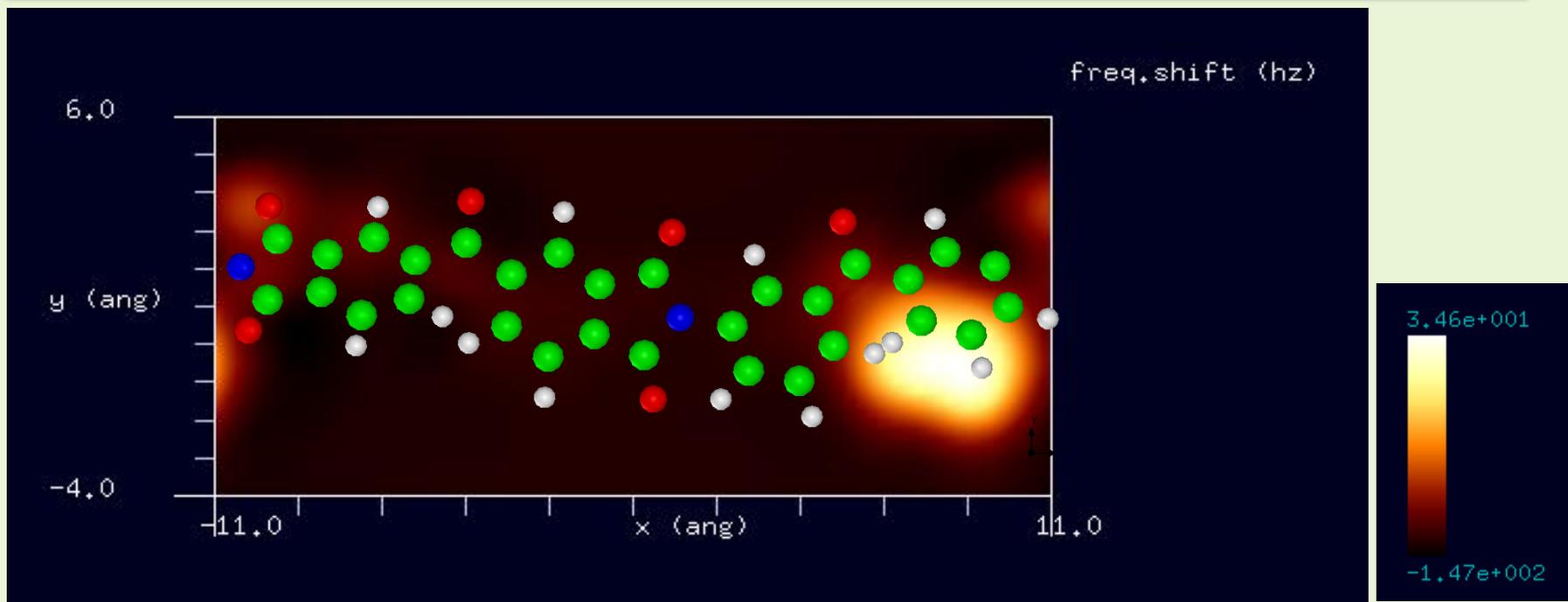
【DFTB】高耐熱性ポリイミド接着剤Larc-TPI



水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

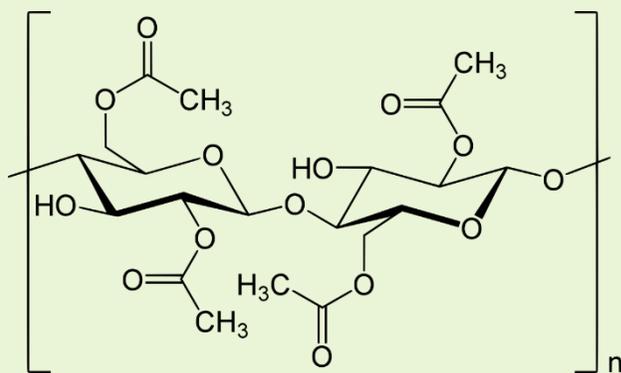


周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.8 Å
周波数のずれは -1.47×10^2 Hzから 3.46×10^1 Hz

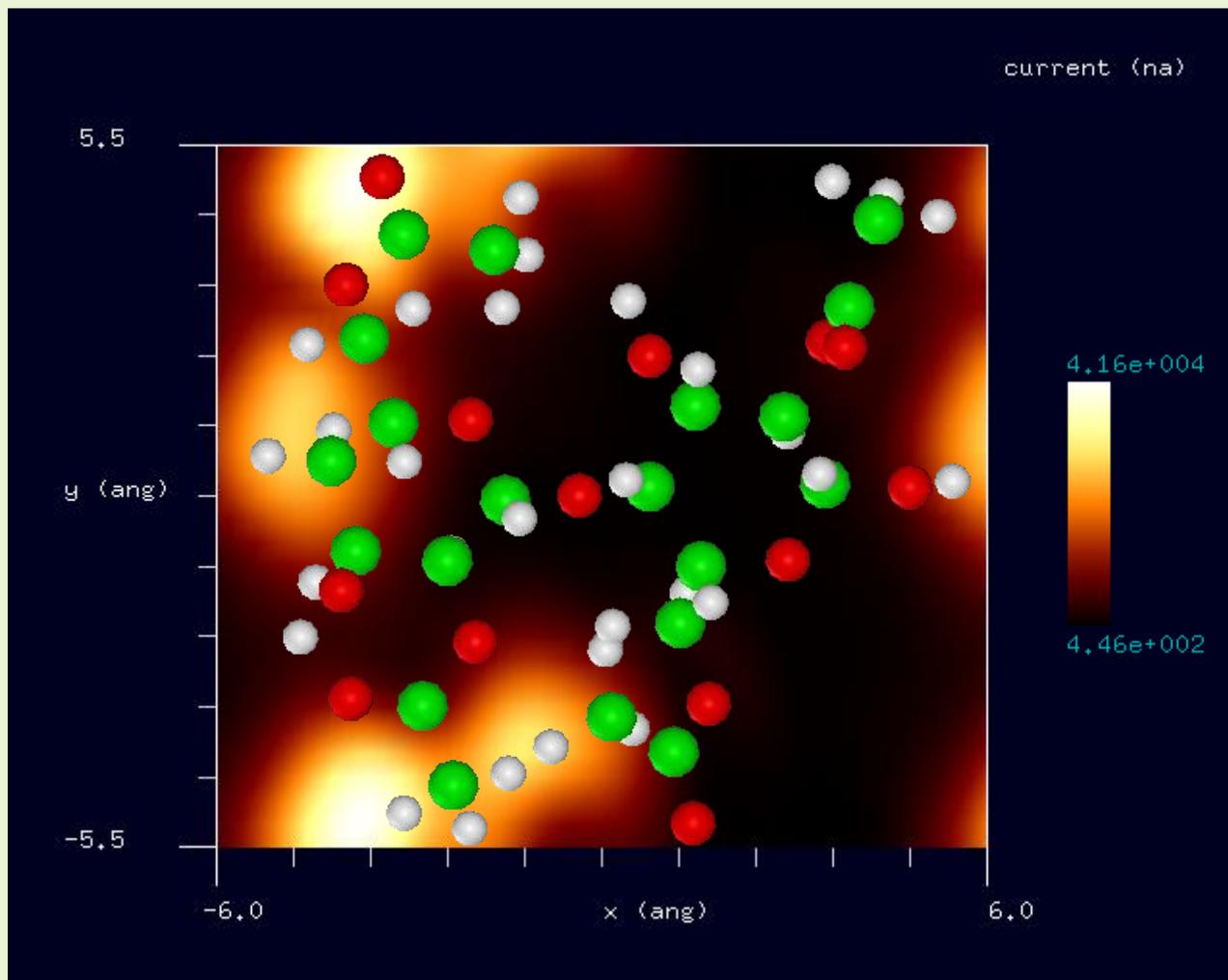
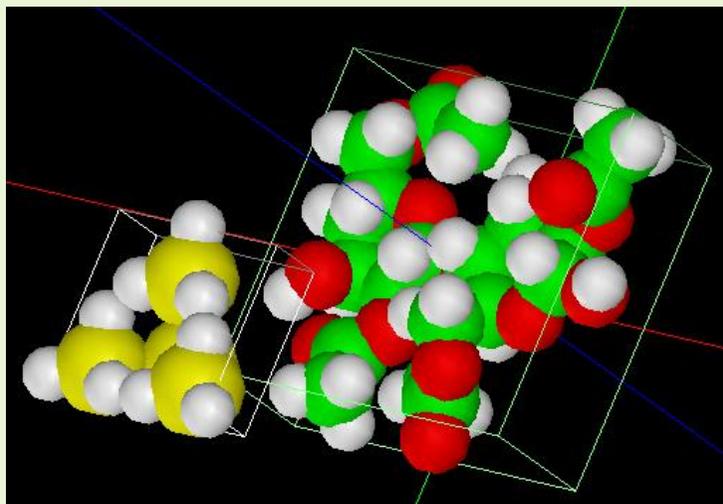


【DFTB】ジアセテート(diacetate)[アセテート繊維の一種]

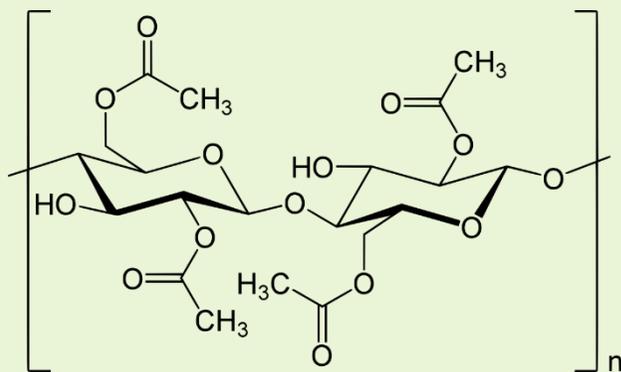
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.8 Å
最大電流 4.16×10^4 nA、最小電流 4.46×10^2 nA



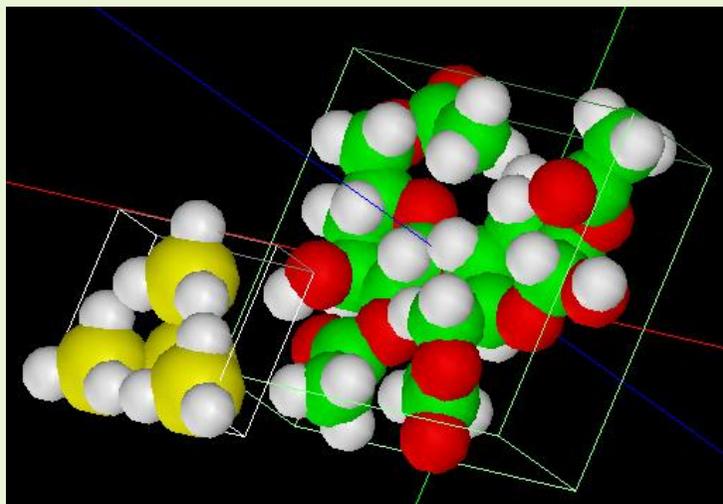
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算



【DFTB】ジアセテート(diacetate)[アセテート繊維の一種]



水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算

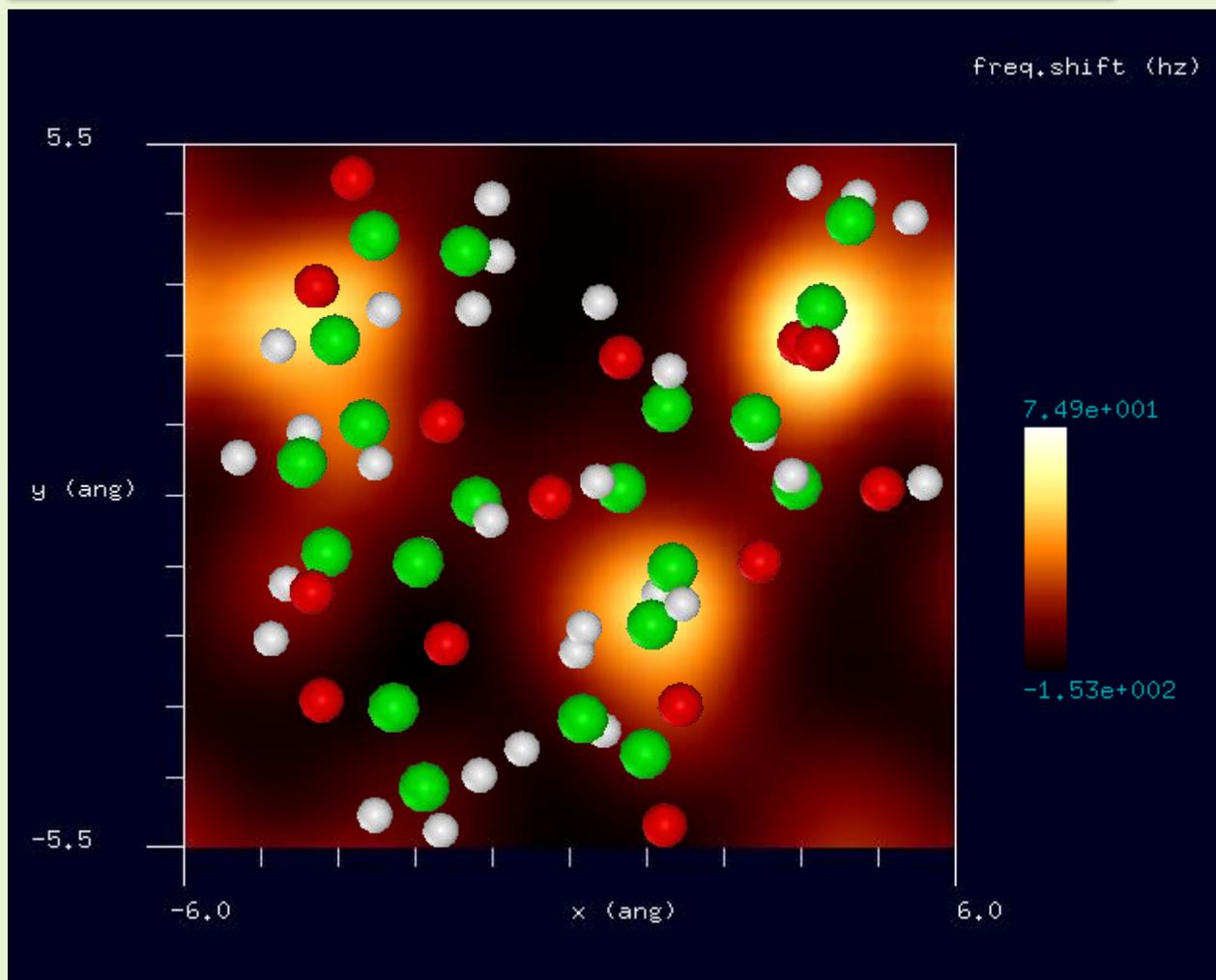


周波数シフトAFM画像:

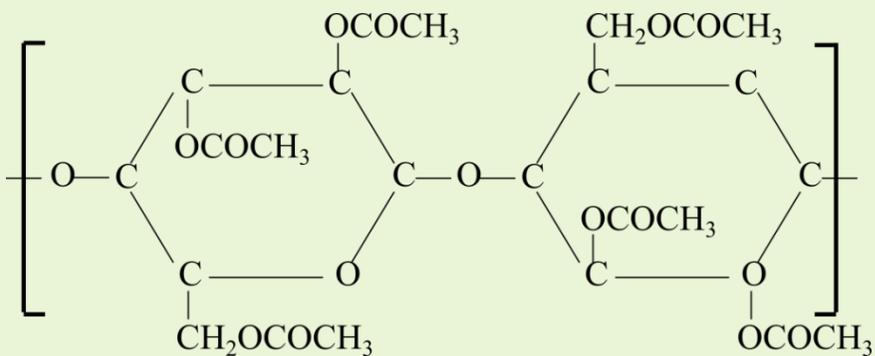
探針振動の共鳴周波数170kHz,

探針と試料の最短距離4.8 Å

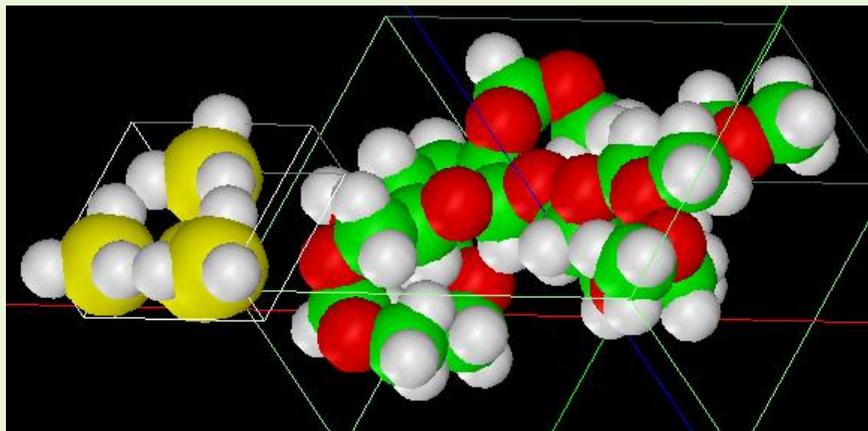
周波数のずれは -1.53×10^2 Hzから 7.49×10^1 Hz



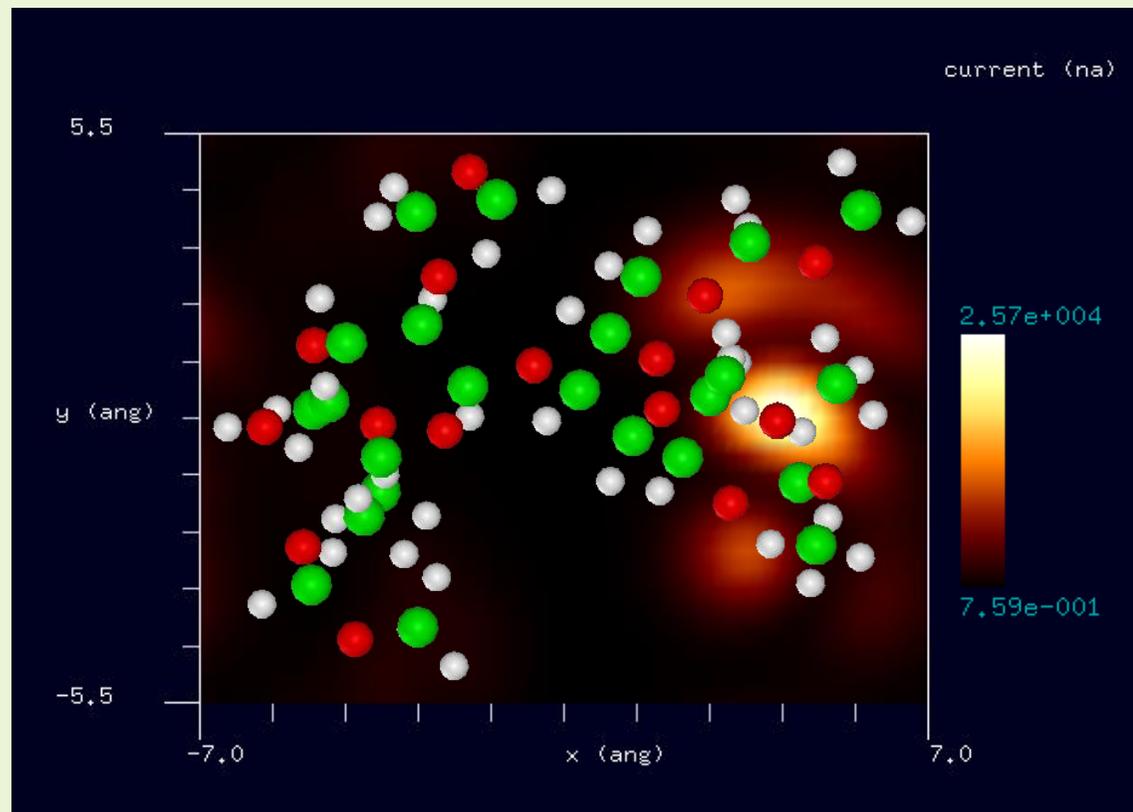
【DFTB】トリアセテート(triacetate)[アセテート繊維の一種]



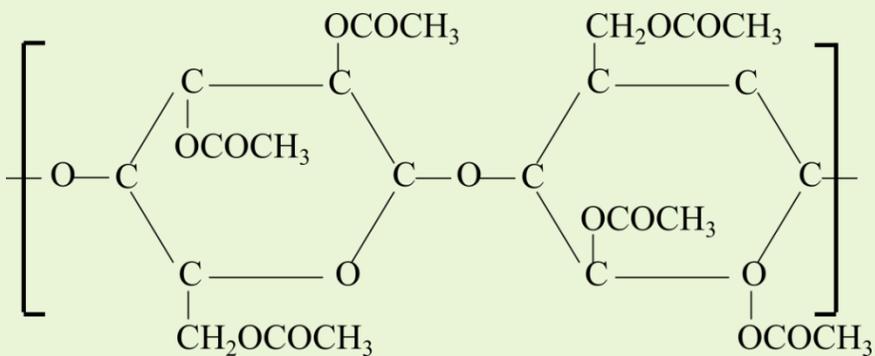
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算



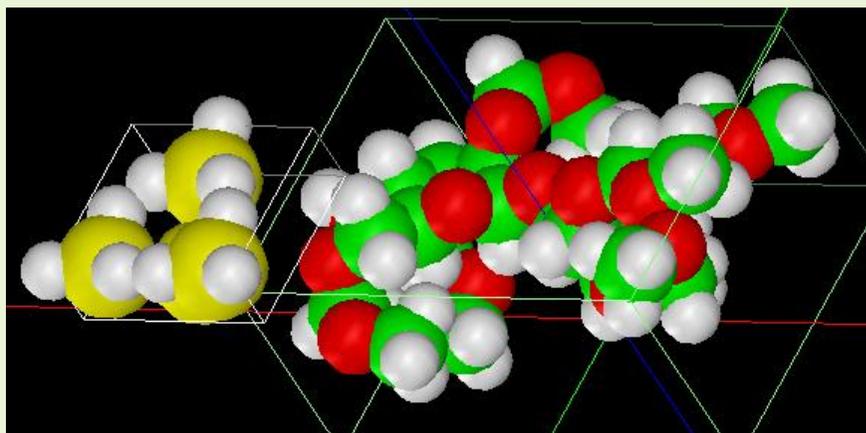
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.3 Å
最大電流 2.57×10^4 nA、最小電流 7.59×10^{-1} nA



【DFTB】トリアセテート(triacetate)[アセテート繊維の一種]



水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算

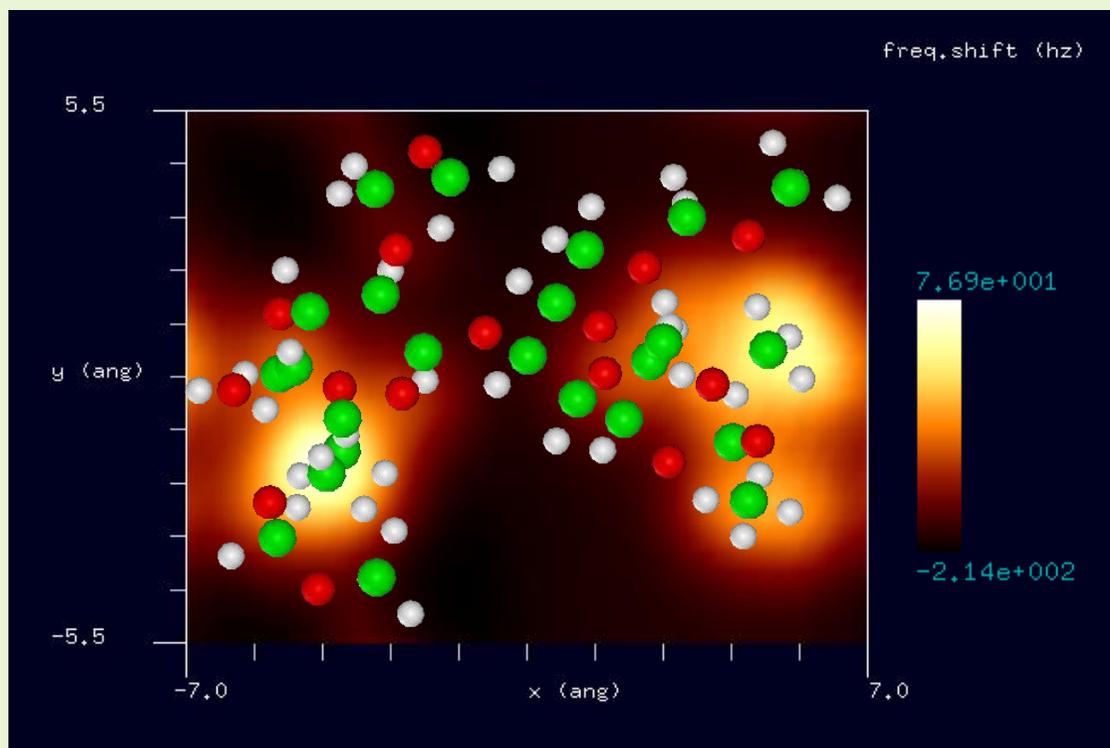


周波数シフトAFM画像:

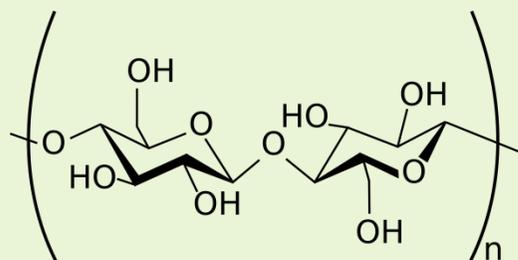
探針振動の共鳴周波数170kHz,

探針と試料の最短距離4.3 Å

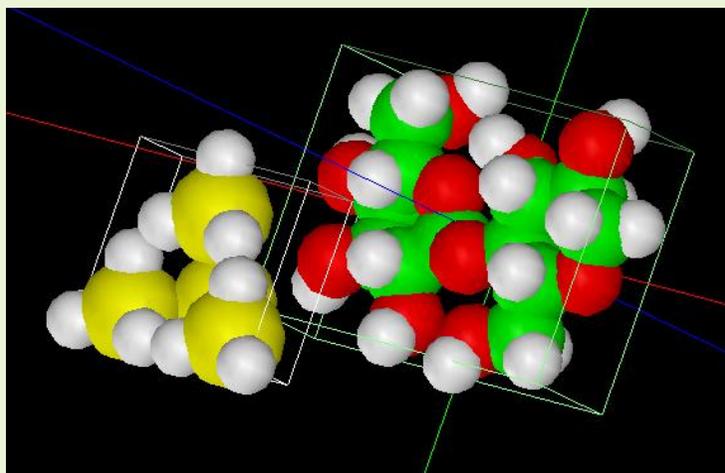
周波数のずれは -2.14×10^2 Hzから 7.69×10^1 Hz



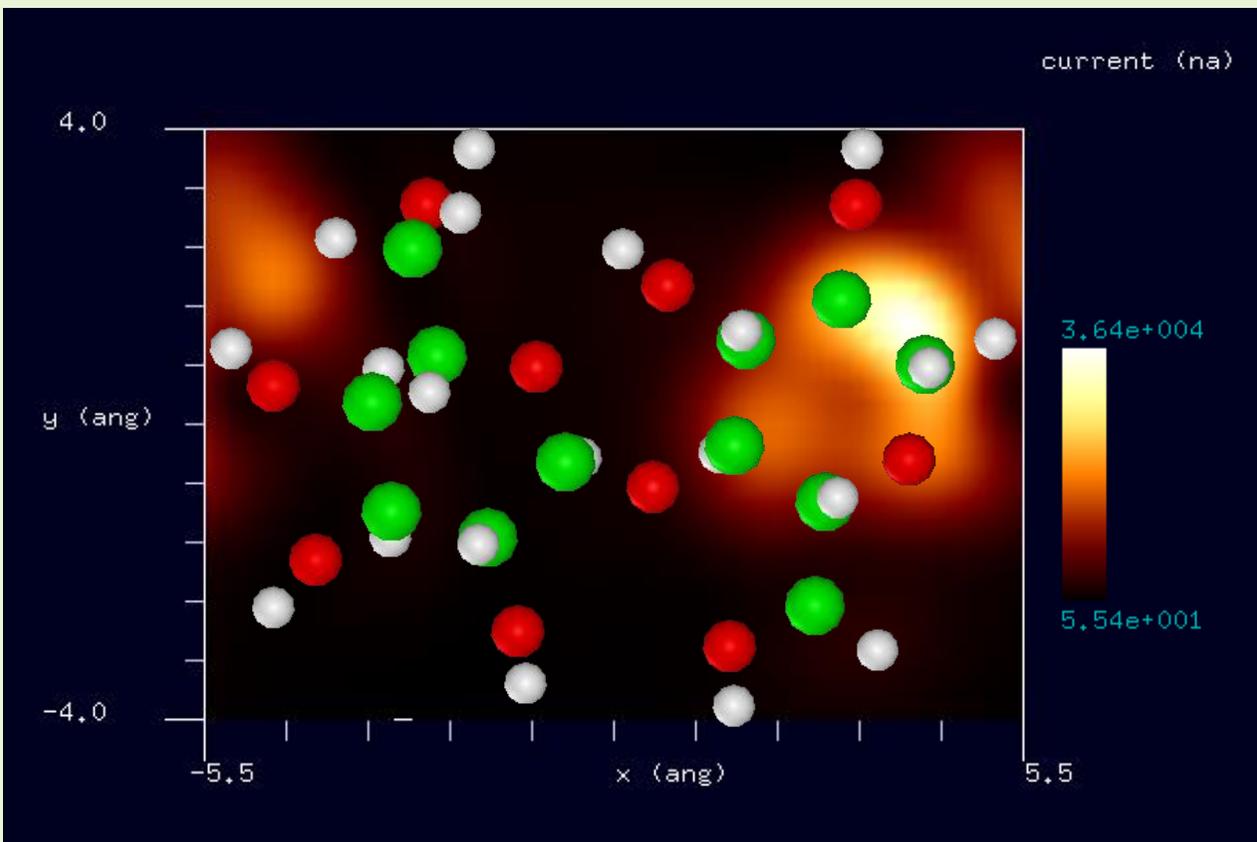
【DFTB】セルロース(cellulose)[アセテート繊維の一種]



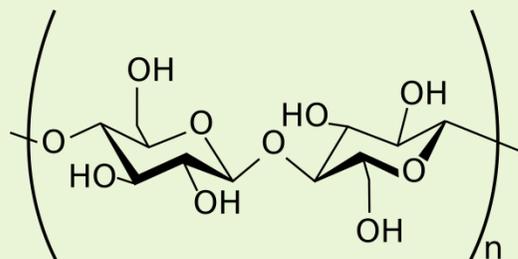
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算



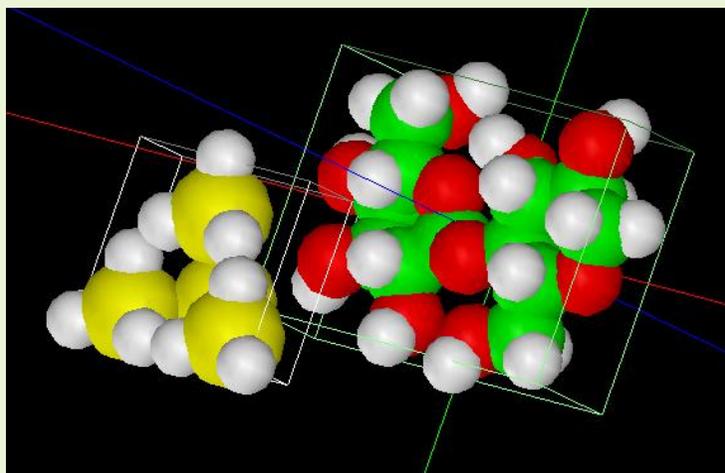
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.9 Å
最大電流 3.64×10^4 nA、最小電流 5.54×10^1 nA



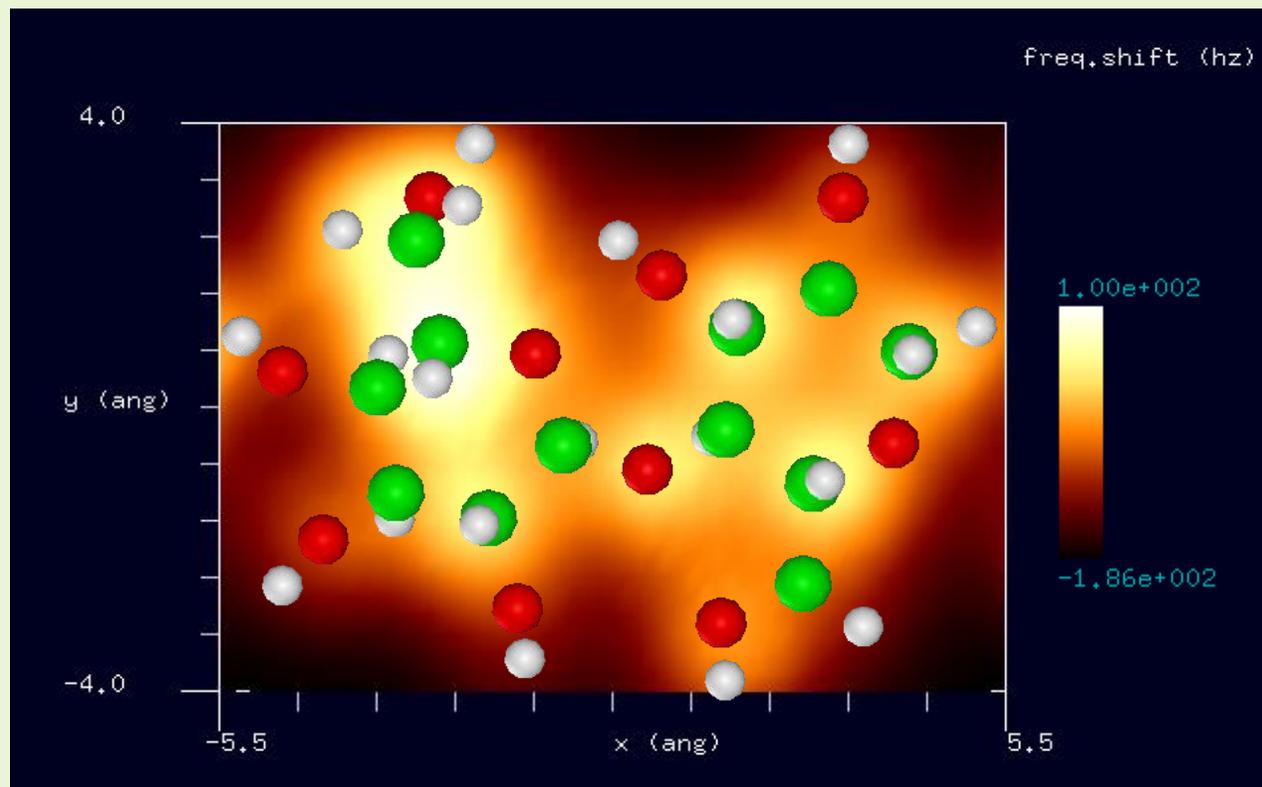
【DFTB】セルロース(cellulose)[アセテート繊維の一種]



水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算

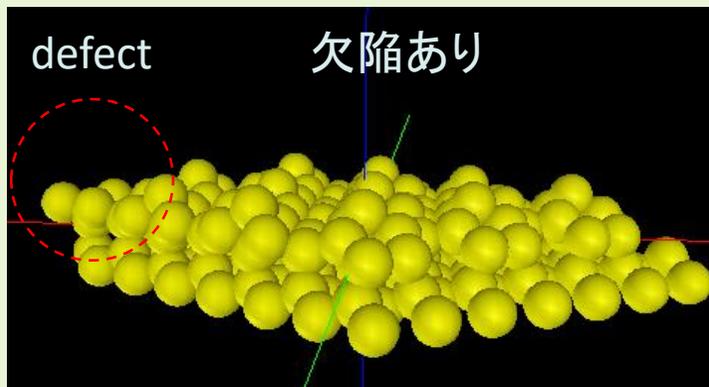
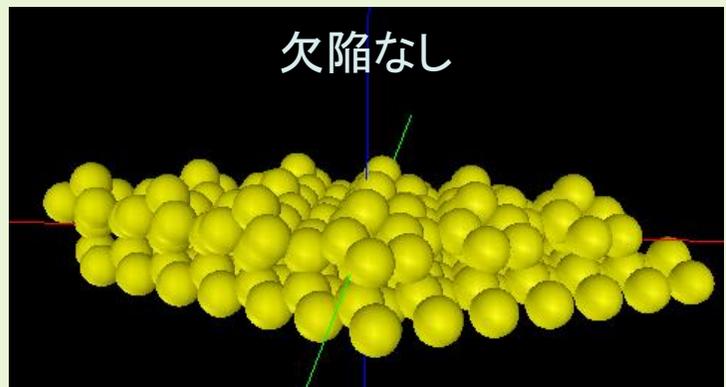


周波数シフトAFM画像:
探針振動の共鳴周波数170kHz,
探針と試料の最短距離4.4 Å
周波数のずれは -1.86×10^2 Hzから 1.00×10^2 Hz

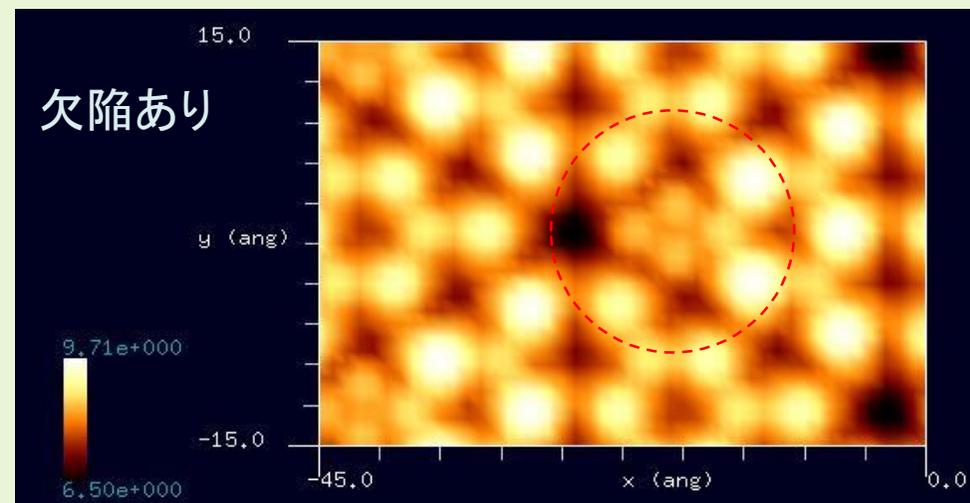
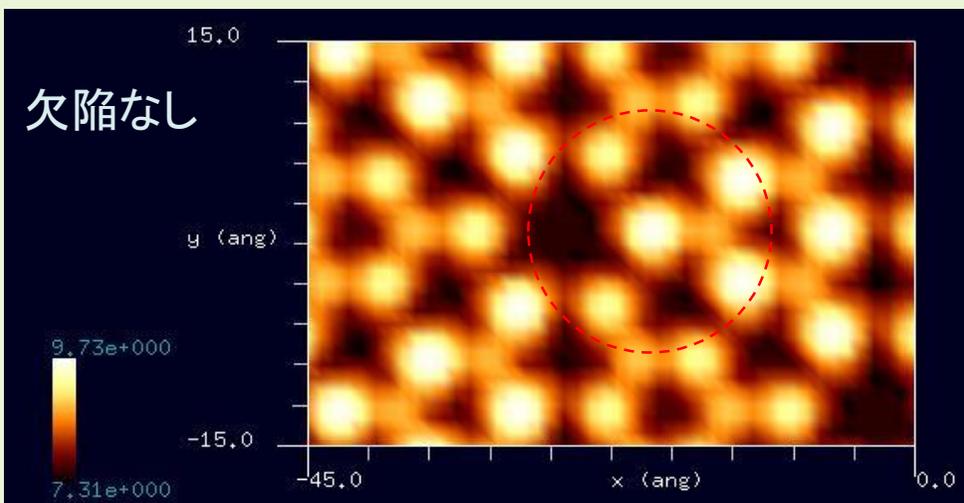


【DFTB】Si表面の欠陥のconstant current STMシミュレーション

シミュレートモデル



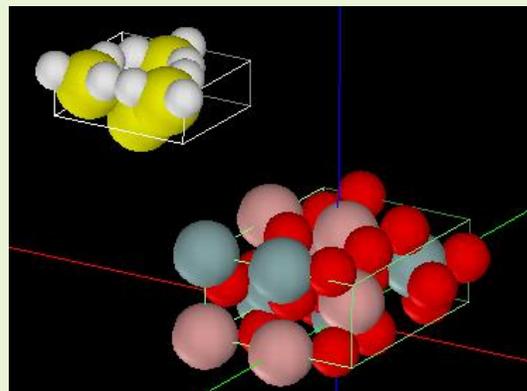
探針: Si_4H_9 探針
試料: Si(111)-DAS構造
スキャンエリア:
45 Å x 30 Å
スキャンモード:
constant current,
探針バイアス: -1.0 V
電流値: 1000 nA



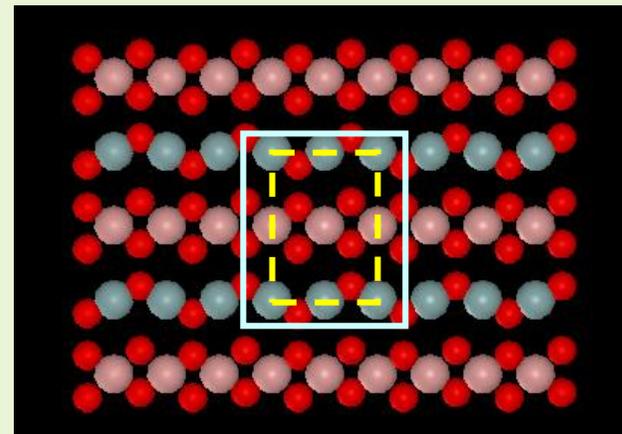
最表面のSi原子の抜けたところに、2層目のSi原子の構造が現れた。

【DFTB】透明導電性フィルム(ITO)のconstant current STMシミュレーション

シミュレートモデル

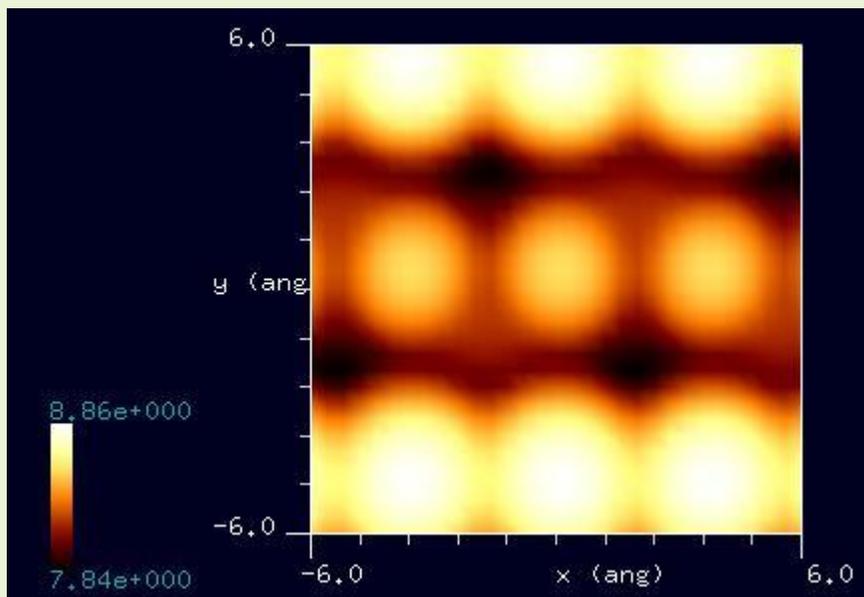


探針: Si_4H_9 探針
試料: $\text{In}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$ (110)表面
スキャンエリア:
12 Å x 12 Å
スキャンモード:
constant current,
探針バイアス: +1.0 V
電流値: 10 nA



最表面の原子配置

黄色枠は単位格子。水色枠はスキャンエリア。



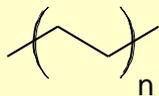
Sn原子の位置が最も高く、
In原子の位置はやや低く現れた。

【DFTB】ポリエチレンの周波数シフトAFM像シミュレーション

シミュレートモデル

探針: CO探針

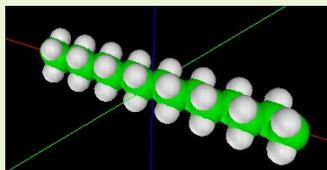
試料: ポリエチレン



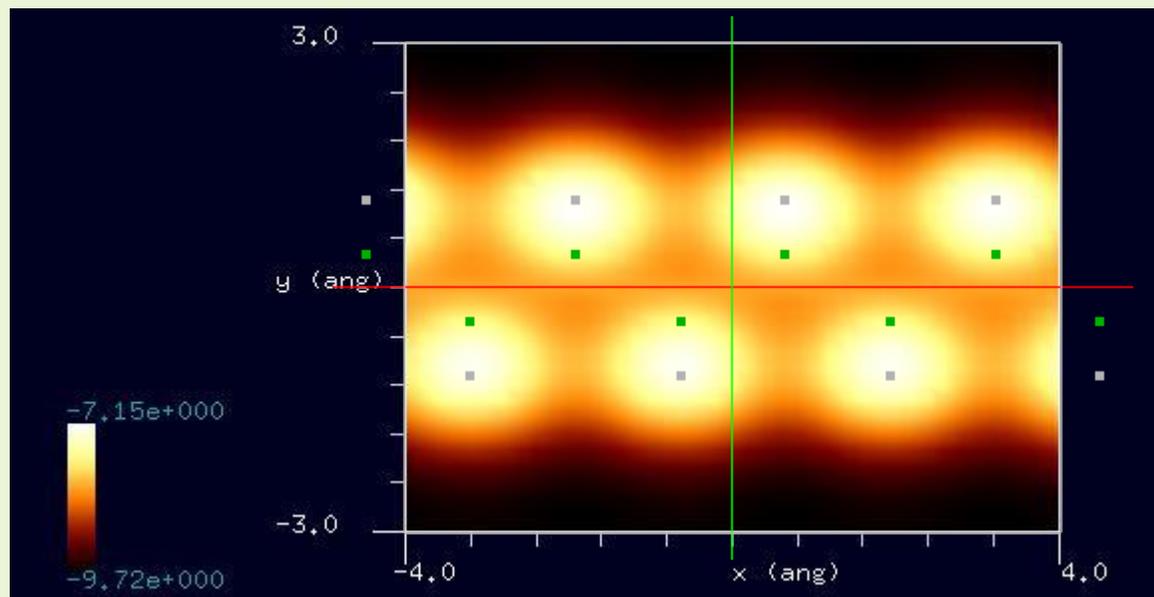
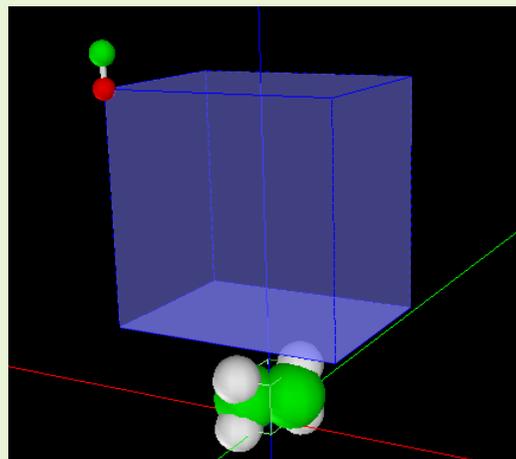
スキャンエリア: $8 \text{ \AA} \times 6 \text{ \AA}$

スキャンモード: 周波数シフトAFM

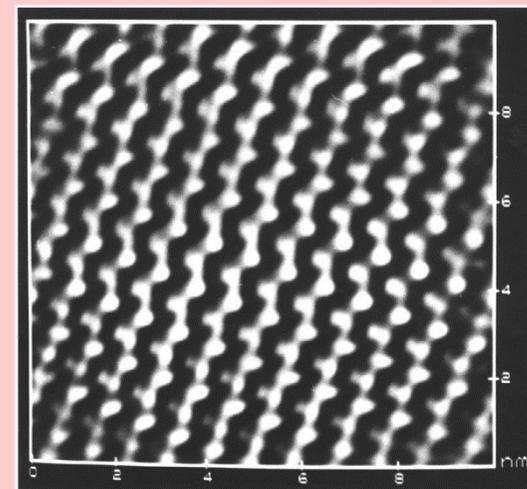
共振周波数: 172 kHz



周期的境界条件を課した
ポリエチレンモデル



cf. Experiment



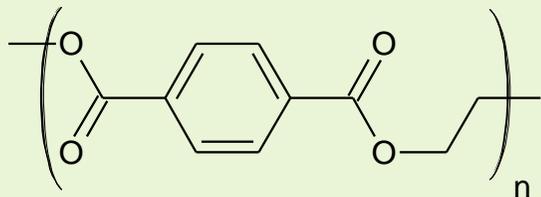
環状アルカン $C_{48}H_{96}$ のAFM force像。
コントラストは力の変化を相対スケールでカバーする。

環状 $C_{48}H_{96}$ はポリエチレンに対応するモデル化合物である。周期的な明るいスポットは $-(CH_2)-(CH_2)-$ 基と帰属できる。

Sergei N. Magonov and Darrell H. Reneker, Annu. Rev. Mater. Sci. 27, 175-222 (1997). Characterization of polymer surfaces with atomic force microscopy.

【DFTB】ポリエチレンテレフタレート(PET)のconstant current STMシミュレーション

シミュレートモデル



探針: Si_4H_9 探針

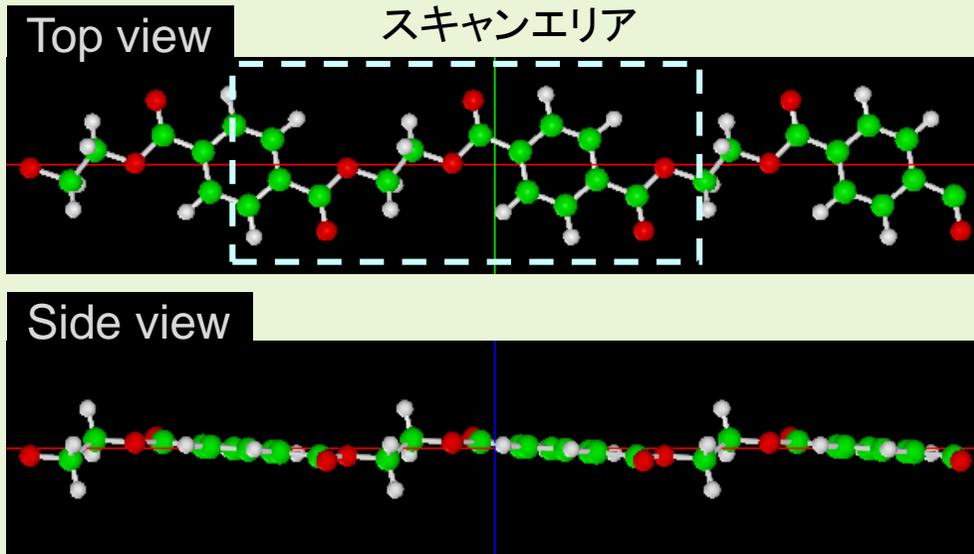
試料: ポリエチレンテレフタレート(PET)

スキャンエリア: $16 \text{ \AA} \times 16 \text{ \AA}$

スキャンモード: constant current STM

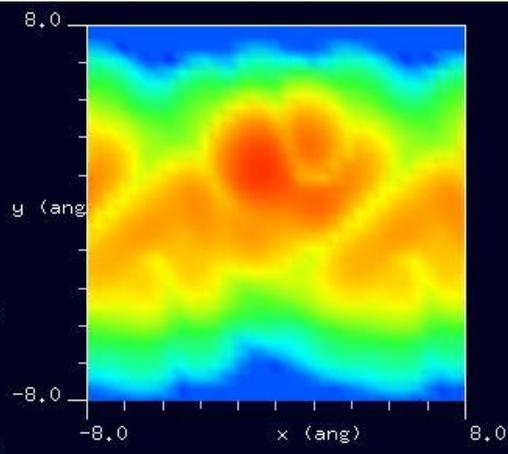
探針バイアス: $+2.0 \text{ V}$, -2.0 V

電流値: 10, 100, 1000 nA

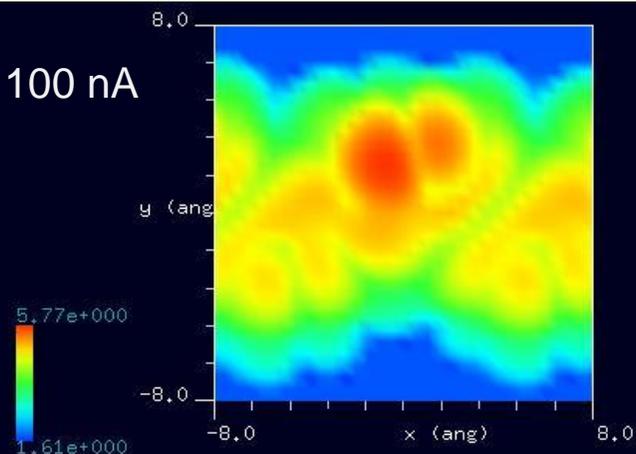


探針バイアス: $+2.0 \text{ V}$

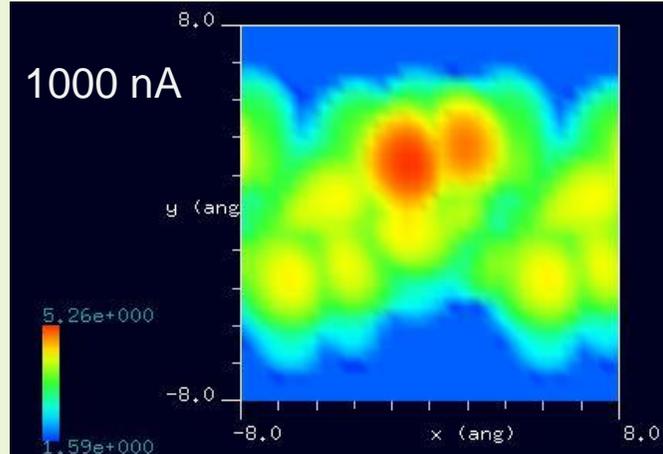
10 nA



100 nA

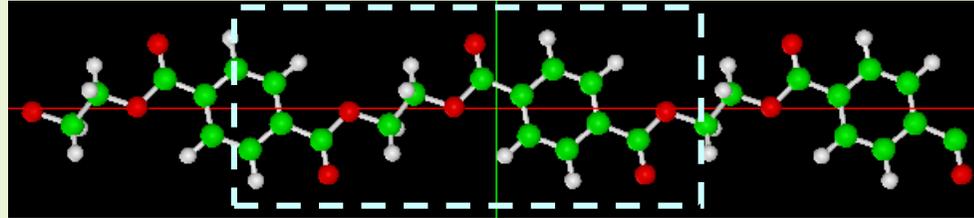


1000 nA



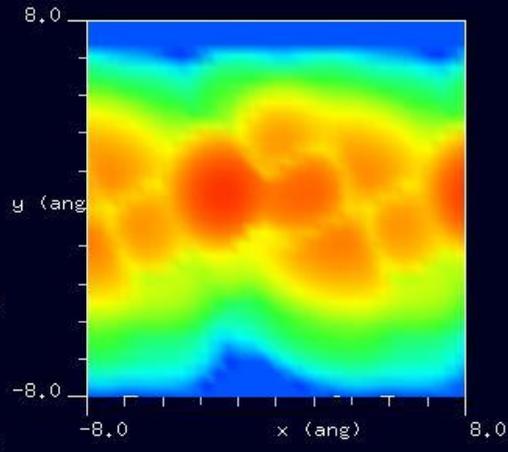
【DFTB】ポリエチレンテレフタレート(PET)のconstant current STMシミュレーション

スキャンエリア

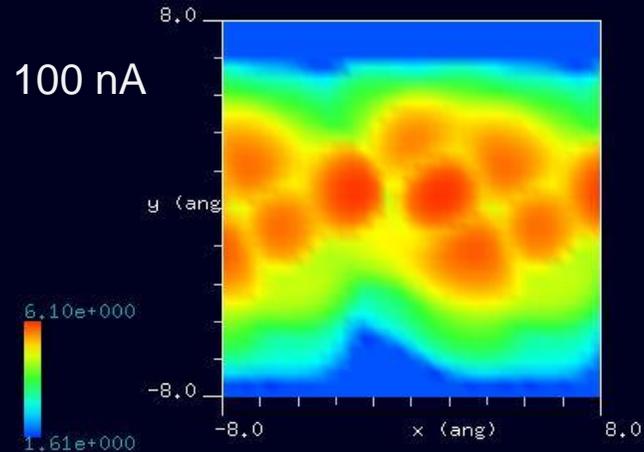


探針バイアス: -2.0 V

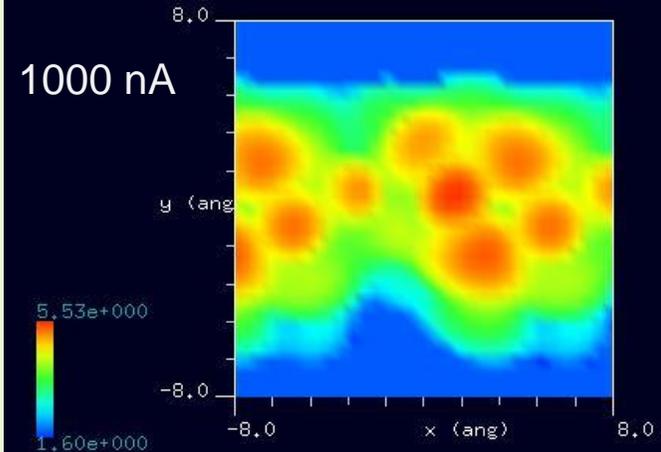
10 nA



100 nA

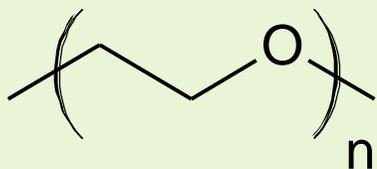


1000 nA



【DFTB】ポリエチレングリコール(PEG)のconstant current STMシミュレーション

シミュレートモデル



探針: Si_4H_9 探針

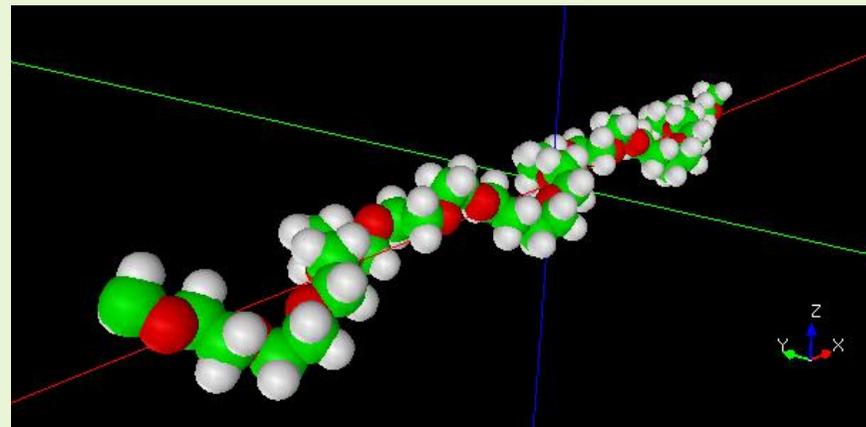
試料: ポリエチレングリコール(PEG)

スキャンエリア: $30 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$

スキャンモード: constant current STM

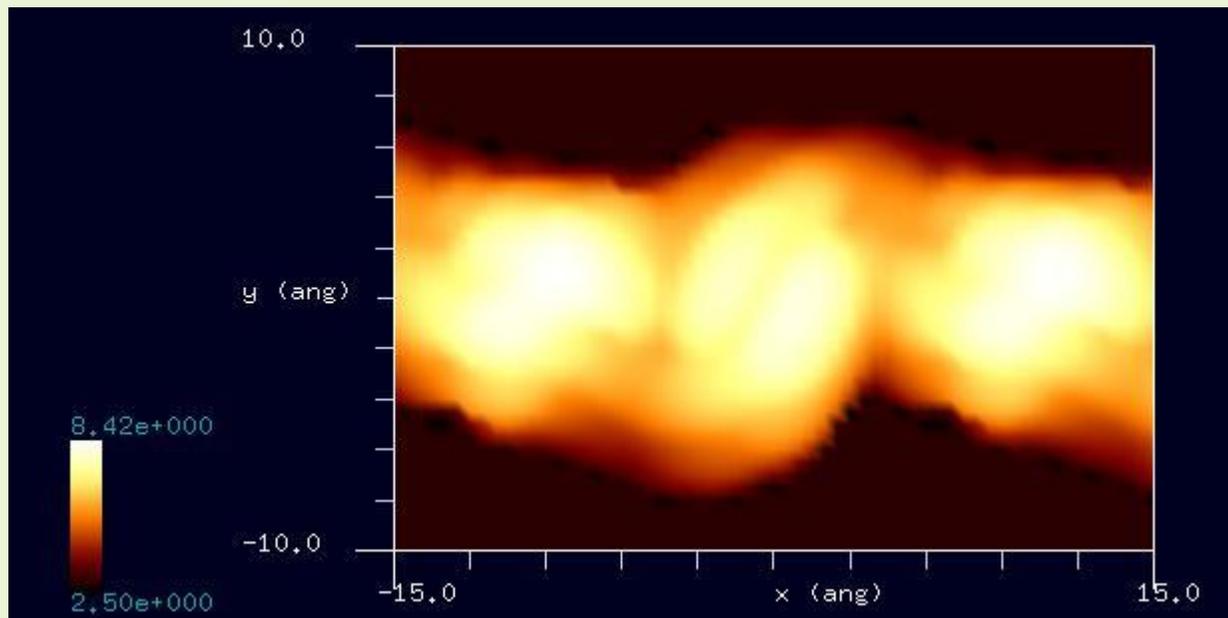
探針バイアス: $+5.0 \text{ V}$

電流値: 1000 nA



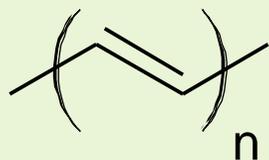
$n=7$ で1周期のらせん構造。

図は $n=21$ (3周期のらせん)のPEGモデル。

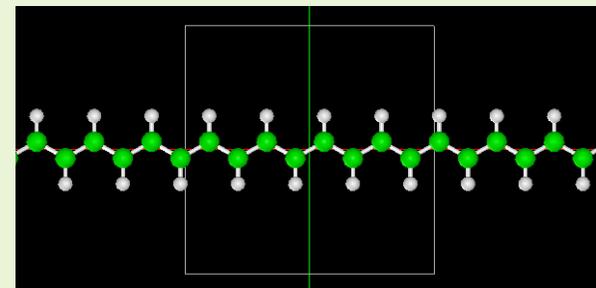
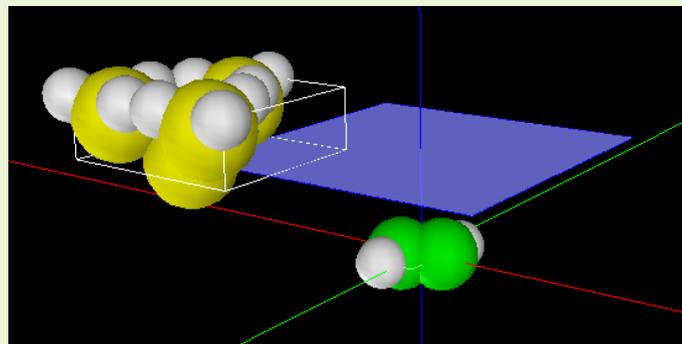


【DFTB】ポリアセチレンのconstant height STMシミュレーション

シミュレートモデル

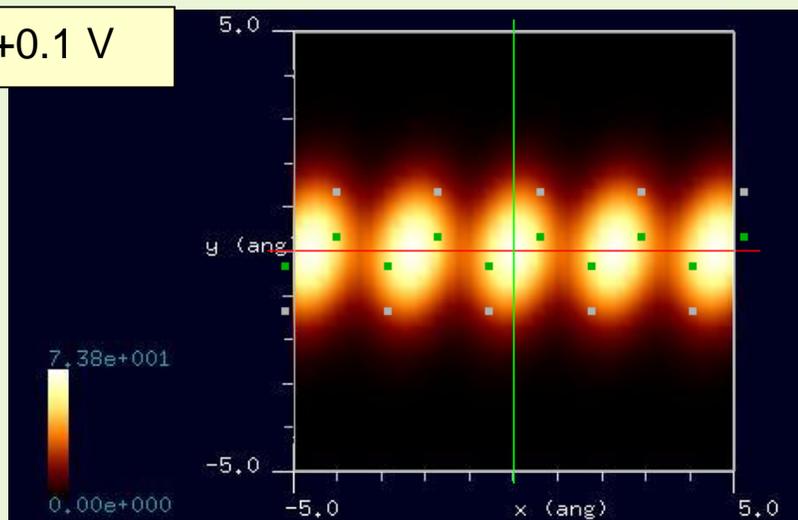


探針: Si_4H_9 探針
試料: trans-polyacetylene
スキャンエリア: $10 \text{ \AA} \times 10 \text{ \AA}$
スキャンモード:
constant height STM
探針-試料間距離: 3.5 \AA

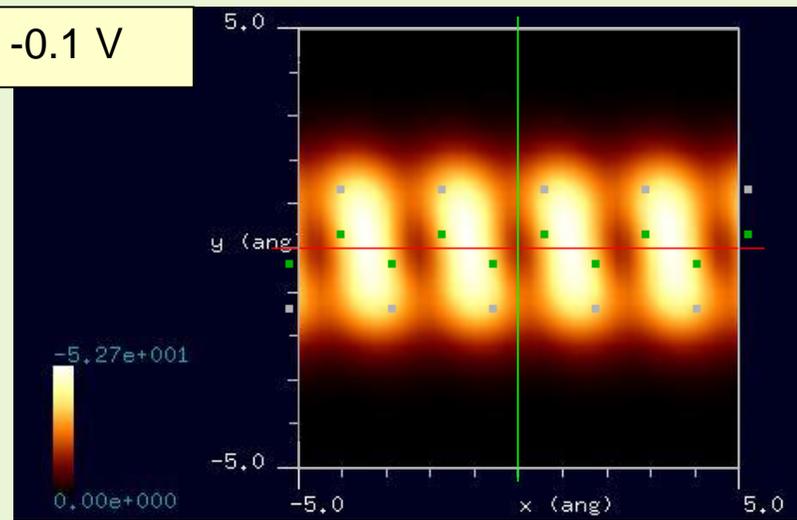


周期的境界条件を課した
trans-polyacetyleneモデル

$V_{\text{tip}} = +0.1 \text{ V}$

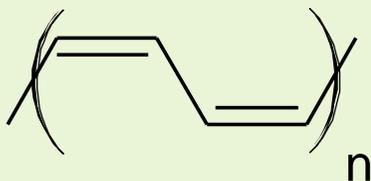


$V_{\text{tip}} = -0.1 \text{ V}$

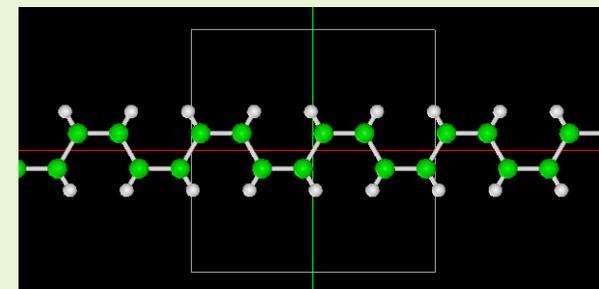
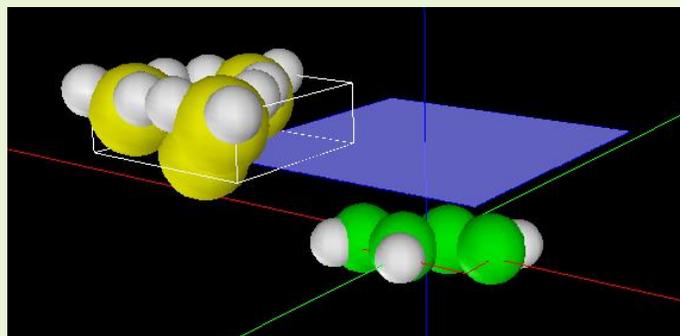


【DFTB】ポリアセチレンのconstant height STMシミュレーション

シミュレートモデル

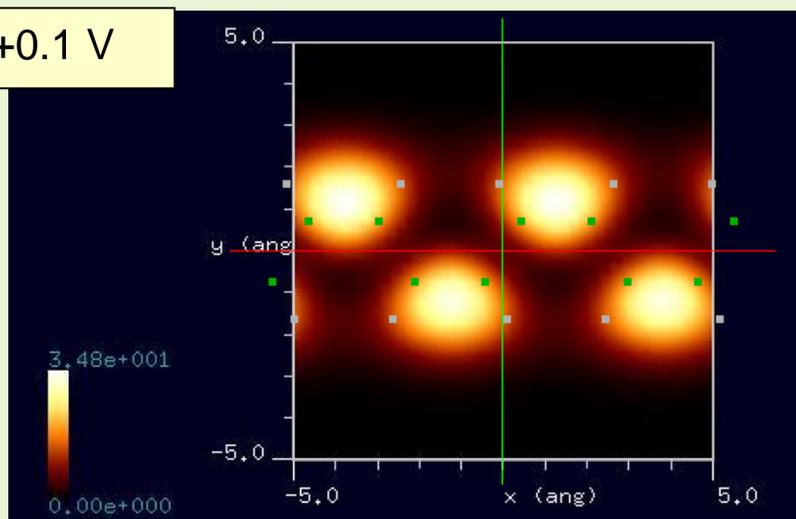


探針: Si_4H_9 探針
試料: cis-polyacetylene
スキャンエリア: $10 \text{ \AA} \times 10 \text{ \AA}$
スキャンモード:
constant height STM
探針-試料間距離: 3.5 \AA

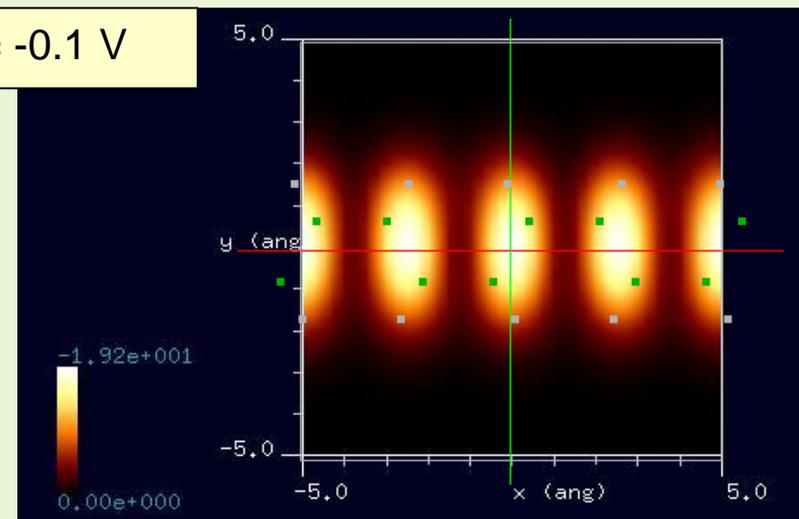


周期的境界条件を課した
cis-polyacetyleneモデル

$V_{\text{tip}} = +0.1 \text{ V}$



$V_{\text{tip}} = -0.1 \text{ V}$



【SetModel】原子モデル作成

SetModel

結晶情報を与えて
任意の大きさの
原子モデルを作成

原子の削除・複製・移動・
元素の変更など

水素原子の付加、
MM3力場パラメータの
生成など

SPMシミュレータの
各ソルバーに適した
形式で出力

欠陥のあるグラファイトを作成

結晶情報

空間群番号: 194

格子定数:

$a = 2.464 \text{ \AA}$

$b = 6.711 \text{ \AA}$

Fractional座標:

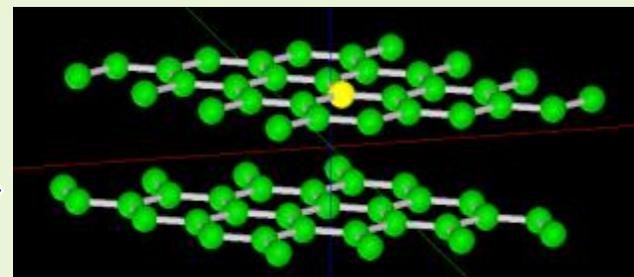
C (0, 0, 1/4)

C (1/3, 2/3, 1/4)

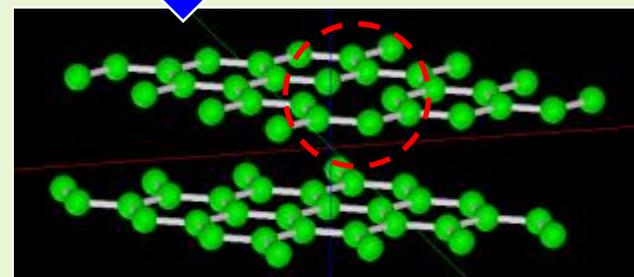
向きや大きさ

ミラー指数: (0 0 1)

格子のサイズ: (4, 4, 1)



原子を選択して削除



MM3力場パラメータの生成

txyz形式で出力

xyz形式で出力

CG

MD

GeoAFM

FemAFM

DFTB

【SetModel】原子モデル作成

SetModel

結晶情報を与えて
任意の大きさの
原子モデルを作成

原子の削除・複製・移動・
元素の変更など

水素原子の付加、
MM3力場パラメータの
生成など

SPMシミュレータの
各ソルバーに適した
形式で出力

シリコンクラスター探針モデルの作成

結晶情報

空間群番号: 227

格子定数:

$a = 5.4 \text{ \AA}$

Fractional座標:

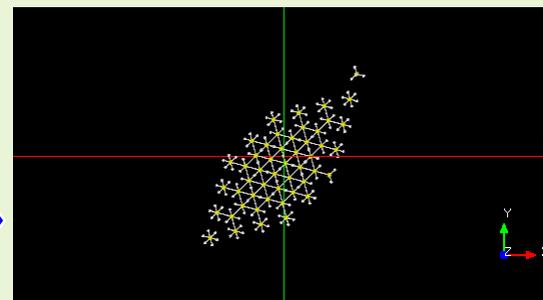
Si (0, 0, 0)

向きや大きさ

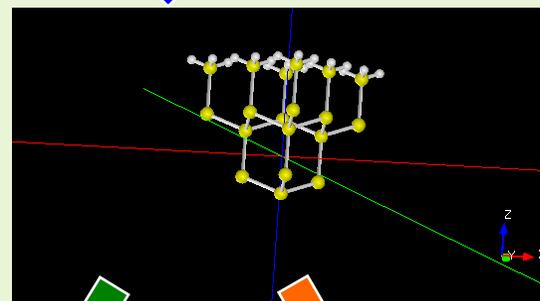
ミラー指数: (1 1 1)

格子のサイズ: (2, 2, 3)

ダングリングボンドを
水素終端する



探針の構造に不要な
原子を選択して削除



MM3力場パラメータの生成

txyz形式で出力

xyz形式で出力

CG

MD

GeoAFM

FemAFM

DFTB

【SetModel】原子モデル作成

SetModel

カーボンナノチューブモデルの作成

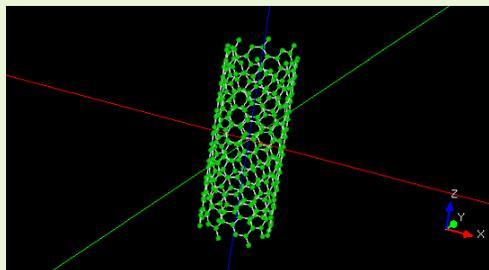
シングルウォールCNT

設定入力

モード: **swcnt**

カイラル指数: **(8, 6)**

単位数: **1**



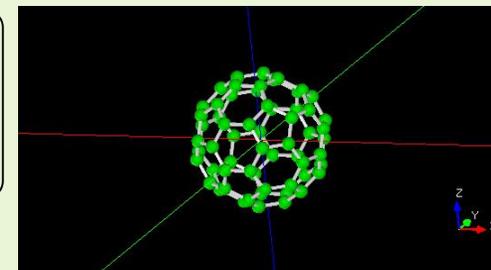
フラーレン族

設定入力

モード: **fuller**

カイラル指数: **(5, 5)**

単位数: **1**



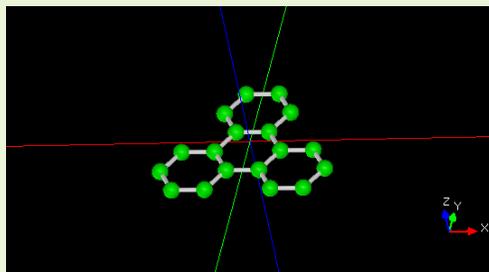
グラフェンシート

設定入力

モード: **sheet**

カイラル指数: **(20, -10)**

単位数: **1**



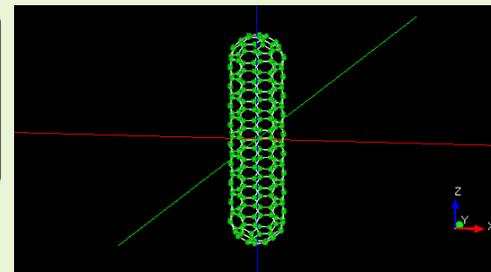
キャップ付きCNT

設定入力

モード: **capped**

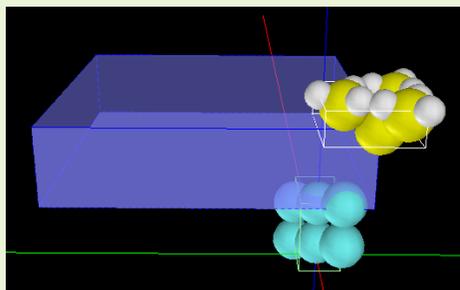
カイラル指数: **(10, -5)**

単位数: **8**

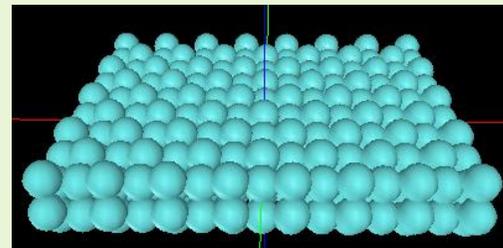


【DFTB】Mo(111)のconstant current STM像

シミュレートモデル

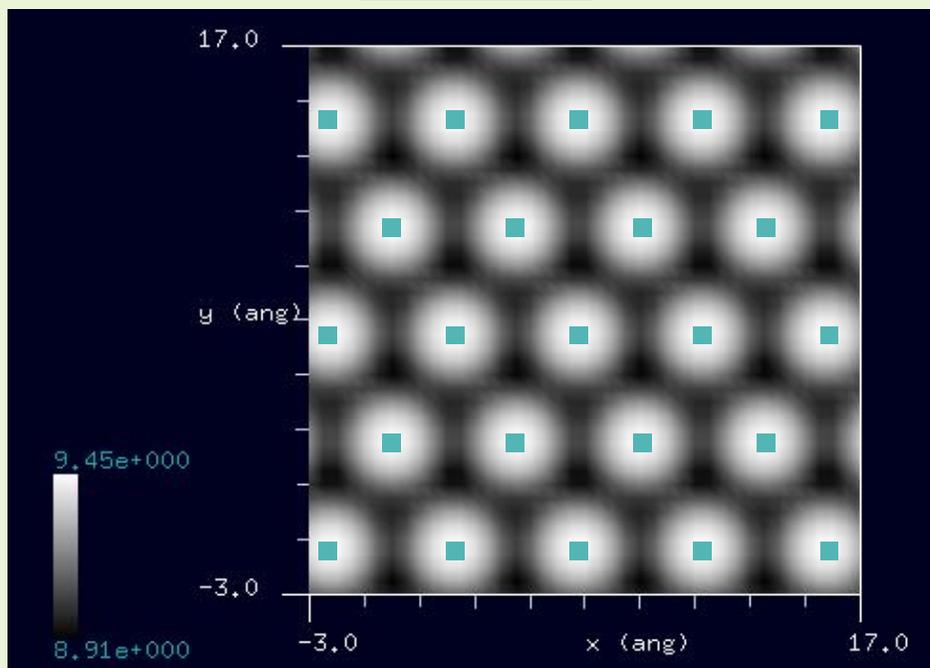


探針: Si_4H_9
試料: Mo(111)表面
スキャンエリア: $20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$
スキャンモード: constant current STM
探針バイアス: +0.5 V
電流値: 10 nA

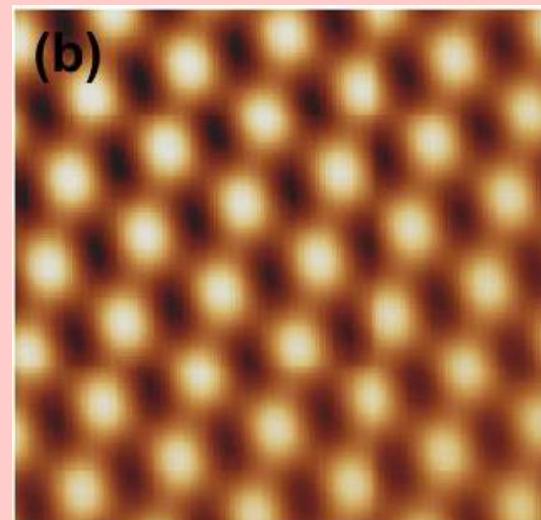


周期的境界条件を課したMo(111)モデル

計算結果



cf. Experiment

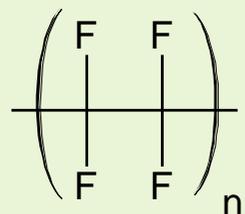


STM image of Mo(111) surface.

<http://www.cmu.edu/physics/stm/publ/107/LB-STM.pdf>
Scanning Tunneling Microscopy of Metals and Semiconductors

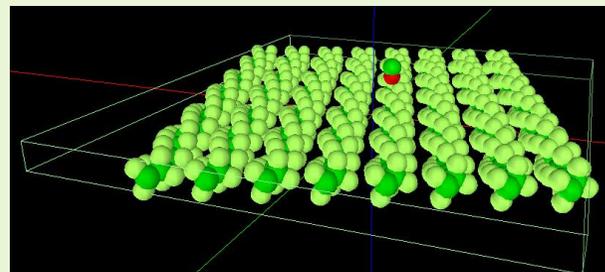
【CG】フッ素系樹脂PTFEのカー定モードAFM像

シミュレートモデル

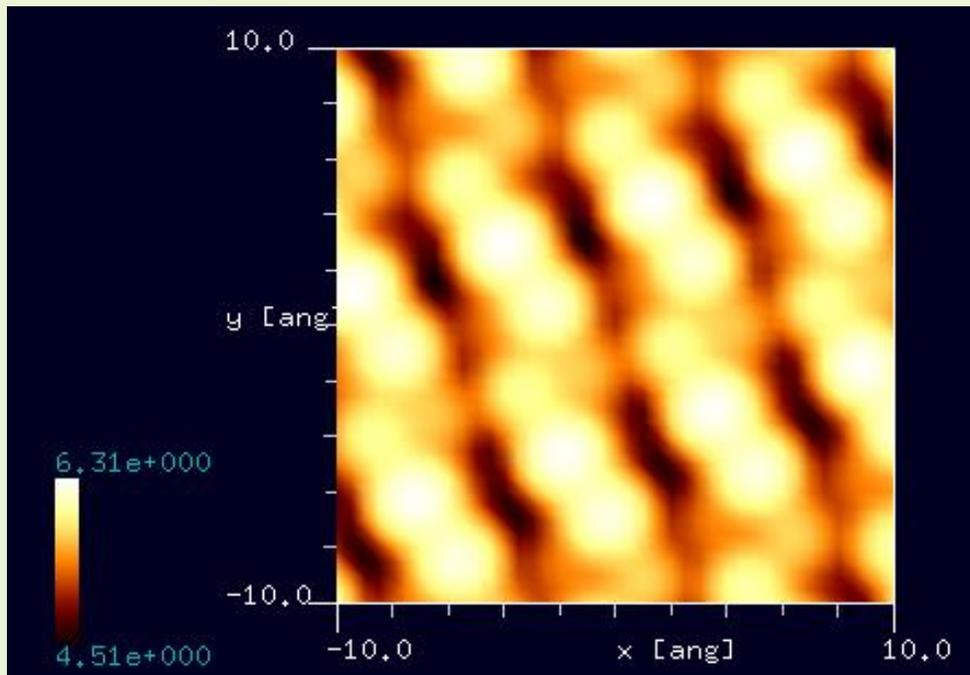


PTFE =
ポリテトラフルオロエチレン

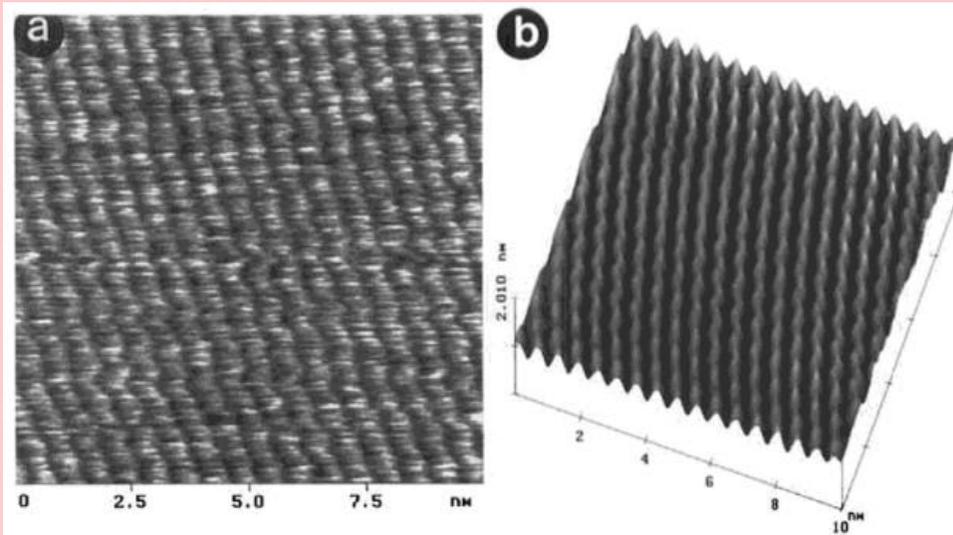
探針: CO
 試料: PTFEの13₆-helix chain, 単層シート
 スキャンエリア: 20 Å x 20 Å
 スキャンモード: カー定モード
 力の設定値: +0.01 nN (微小な斥力)
 解像度: 0.5 Å



計算結果



cf. Experiment

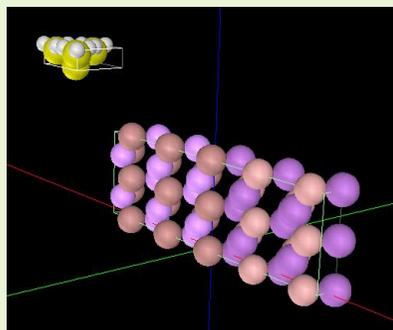


(a) Molecular-scale AFM height image of a PTFE layer deposited by rubbing on a hot glass substrate. (b) Surface view of (a) after filtering.

Sergei N. Magonov and Myung-Hwan Whangbo, Surface Analysis with STM and AFM: Experimental and Theoretical Aspects of Image Analysis

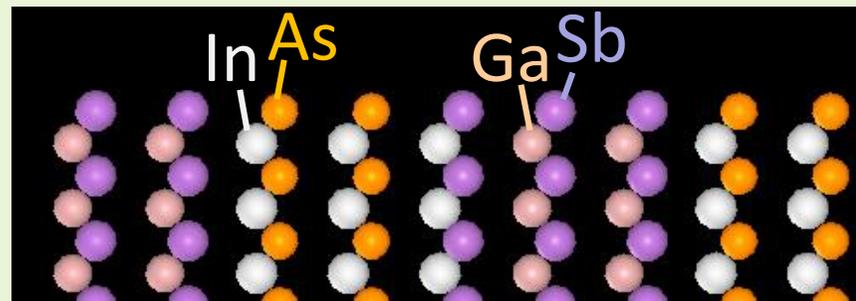
【DFTB】InAs-GaSb界面の(110)面のconstant current STM像

シミュレートモデル

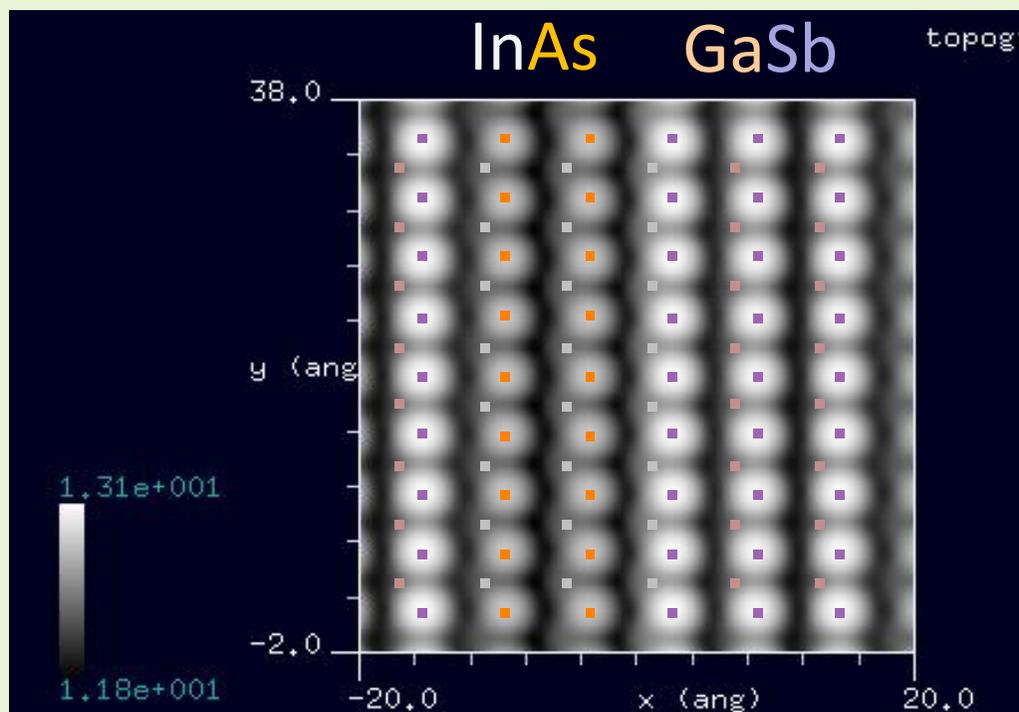


探針: Si_4H_9
 試料: InAs-GaSb界面の(110)面
 スキャンエリア: $40 \text{ \AA} \times 40 \text{ \AA}$
 スキャンモード: constant current STM
 探針バイアス: $+1.0 \text{ V}$
 電流値: 1000 nA
 解像度: 0.5 \AA

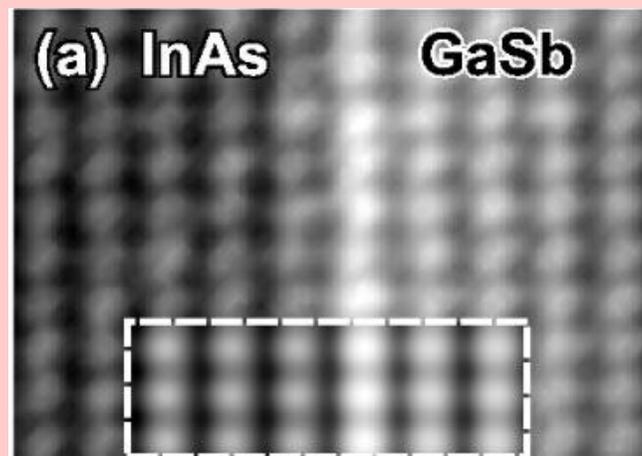
最表面の原子配置(周期的境界条件を適用)



計算結果



cf. Experiment

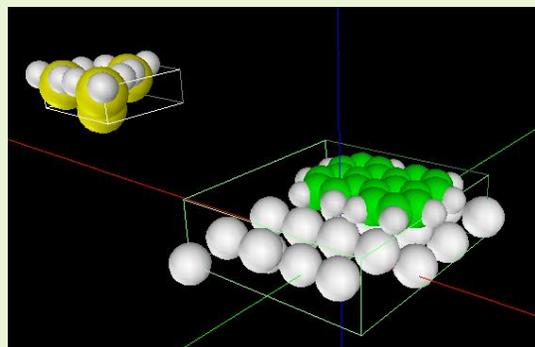


An XSTM image of an InAs-GaSb interface with InSb interfacial bonds. Inset: Simulated XSTM image of this structure. Both gray scales span about 1 \AA .

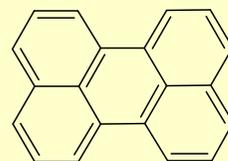
S. G. Kim, S. C. Erwin, B. Z. Noshov, L. J. Whitman, Phys. Rev. B 67, 121306(R) (2003).

【DFTB】Perylene on Ag(110)のconstant current STM像

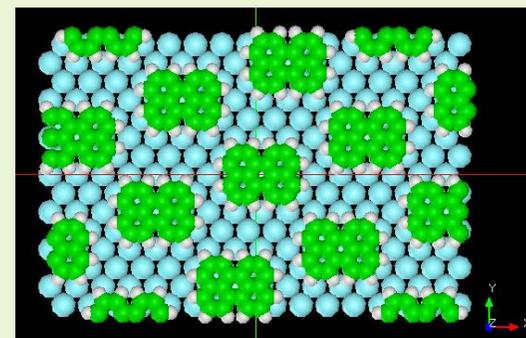
シミュレートモデル



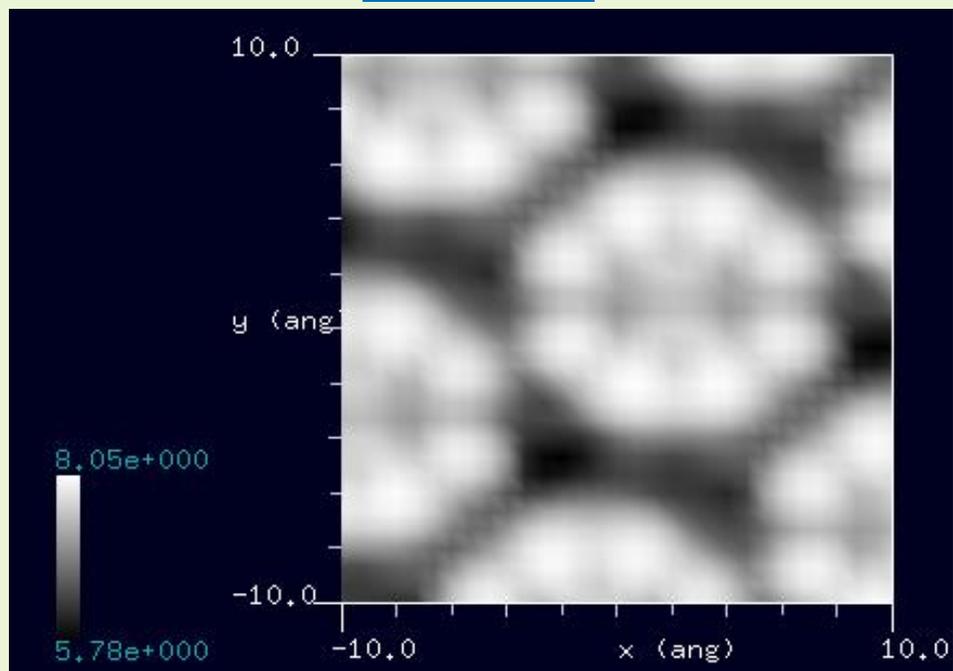
探針: Si_4H_9
 試料: Ag(110)面上の
 Perylene分子
 スキャンエリア: $20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$
 スキャンモード: constant current STM
 探針バイアス: +1.2 V
 電流値: 1000 nA
 解像度: 0.5 \AA



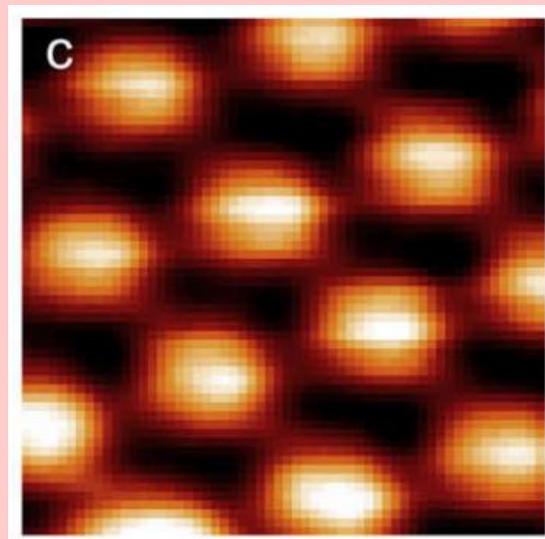
周期的境界条件で拡張したモデル



計算結果



cf. Experiment

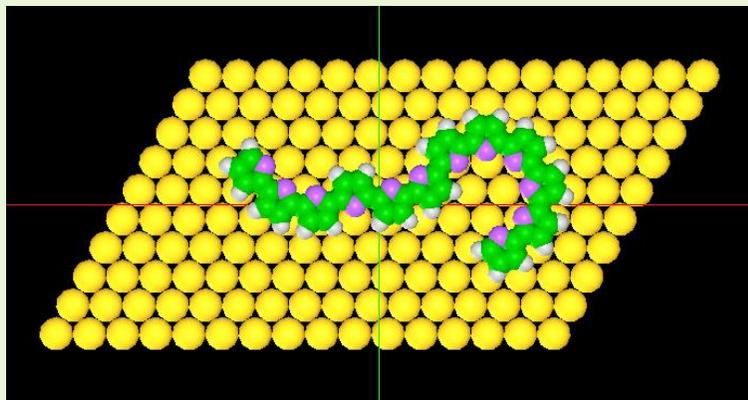


Experimental STM image ($4 \text{ nm} \times 4 \text{ nm}$, $U = -1.2 \text{ V}$, $I = 0.13 \text{ nA}$) of perylene superstructure.

H.-J. Gao and Li Gao, Progress in Surface Science 85, 28–91 (2010).

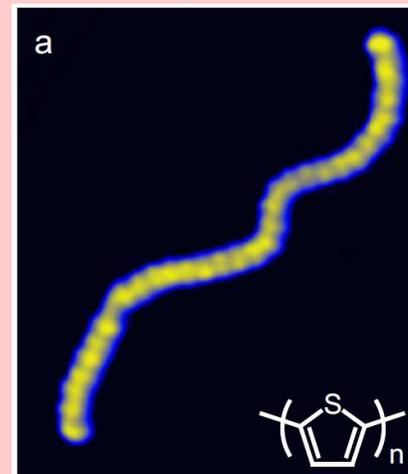
【DFTB】ポリチオフェンワイヤのconstant current STM像

シミュレートモデル



探針: Si_4H_9
試料: Au(111)面上のポリチオフェン分子
スキャンエリア: $40 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$
スキャンモード: constant current STM

cf. Experiment

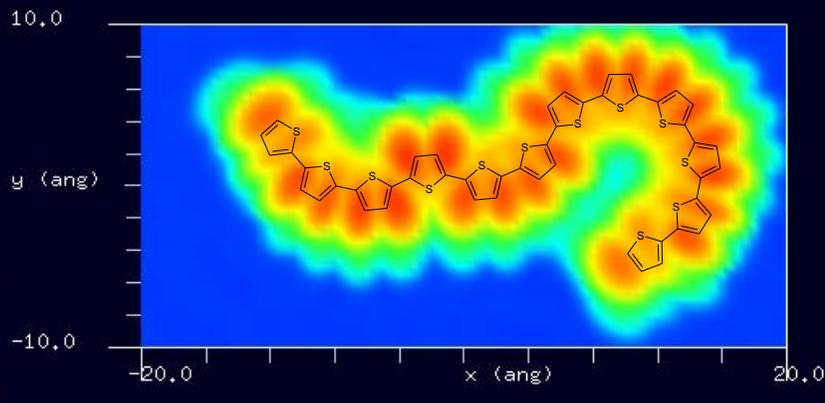


STM image ($I = 2 \text{ nA}$, $V = 0.1 \text{ V}$).

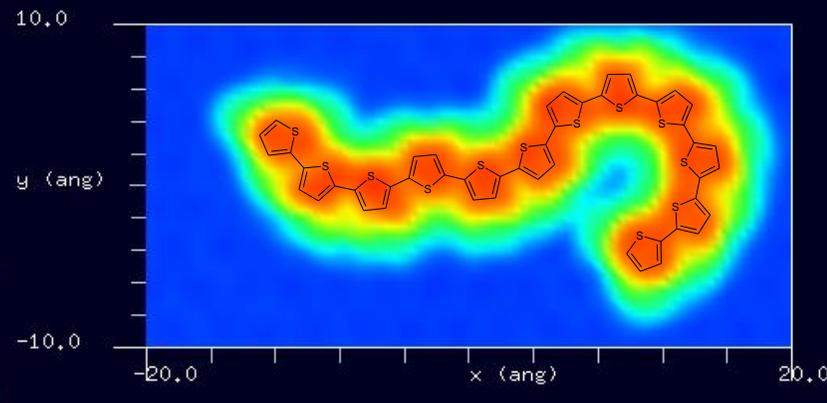
Gael Reecht et al., Phys. Rev. Lett. 2, 112, 047403 (2014).

計算結果

$V_{\text{tip}} = +0.5 \text{ V}$, $I = 100 \text{ nA}$.



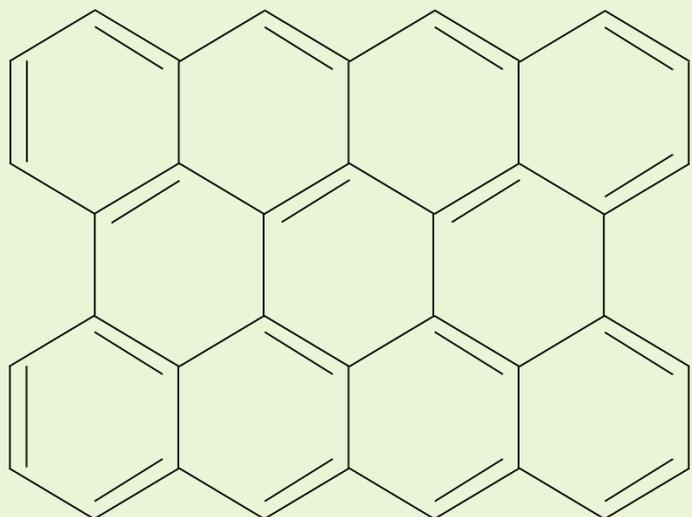
$V_{\text{tip}} = -0.5 \text{ V}$, $I = 100 \text{ nA}$.



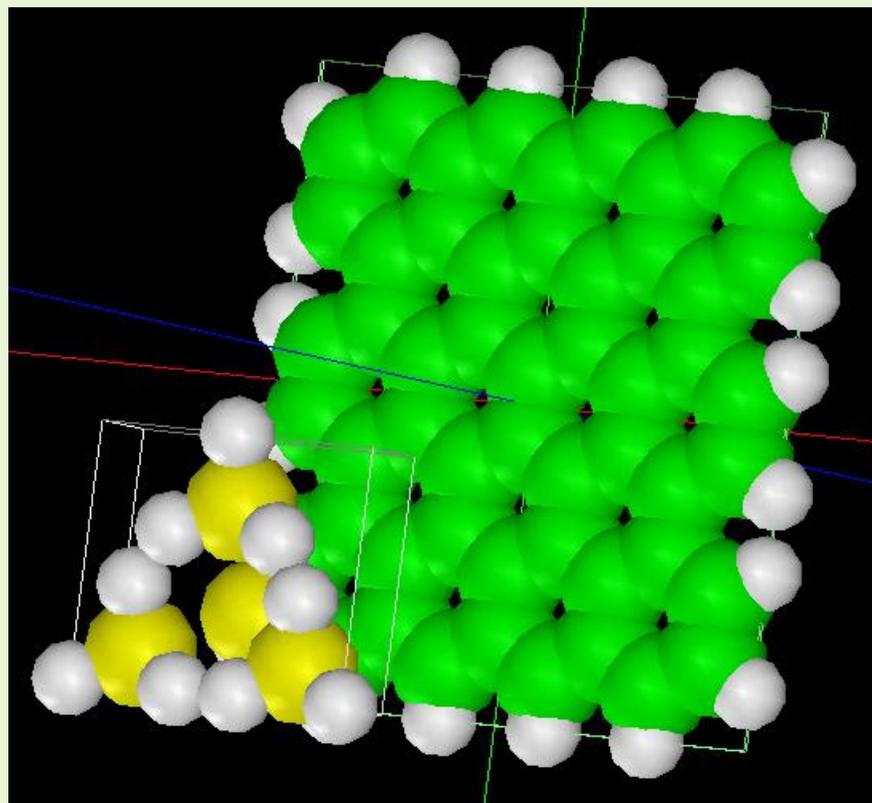
【DFTB】HOPGのSTM像およびAFM像

DFTB

HOPG(高配向熱分解黒鉛)

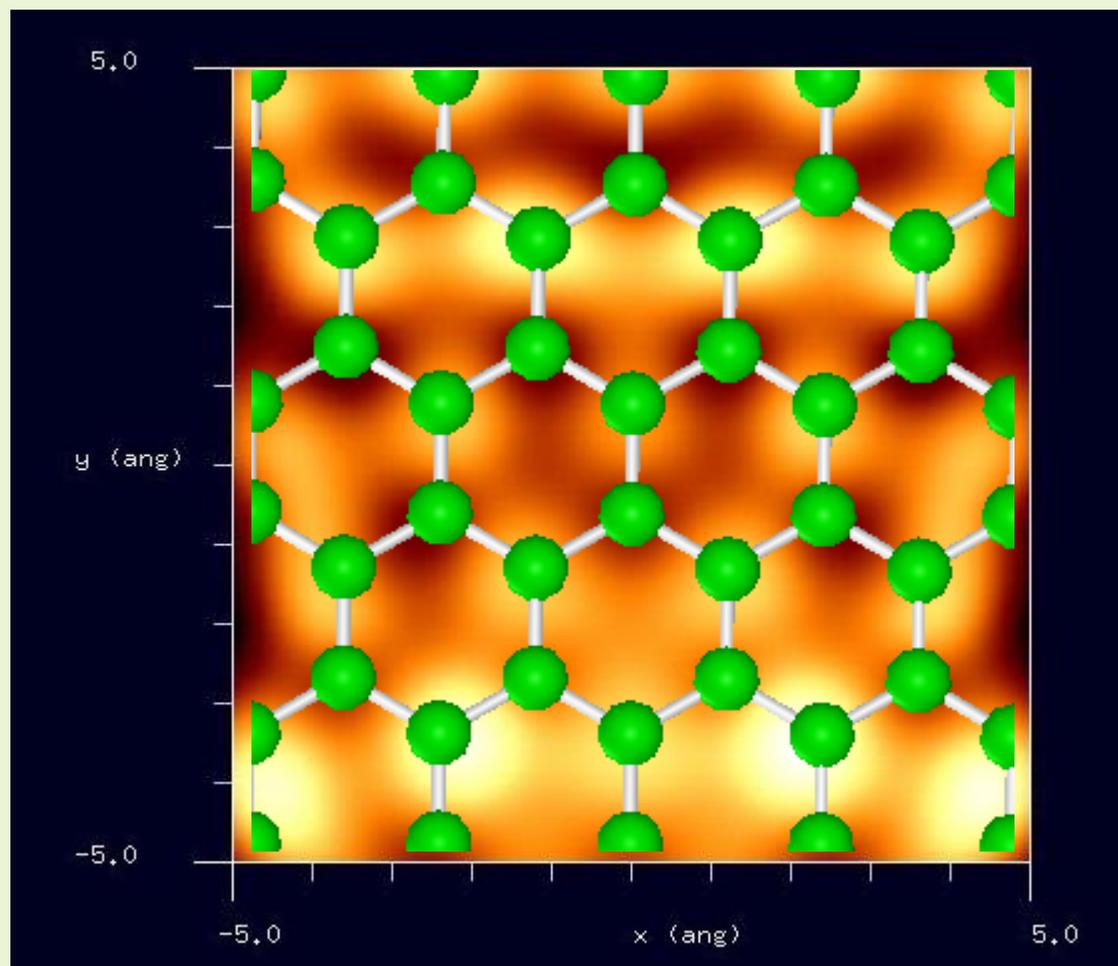


水素終端されたシリコン探針を使用



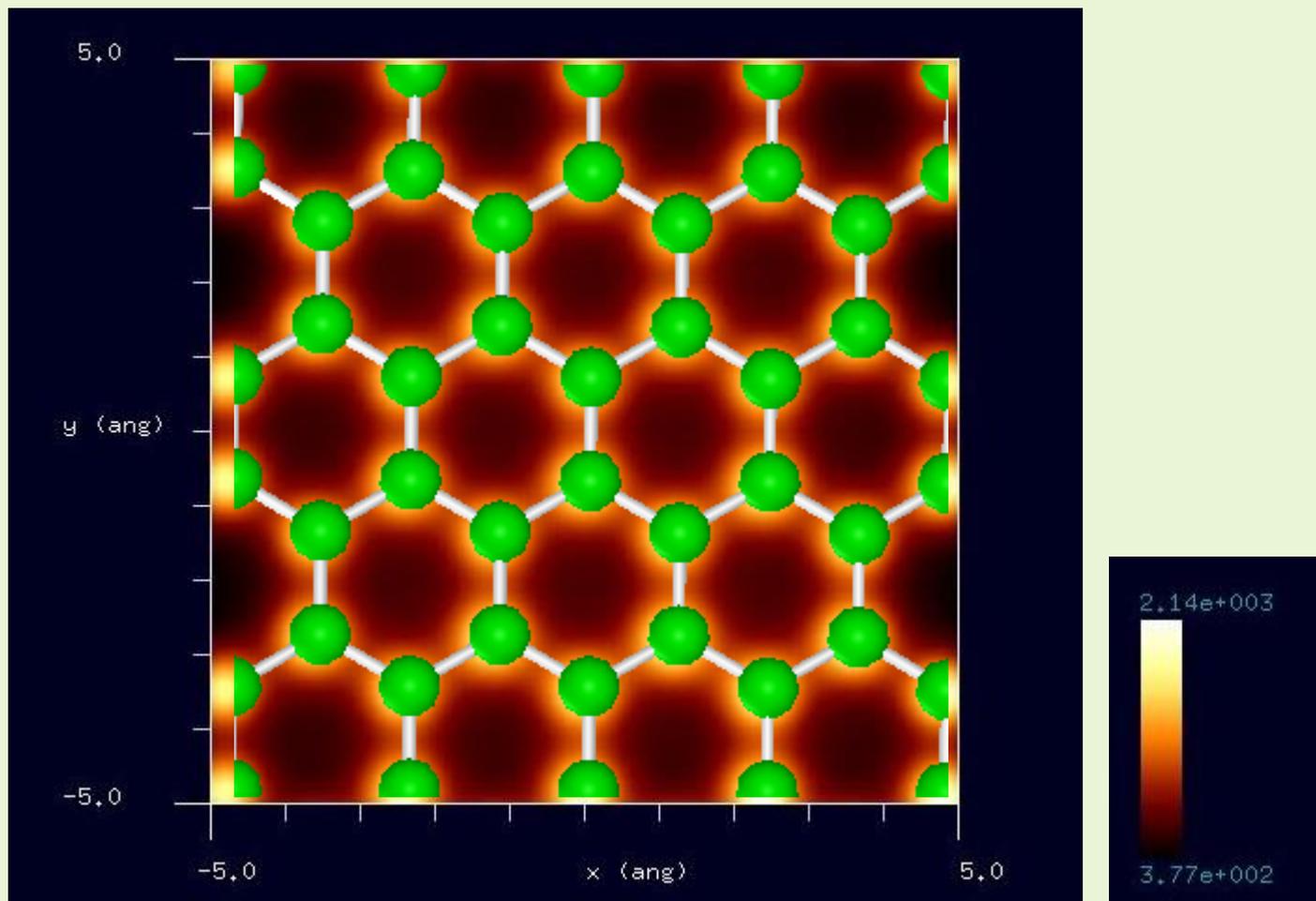
【DFTB】HOPGのconstant height STM像

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.4 Å
最大電流 3.23×10^5 nA、最小電流 1.34×10^5 nA



【DFTB】HOPGの周波数シフトAFM像

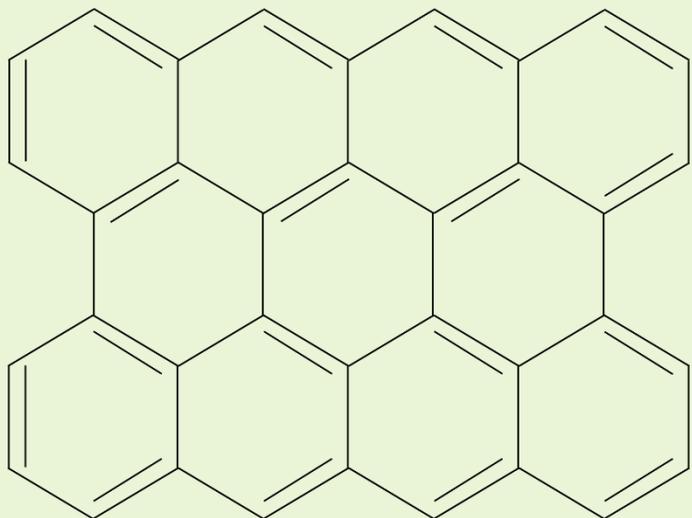
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離3.9 Å
周波数のずれは 3.77×10^2 Hzから 2.14×10^3 Hz



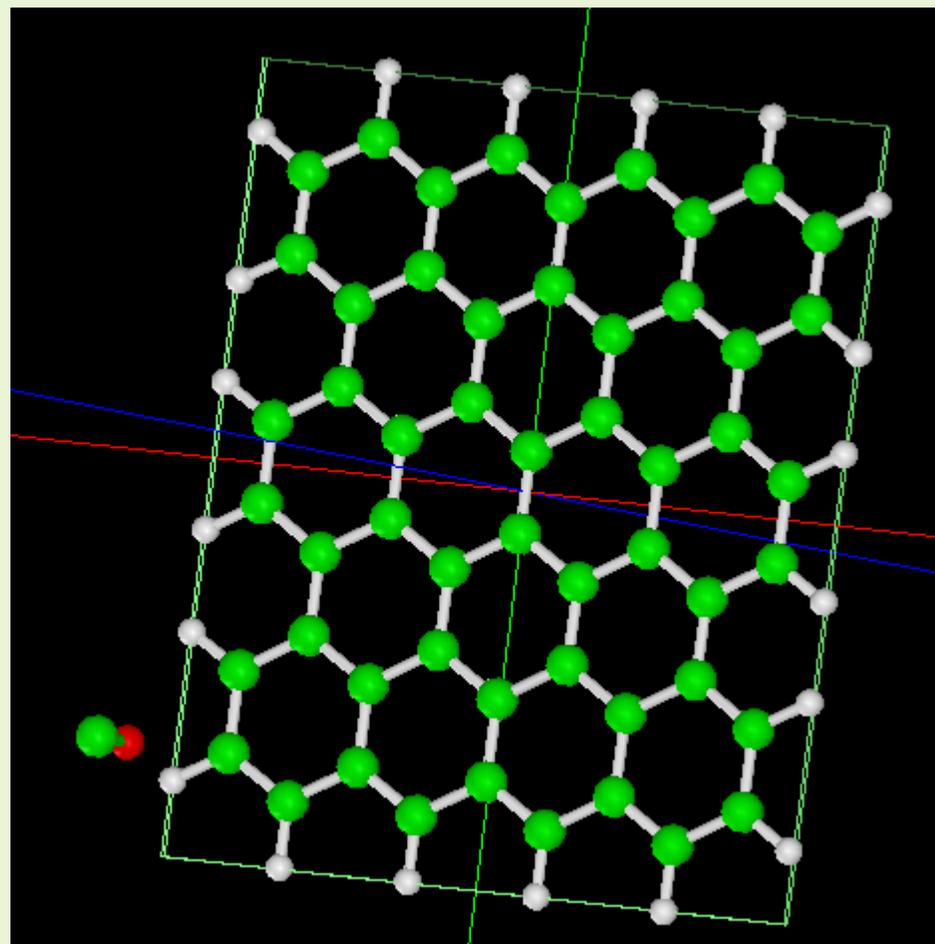
【CG】HOPGの周波数シフトAFM像

CG

HOPG(高配向熱分解黒鉛)

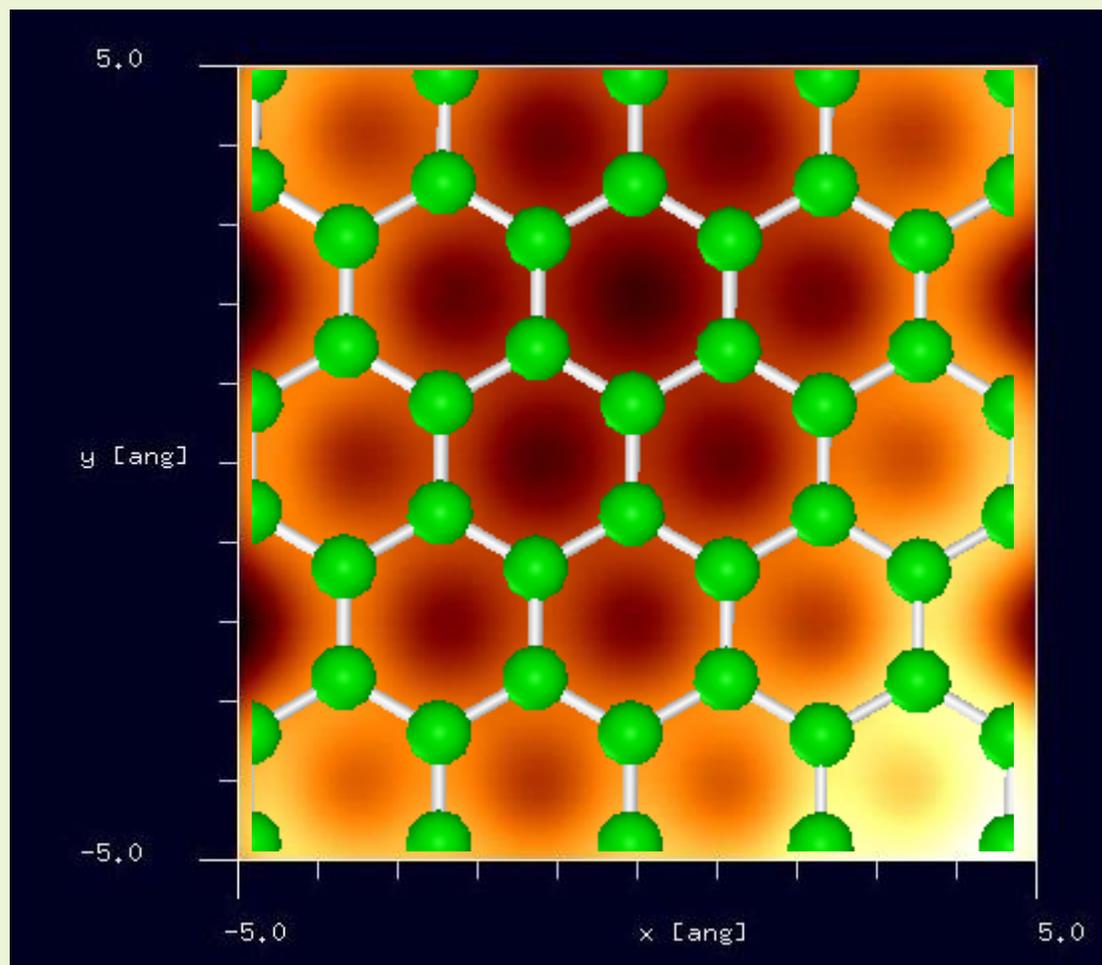


CO探針を使用



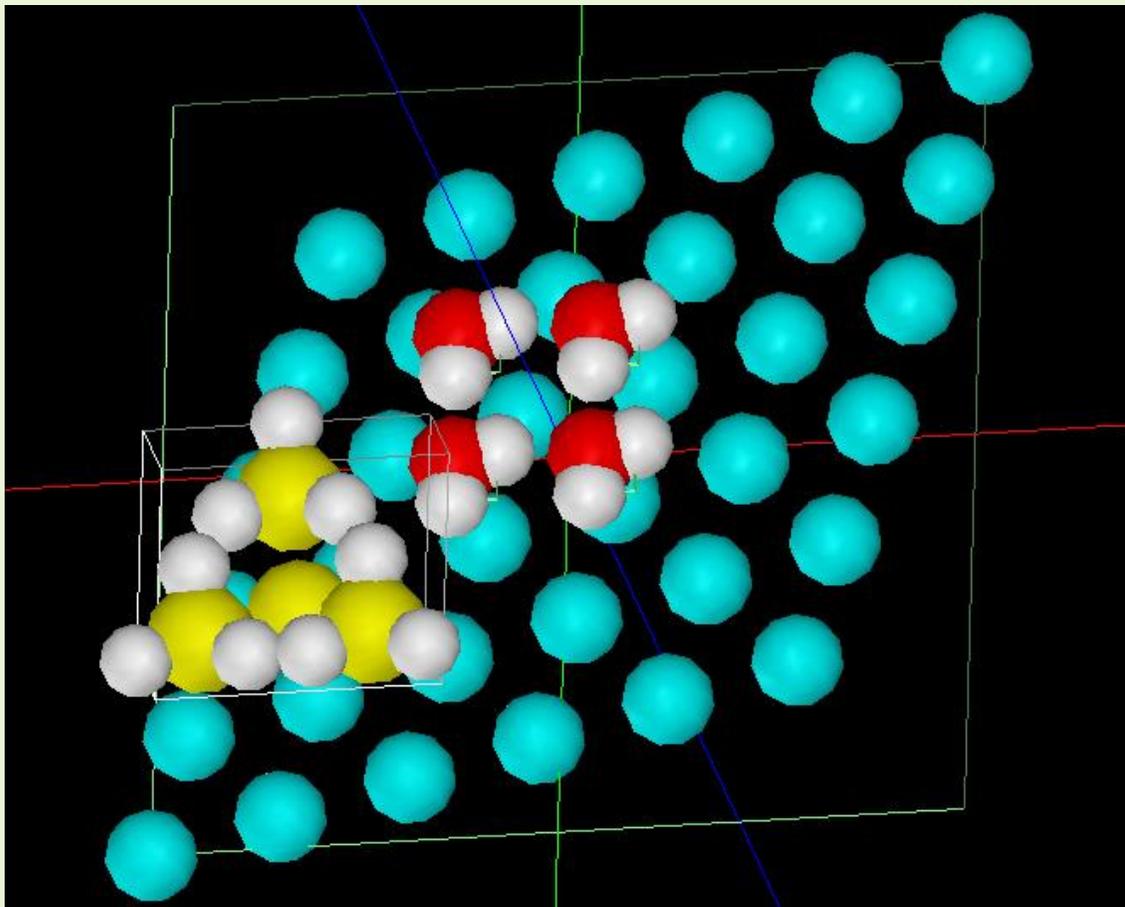
【CG】HOPGの周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離3.4 Å
周波数のずれは 2.23×10^1 Hzから 1.06×10^2 Hz



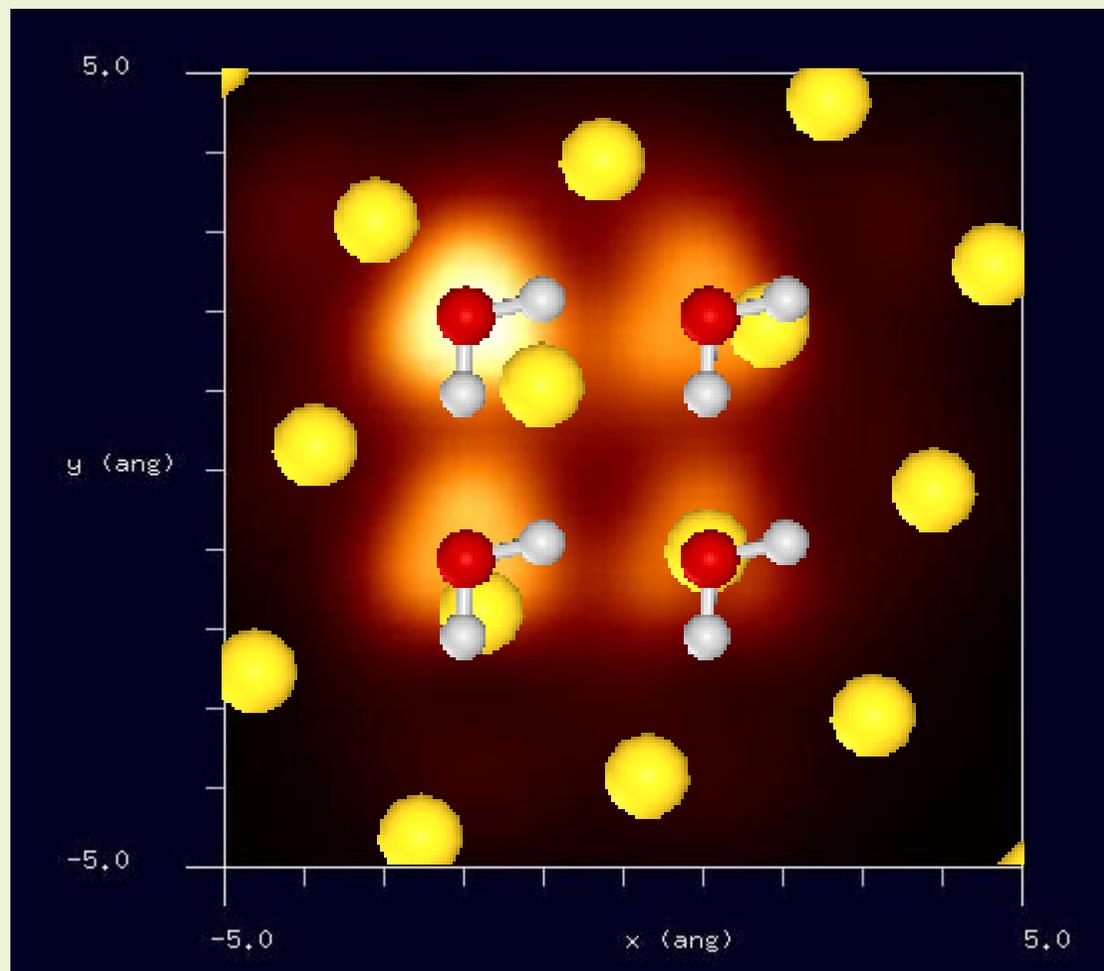
【DFTB】Au(111)基板上的の水分子のSTM像およびAFM像

水素終端されたシリコン探針を使用



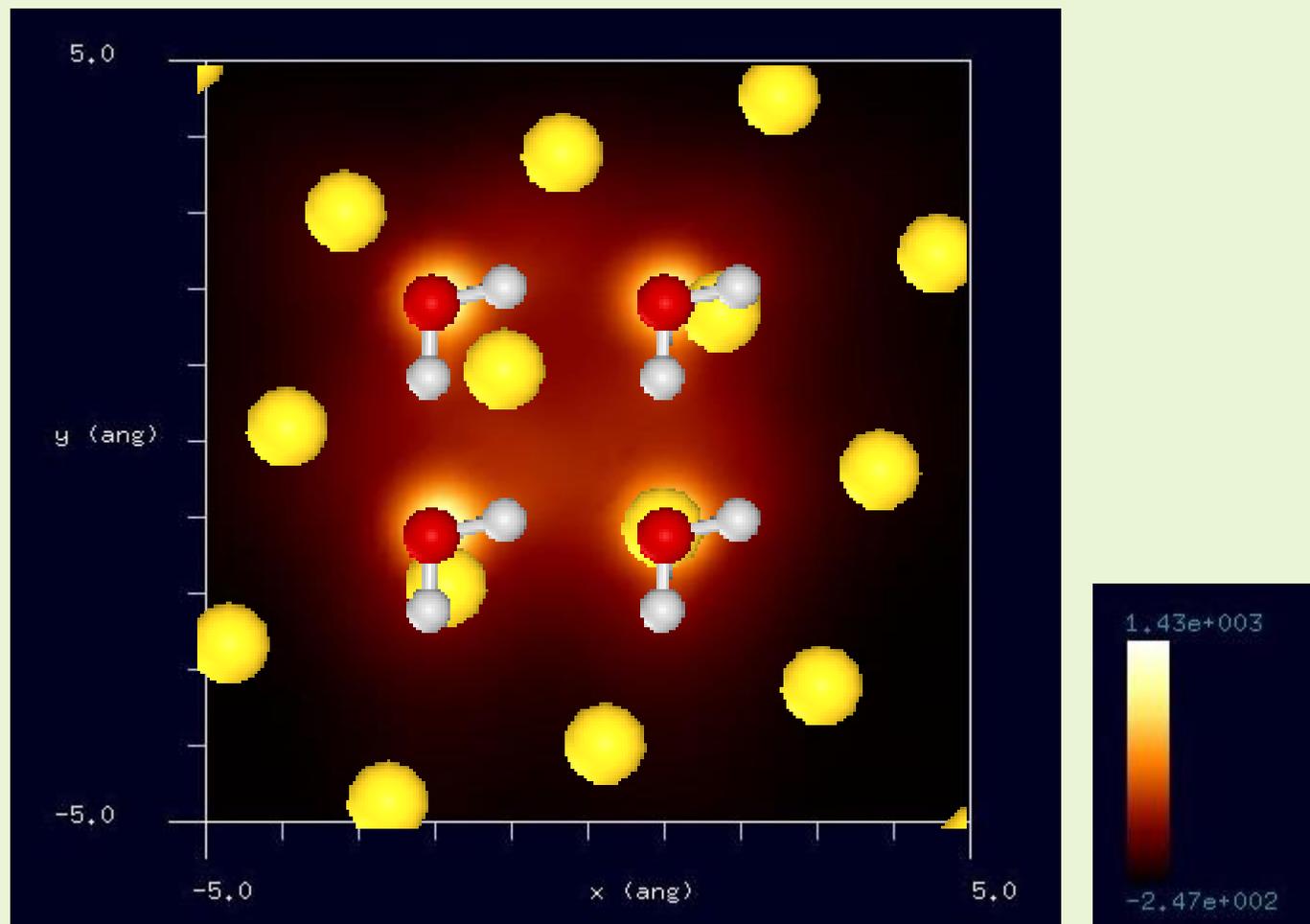
【DFTB】Au(111)基板上的の水分子のconstant height STM像

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.2 Å
最大電流 1.91×10^5 nA、最小電流 9.49×10^3 nA



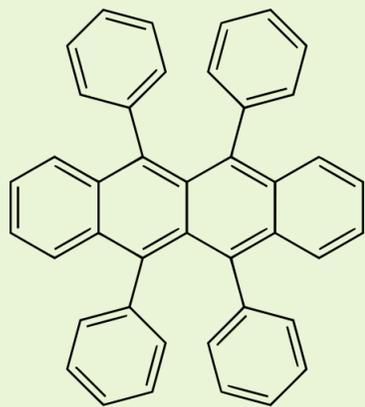
【DFTB】Au(111)基板上的の水分子の周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離3.9 Å
 周波数のずれは -2.47×10^2 Hzから 1.43×10^3 Hz

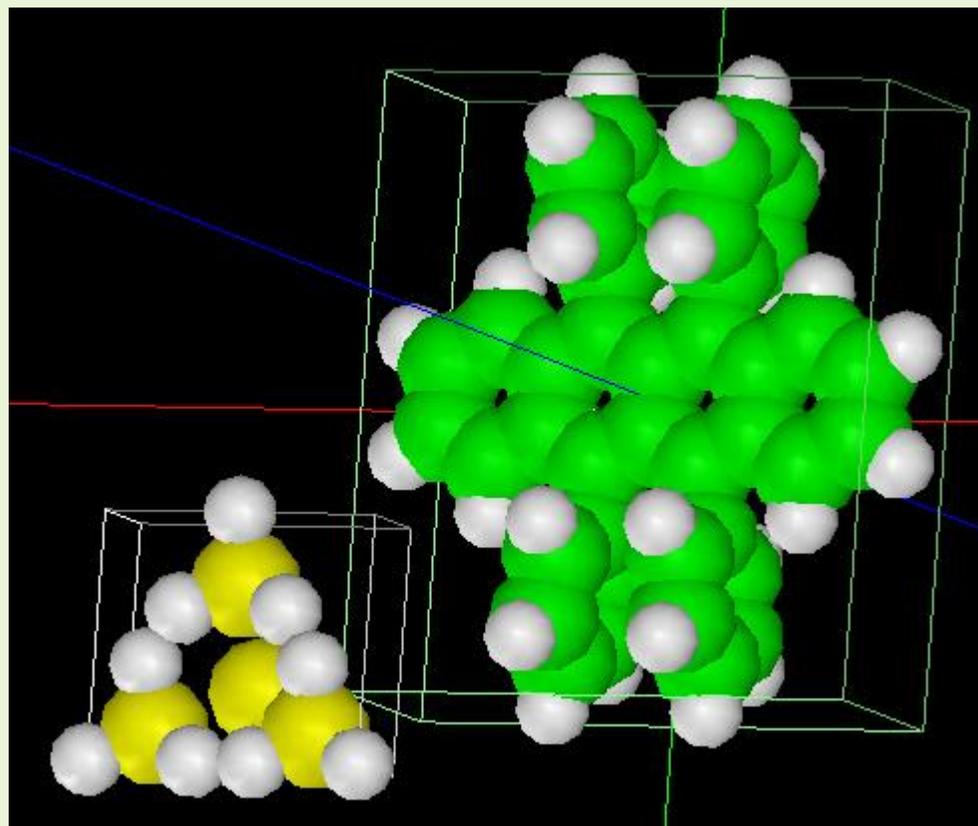


【DFTB】ルブレン分子のSTM像およびAFM像

ルブレン(rubrene)[有機ELの一種]

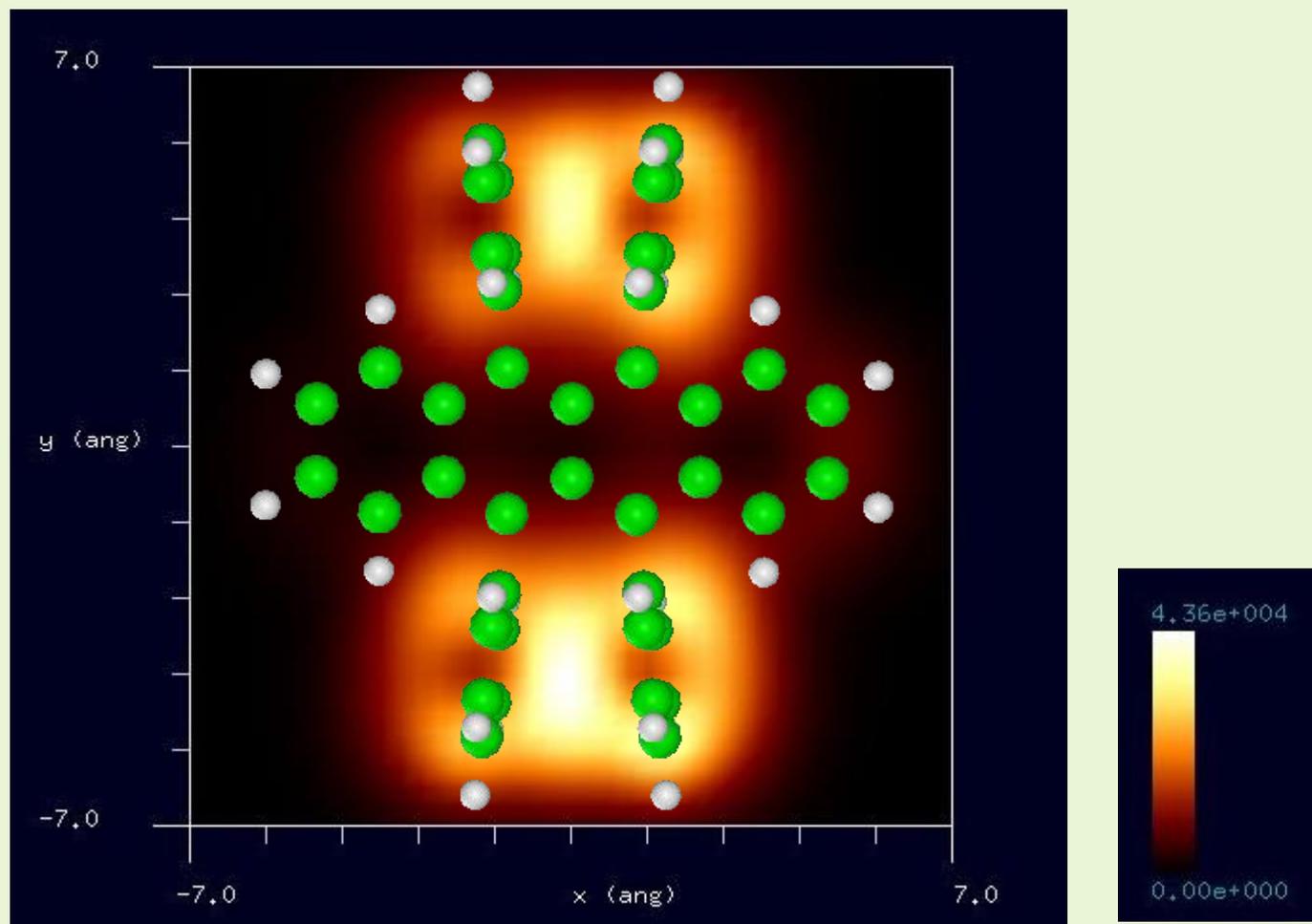


水素終端されたシリコン探針を使用



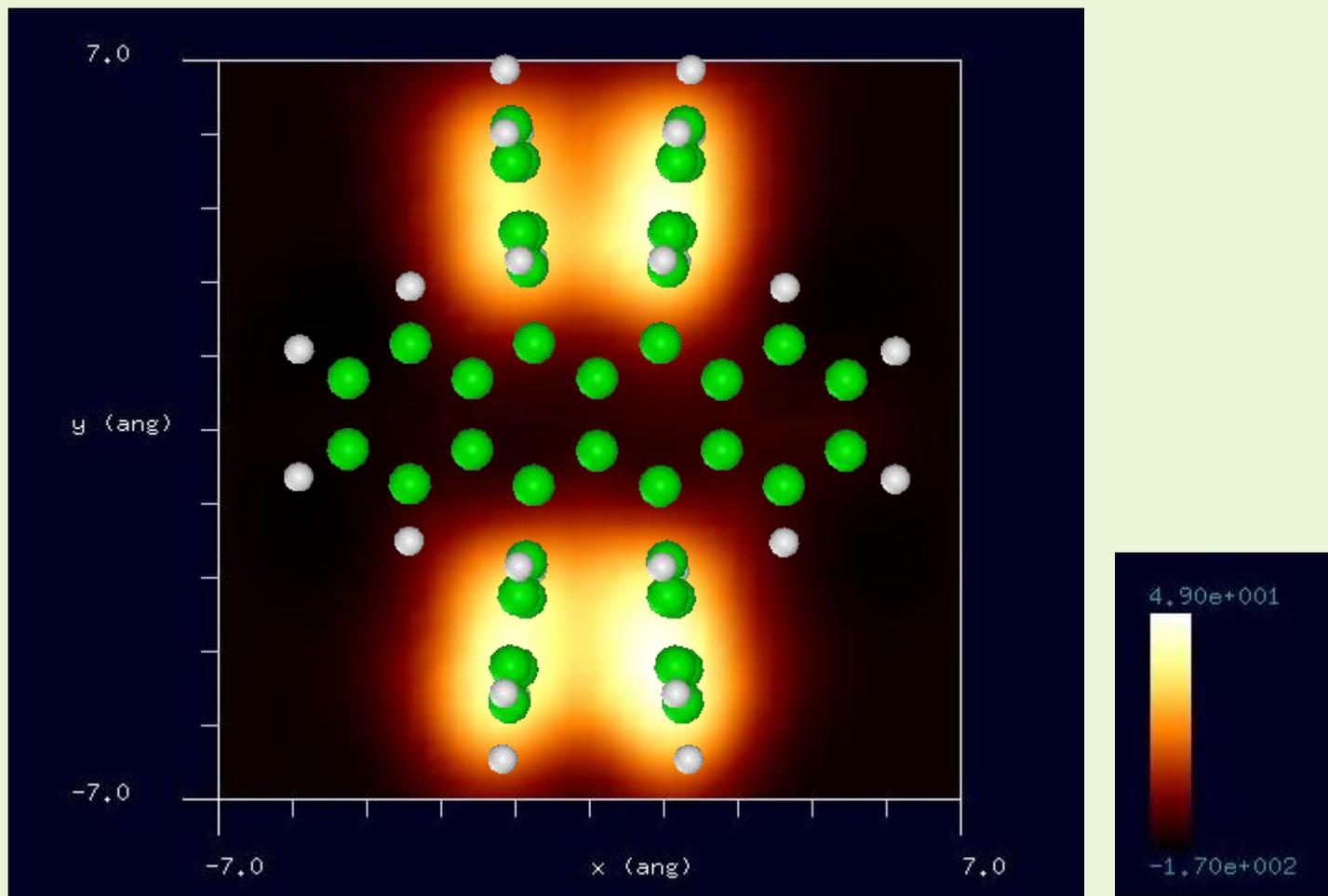
【DFTB】ルブレン分子のconstant height STM像

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.4 Å
最大電流 4.36×10^4 nA、最小電流 0.00×10^0 nA



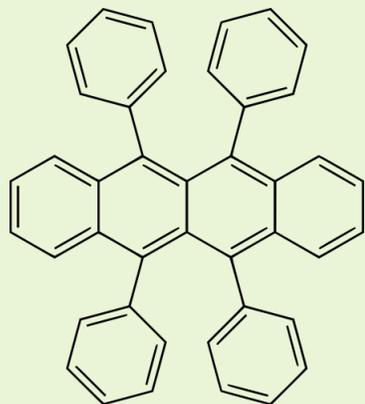
【DFTB】ルブレン分子の周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.4 Å
周波数のずれは -1.70×10^2 Hzから 4.90×10^1 Hz

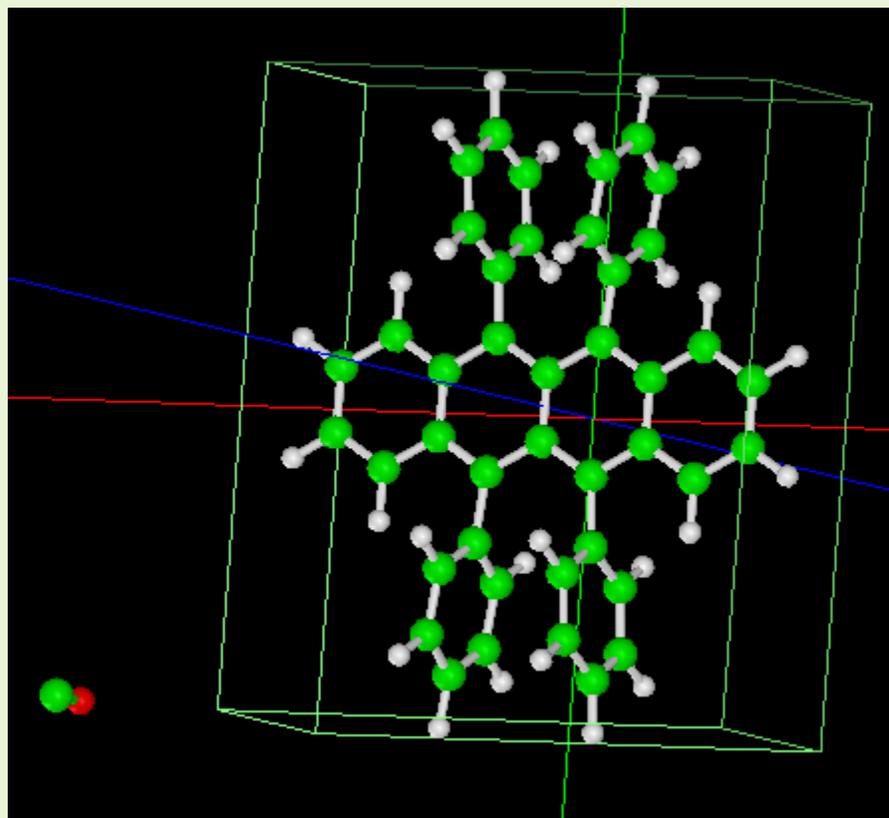


【CG】ルブレン分子の周波数シフトAFM像

ルブレン(rubrene)[有機ELの一種]

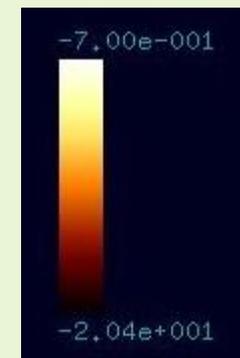
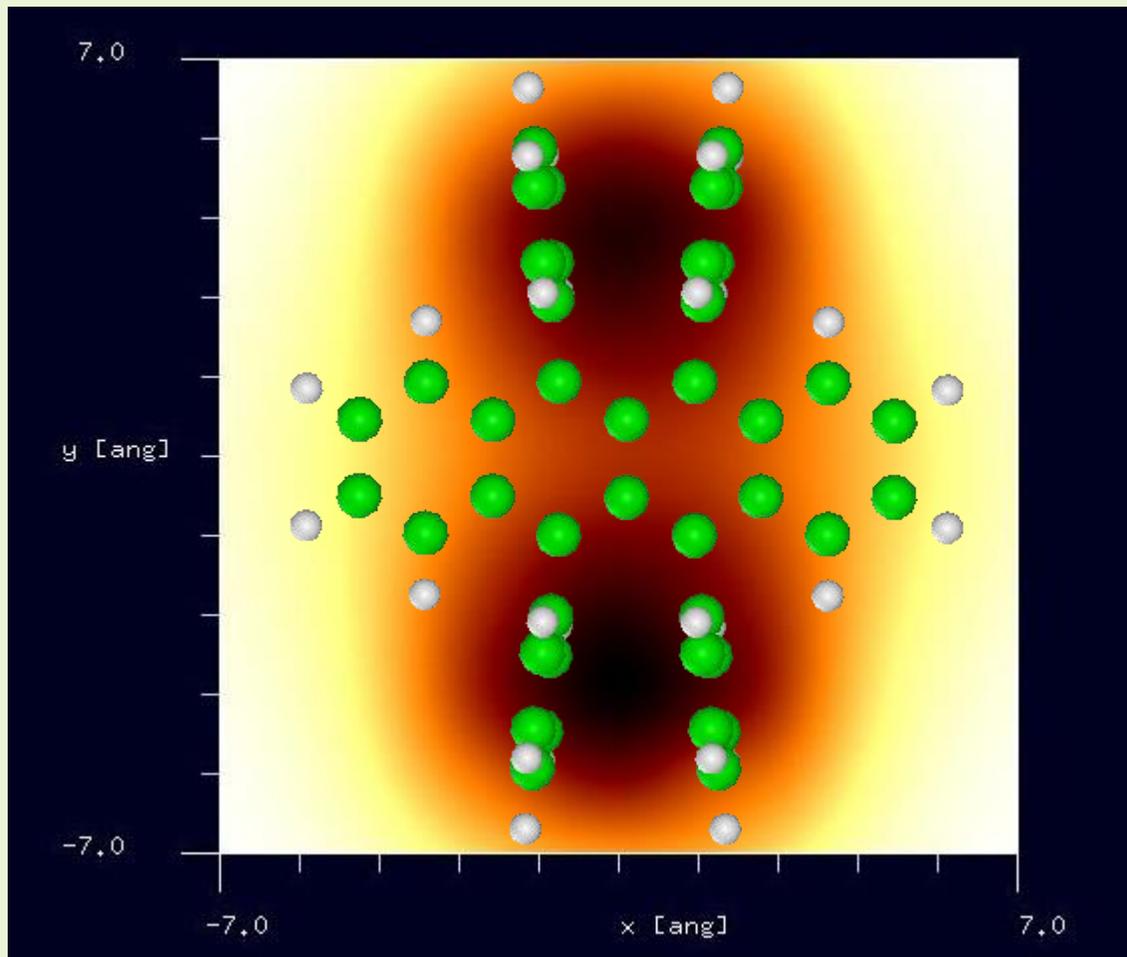


CO探針を使用



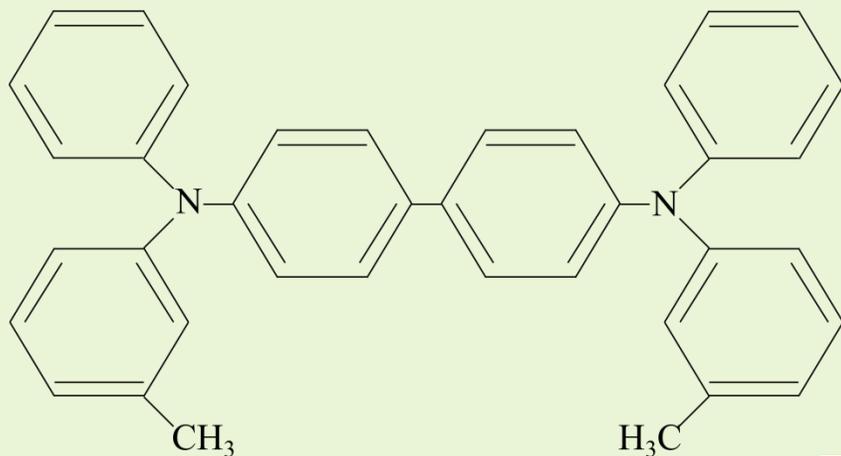
【CG】ルブレン分子の周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離3.9 Å
周波数のずれは -2.04×10^1 Hzから -7.00×10^{-1} Hz

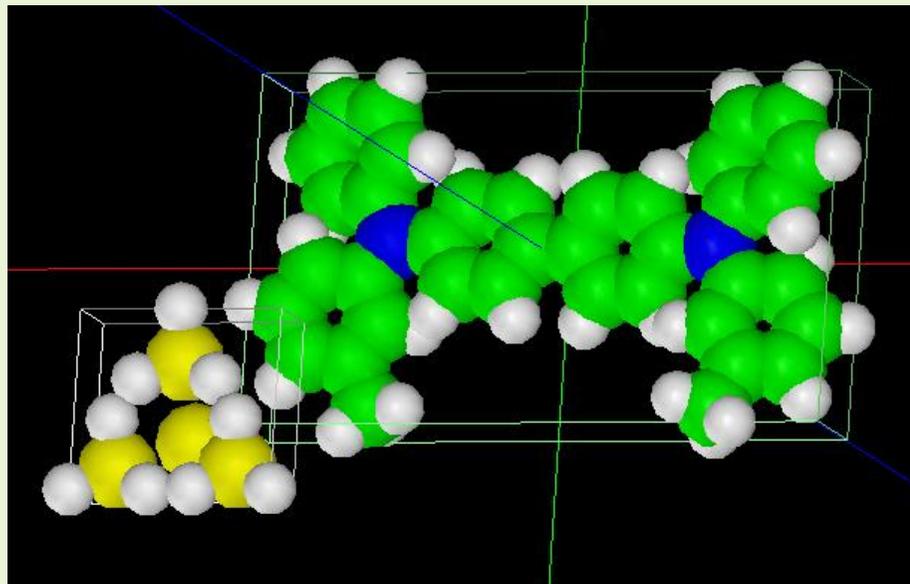


【DFTB】TPD分子のSTM像およびAFM像

TPD(triphenyldiamine)[有機ELの一種]

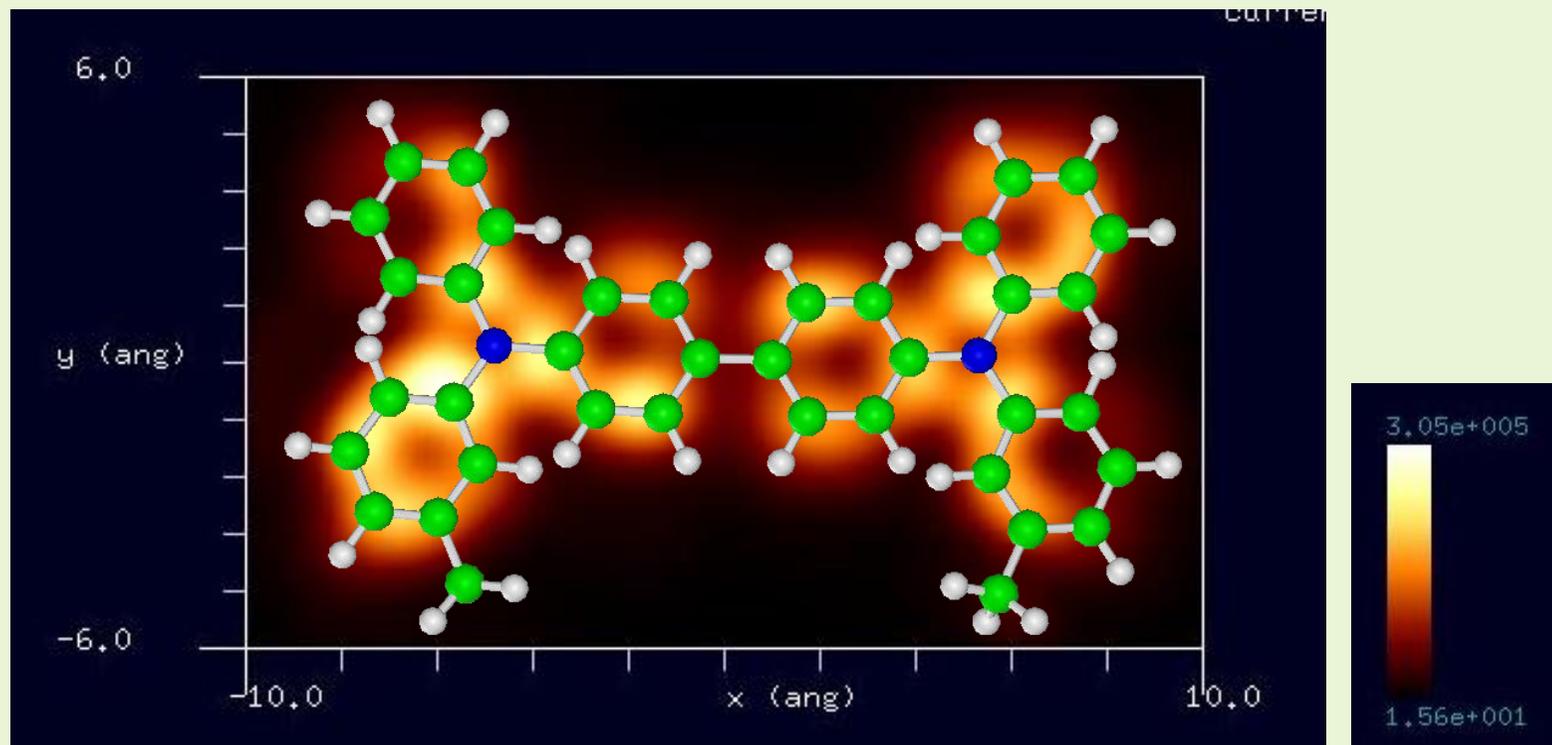


水素終端されたシリコン探針を使用



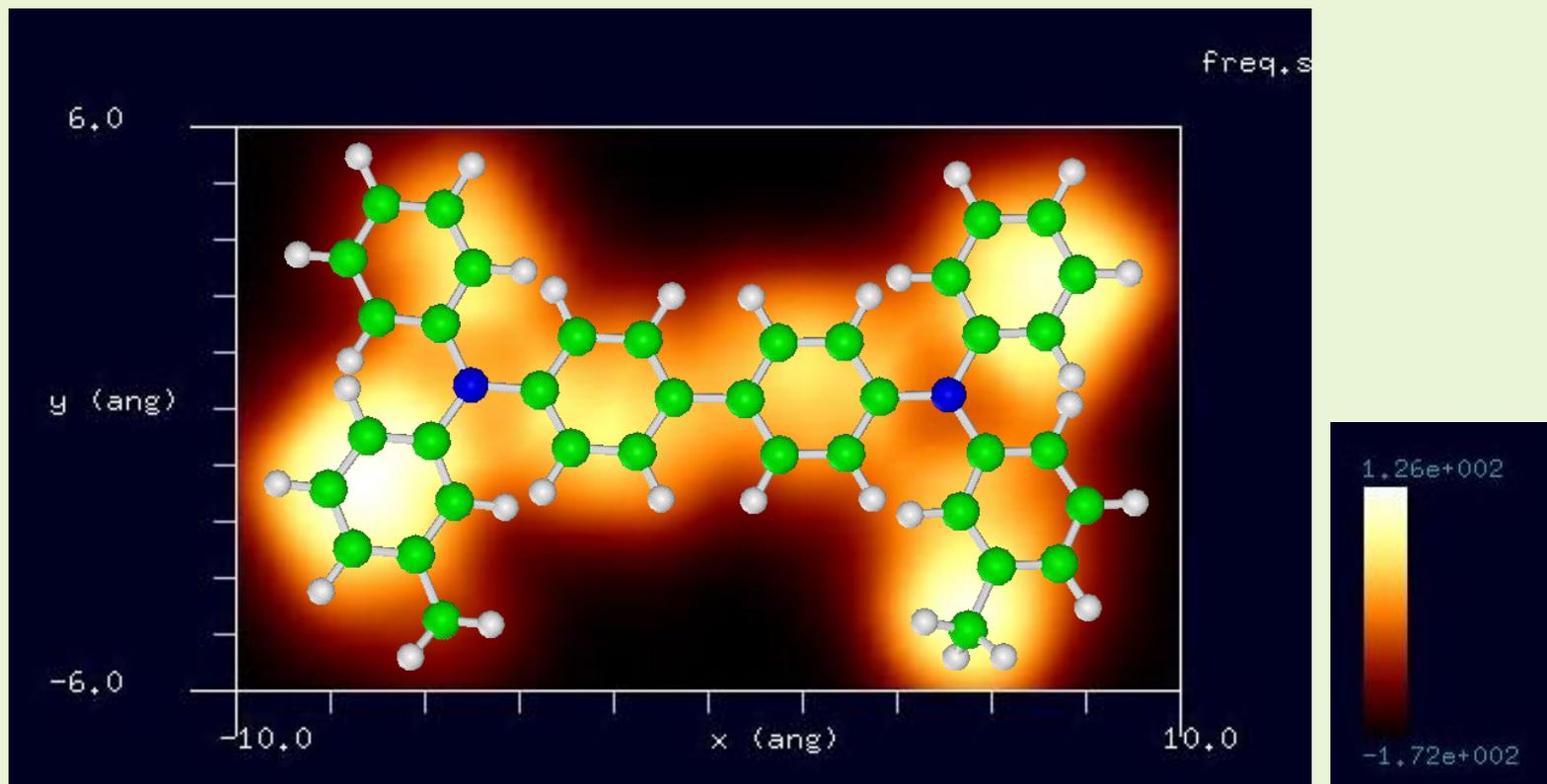
【DFTB】TPD分子のconstant height STM像

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.85 Å
最大電流 3.05×10^5 nA、最小電流 1.56×10^1 nA



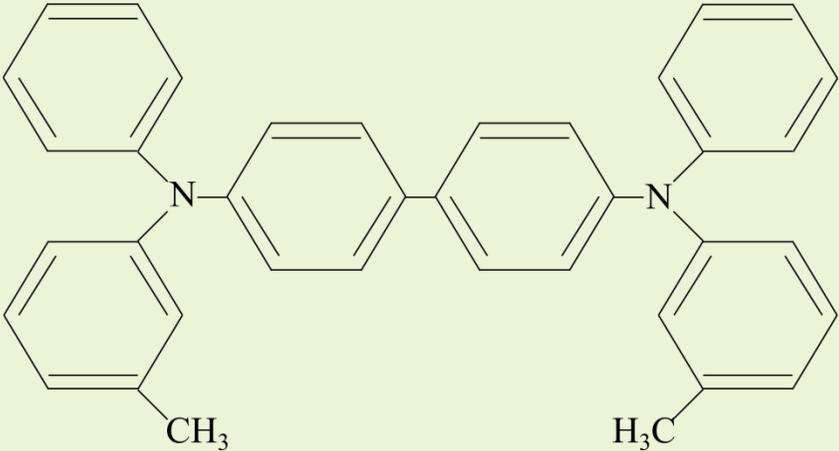
【DFTB】TPD分子の周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.3 Å
 周波数のずれは -1.72×10^2 Hzから 1.26×10^2 Hz

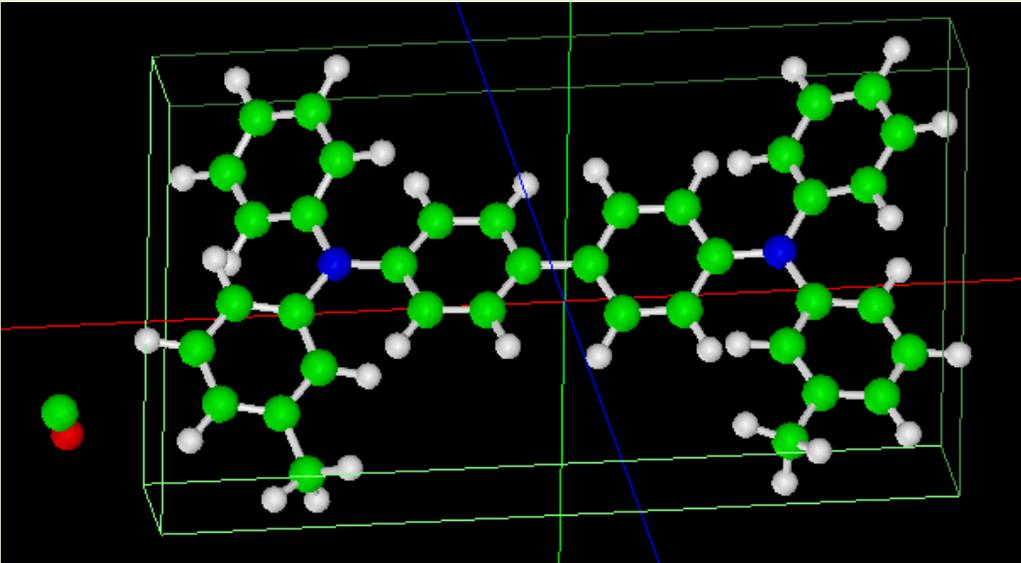


【CG】TPD分子の周波数シフトAFM像

TPD(triphenyldiamine)[有機ELの一種]

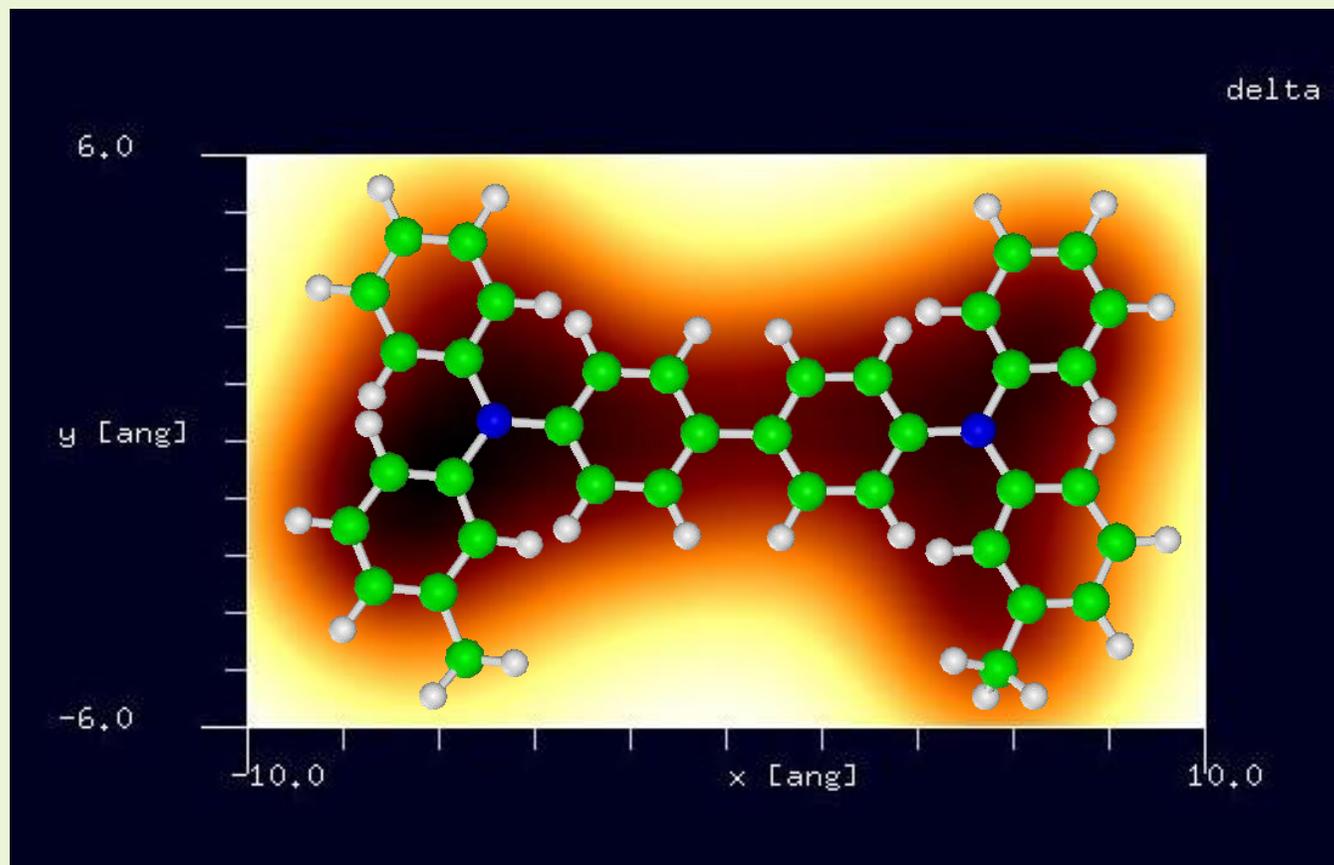


CO探針を使用

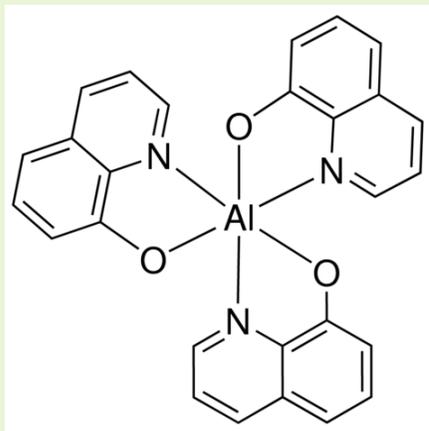


【CG】TPD分子の周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.3 Å
 周波数のずれは -1.74×10^1 Hzから -1.58×10^0 Hz

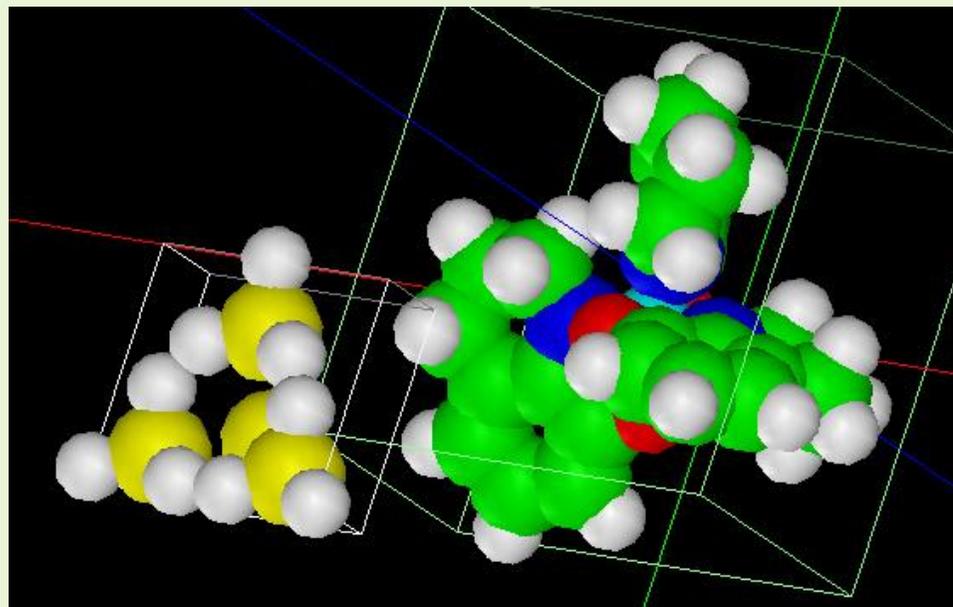


【DFTB】Alq3のSTM像およびAFM像



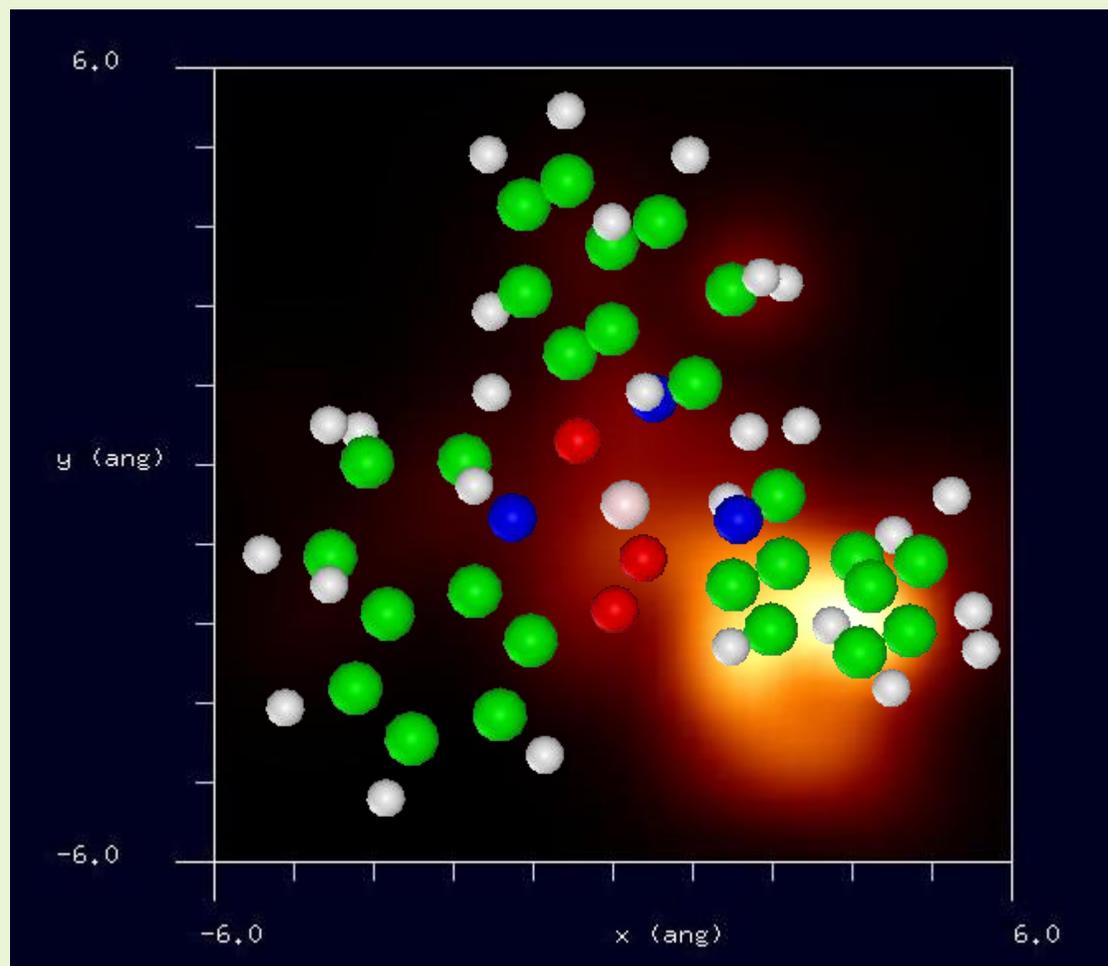
Alq3: トリス(8-ヒドロキシキノリン)アルミニウム[有機ELの一種]

水素終端されたシリコン探針を使用



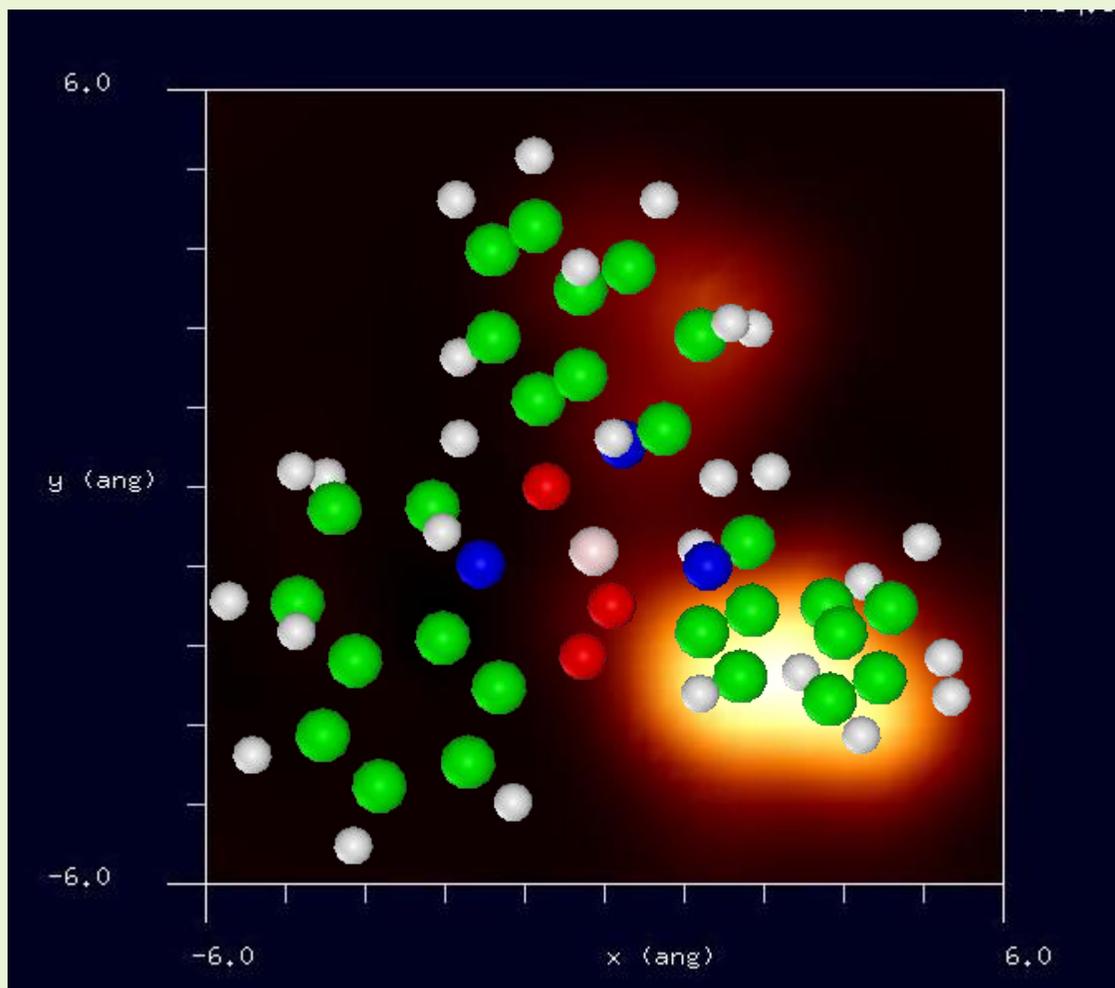
【DFTB】Alq3のconstant height STM像

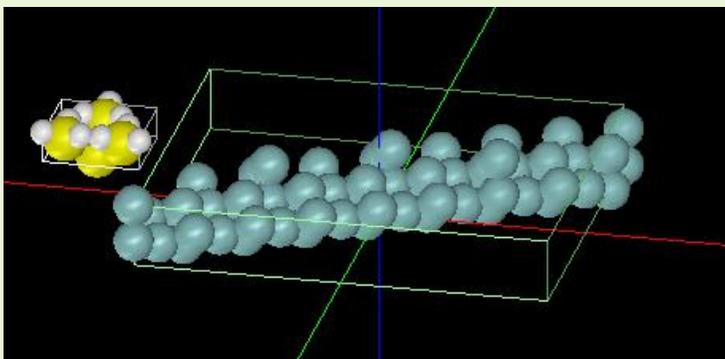
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.46 Å
最大電流 2.21×10^5 nA、最小電流 0.00×10^0 nA



【DFTB】Alq3の周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.4 Å
 周波数のずれは -1.78×10^2 Hzから 8.55×10^1 Hz

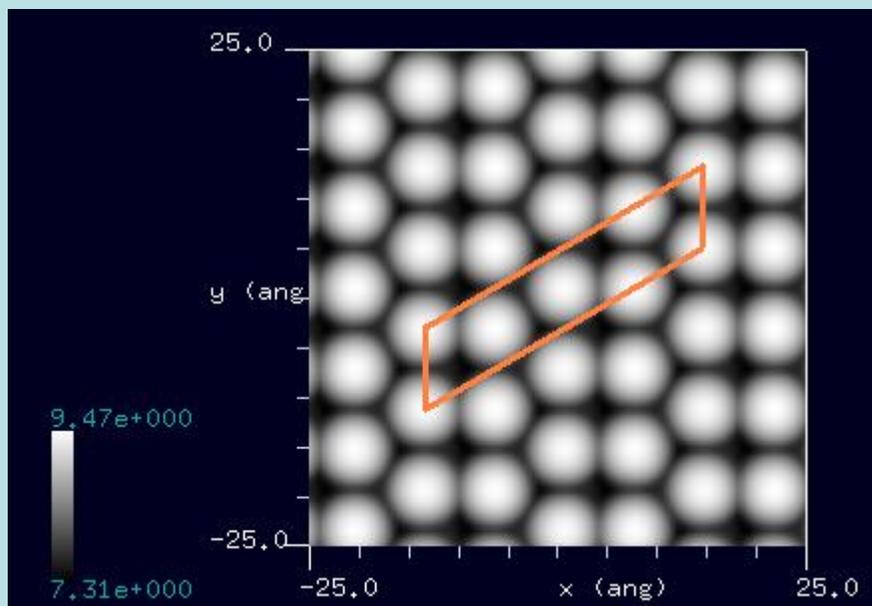




探針: Si_4H_9
試料: Ge(111)-c(2×8).
手法: constant current STM
電流セットポイント: 10 nA
探針バイアス: +0.5 V

constant current STMシミュレート結果

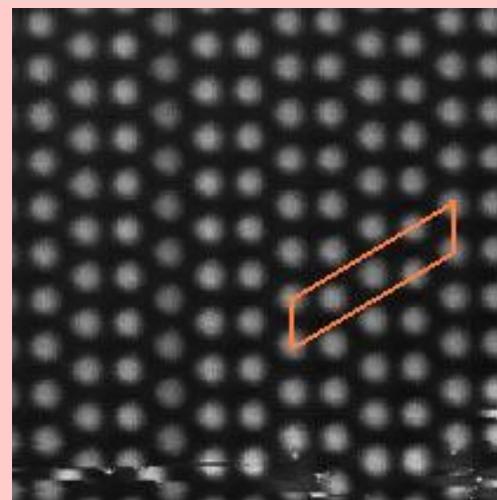
50 Å x 50 Å



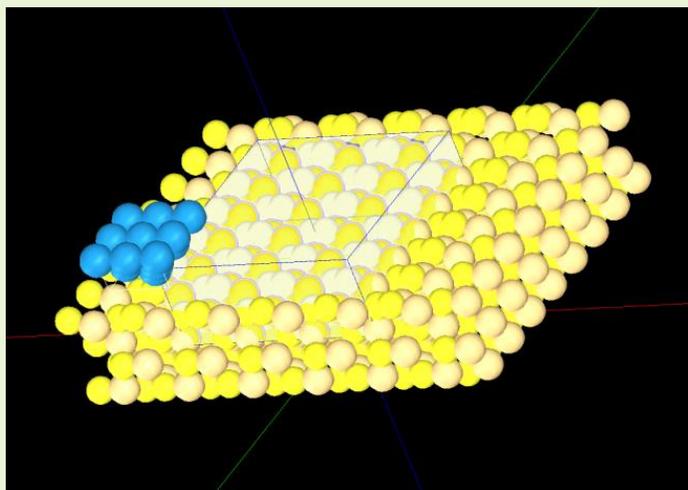
cf. Experiment

試料: Ge(111)-c(2×8)
手法: STM
探針バイアス: +0.5V

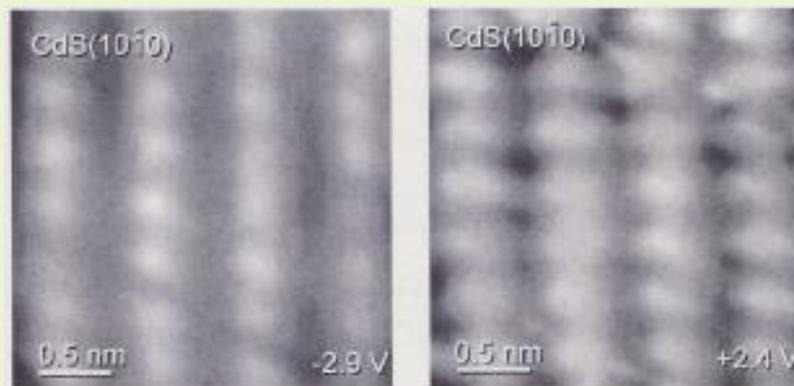
80 Å x 80 Å



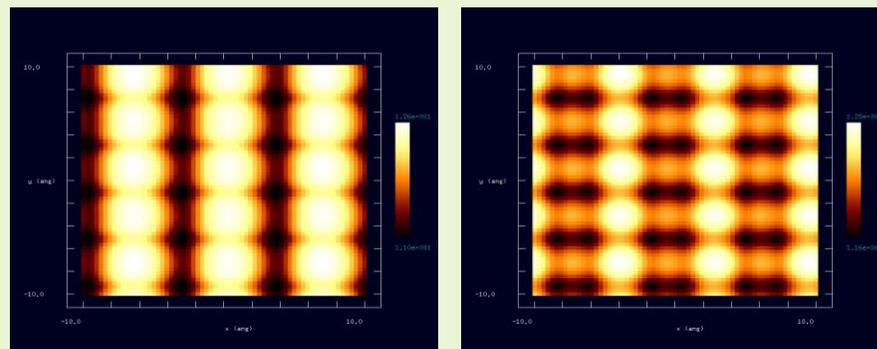
【DFTB】CdS(100)-(1x1) STM



探針: タングステン探針
試料表面: CdS (10 $\bar{1}$ 0) -(1x1)

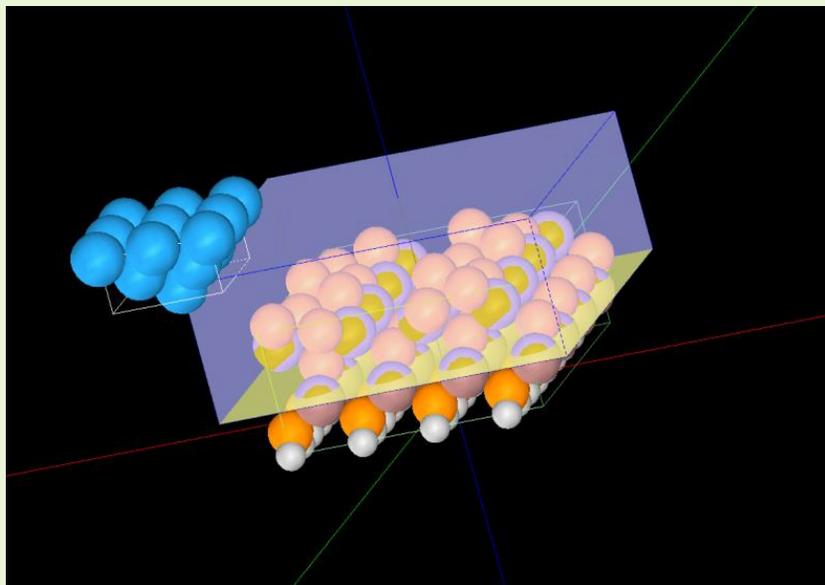


STM実験結果(Phys. Rev. B 56, 12321)
左:占有状態、試料バイアス-2.9V
右:非占有状態、試料バイアス+2.4V

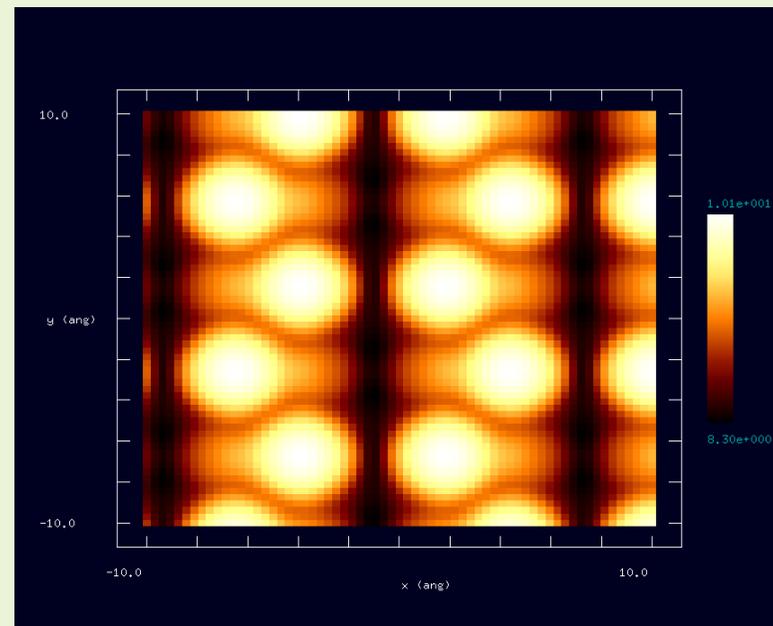
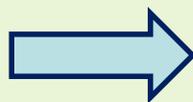


DFTB STM 電流一定像
左:占有状態、探針バイアス2.0V
右:非占有状態、探針バイアス-2.0V

【DFTB】InP(001)-c(4x2) STM



探針: タングステン
試料表面: InP(001)-c(4x2)

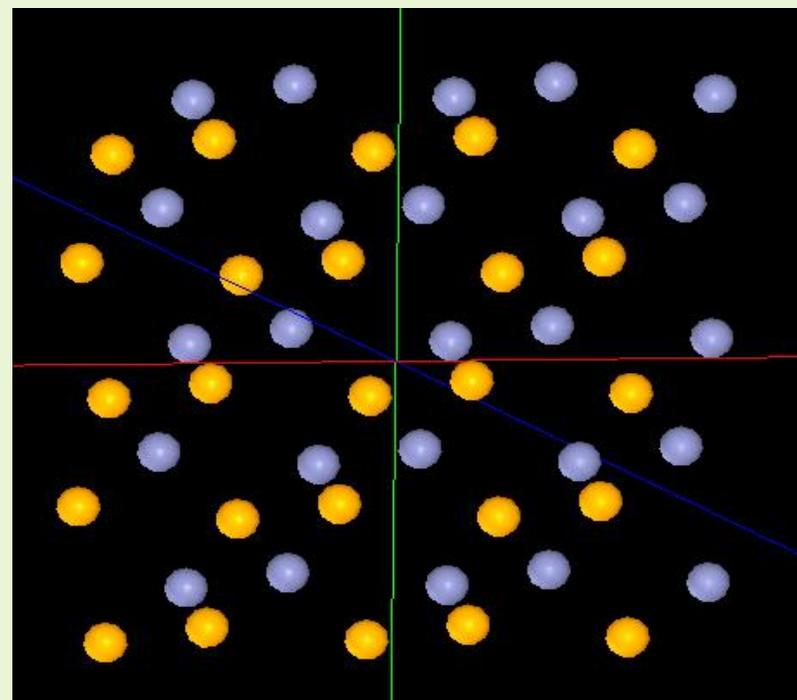
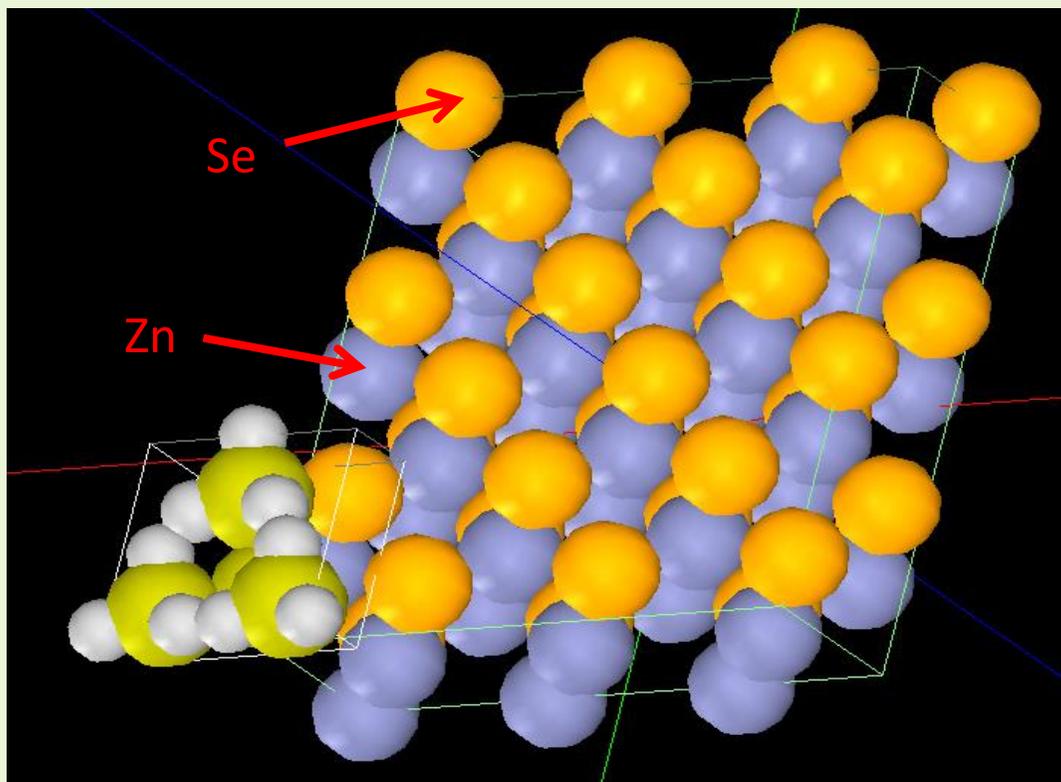


STM コンスタントカレントモード
探針バイアス: 1.5V
電流値: 10000nA

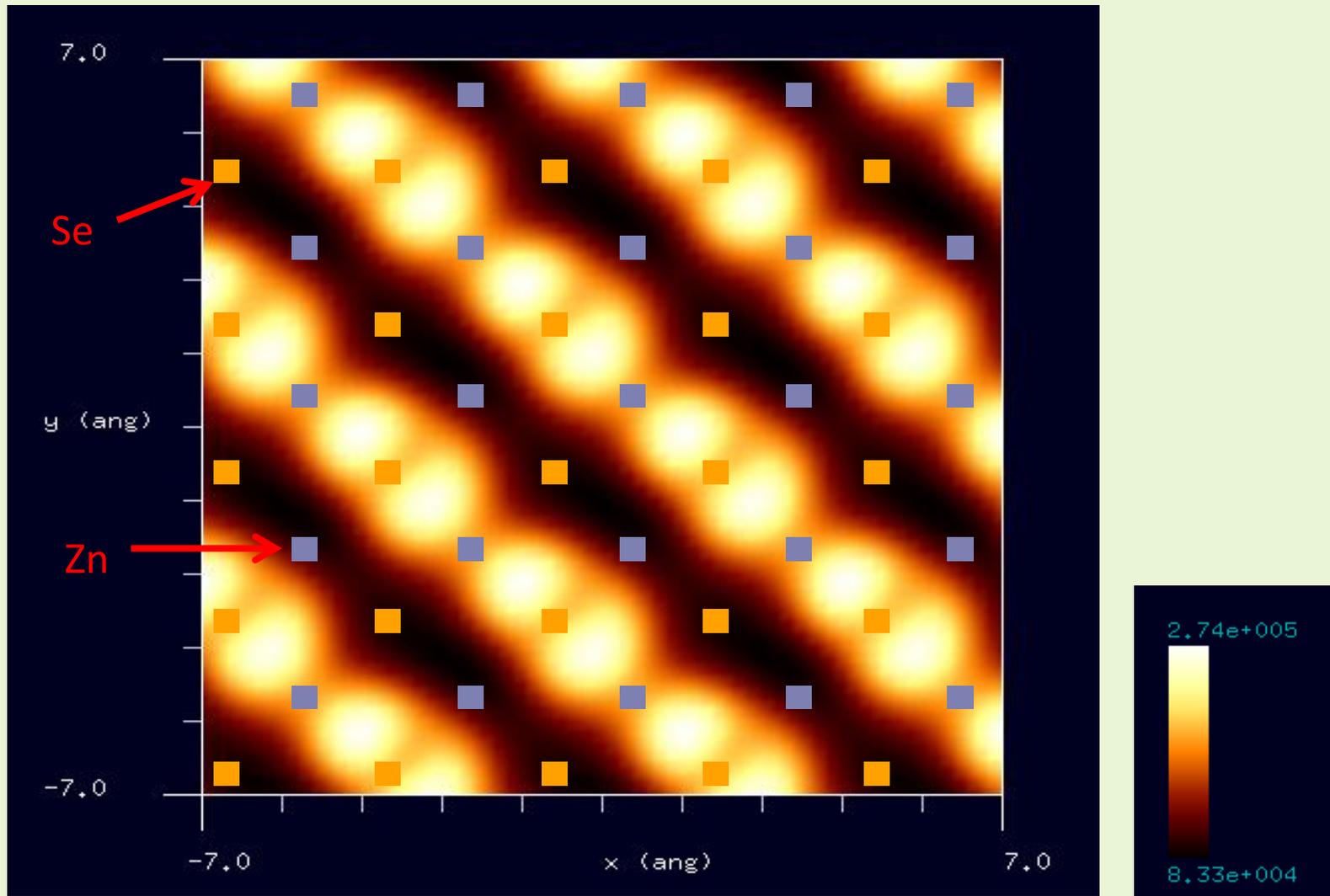
DFTB

ZnSe (セレン化亜鉛 発光ダイオード、半導体レーザーの材料)

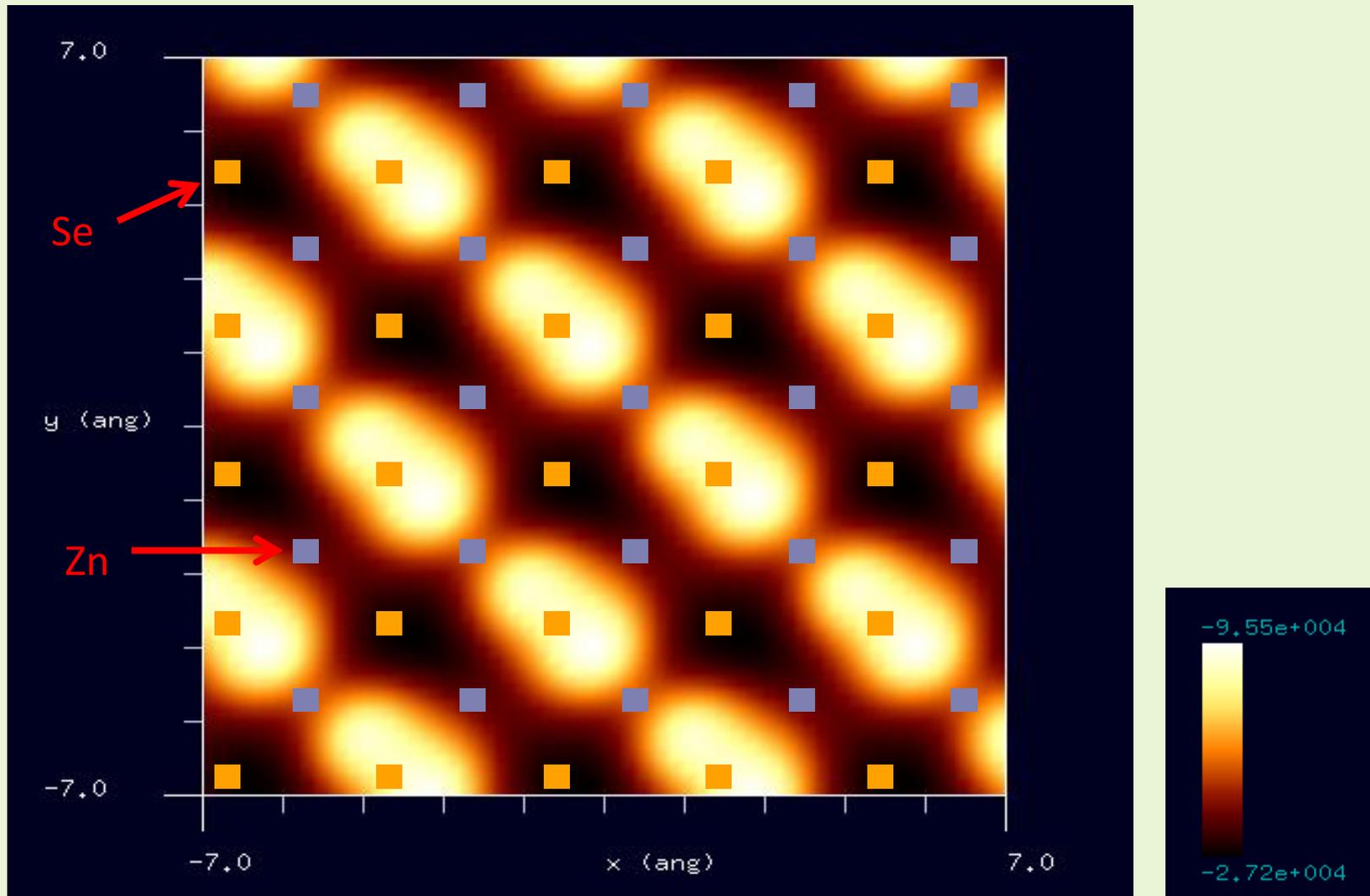
水素終端されたシリコン探針を使用
立方晶(空間群番号:216)
(001)面



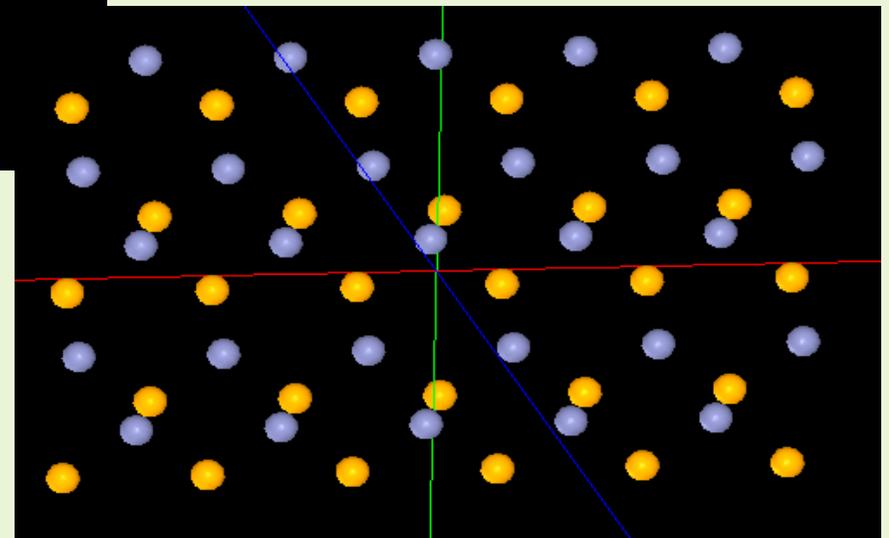
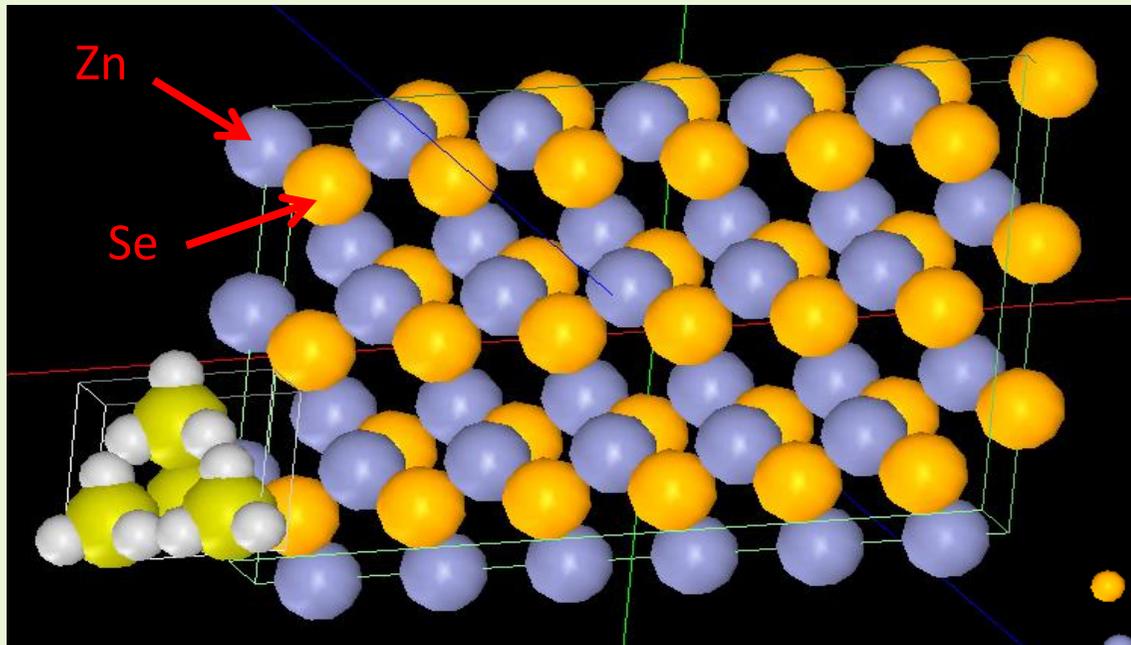
STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.2 Å
最大電流 2.74×10^5 nA、最小電流 8.33×10^4 nA



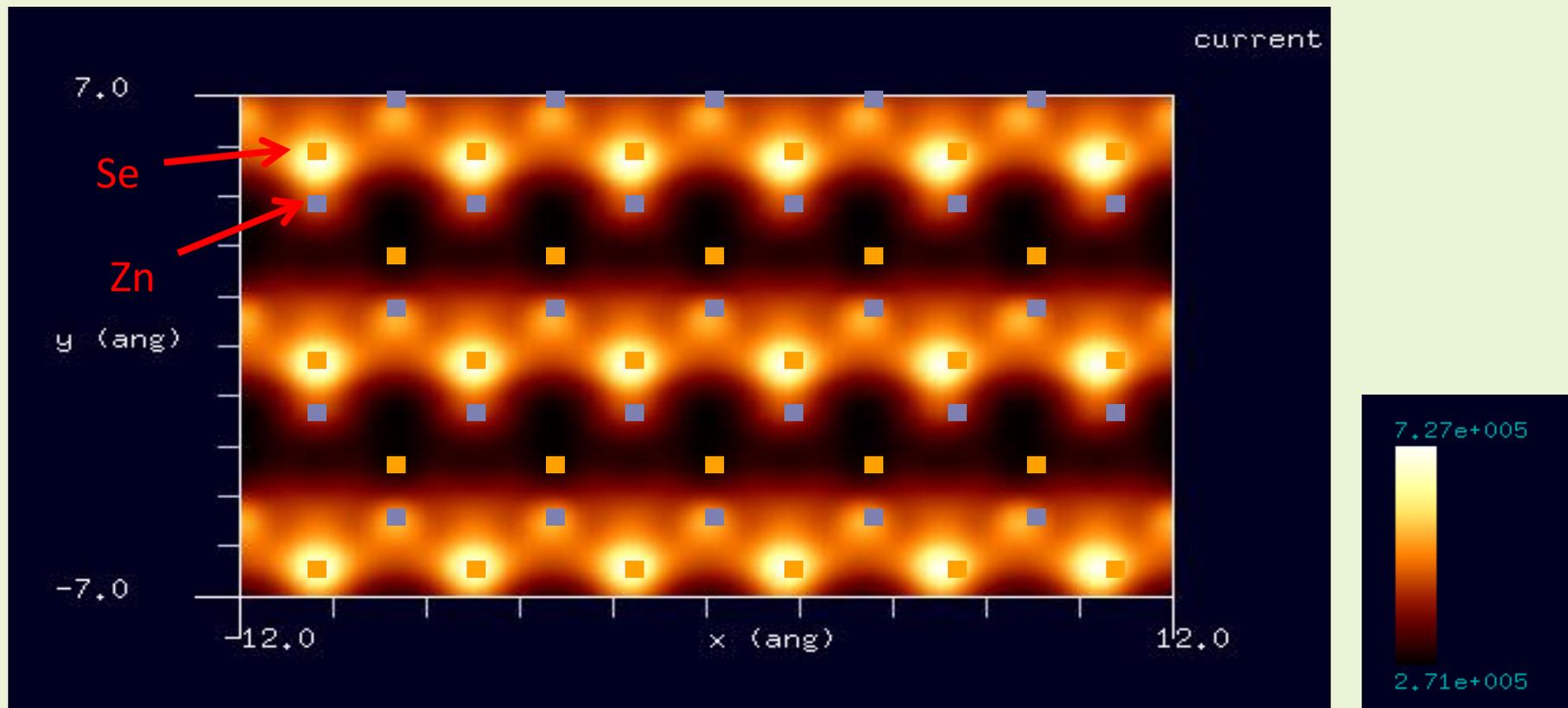
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.2 Å
最大電流 -2.72×10^4 nA、最小電流 -9.55×10^4 nA



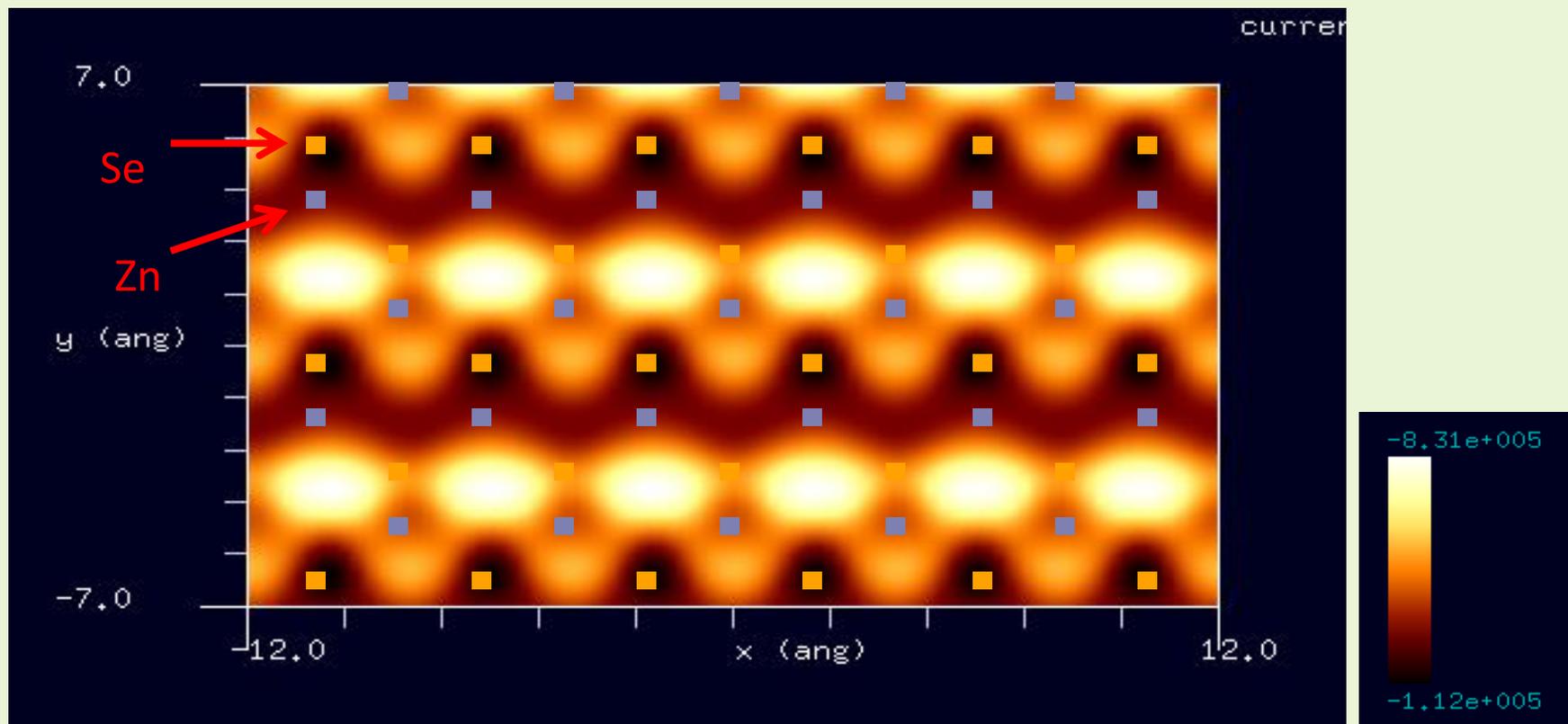
水素終端されたシリコン探針を使用
立方晶(空間群番号:216)
(110)面



STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.99 Å
最大電流 7.27×10^5 nA、最小電流 2.71×10^5 nA

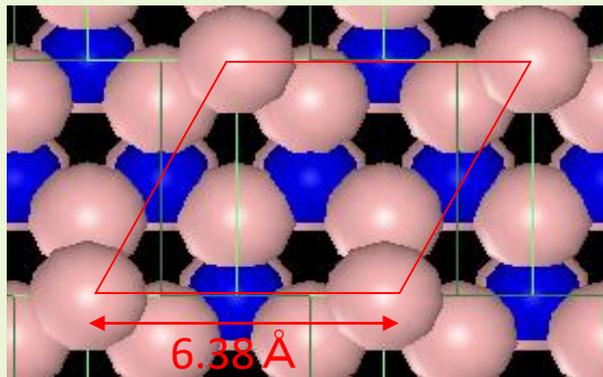


STM画像: 印加電圧-4V, 探針と試料の最短距離0.99 Å
最大電流 -1.12×10^5 nA、最小電流 -8.31×10^5 nA



【DFTB】 GaNの結晶面のSTMシミュレーション

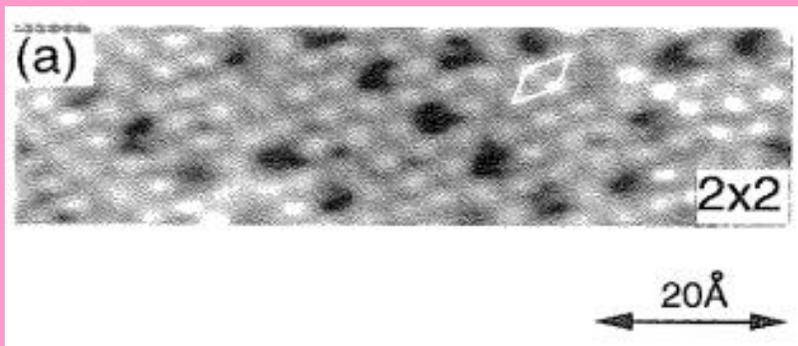
GaN(0001)の2×2再構成



試料のモデル(赤枠は単位格子)

探針: Si_4H_9
試料: GaN
スキャンエリア: $20 \text{ \AA} \times 12 \text{ \AA}$
スキャンモード: constant current STM
探針バイアス: +1.0[V]
電流値: 2400[nA]

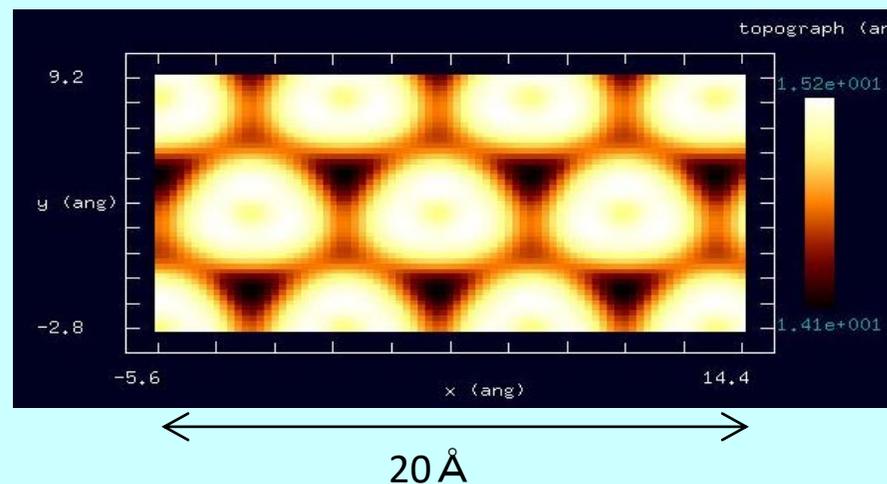
実測画像



サンプル電圧: -3.0[V]

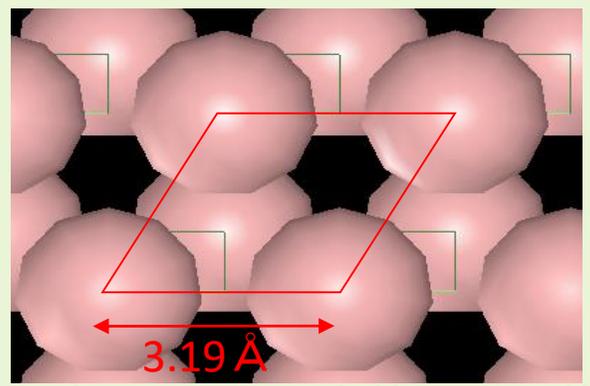
表面科学Vol.21, No3, pp.134-141,2000

constant current STMシミュレーション



【DFTB】 GaNの結晶面のSTMシミュレーション

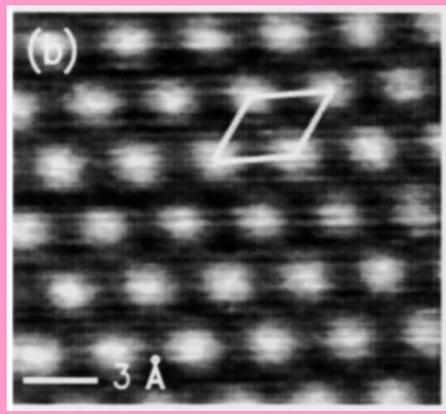
GaN(000 $\bar{1}$)の1×1再構成



試料のモデル(赤枠は単位格子)

探針: Si₄H₉
試料: GaN
スキャンエリア: 10 Å × 6 Å
スキャンモード: constant current STM
探針バイアス: +1.0[V]
電流値: 8500[nA]

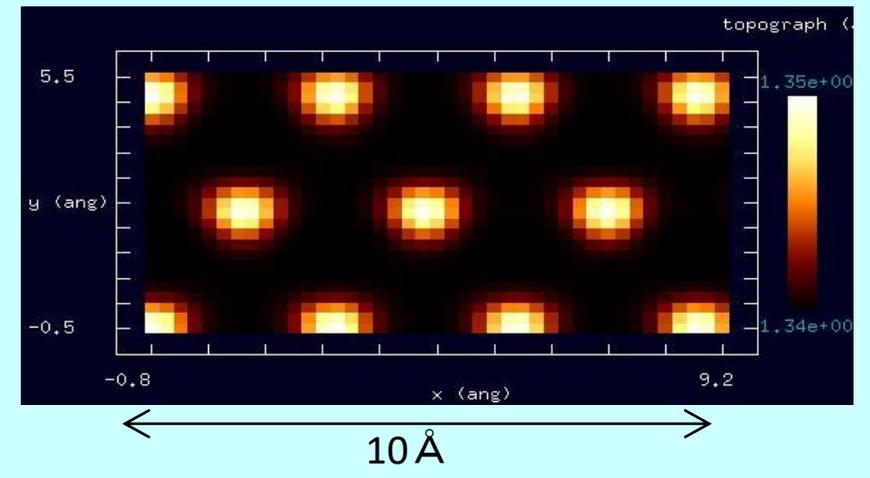
実測画像



試料バイアス電圧:
-0.75[V]
電流値:
0.03~0.11[nA]

PHYSICAL REVIEW LETTERS VOLUME 79, NUMBER 20 17 NOVEMBER 1997

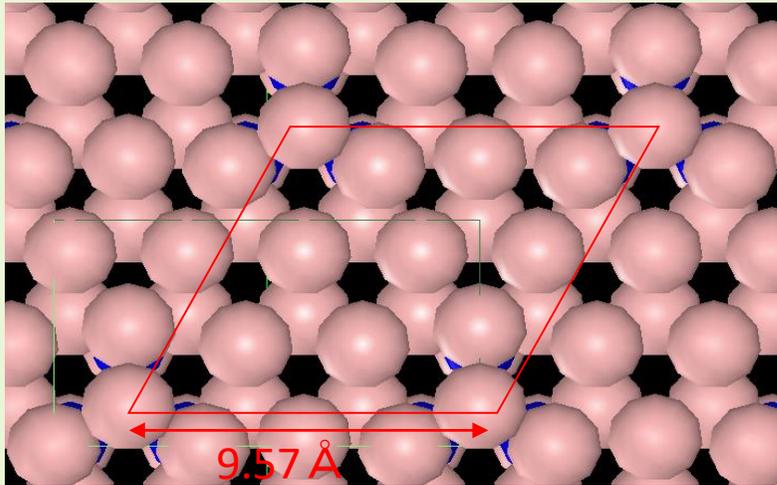
constant current STMシミュレーション



画像はコントラスト調整後

【DFTB】 GaNの結晶面のSTMシミュレーション

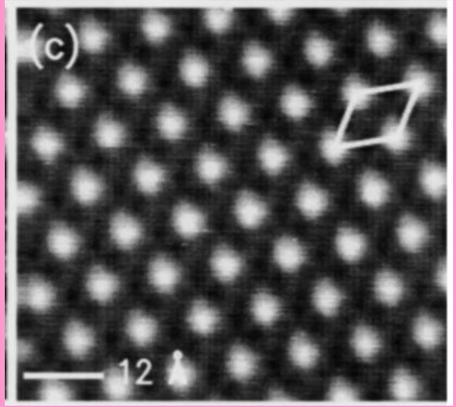
GaN(0001)の3×3再構成



試料のモデル(赤枠は単位格子)

探針: Si₄H₉
 試料: GaN
 スキャンエリア: 20 Å × 15 Å
 スキャンモード: constant current STM
 探針バイアス: +1.0[V]
 電流値: 800[nA]

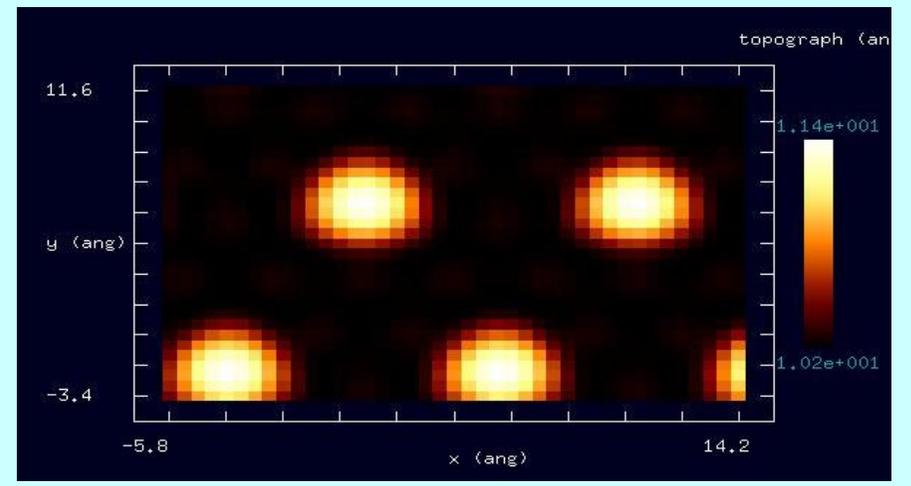
実測画像



試料バイアス電圧:
 -0.1[V]
 電流値:
 0.03~0.11[nA]

PHYSICAL REVIEW LETTERS VOLUME 79, NUMBER 20 17 NOVEMBER 1997

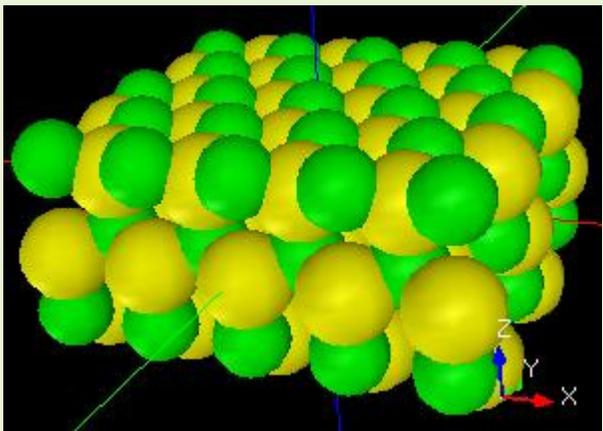
constant current STMシミュレーション



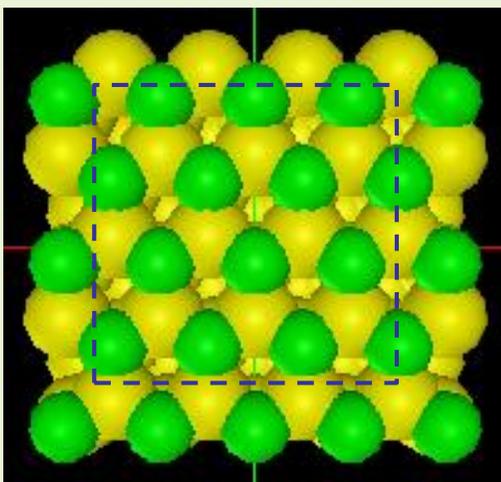
画像はコントラスト調整後

【DFTB】4H-SiC (0001) 表面の constant current STM像シミュレーション

4H-SiC (0001) 表面の構造



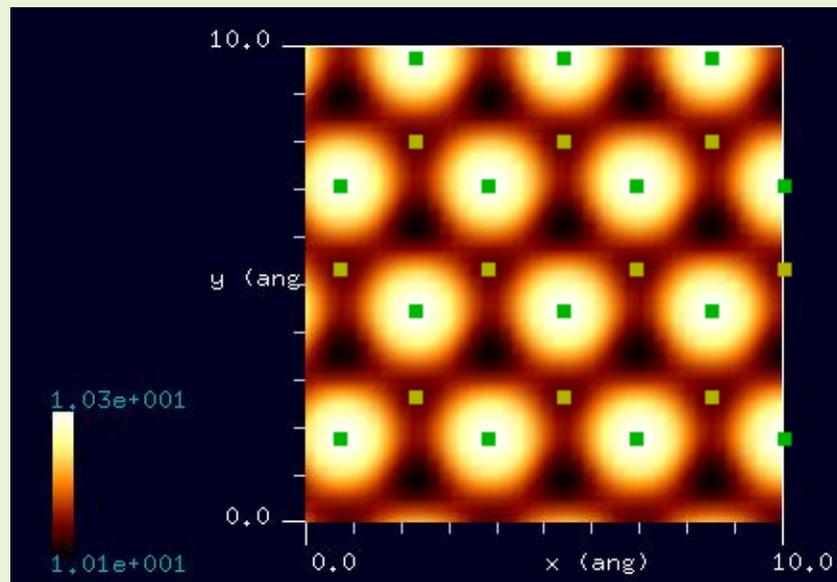
緑 = 炭素原子。黄 = Si原子。



Scan area

探針: Si_4H_9
試料: 4H-SiC (0001)
手法: constant current STM
電流セットポイント: 10 nA
探針バイアス: +1.0 V

探針高さ
高 ↑
低 ↓



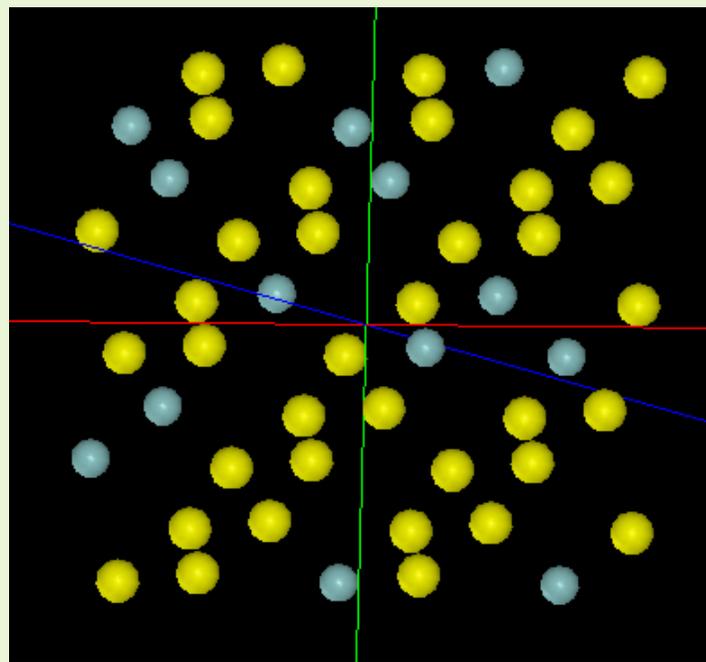
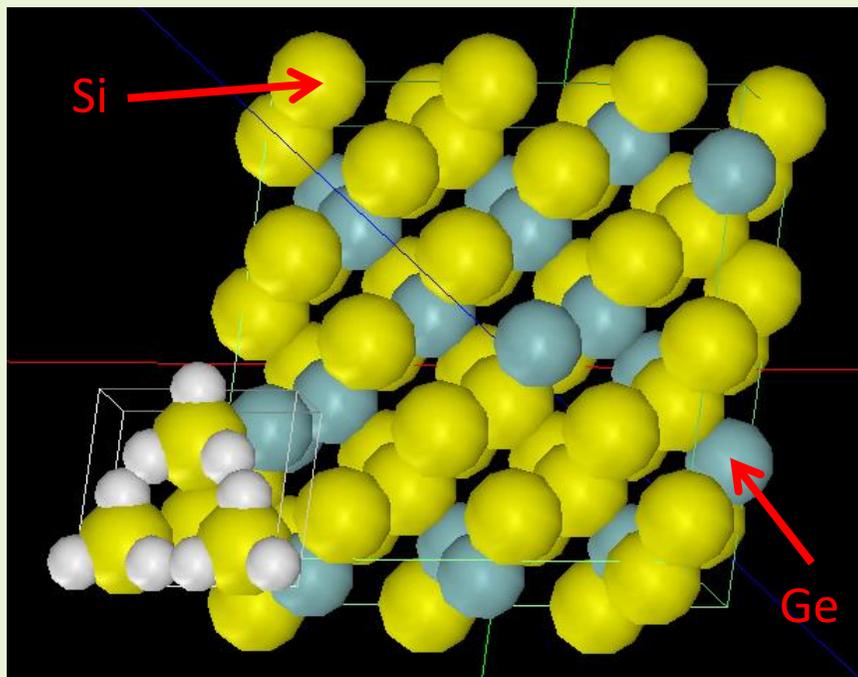
水素終端されたシリコン探針を使用



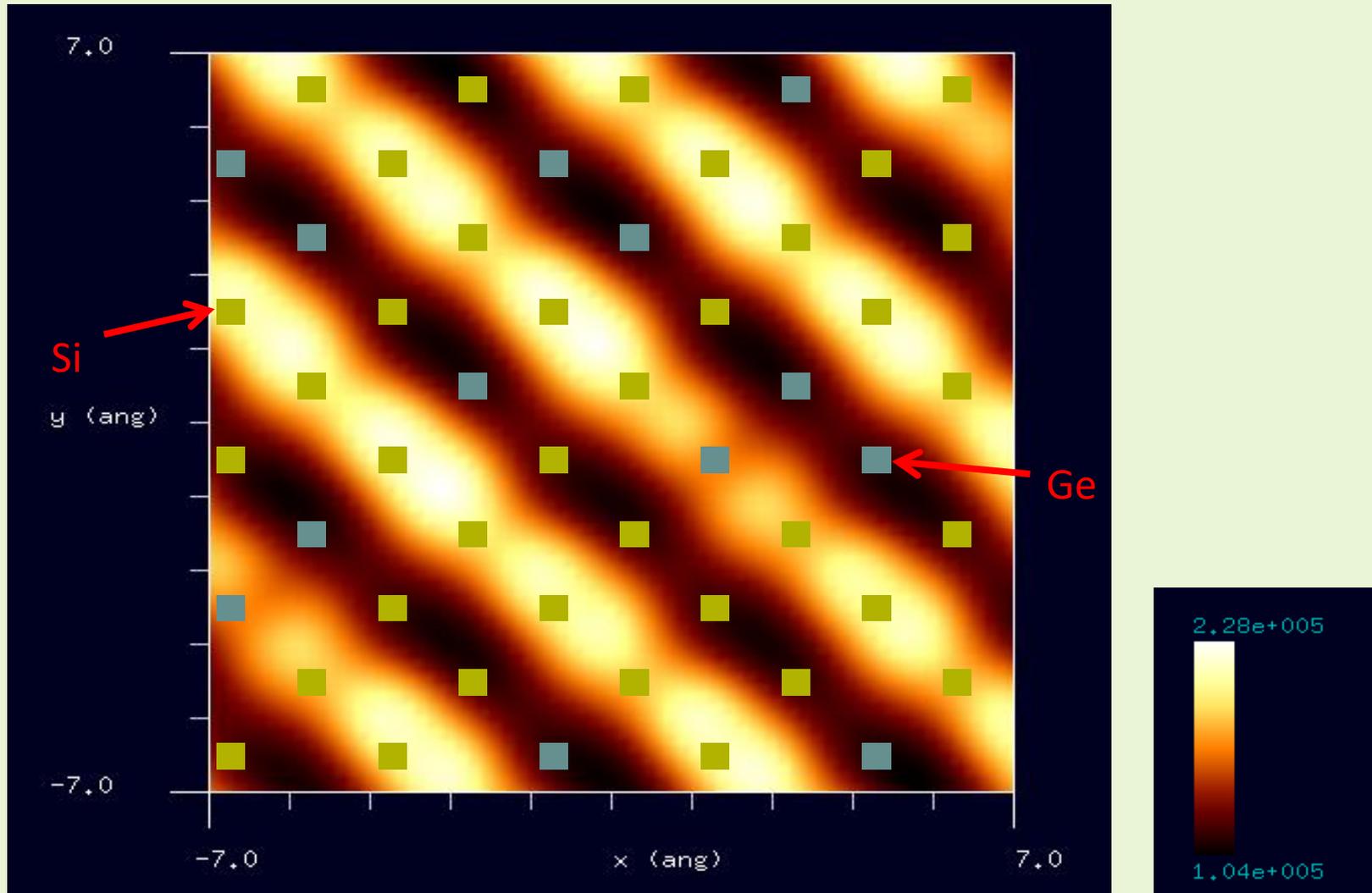
立方晶(空間群番号:227)

(001)面

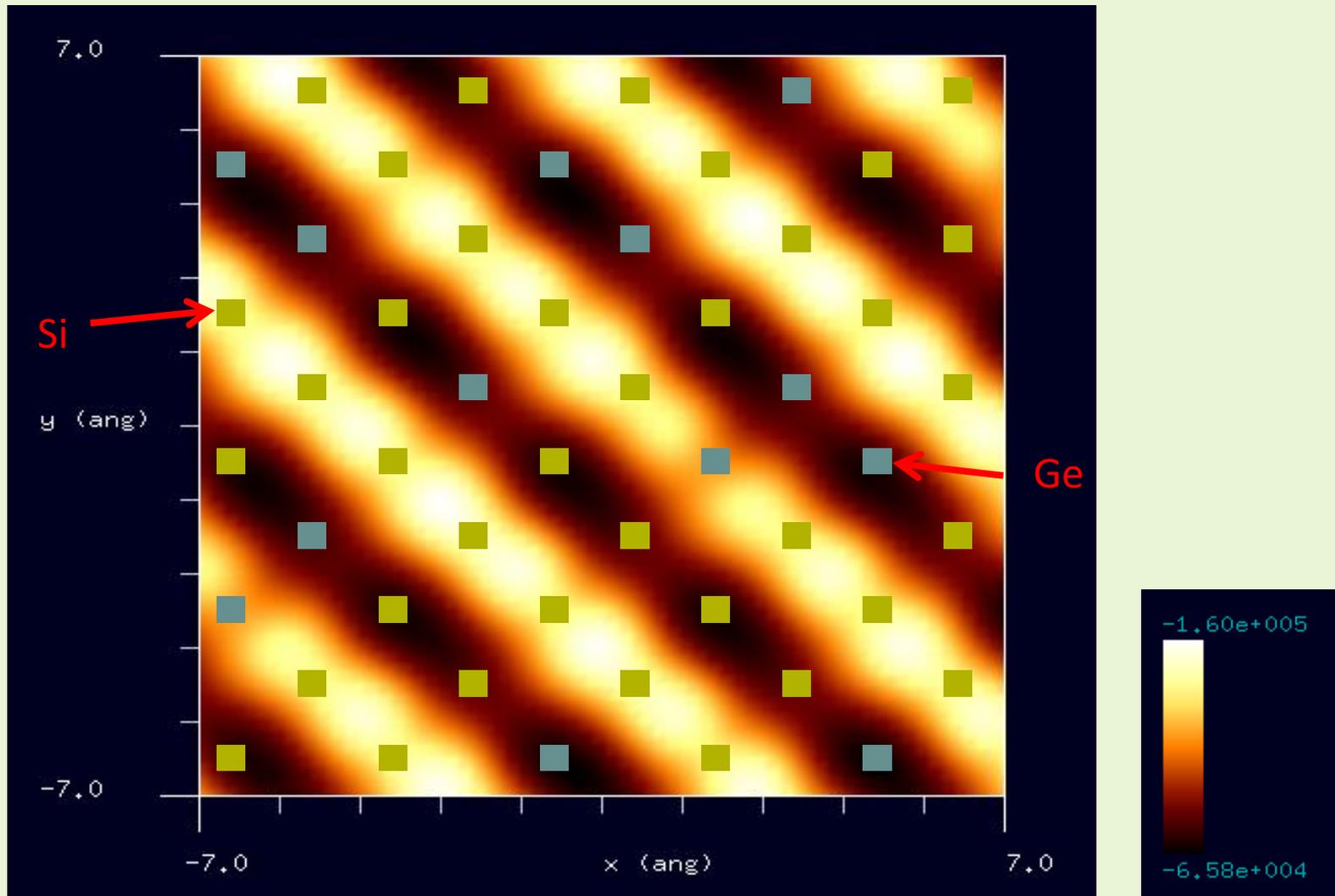
Si結晶中のSi原子をランダムにGeと置き換えたもの



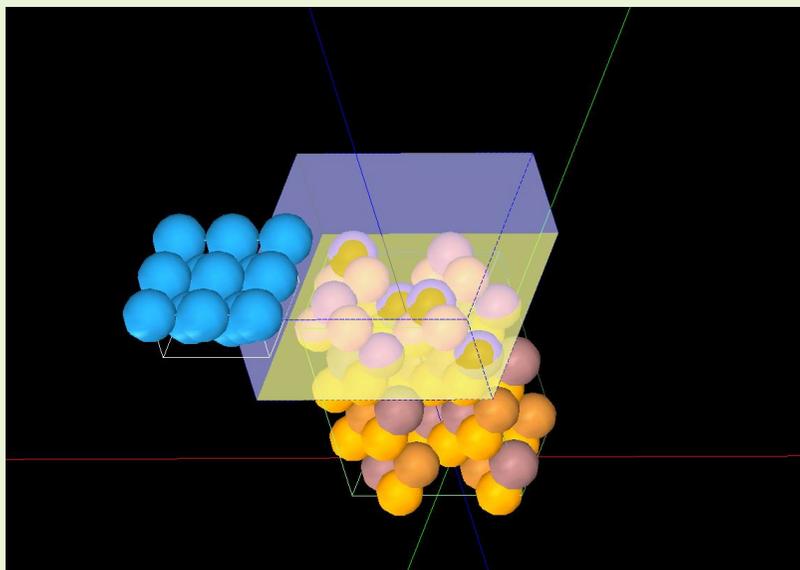
STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.5 Å
最大電流 2.28×10^5 nA、最小電流 1.04×10^5 nA



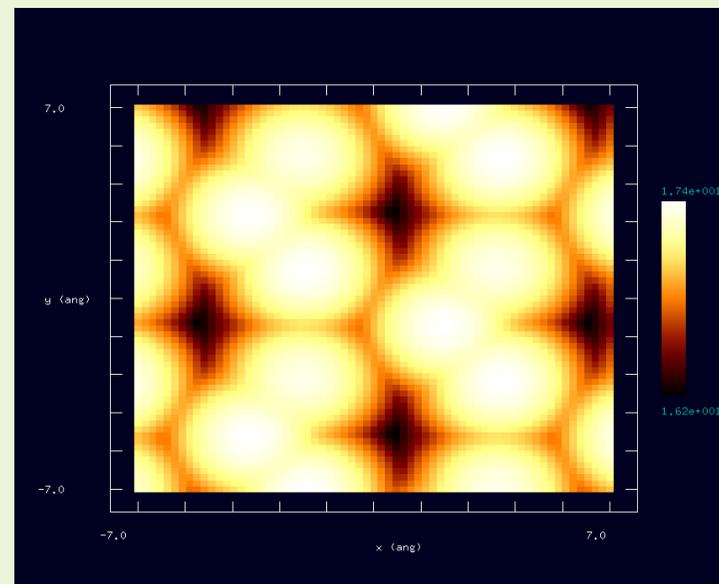
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.5 Å
最大電流 -6.58×10^4 nA、最小電流 -1.60×10^5 nA



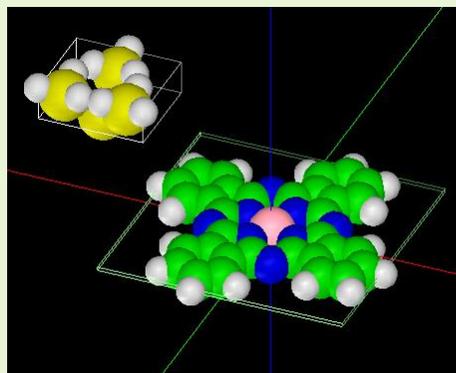
【DFTB】CuInSe₂(001) STM



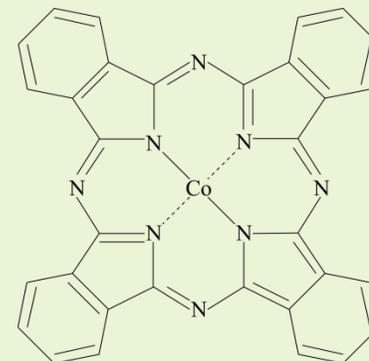
探針: タングステン
試料表面: CuInSe₂(001)



STM コンスタントカレントモード
探針バイアス: 1.0V
電流値: 1.0nA

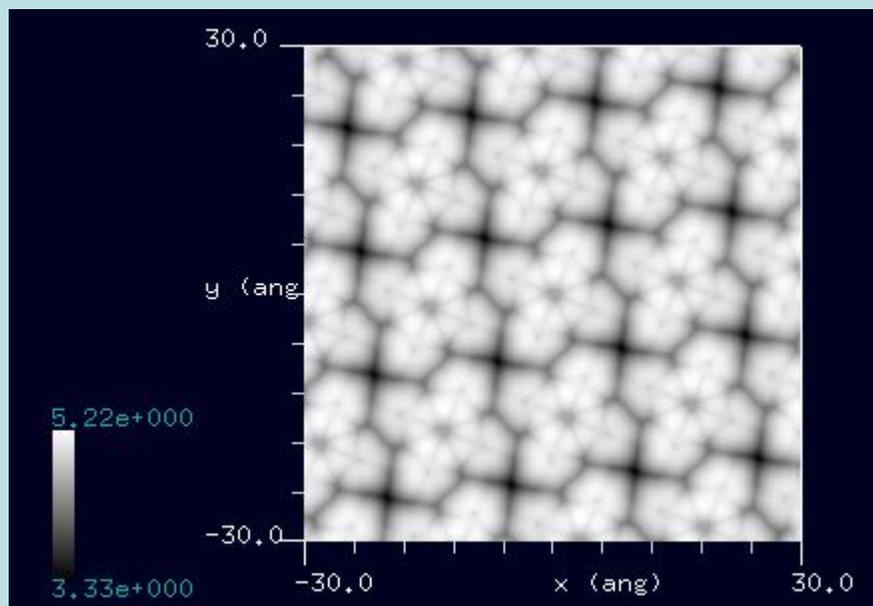


探針: Si_4H_9
 試料: CoPc , $\text{C}_{32}\text{H}_{16}\text{CoN}_8$.
 基板は無視
 手法: constant current STM
 電流セットポイント: 0.1 nA
 探針バイアス: +2.0 V



constant current STMシミュレート結果

60 Å x 60 Å

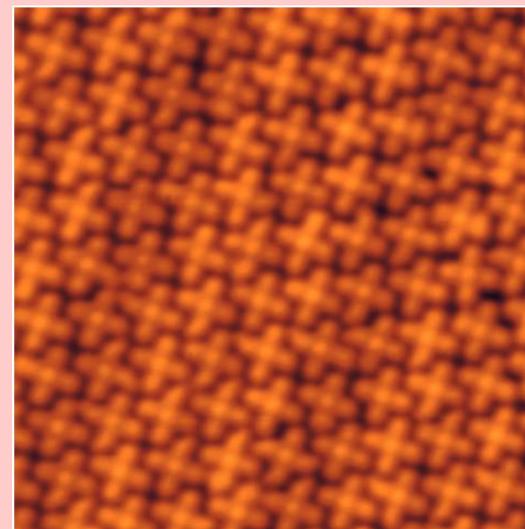


cf. Experiment

試料: CoPc on Au (111)

手法: STM

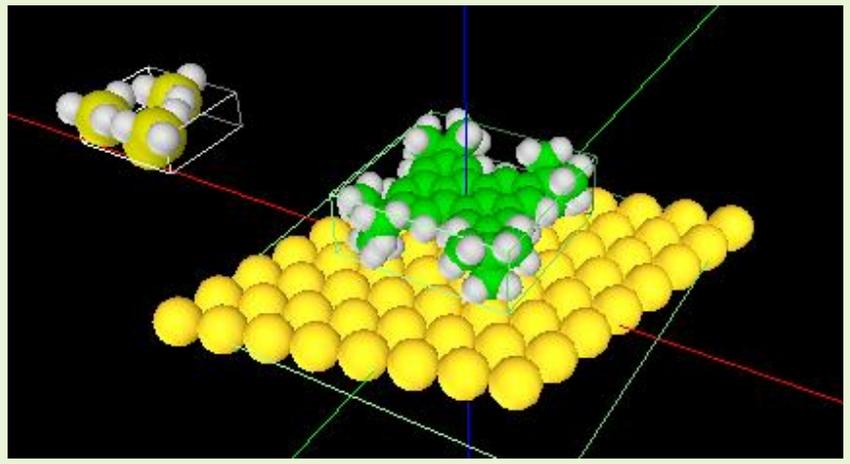
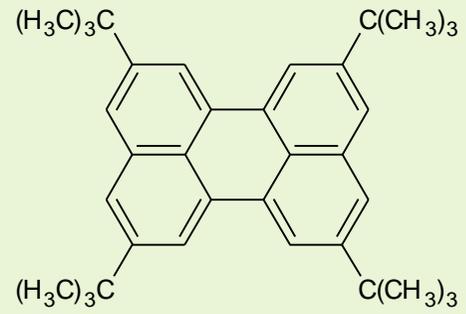
150 Å x 150 Å



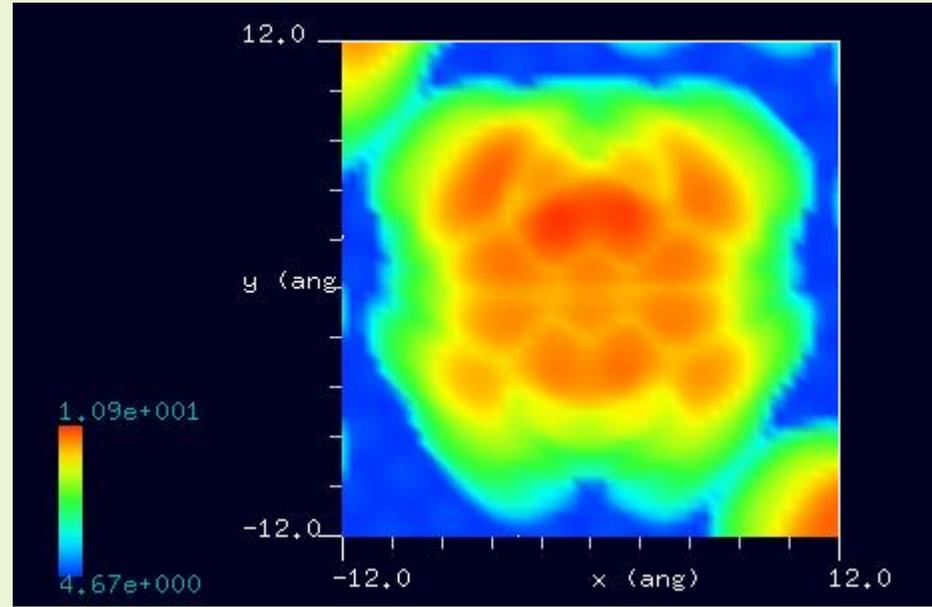
【DFTB】2,5,8,11-テトラ-tert-ブチルペリレンのconstant current STM像

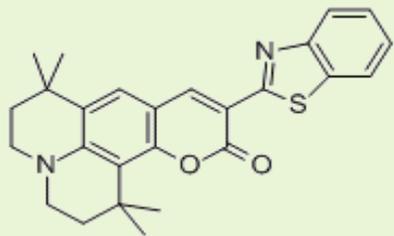
シミュレートモデル

探針: Si₄H₉探針
試料: Au(111)面上のTBP分子
スキャンエリア: 24 Å x 24 Å
スキャンモード: Constant current STM
探針バイアス: -1.0 V
電流値: 1.0 nA



計算結果





探針: Si_4H_9

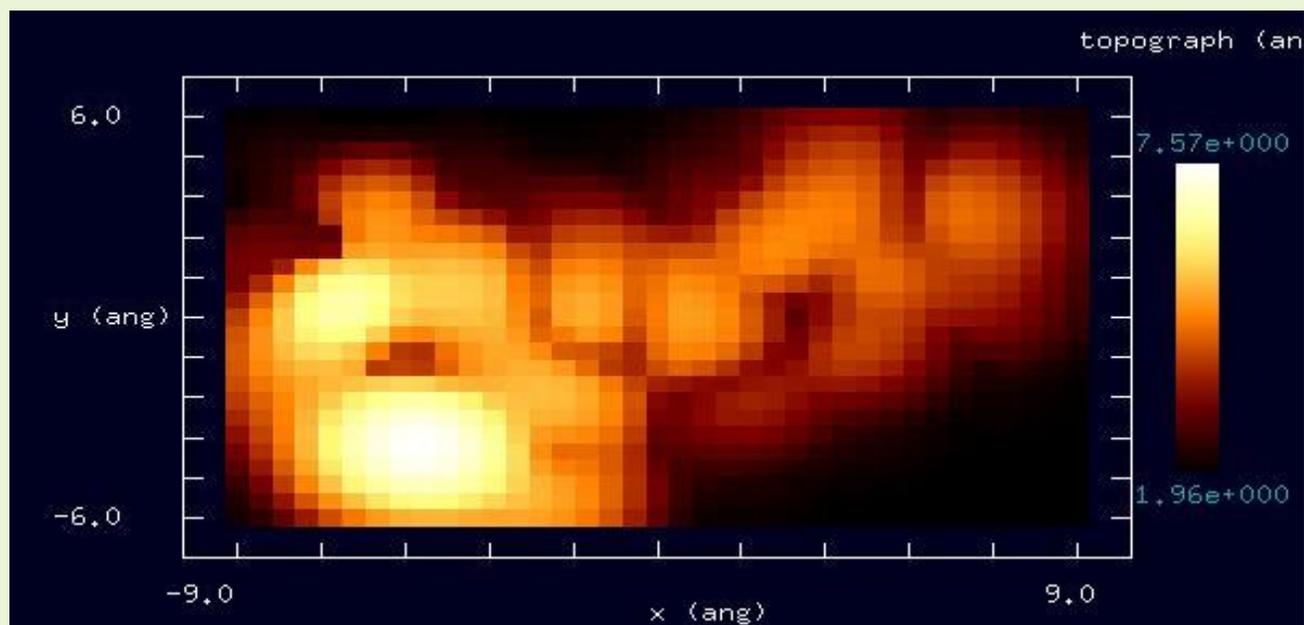
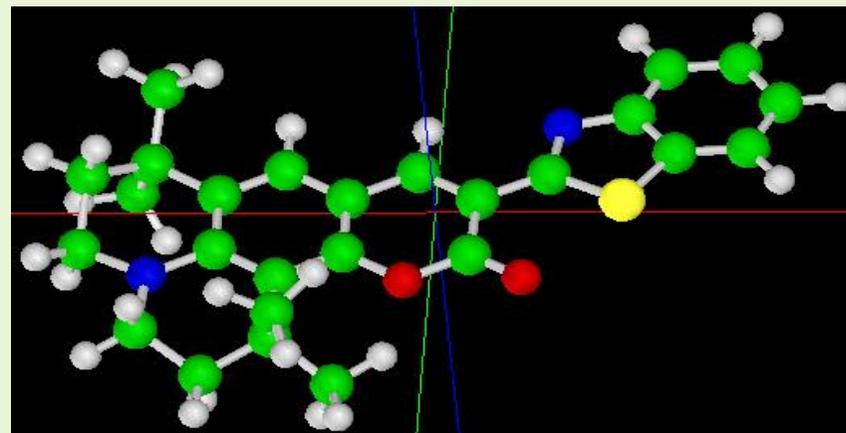
試料: クマリン545T

スキャンエリア: $18 \text{ \AA} \times 12 \text{ \AA}$

スキャンモード: constant current STM

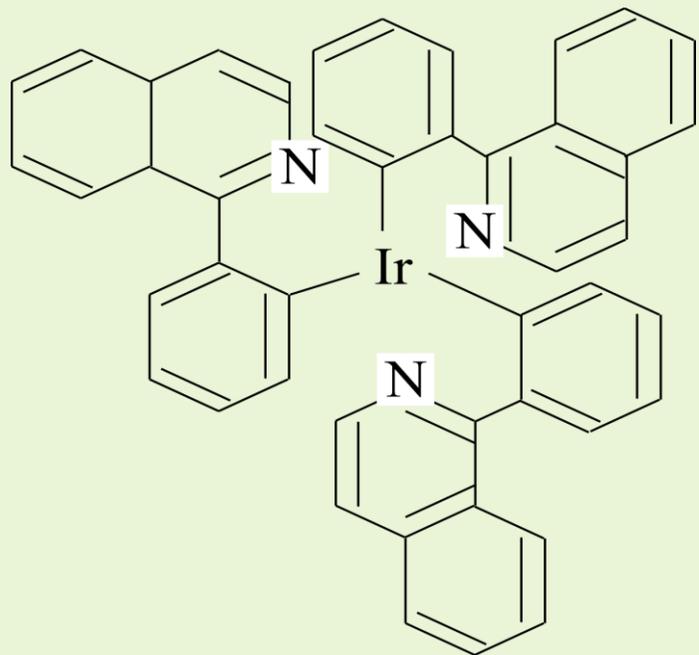
探針バイアス: $+1.0 \text{ [V]}$

電流値: 10 [nA]

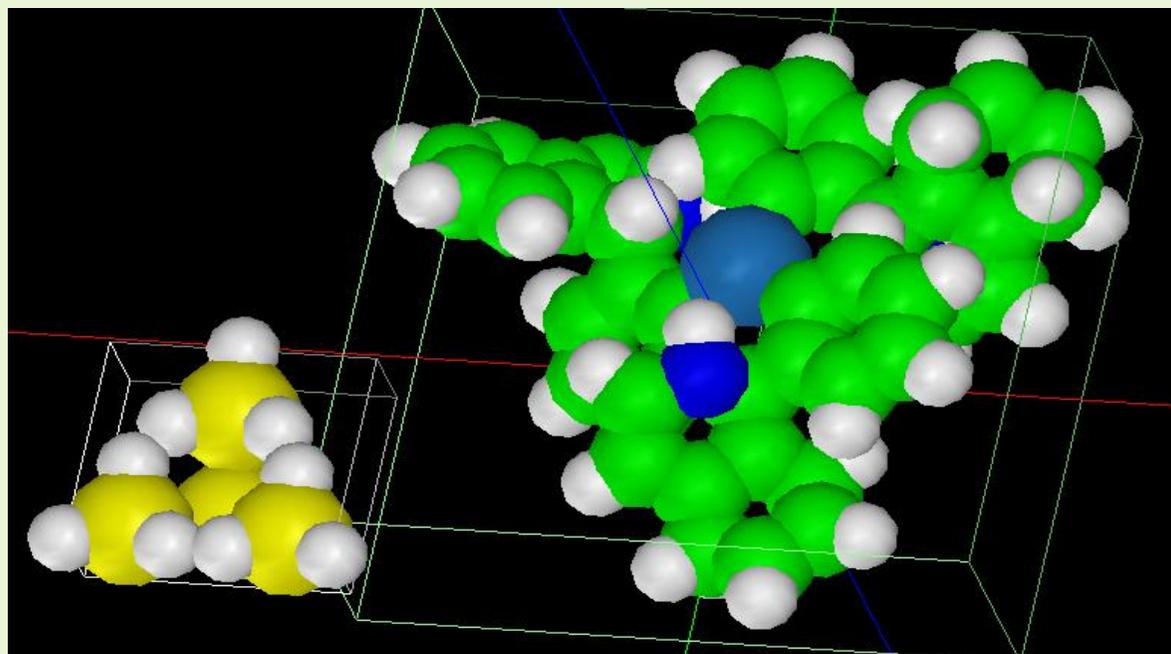


画像はコントラスト調整後

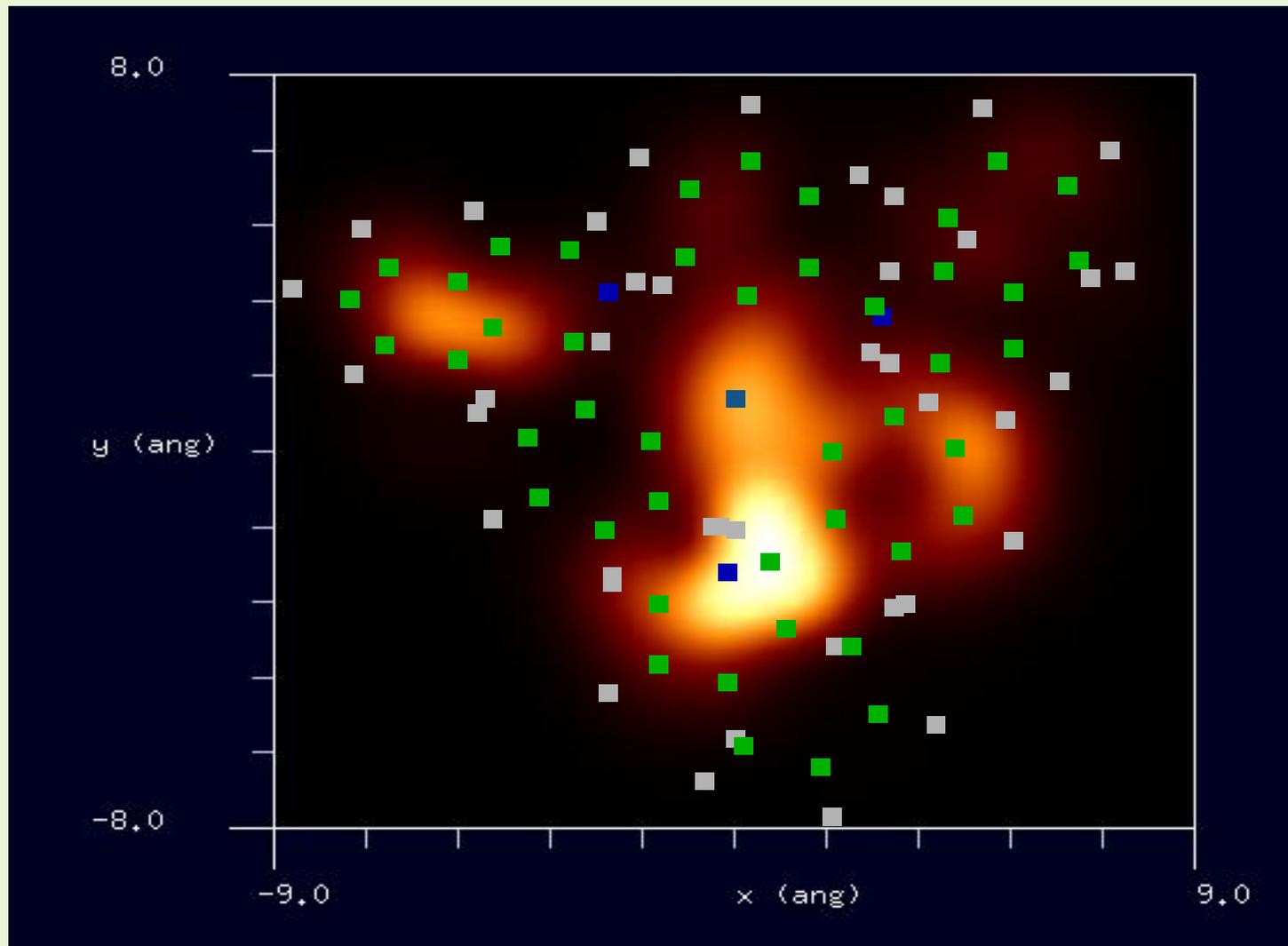
$\text{Ir}(\text{piq})_3$ [トリス[1-フェニルイソキノリン-C2,N]イリジウム(III)] 有機半導体の一種



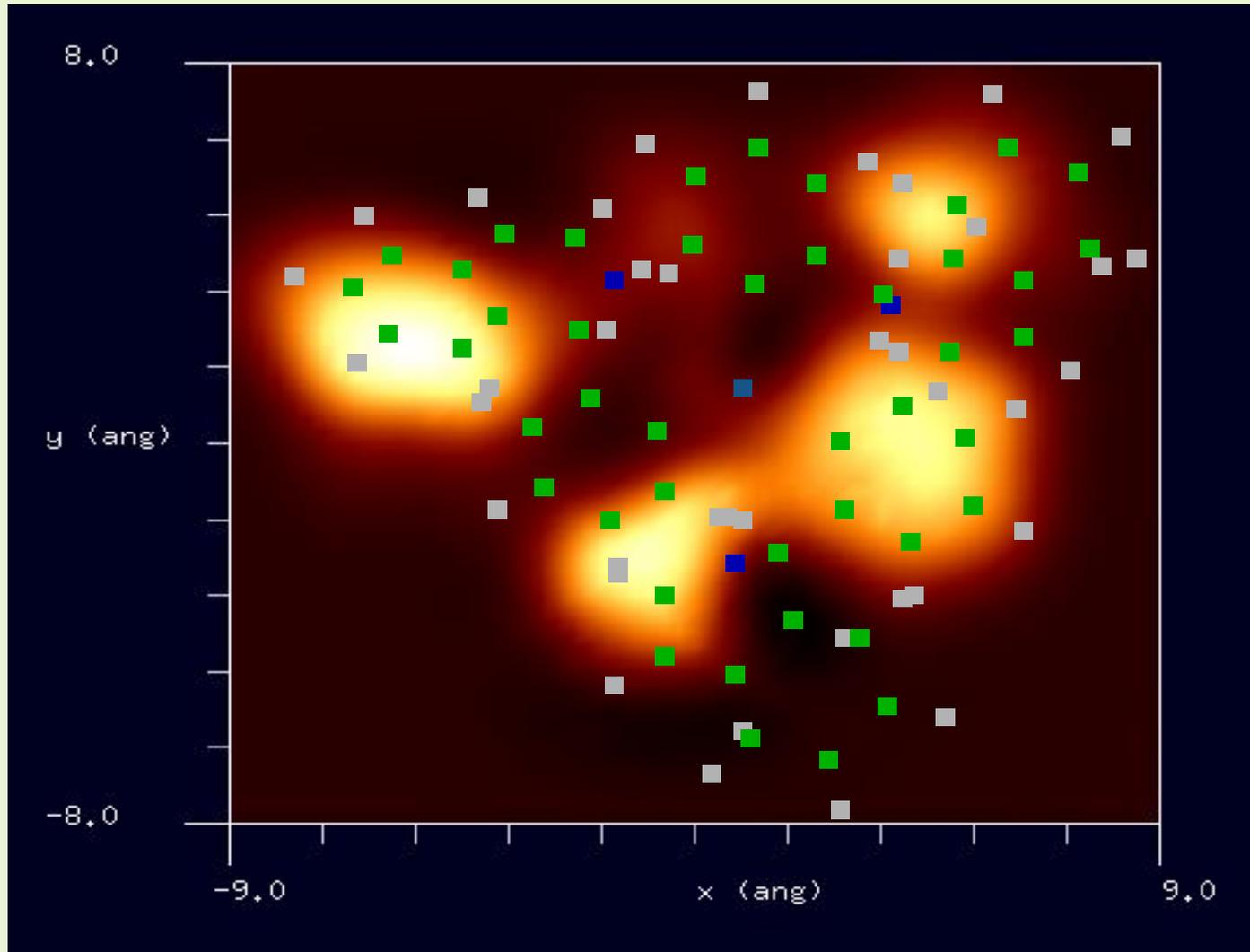
水素終端されたシリコン探針を使用



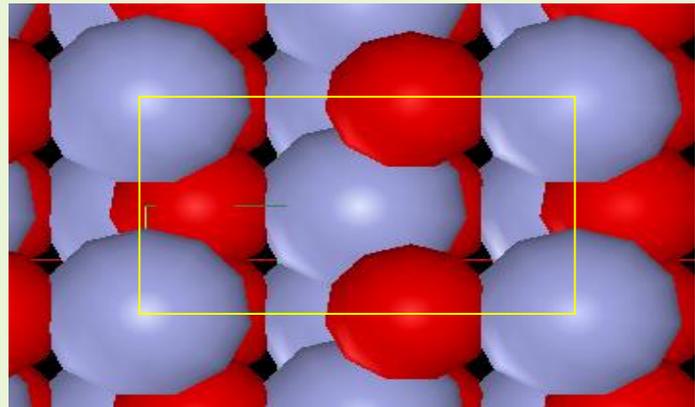
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.3Å
最大電流 1.42×10^5 nA、最小電流 0.00×10^0 nA



周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.3 Å
周波数のずれは -2.02×10^2 Hzから 7.64×10^1 Hz



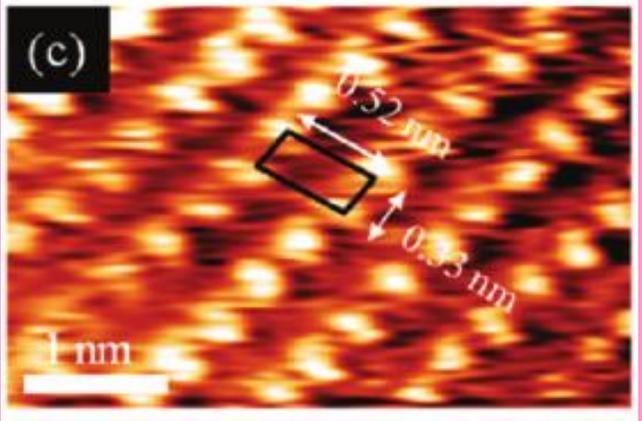
【DFTB】透明導電膜ZnOのSTM像



試料のモデル(黄枠は単位格子)

探針: Si_4H_9
 試料: ZnO
 スキャンエリア: $18 \text{ \AA} \times 12 \text{ \AA}$
 スキャンモード: constant current STM
 探針バイアス: -2.0 [V]
 電流値: 3000 [nA]

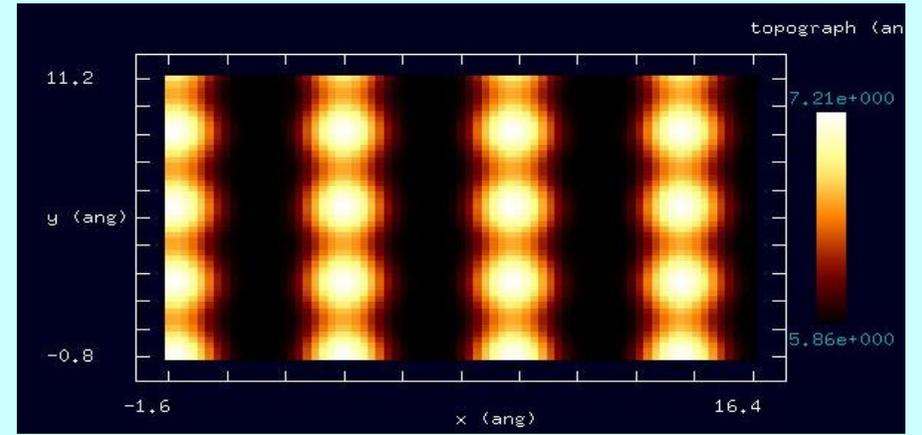
実測画像



$V_s = 2.5 \text{ [V]}$
 $I_t = 0.6 \text{ [nA]}$

The Journal of Physical Chemistry C 116(18):9917–9924 · April 2012

constant current STMシミュレーション

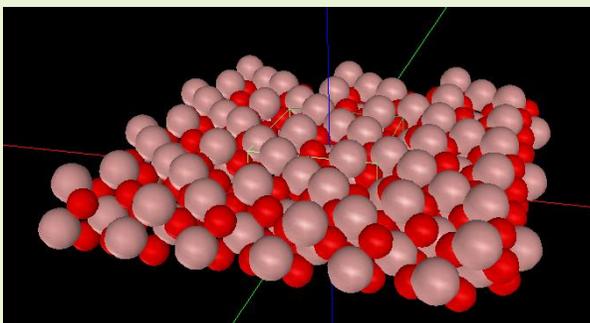


画像はコントラスト調整後

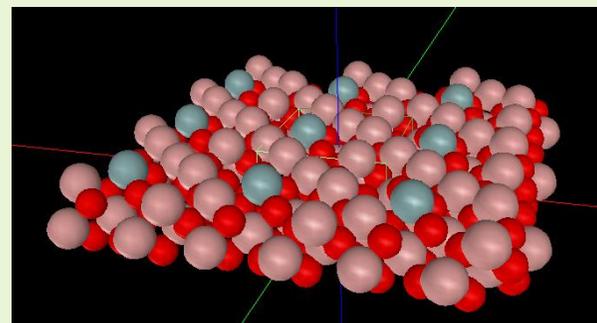
【DFTB】透明導電膜ITO (Indium Tin Oxide)のSTM像

シミュレートモデル

探針: Si_4H_9 探針
試料: In_2O_3 (001)面
スキャンエリア: $30 \text{ \AA} \times 30 \text{ \AA}$
スキャンモード: Constant current STM
探針バイアス: -1.0 V
電流値: 10 nA



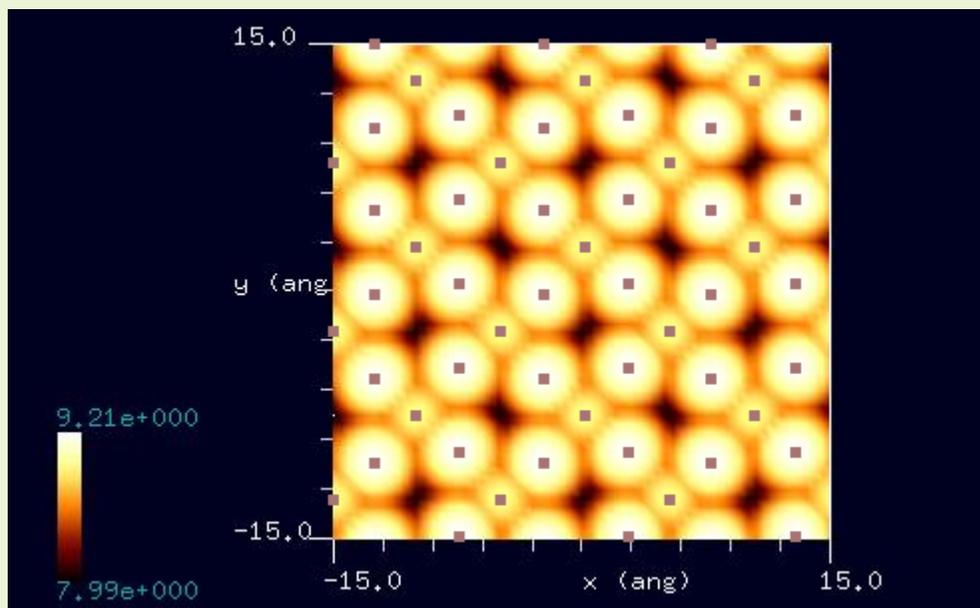
周期的境界条件を課した
 In_2O_3 (001)表面モデル



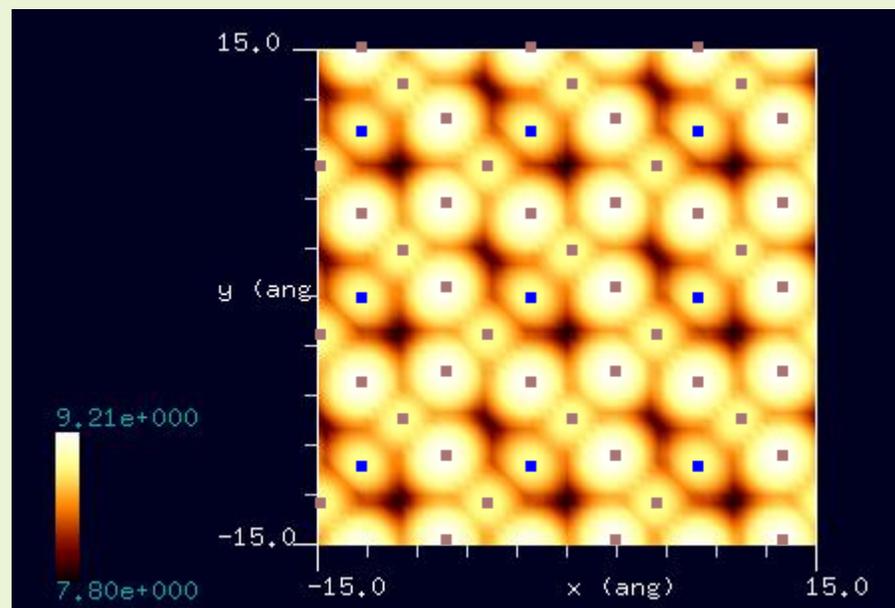
最表面の一部をSnで置換した
 In_2O_3 (001)表面モデル

計算結果

In_2O_3 (001)表面のSTM



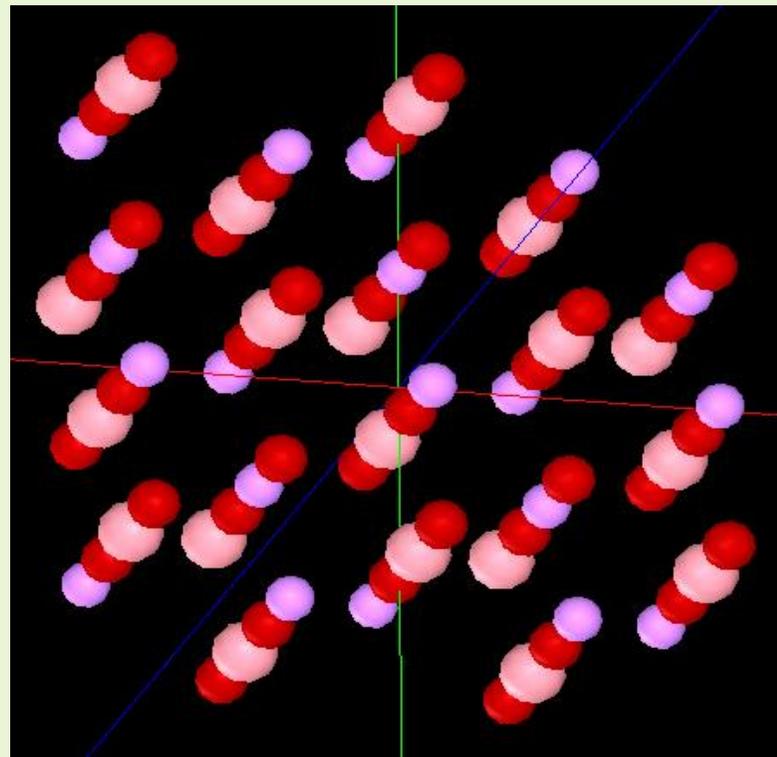
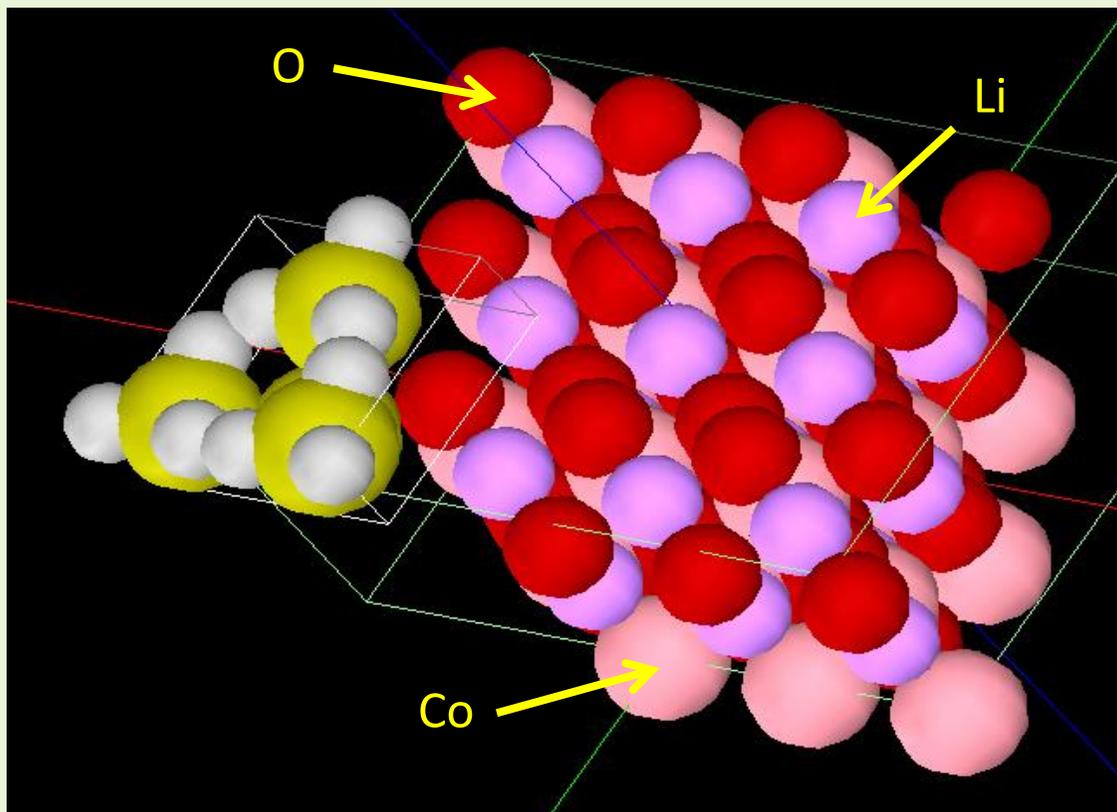
一部をSnで置換した In_2O_3 (001)表面のSTM



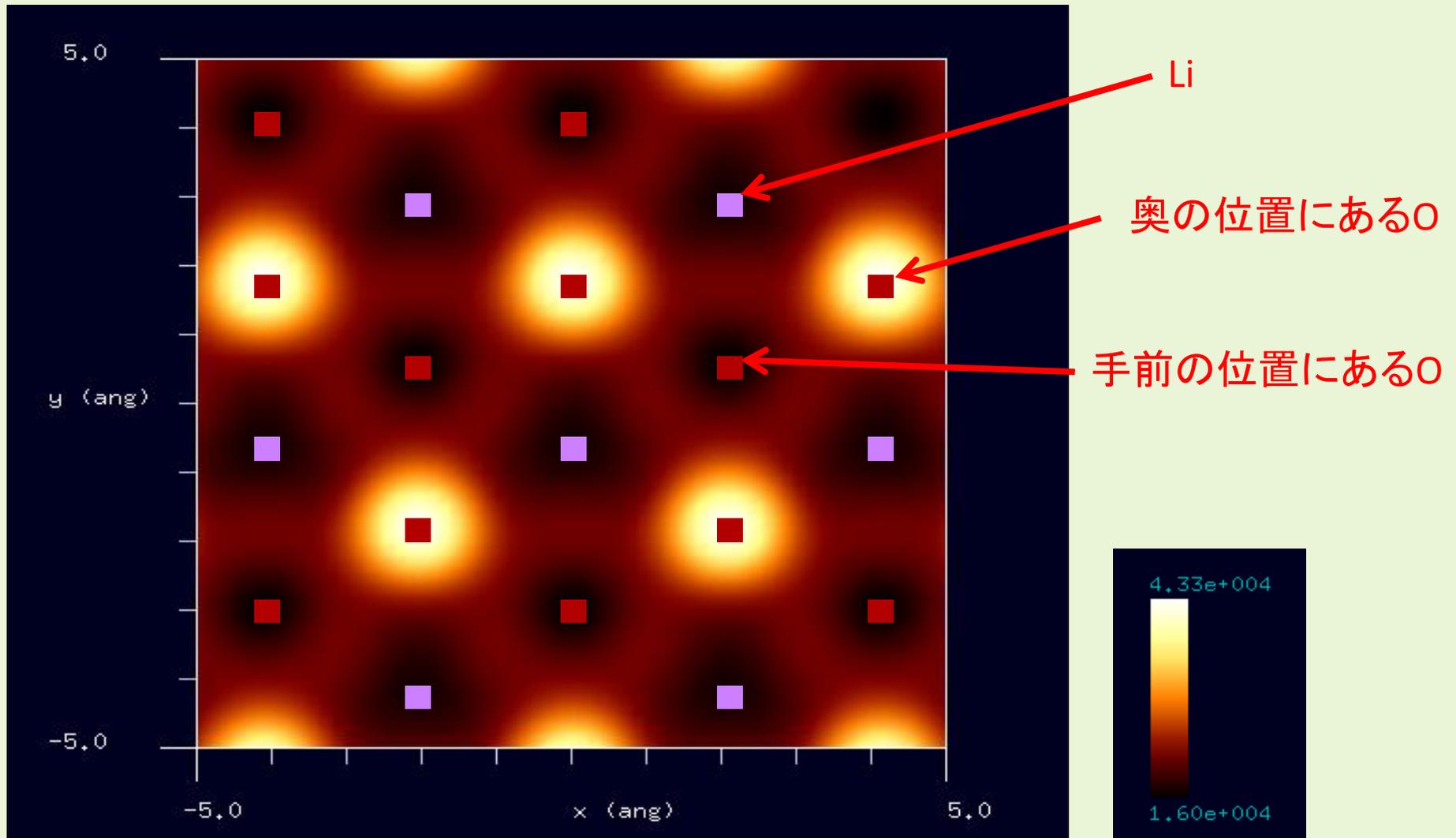
DFTB

LiCoO_2 (リチウムイオン電池の正極活物質)

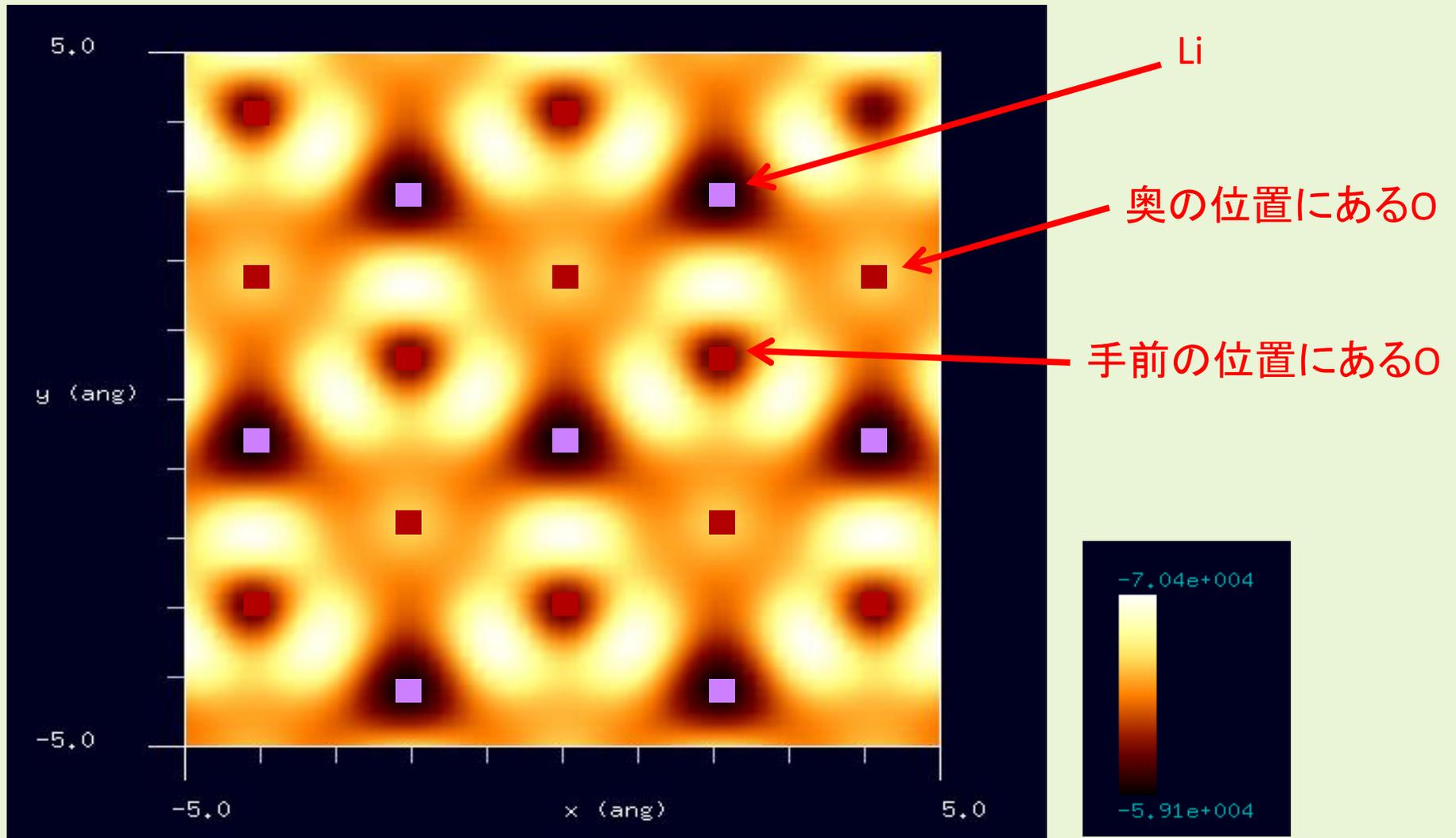
水素終端されたシリコン探針を使用
三方晶(空間群番号:166)
(001)面



STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.3 Å
最大電流 4.33×10^4 nA、最小電流 1.60×10^4 nA



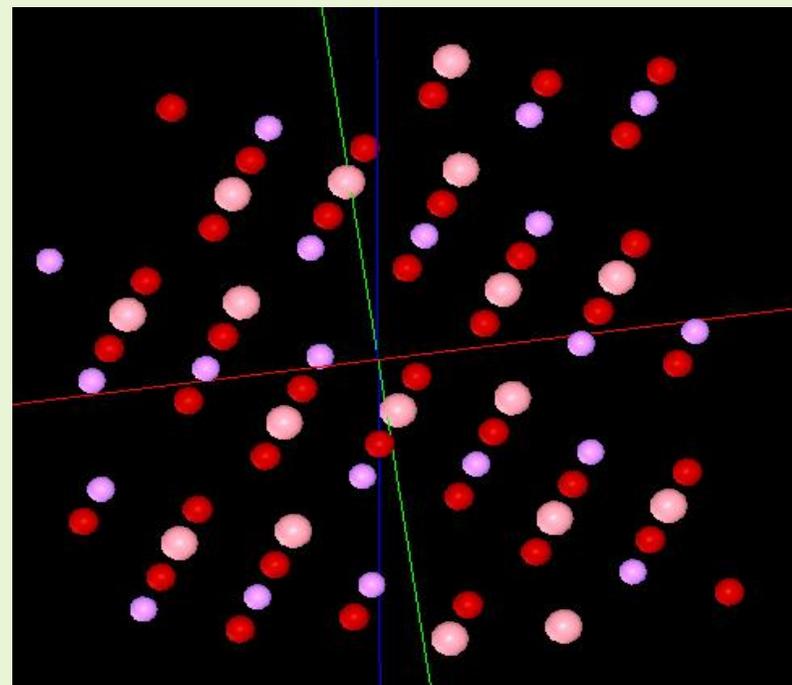
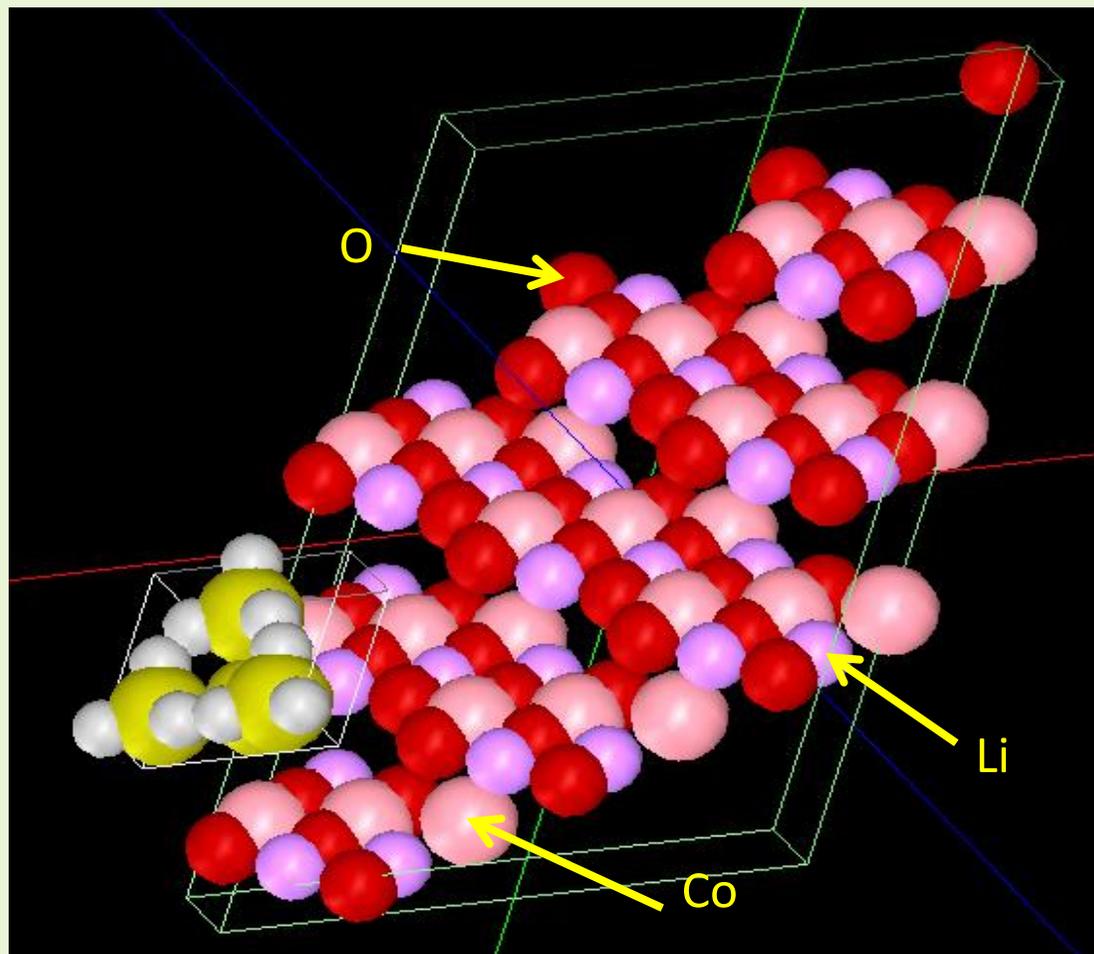
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.3Å
最大電流 -5.91×10^4 nA、最小電流 -7.04×10^4 nA



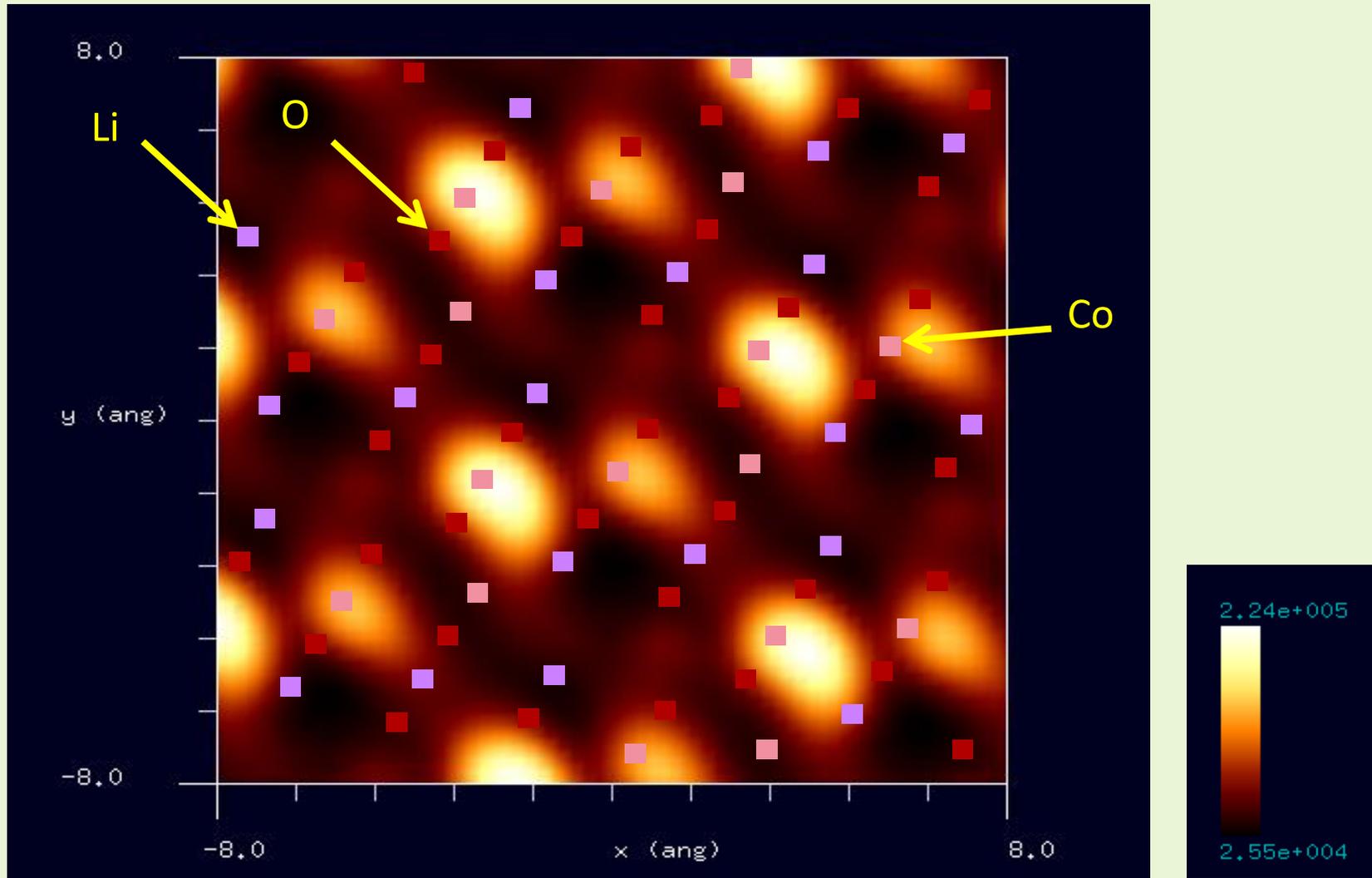
DFTB

LiCoO_2 (リチウムイオン電池の正極活物質)

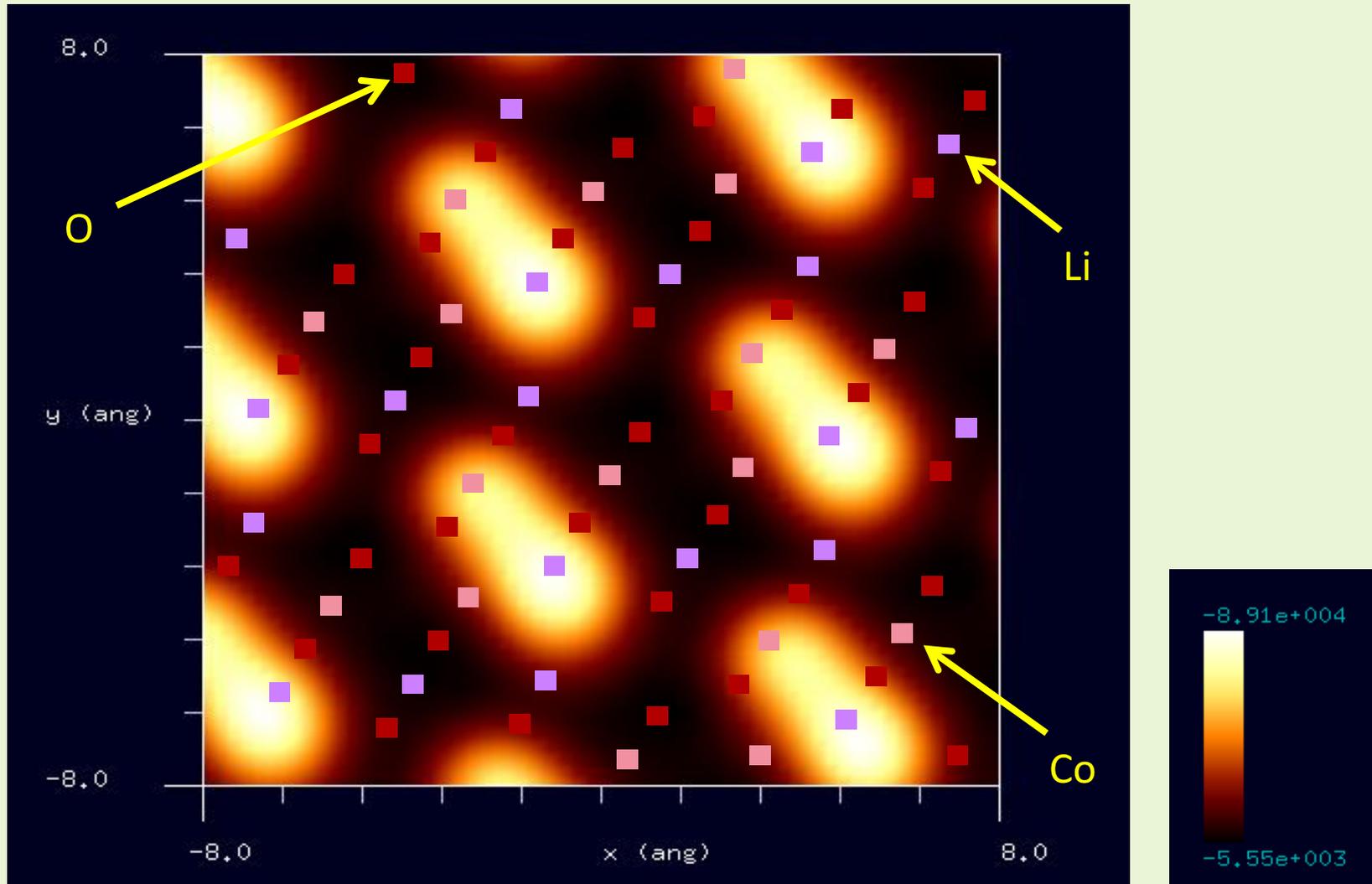
水素終端されたシリコン探針を使用
三方晶(空間群番号:166)
(111)面



STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.2 Å
最大電流 2.24×10^5 nA、最小電流 2.55×10^4 nA



STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離2.2Å
最大電流 -5.55×10^3 nA、最小電流 -8.91×10^4 nA



【DFTB】リチウムイオン電池の正極活物質 LiMn_2O_4 粒子のSTM画像

シミュレートモデル

探針: Si_4H_9 探針

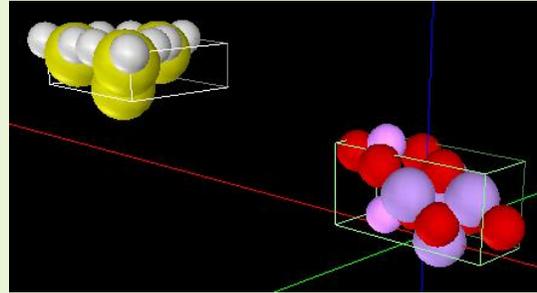
試料: LiMn_2O_4 (111)表面 (Li 終端)

スキャンエリア: $20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$

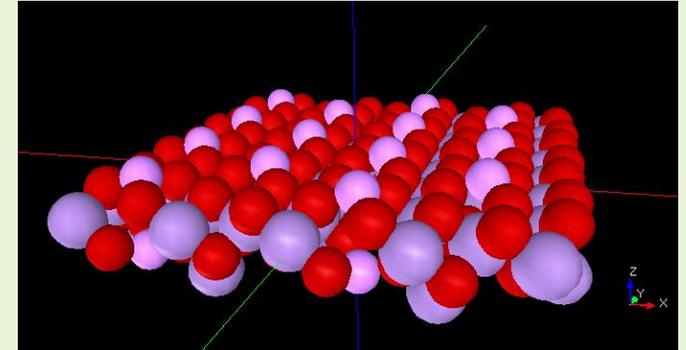
スキャンモード: Constant current STM

探針バイアス: +1.0 V

電流値: 10 nA

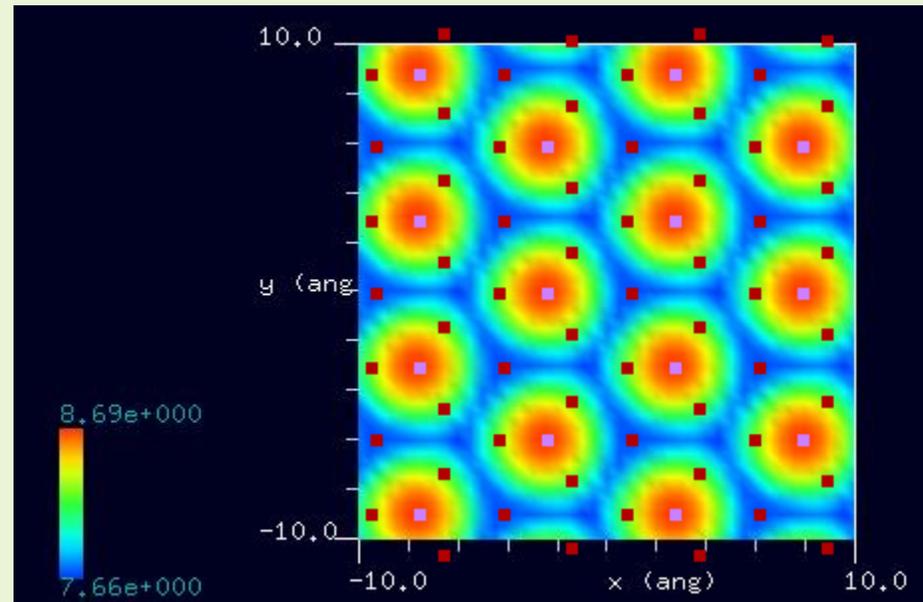


●: 酸素、●: リチウム、
●: マンガン、
●: シリコン、●: 水素



周期的境界条件を課した
Li 終端モデル

計算結果



合成ゴムのAFMシミュレーション

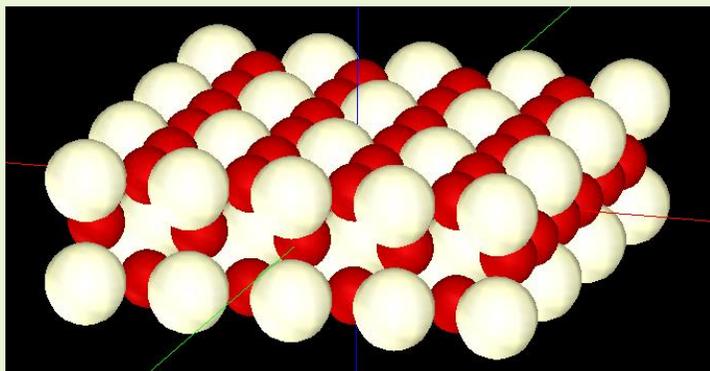
計算不可能

実験は、非相溶性ゴムの力学的損失マップ。

SPMシミュレータでは、力学的損失マップを計算することができない。

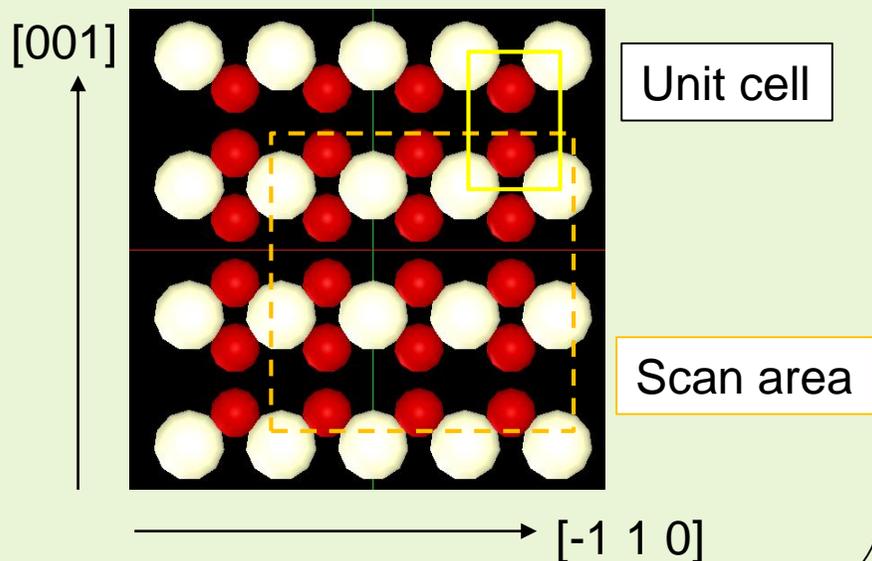
SPMシミュレータでは、試料を複数のエリアに区切って複数の物性データを与えることができない。

CeO_2 (110) 表面の構造



赤 = 酸素原子。白 = Ce原子。

最表面の原子配置



電流セットポイント: 1000 nA

探針
バイアス

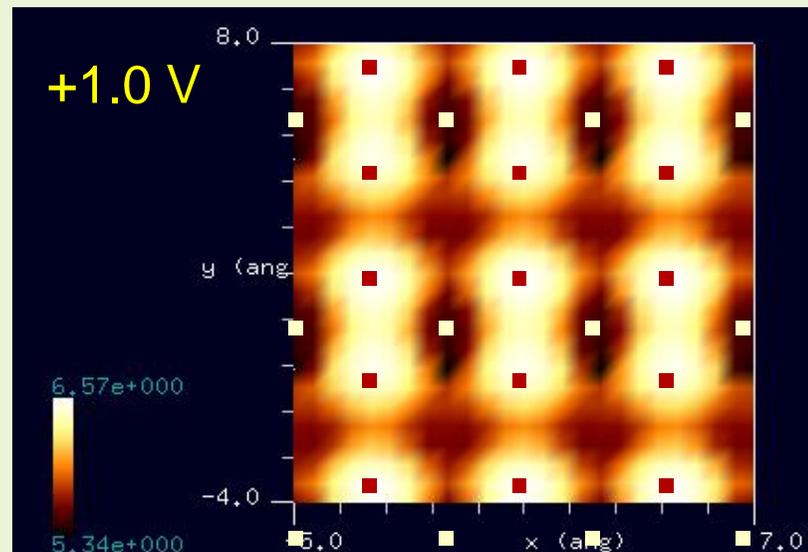
探針高さ

高
↑
低

+1.0 V

6.57e+000

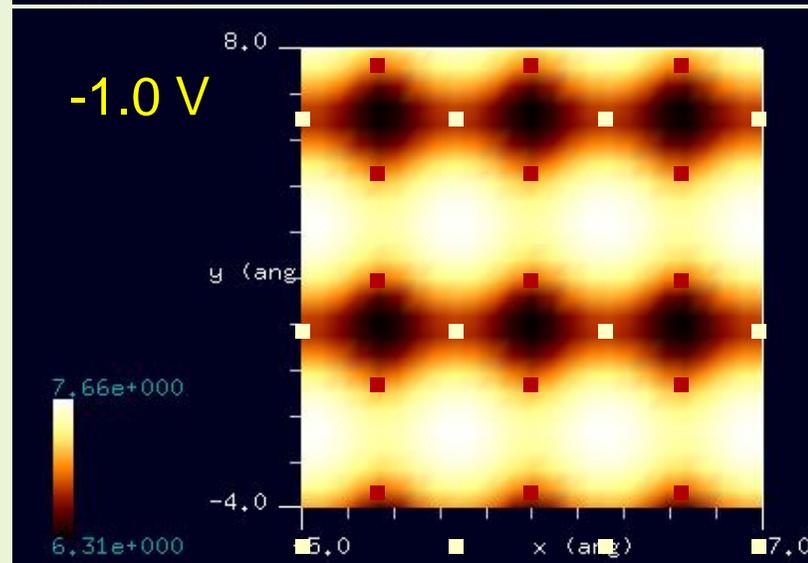
5.34e+000



-1.0 V

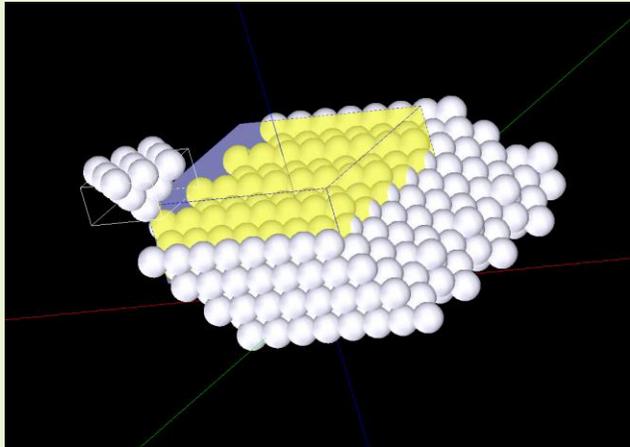
7.66e+000

6.31e+000

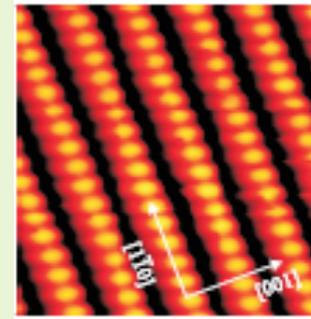


バイアスの正負によって、趣の全く異なるSTM像が得られた。

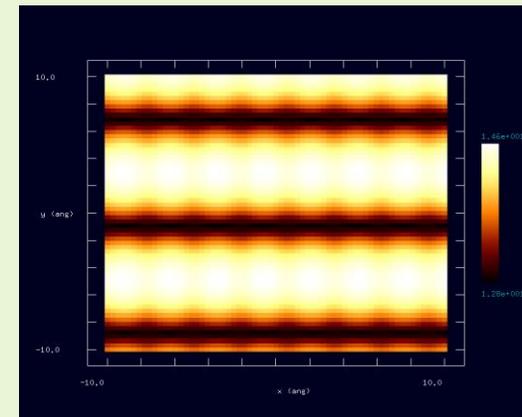
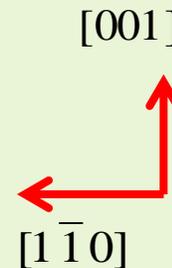
【DFTB】Pt(110)-(1x2) STM



探針: プラチナ探針
試料表面: Pt(110)-(1x2)
missing row reconstruction



STM実験結果
Scanning Tunneling Microscopy
Studies of Model Systems
Relevant to Catalysis“, PhD
thesis. Figure 4.1

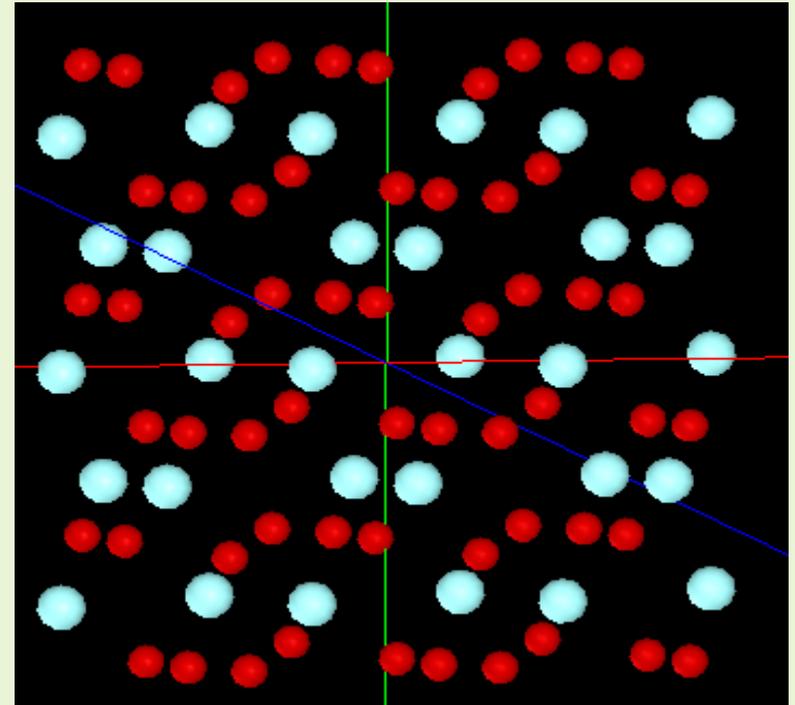
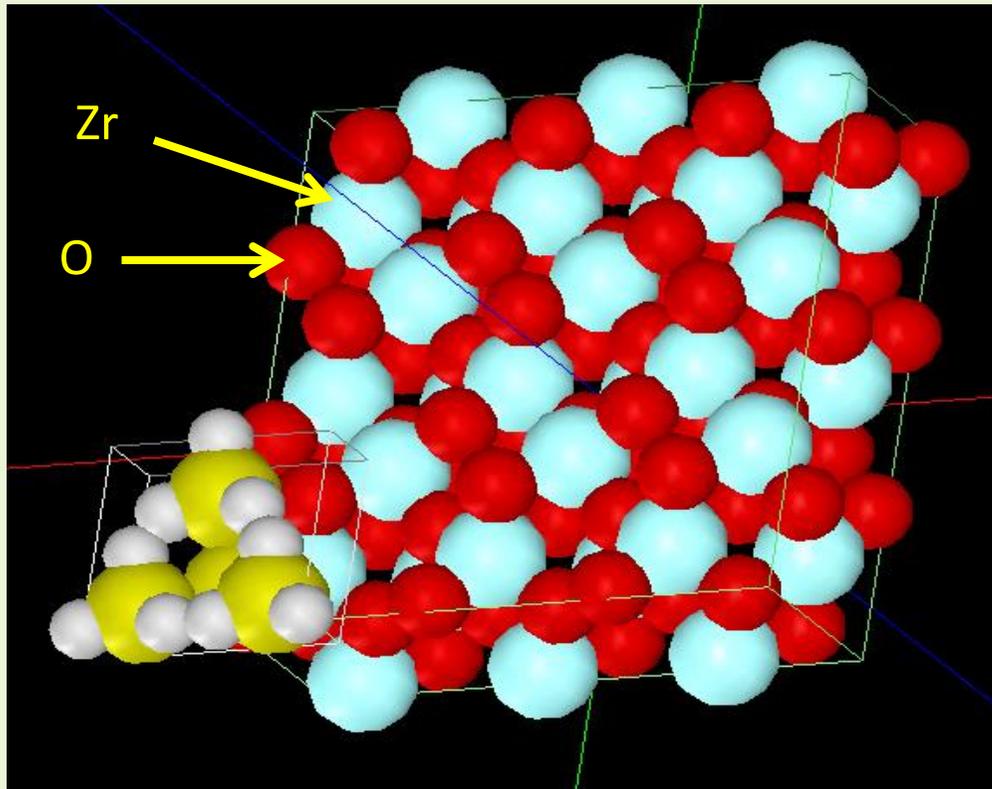


DFTB STM 電流一定像
占有状態、バイアス 1.0 V

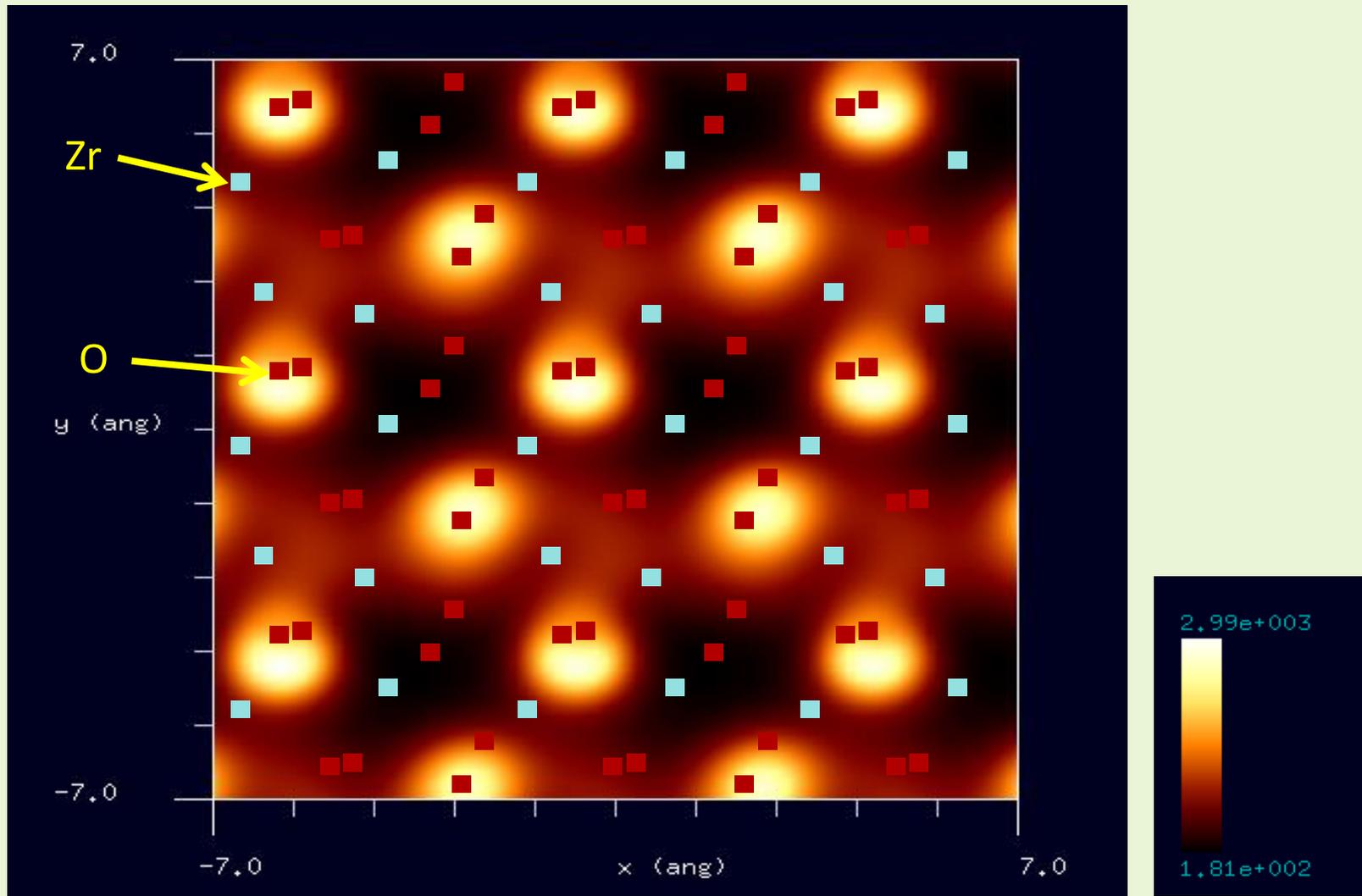
DFTB

ZrO_2 (ジルコニア 自動車の排ガス触媒として用いられる)

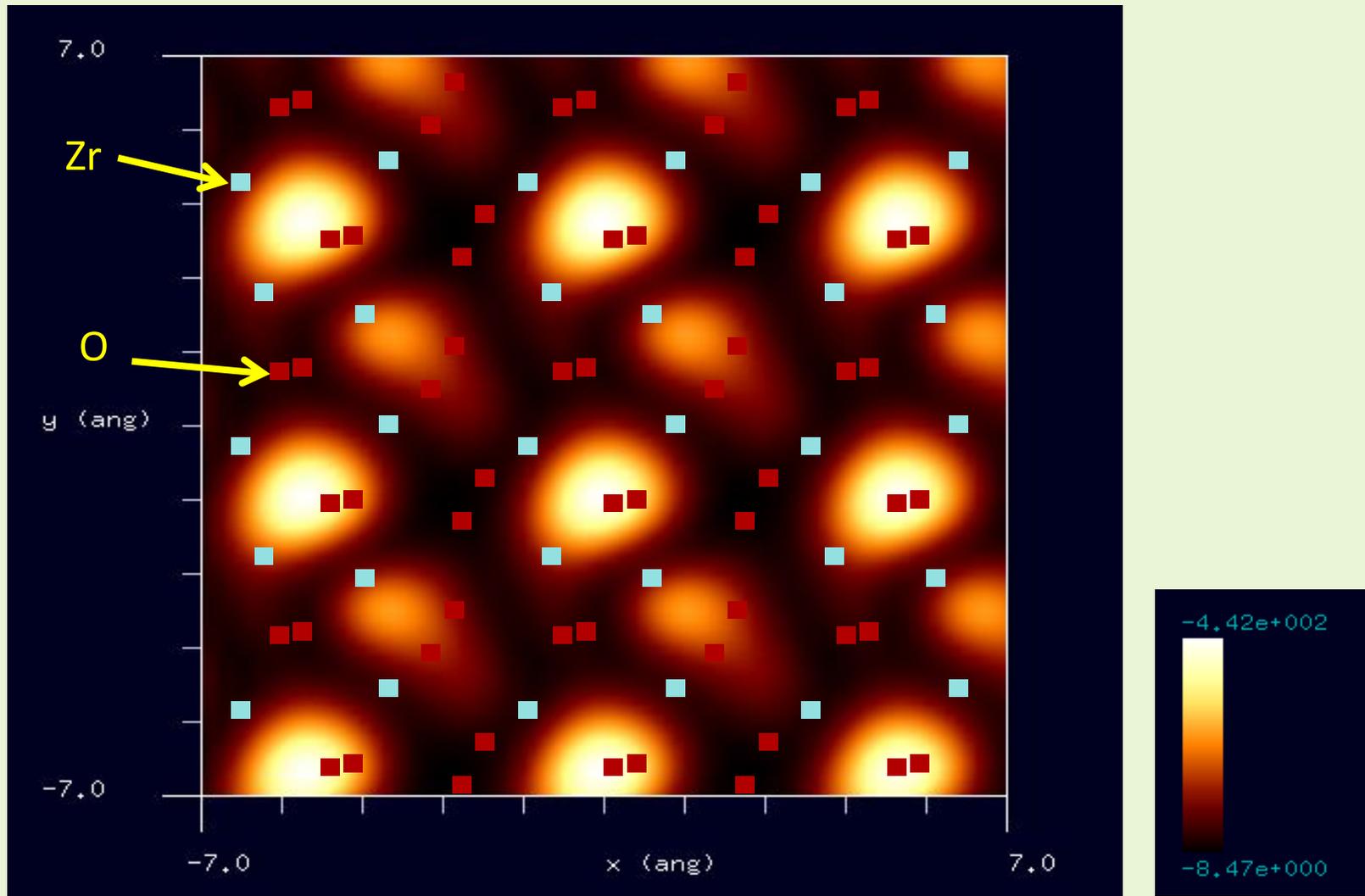
水素終端されたシリコン探針を使用
単斜晶(空間群番号:14)[常温の場合]
(001)面



STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離0.97 Å
最大電流 2.99×10^3 nA、最小電流 1.81×10^2 nA



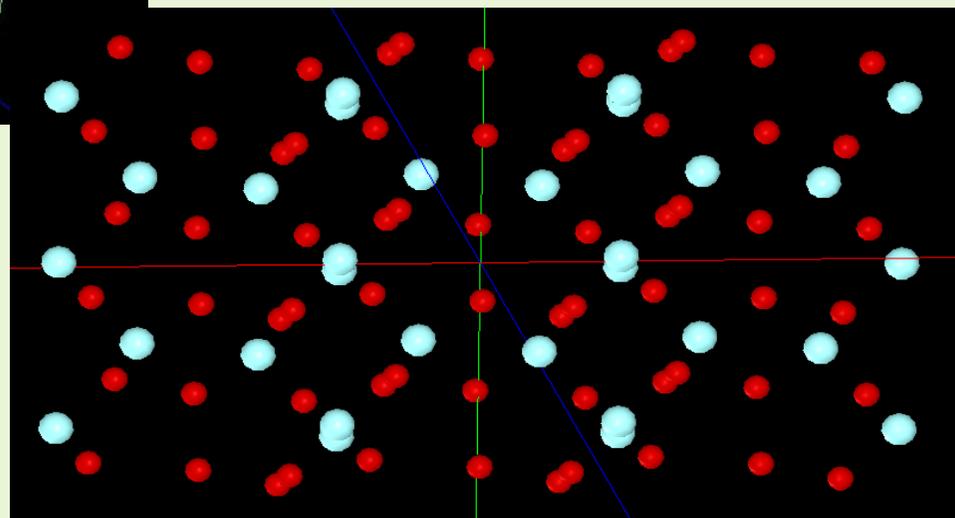
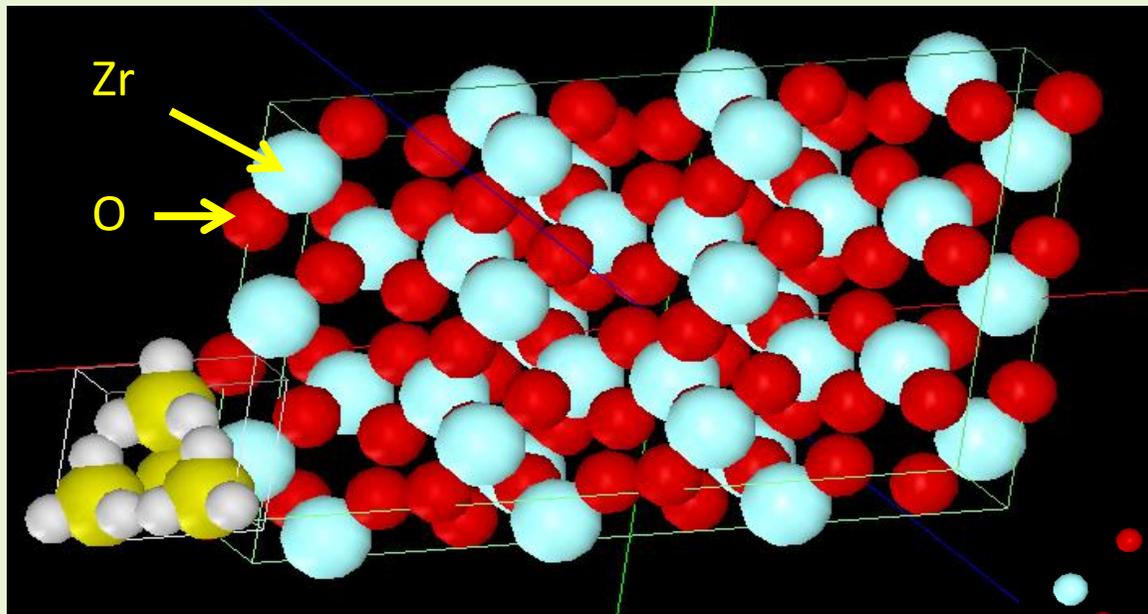
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.5 Å
最大電流 -8.47×10^0 nA、最小電流 -4.42×10^2 nA



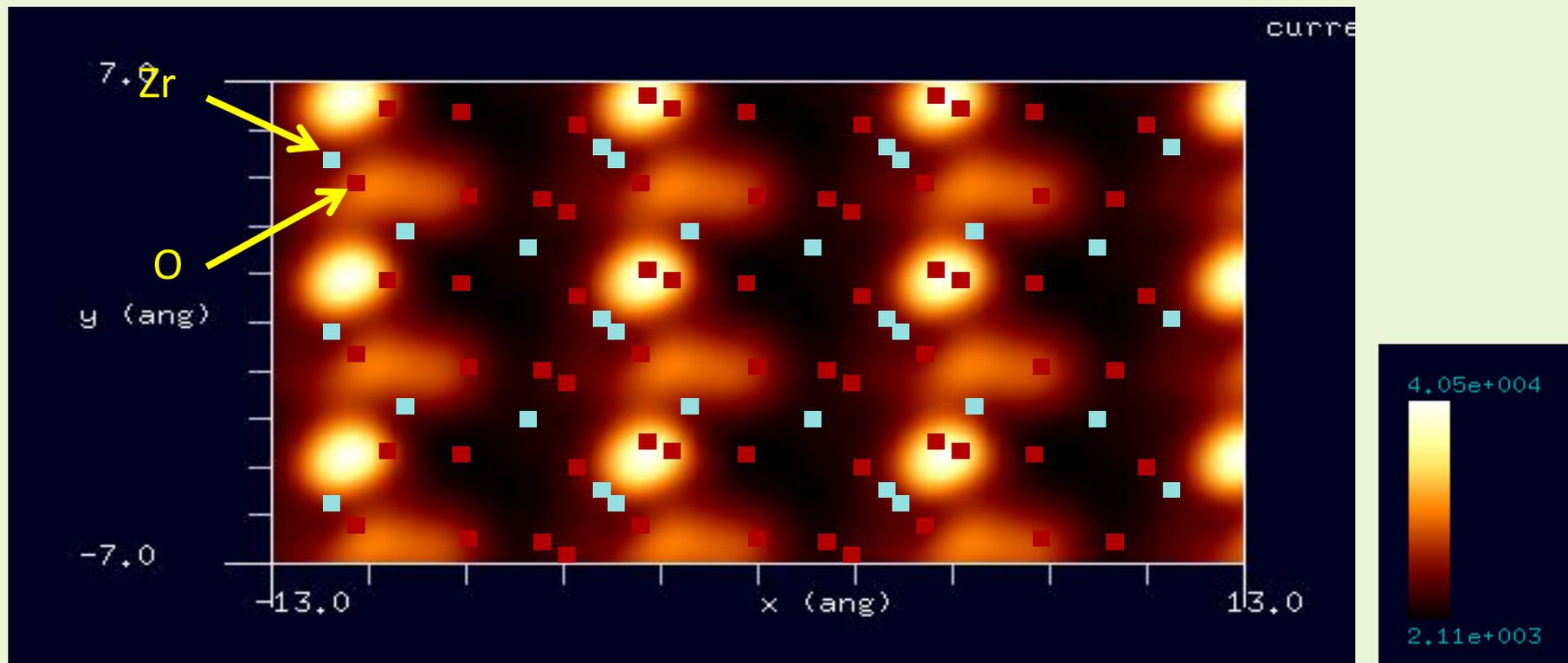
DFTB

ZrO_2 (ジルコニア 自動車の排ガス触媒として用いられる)

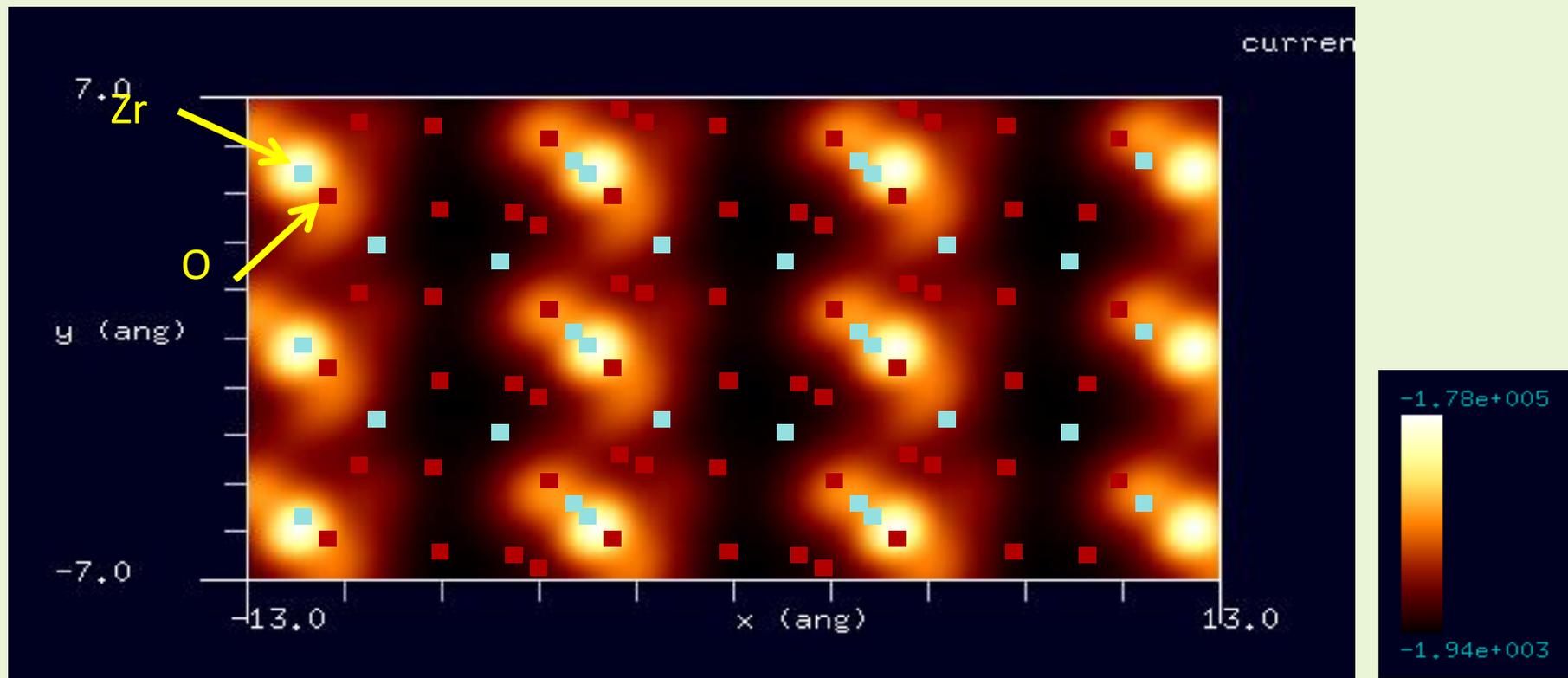
水素終端されたシリコン探針を使用
単斜晶(空間群番号:14)[常温の場合]
(110)面



STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.7 Å
最大電流 4.05×10^4 nA、最小電流 2.11×10^3 nA



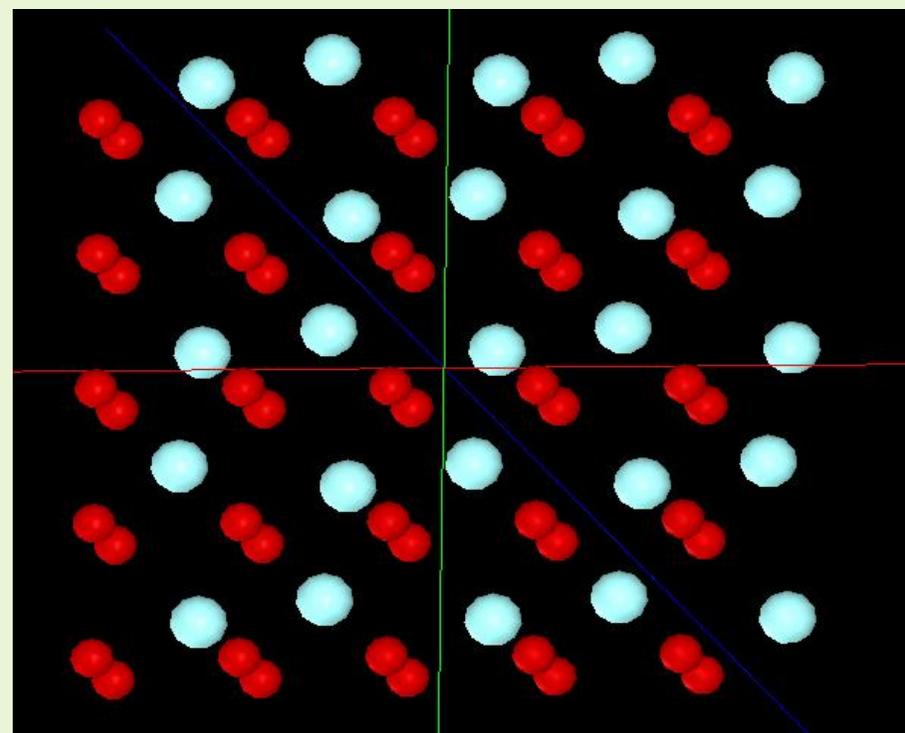
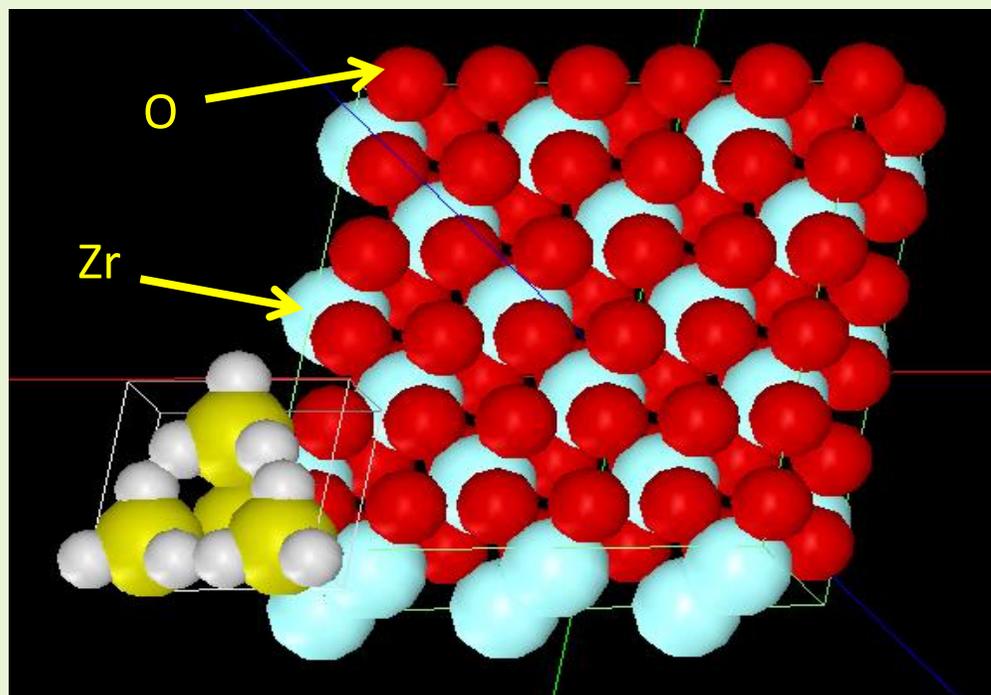
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.7 Å
最大電流 -1.94×10^3 nA、最小電流 -1.78×10^5 nA



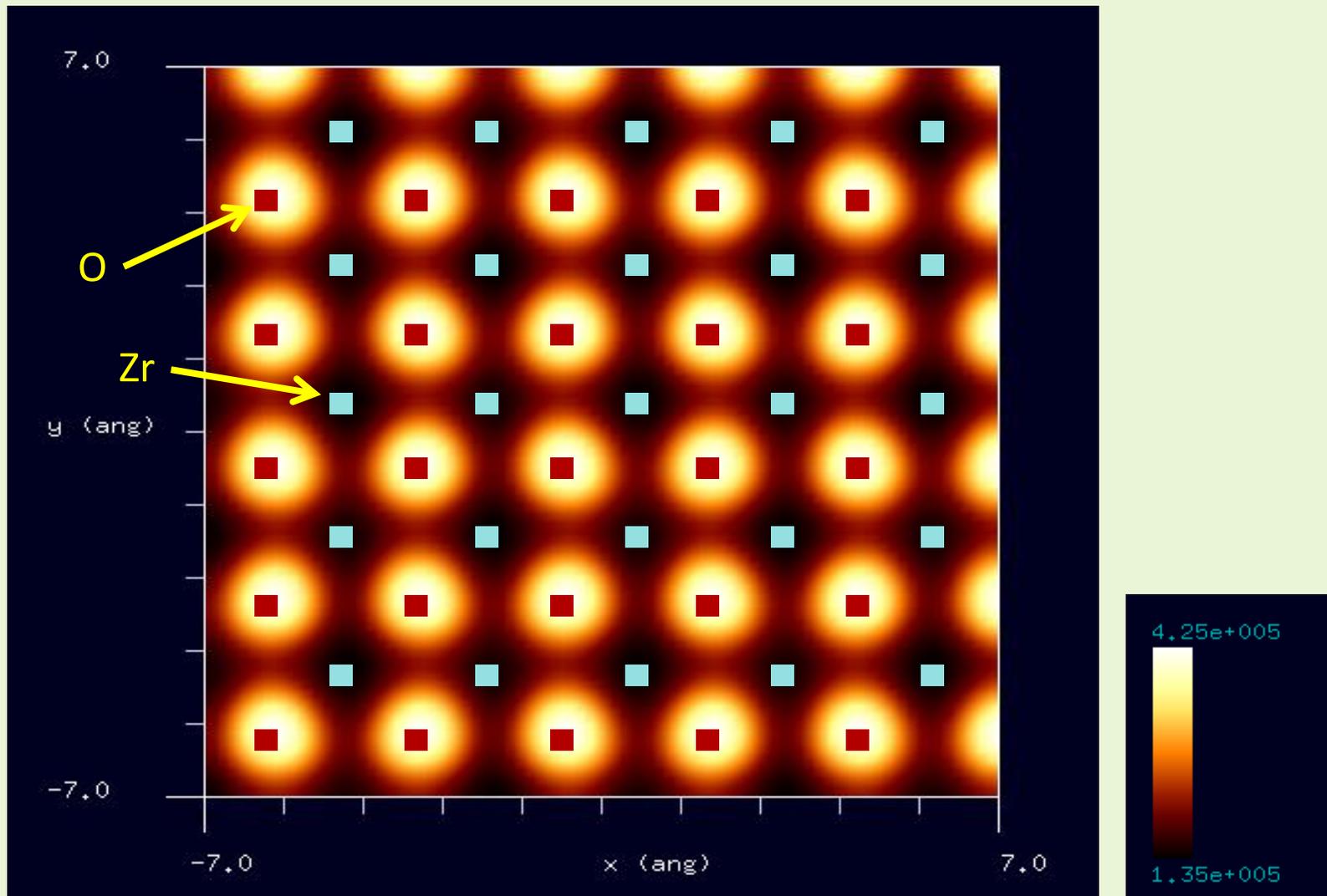
DFTB

ZrO_2 (ジルコニア 自動車の排ガス触媒として用いられる)

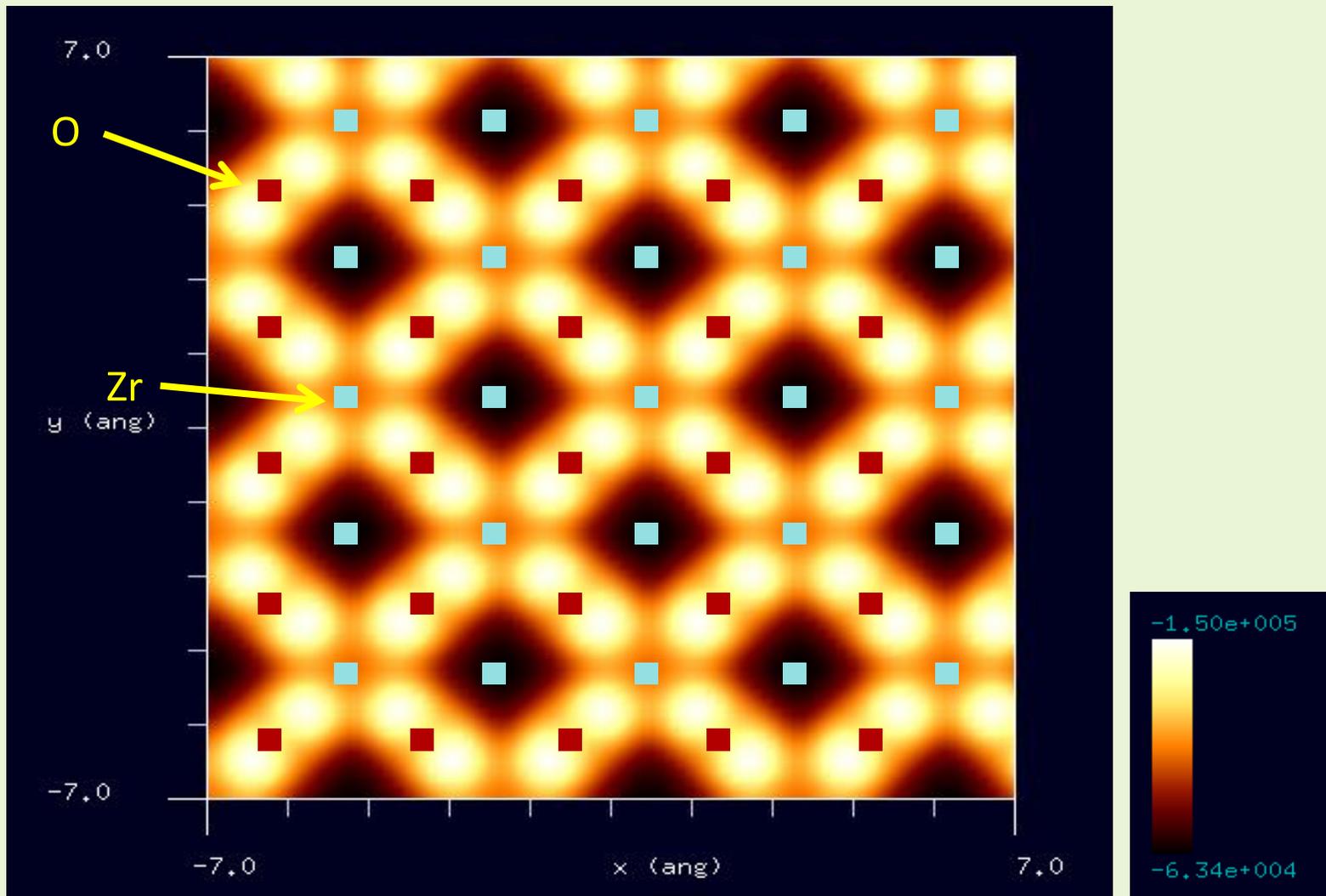
水素終端されたシリコン探針を使用
立方晶(空間群番号:225)[高温の場合]
(001)面



STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.1 Å
最大電流 4.25×10^5 nA、最小電流 1.35×10^5 nA



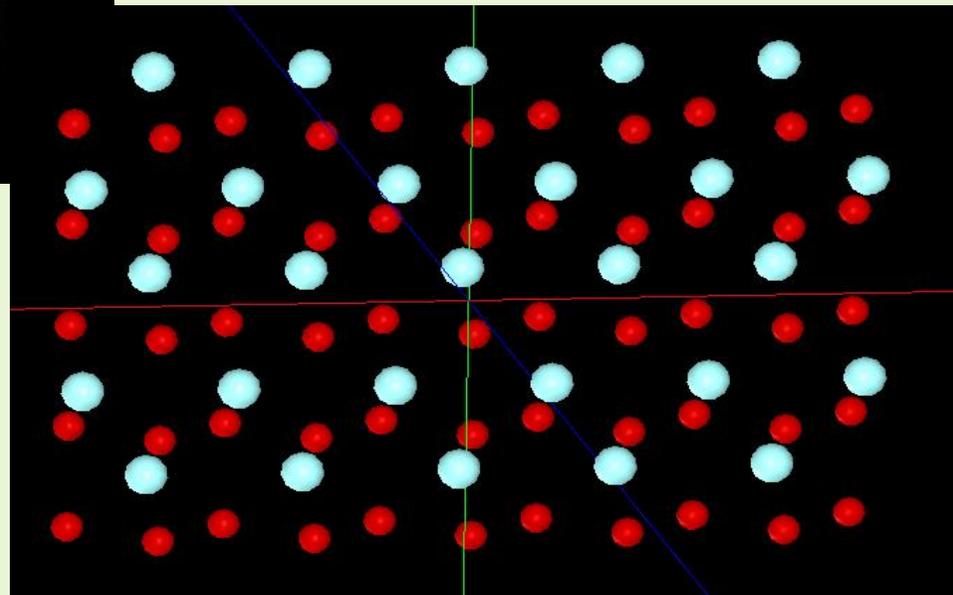
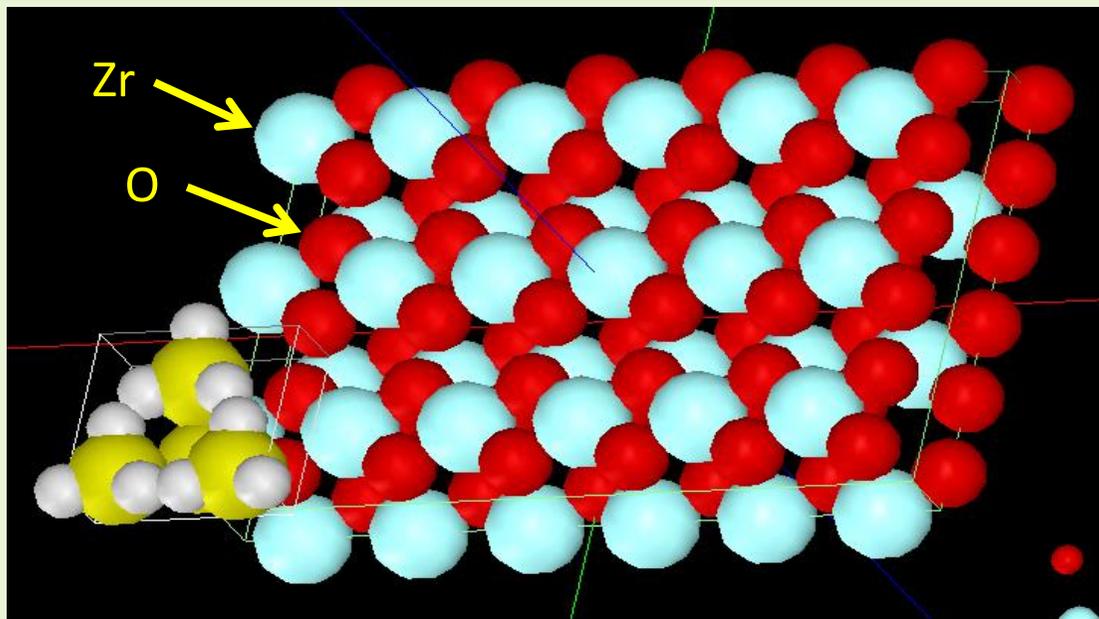
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.1 Å
最大電流 -6.34×10^4 nA、最小電流 -1.50×10^5 nA



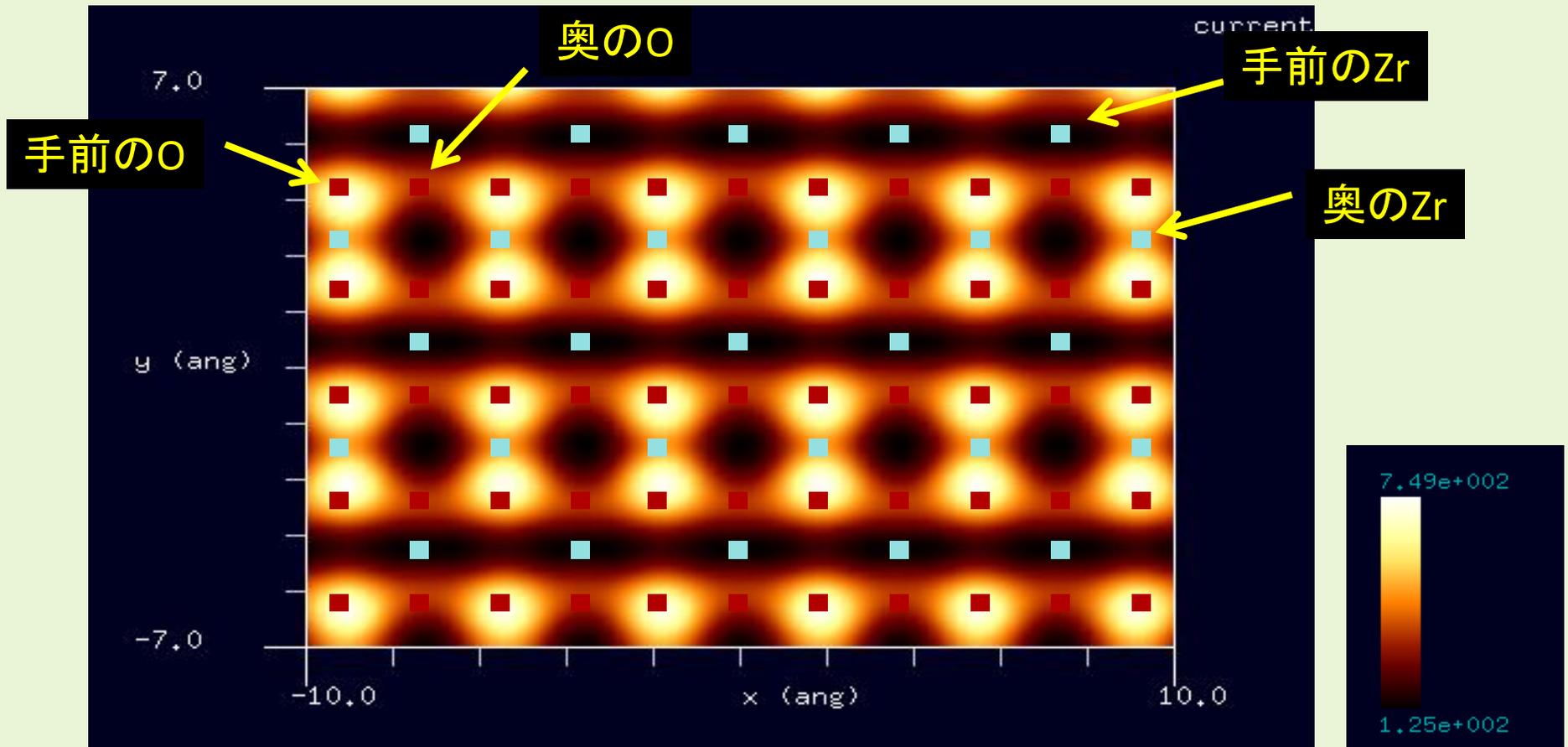
DFTB

ZrO_2 (ジルコニア 自動車の排ガス触媒として用いられる)

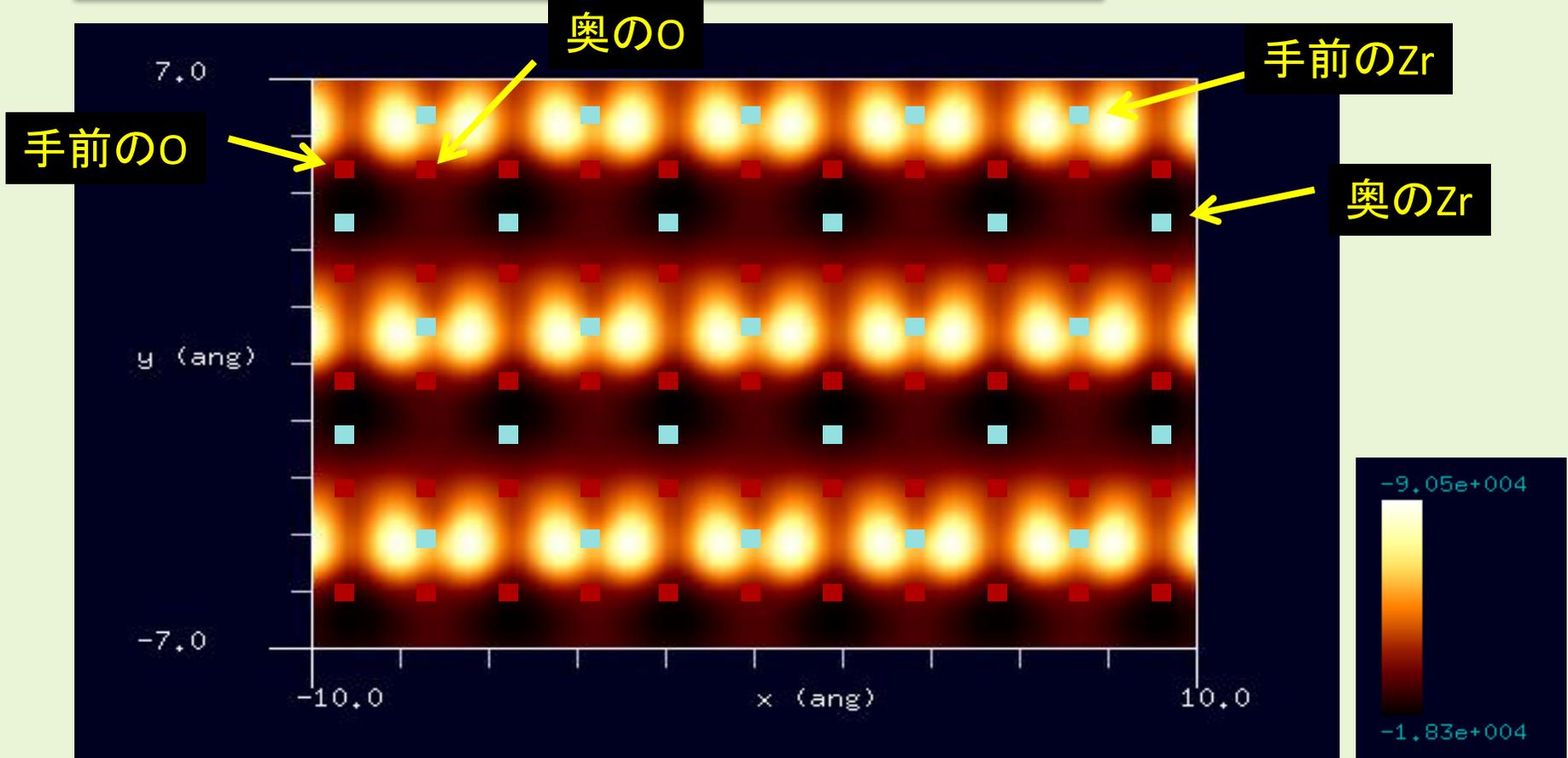
水素終端されたシリコン探針を使用
立方晶(空間群番号:225)[高温の場合]
(110)面



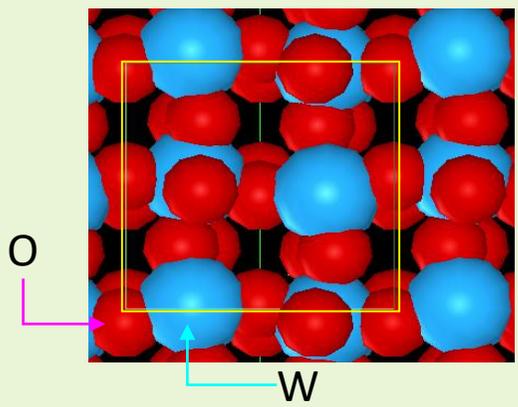
STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離2.7 Å
最大電流 7.49×10^2 nA、最小電流 1.25×10^2 nA



STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.7 Å
最大電流 -1.83×10^{-4} A、最小電流 -9.05×10^{-4} A

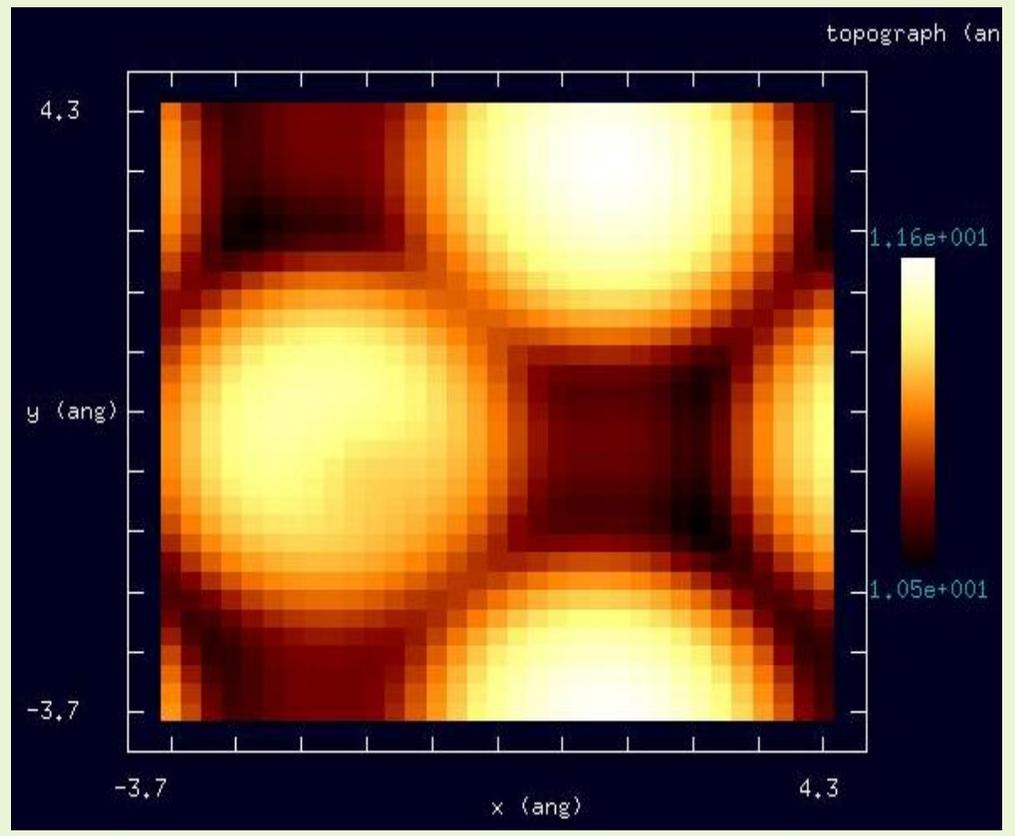


【DFTB】WO₃表面のSTM像



試料(黄色の枠が単位格子)

探針: Si₄H₉
試料: WO₃
スキャンエリア: 8 Å × 8 Å
スキャンモード: constant current STM
探針バイアス: +1.0[V]
電流値: 48[nA]



【DFTB】ポリイソプレンのconstant current STM像

シミュレートモデル

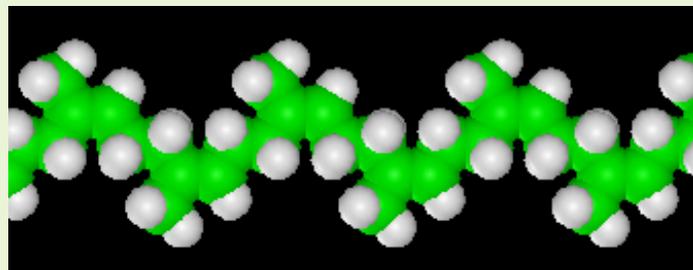
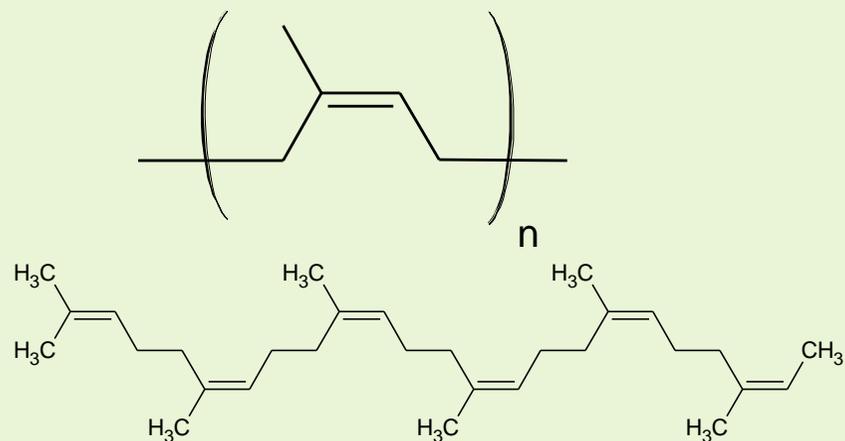
探針: Si_4H_9 探針

試料: cis-ポリイソプレン(天然ゴム)、およびtrans-ポリイソプレン(グタペルカ)

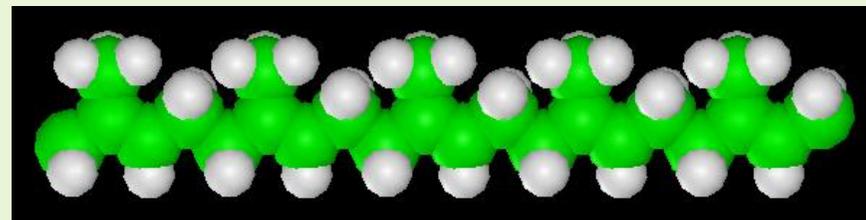
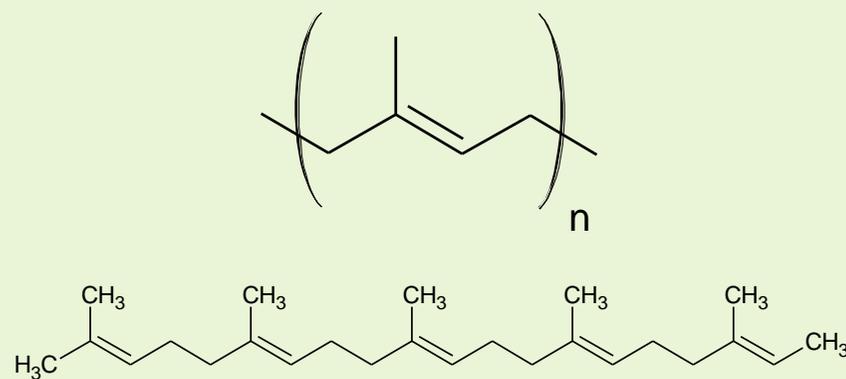
スキャンエリア: $20 \text{ \AA} \times 10 \text{ \AA}$

スキャンモード: Constant current STM

cis-ポリイソプレン(天然ゴム)

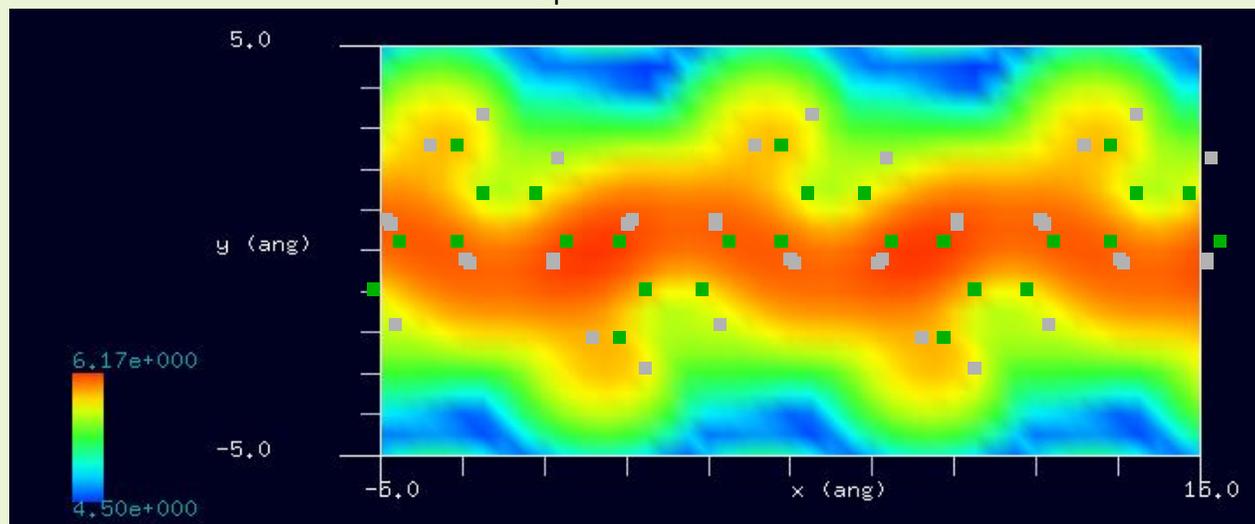


trans-ポリイソプレン(グタペルカ)

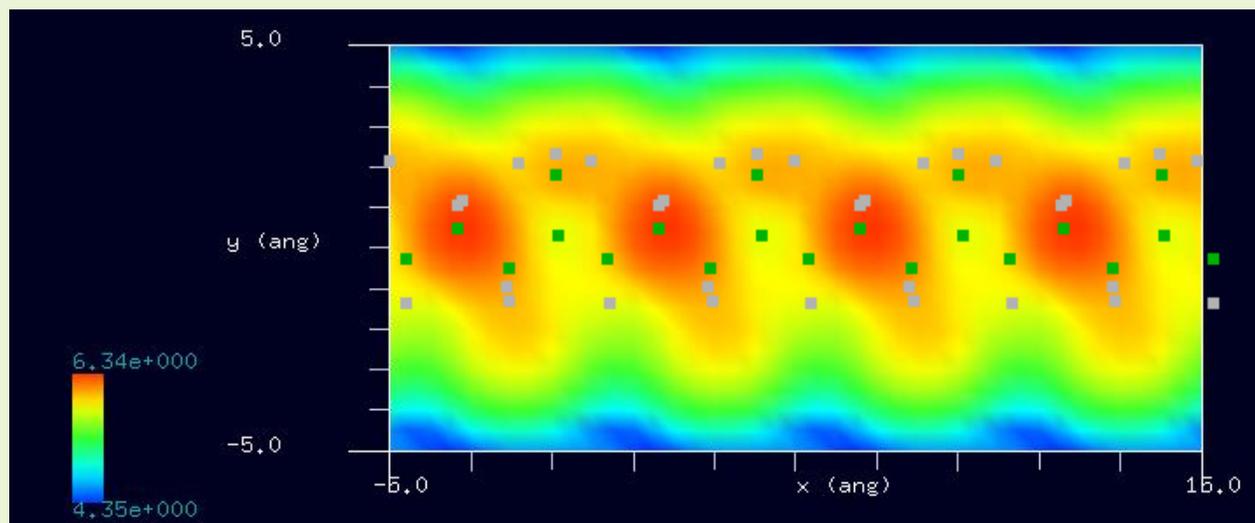


【DFTB】ポリイソプレンのconstant current STM像

cis-polyisoprene, constant current STM, $V_{\text{tip}} = +5.0$ V, $I = 10$ nA.

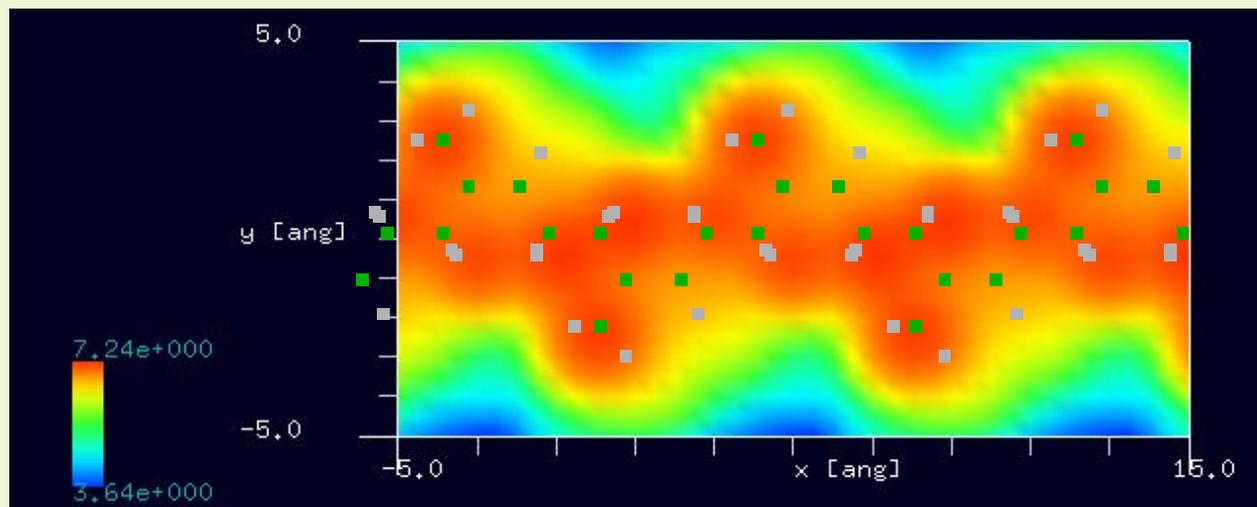


trans-polyisoprene, constant current STM, $V_{\text{tip}} = +5.0$ V, $I = 10$ nA.

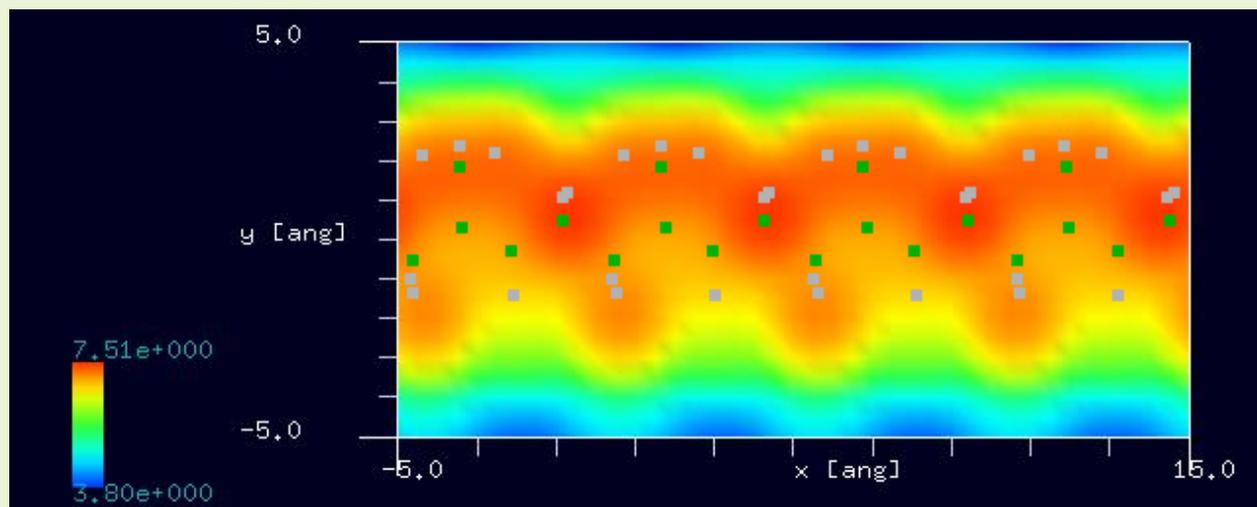


【CG】ポリイソプレンのカー定モードAFM像

cis-polyisoprene, constant force, +0.01 nN.



trans-polyisoprene, constant force, +0.01 nN.



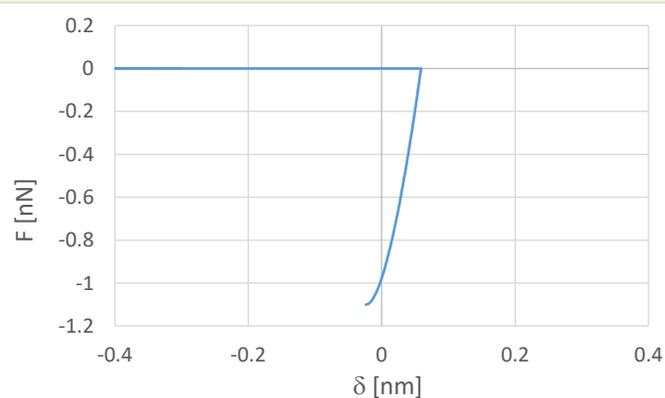
【FemAFM】いろいろな材料の粘弾性接触解析

以下の3種類の物質の物性値を用いて、粘弾性接触解析を行った。

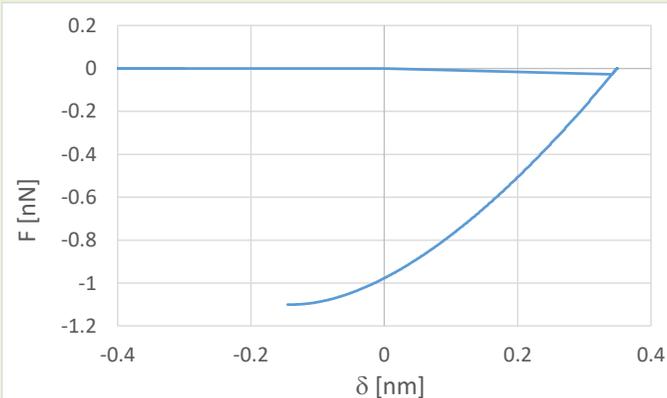
	金	ポリカーボネート	天然ゴム
ヤング率 (GPa)	74	2.6	0.001
ポアソン比	0.42	0.39	0.4999
ハマカ一定数 (zJ)	455	50.8	85.8

表面張力はいずれも水の1.5倍の0.108 N/mに固定した。

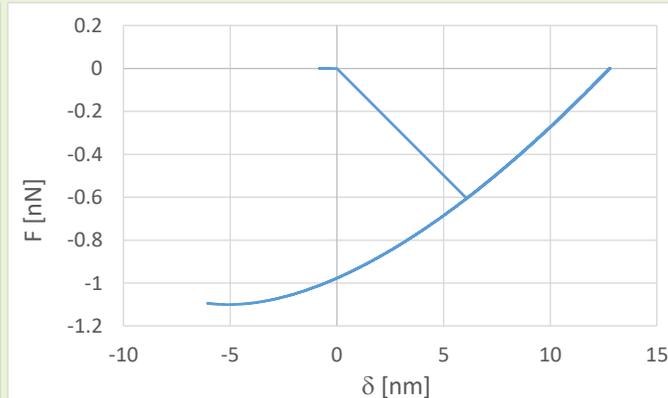
金



ポリカーボネート



天然ゴム



イソプレンゴムとスチレン-ブタジエンゴムのAFM像

実験例: <https://research.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/ja/research/736>

計算不可能

実験は、非相溶性ゴムの力学的損失マップ。

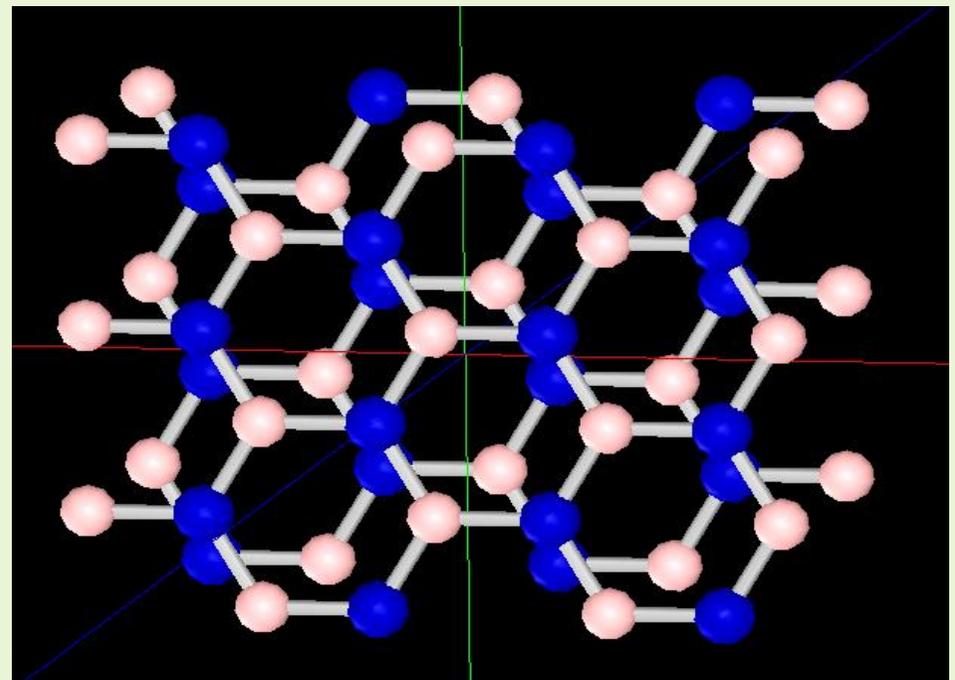
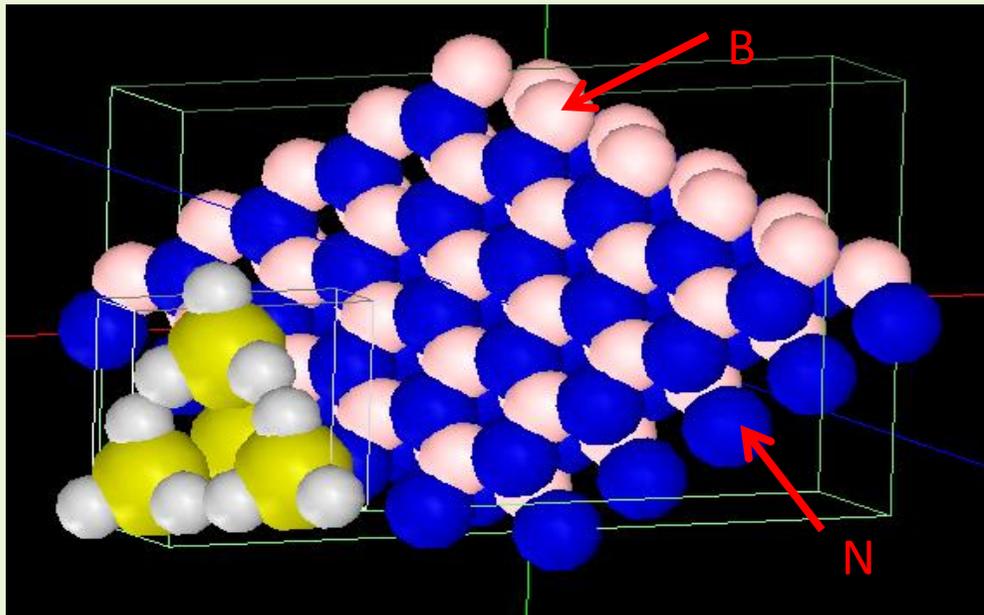
SPMシミュレータでは、力学的損失マップを計算することができない。

SPMシミュレータでは、試料を複数のエリアに区切って複数の物性データを与えることができない。

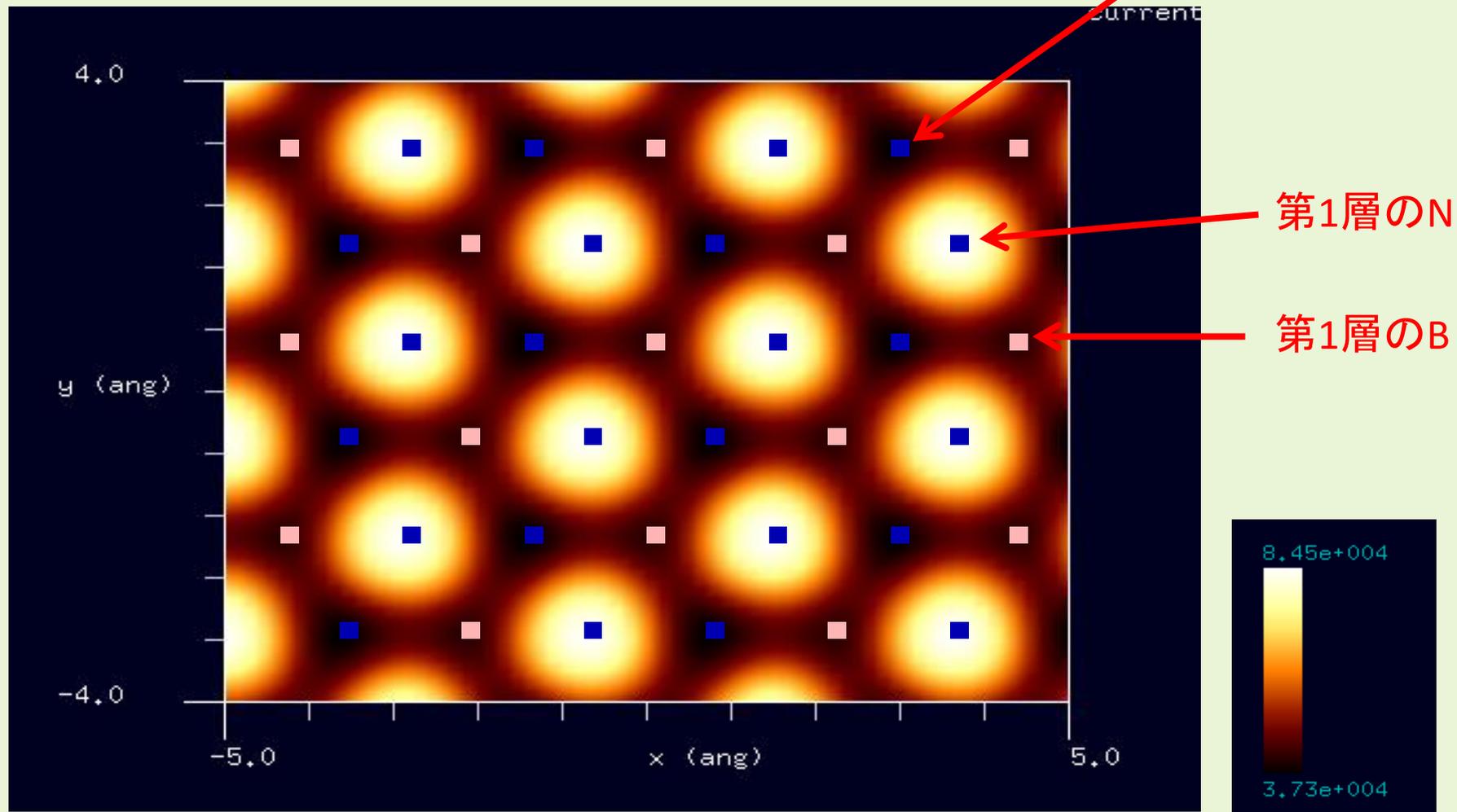
DFTB

BN (窒化ホウ素 発光ダイオード、半導体レーザーの材料)

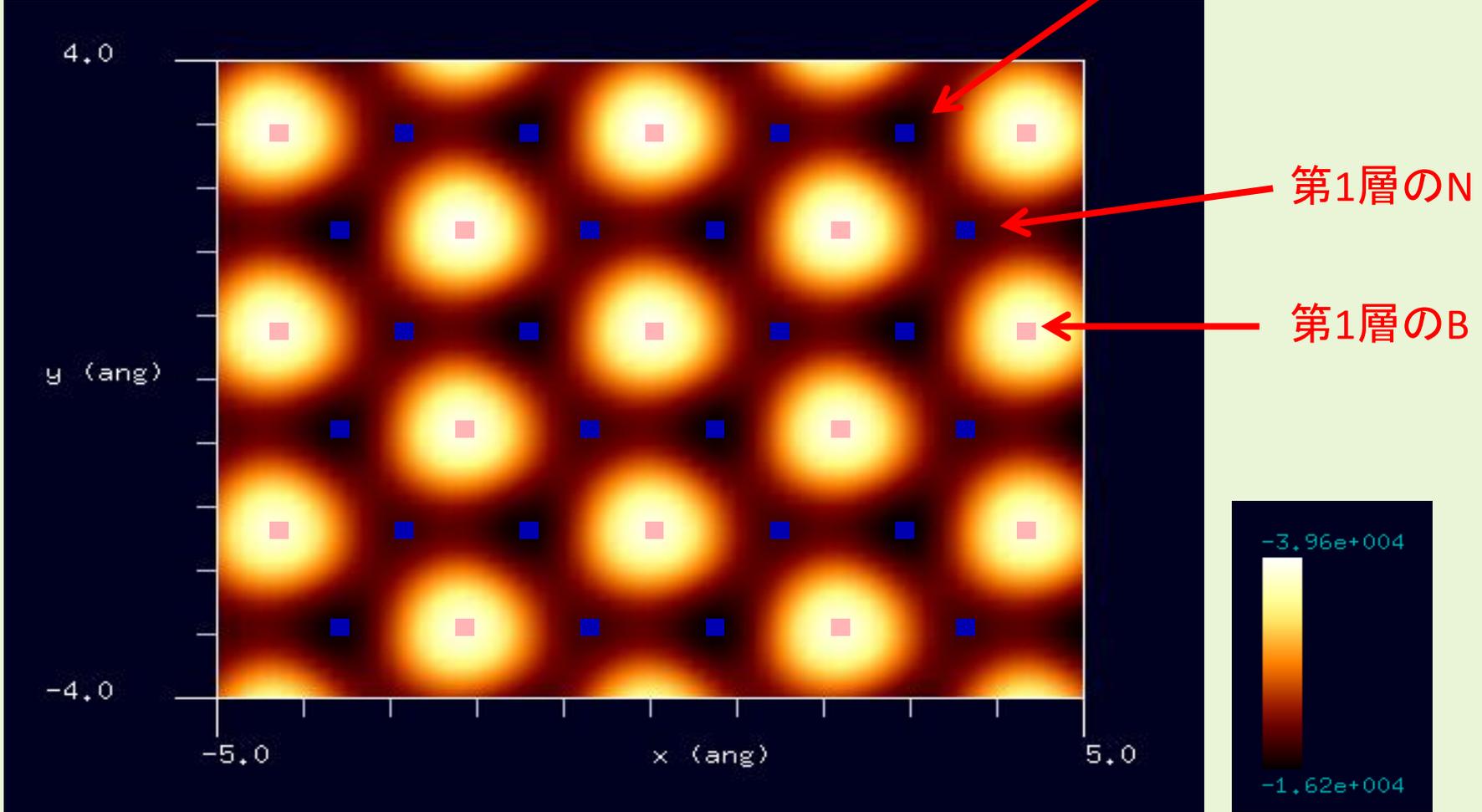
水素終端されたシリコン探針を使用
六方晶(空間群番号:194)



STM画像: 印加電圧2V, 探針と試料の最短距離1.0 Å
最大電流 8.45×10^4 nA、最小電流 3.73×10^4 nA



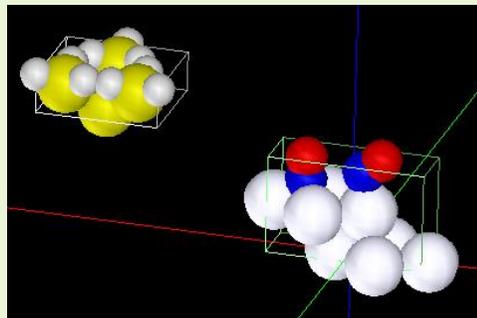
STM画像: 印加電圧-2V, 探針と試料の最短距離1.0Å
最大電流 -1.62×10^4 nA、最小電流 -3.96×10^4 nA



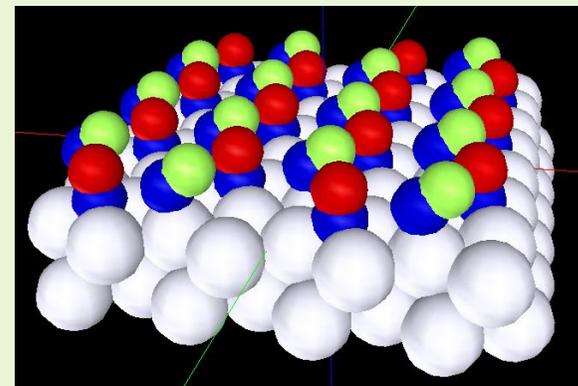
【DFTB】NO/Pt(111)のconstant current STM像

シミュレートモデル

探針: Si₄H₉探針
試料: NO分子が飽和吸着したPt(111)表面
スキャンエリア: 20 Å x 20 Å
スキャンモード:
Constant current STM
探針バイアス: +1.0 V
電流値: 0.5 nA

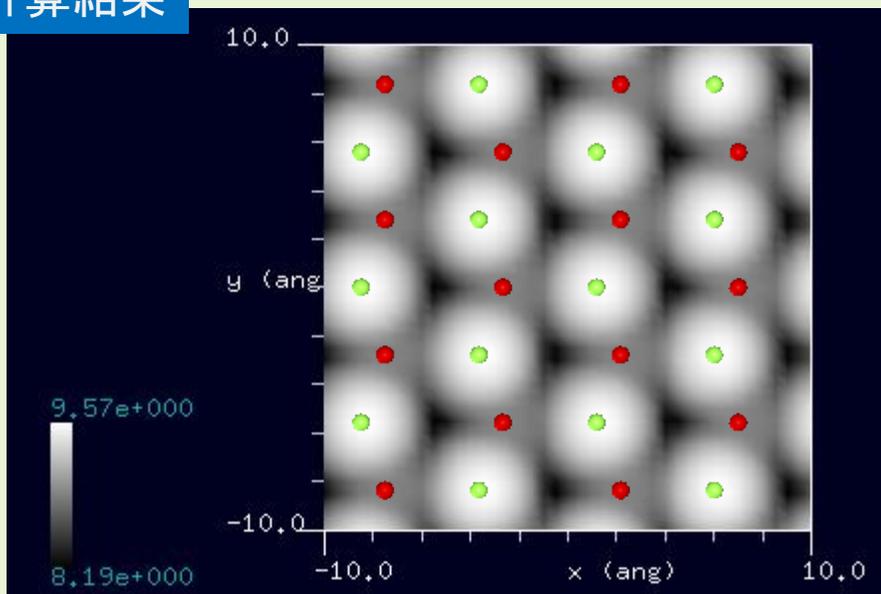


● : 酸素、 ● : 窒素、 ● : 白金、
● : シリコン、 ● : 水素

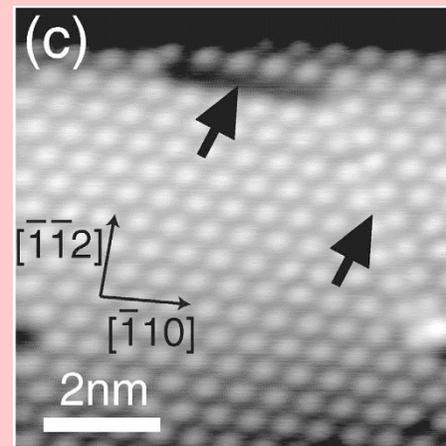


周期的境界条件を課したモデル。便宜上、オントップサイトのO原子を緑色に変えた。

計算結果



cf. Experiment



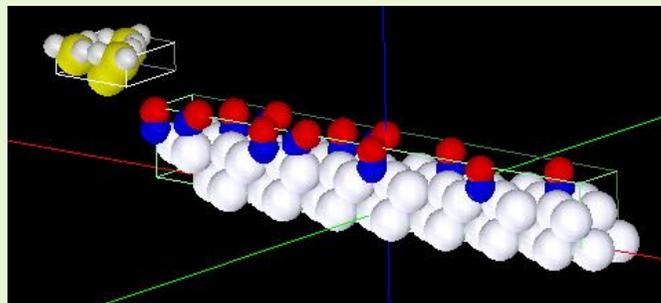
NO分子が飽和吸着したPt(111)表面のSTM像

https://www.jstage.jst.go.jp/article/jvsj2/52/2/52_2_47/_pdf

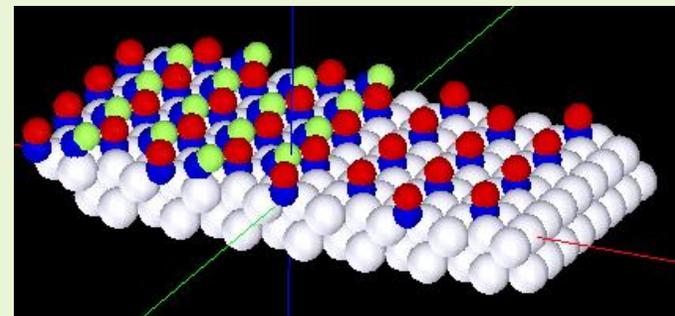
【DFTB】NO/Pt(111)のconstant current STM像

シミュレートモデル

探針: Si_4H_9 探針
試料: NO分子が吸着したPt(111)表面
スキャンエリア: $35 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$
スキャンモード:
Constant current STM
探針バイアス: +1.0 V
電流値: 0.5 nA

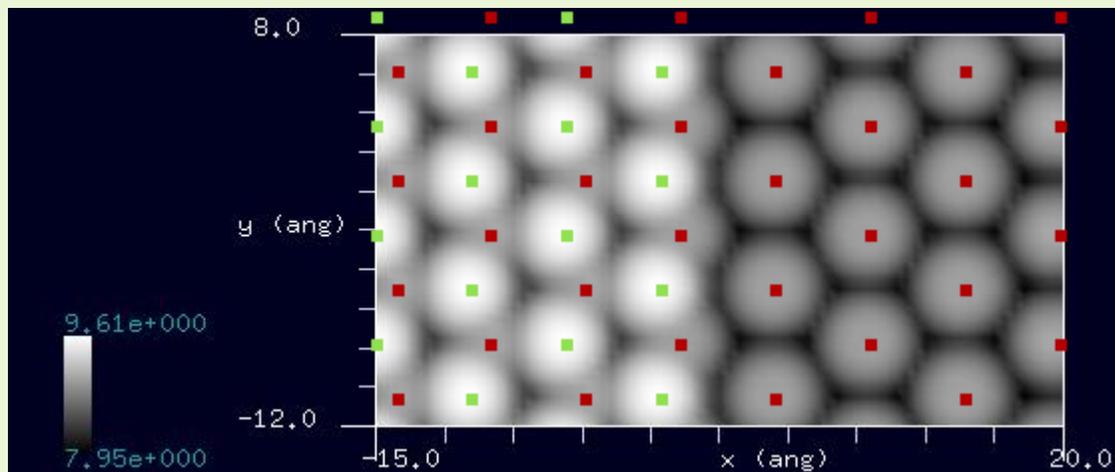


● : 酸素、 ● : 窒素、 ● : 白金、
● : シリコン、 ● : 水素

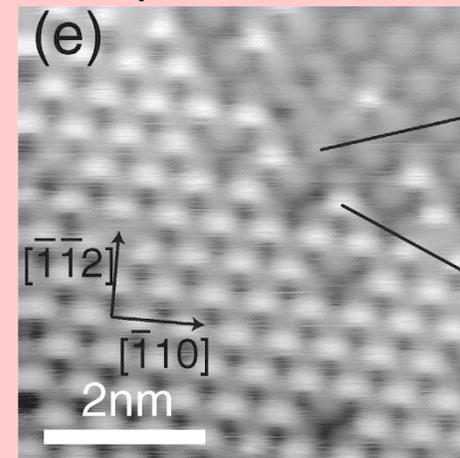


周期的境界条件を課したモデル。便宜上、
オントップサイトのO原子を緑色に変えた。

計算結果



cf. Experiment

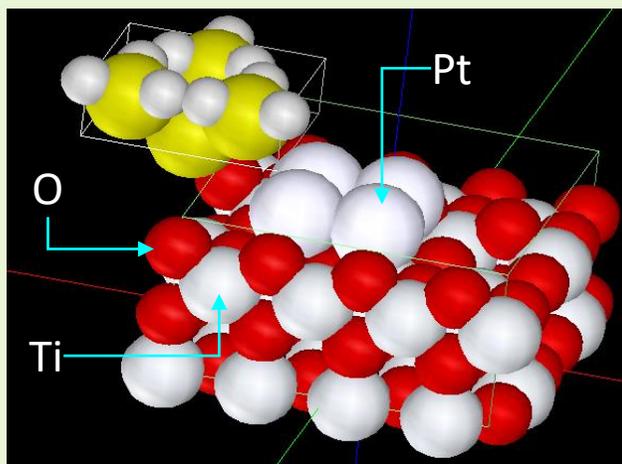


NO分子が吸着したPt(111)表面のSTM像

https://www.jstage.jst.go.jp/article/jvsj2/52/2/52_2_47/_pdf

【DFTB】TiO₂(110)上のPtのSTM像

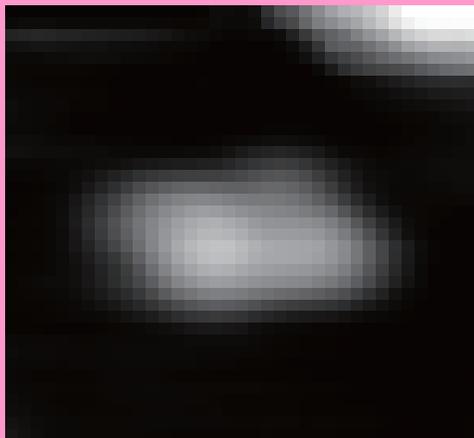
実験画像 (Pt₄の場合)



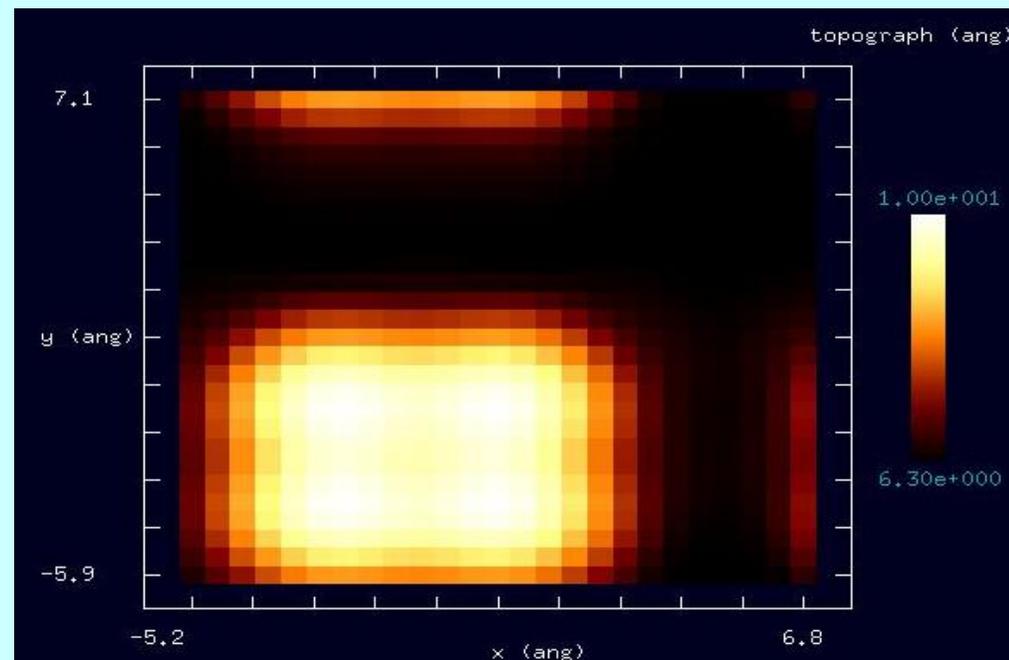
Constant current STMシミュレーション

探針: Si₄H₉
試料: TiO₂上のPt₄
スキャンエリア: 12 Å × 13 Å
スキャンモード: constant current STM
探針バイアス: +1.0[V]
電流値: 400[nA]

実測画像



スキャンエリア: 3.5 × 3.5 nm²
バイアス、電流値は未記載
表面科学Vol. 31, No. 10, pp. 537-542, 2010

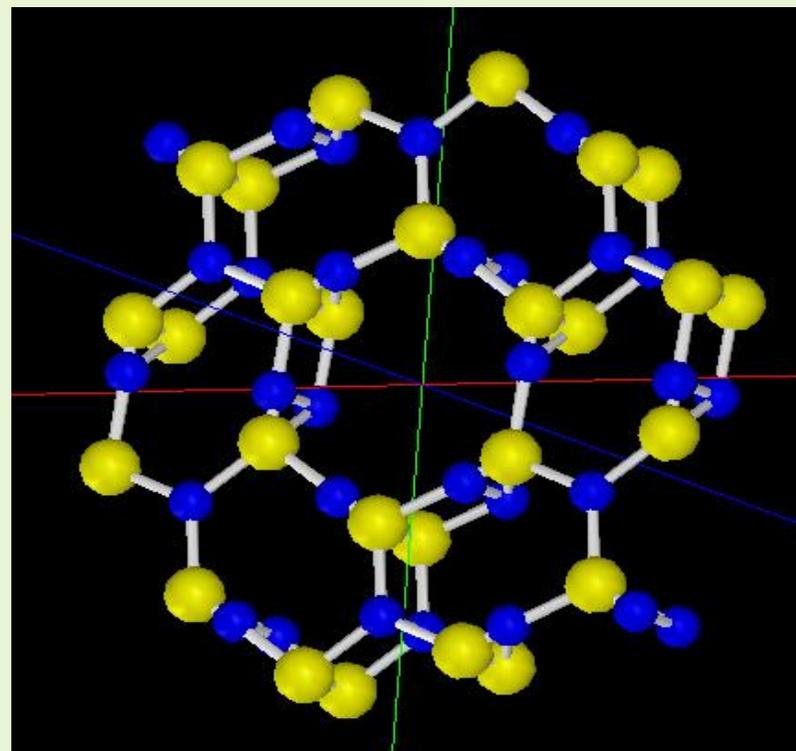
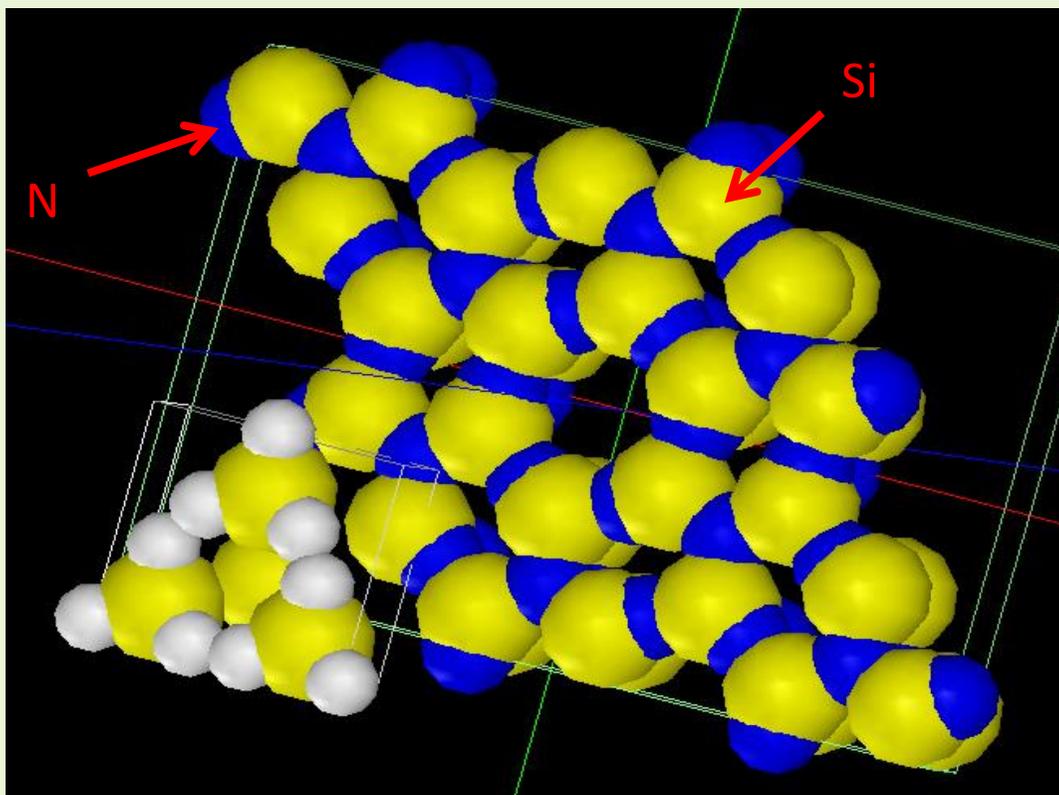


画像はコントラスト調整後

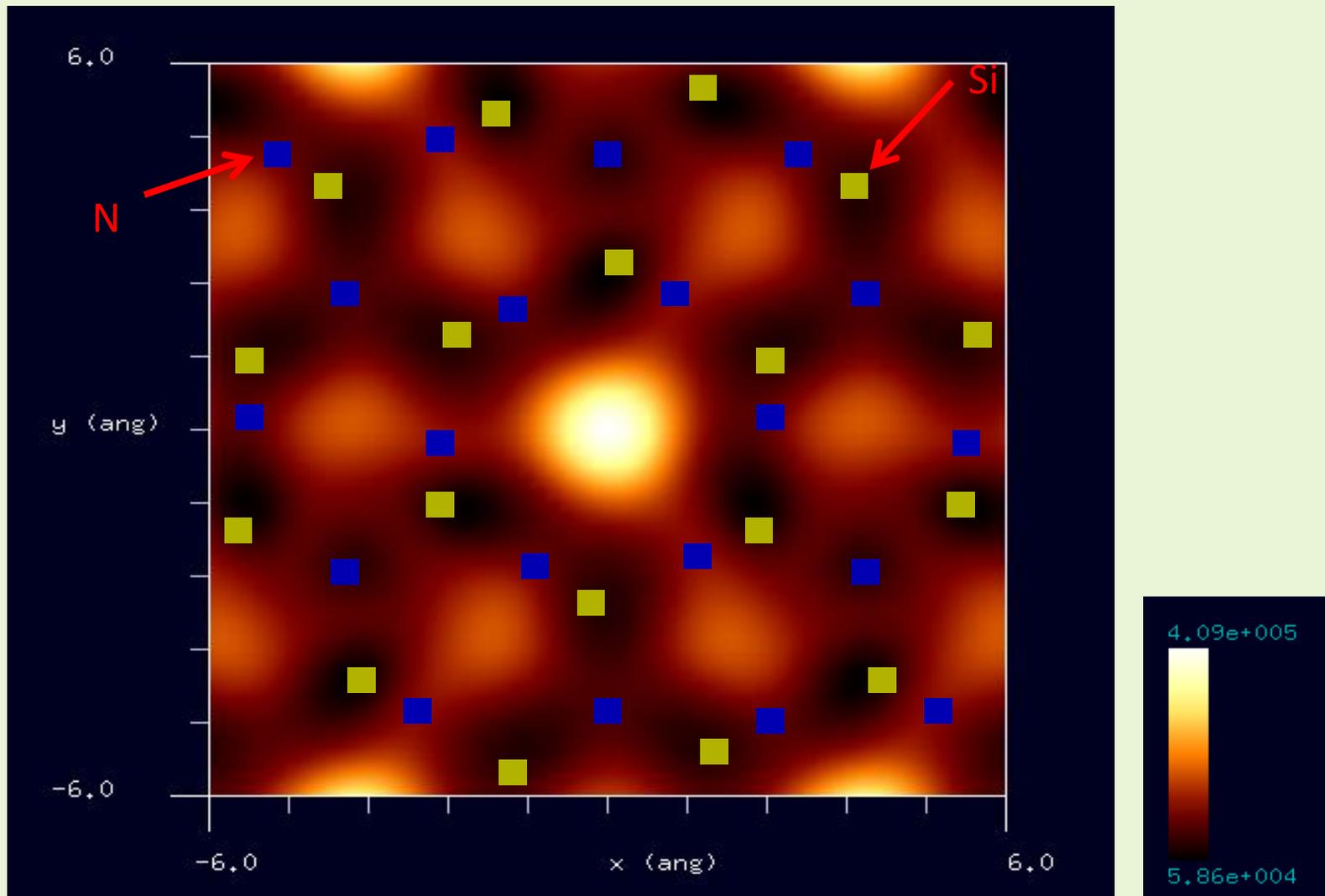
DFTB

Si_3N_4 (シリコンナイトライド、エンジン部品に使用されるファインセラミックス)

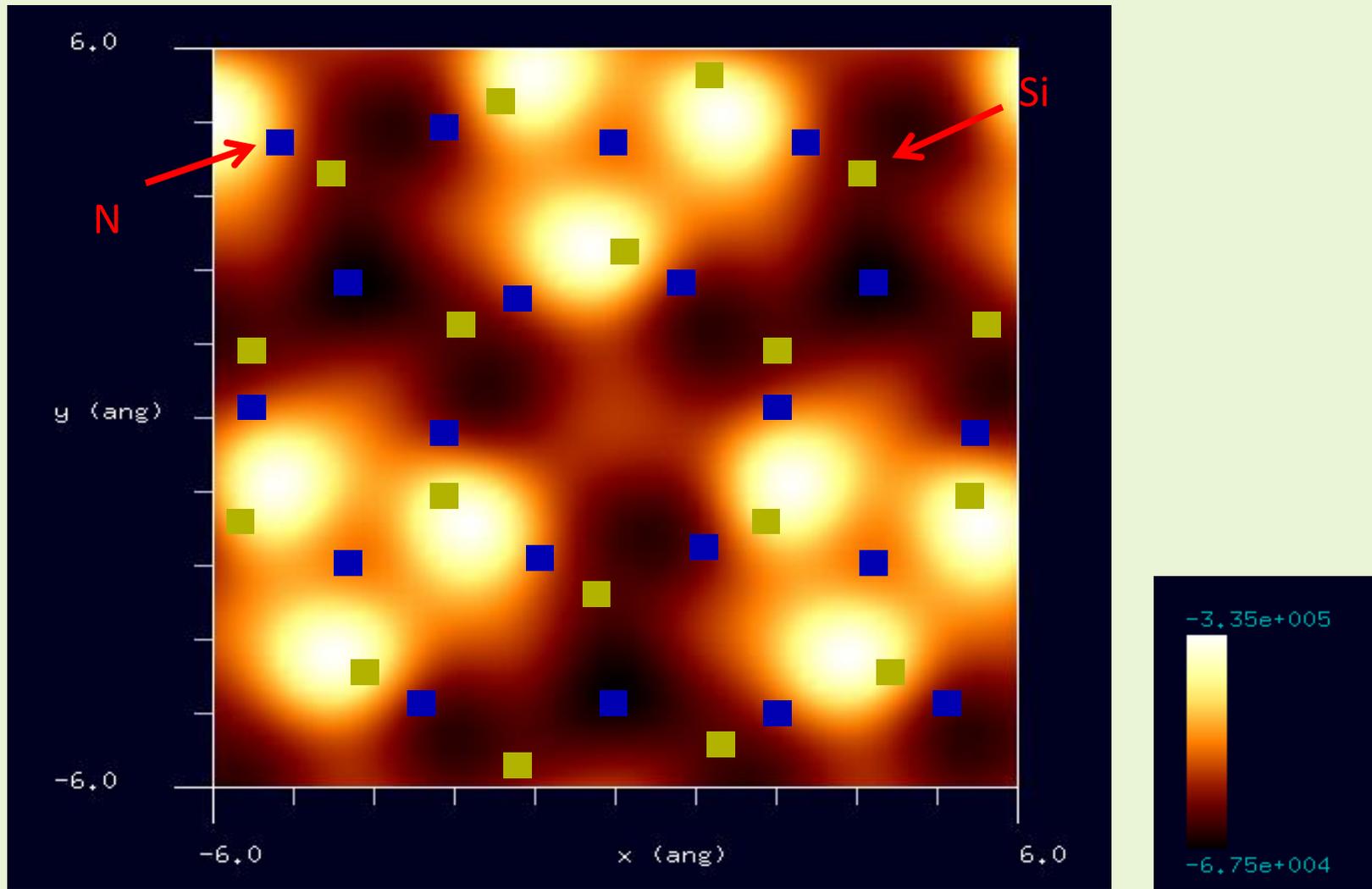
水素終端されたシリコン探針を使用
六方晶(空間群番号: 176)
(001)面



STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.0 Å
最大電流 4.09×10^5 nA、最小電流 5.86×10^4 nA



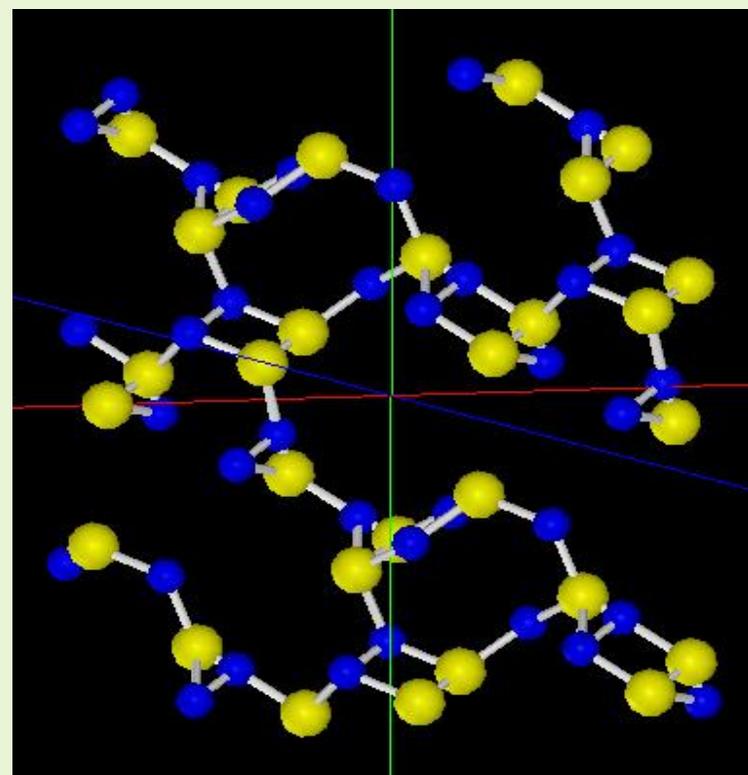
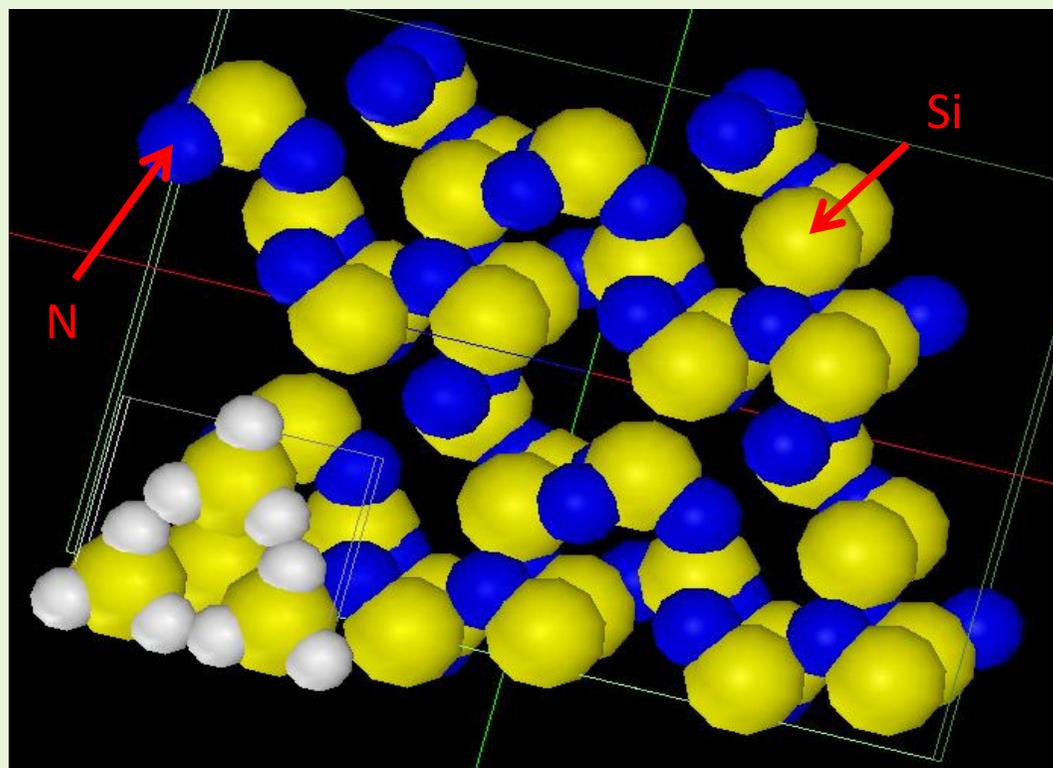
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離2.0Å
最大電流 -6.75×10^4 nA、最小電流 -3.35×10^5 nA



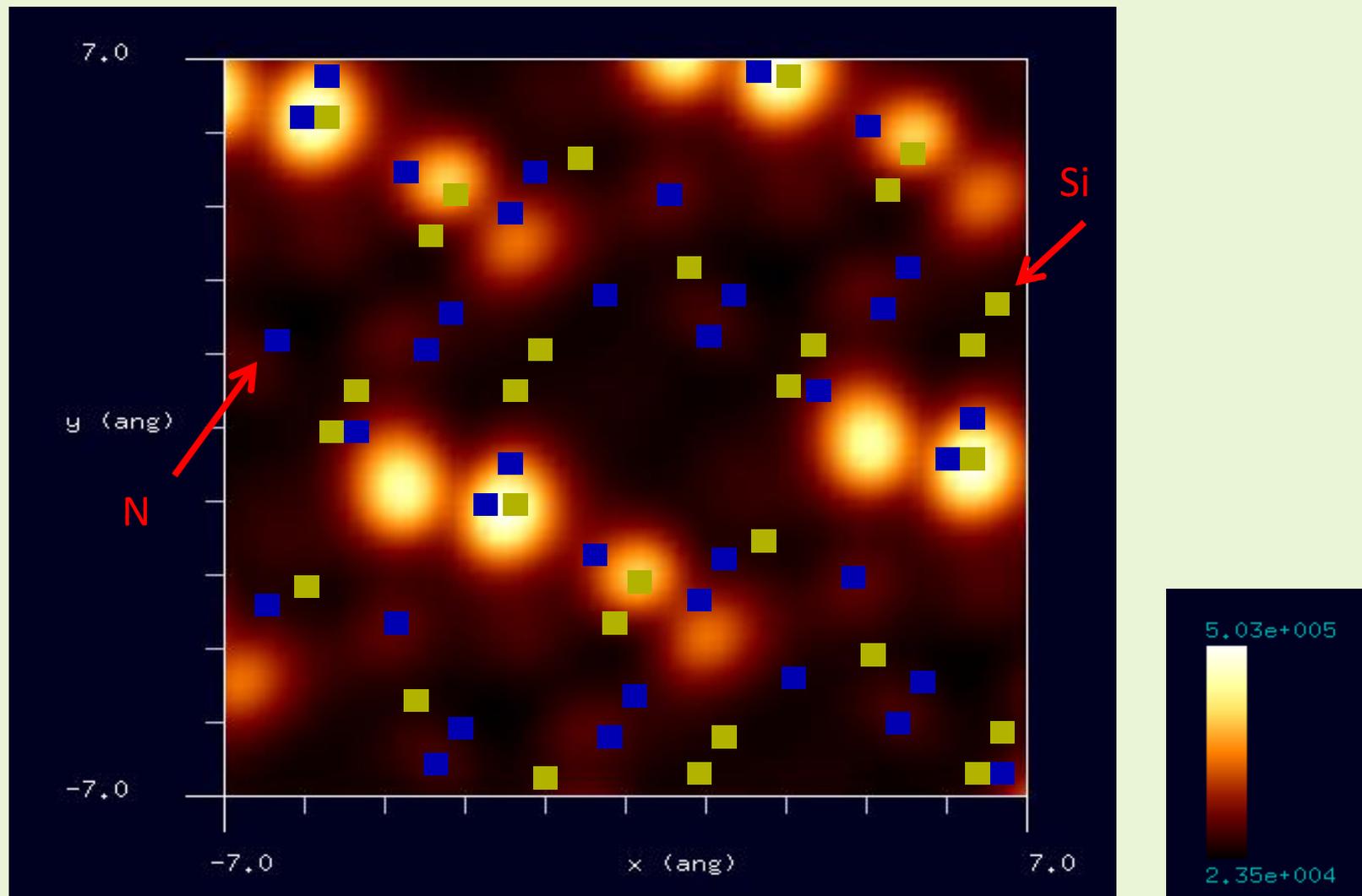
DFTB

Si_3N_4 (シリコンナイトライド、エンジン部品に使用されるファインセラミックス)

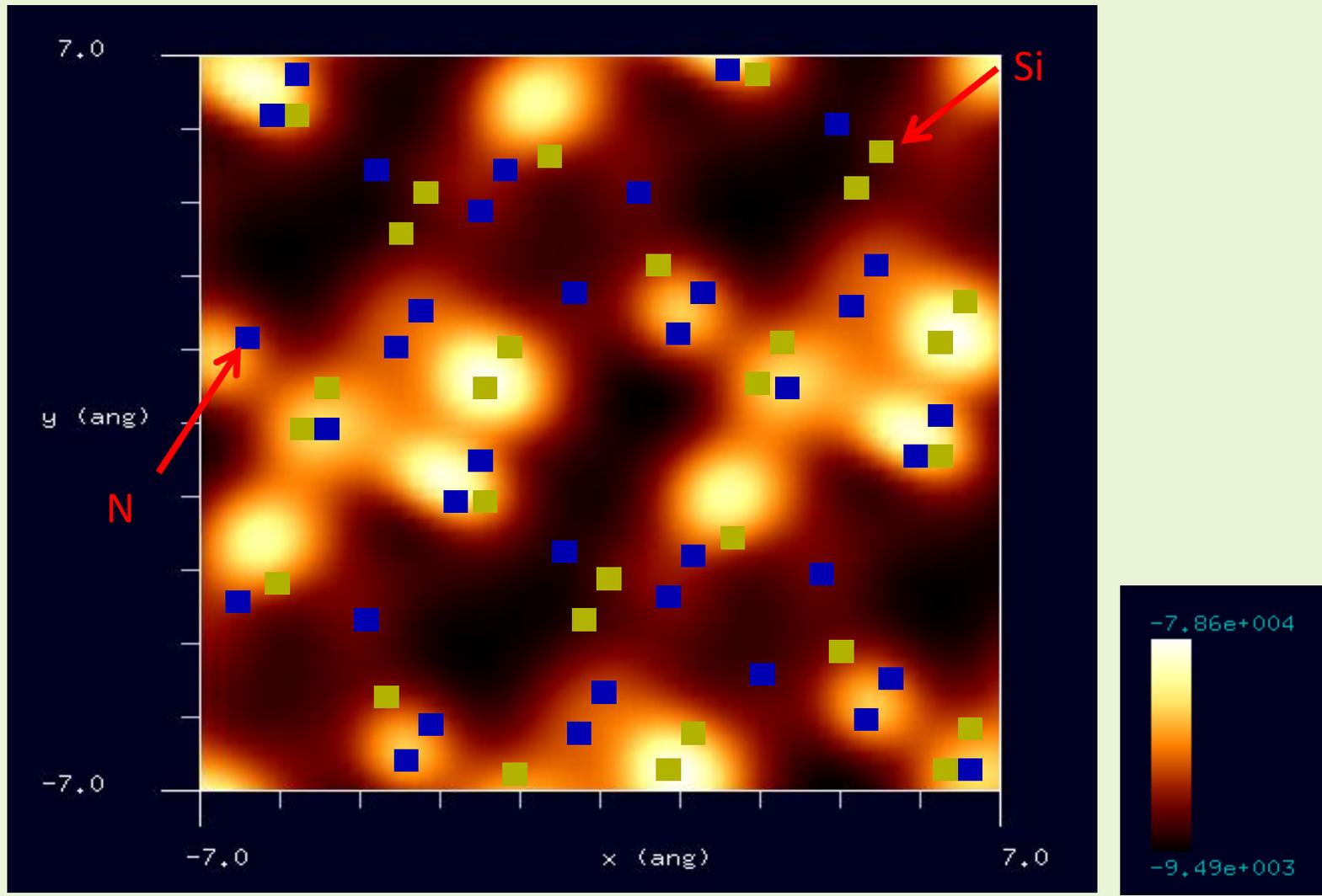
水素終端されたシリコン探針を使用
六方晶(空間群番号:176)
(111)面



STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.1 Å
最大電流 5.03×10^5 nA、最小電流 2.35×10^4 nA



STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.8 Å
最大電流 -9.49×10^3 nA、最小電流 -7.86×10^4 nA

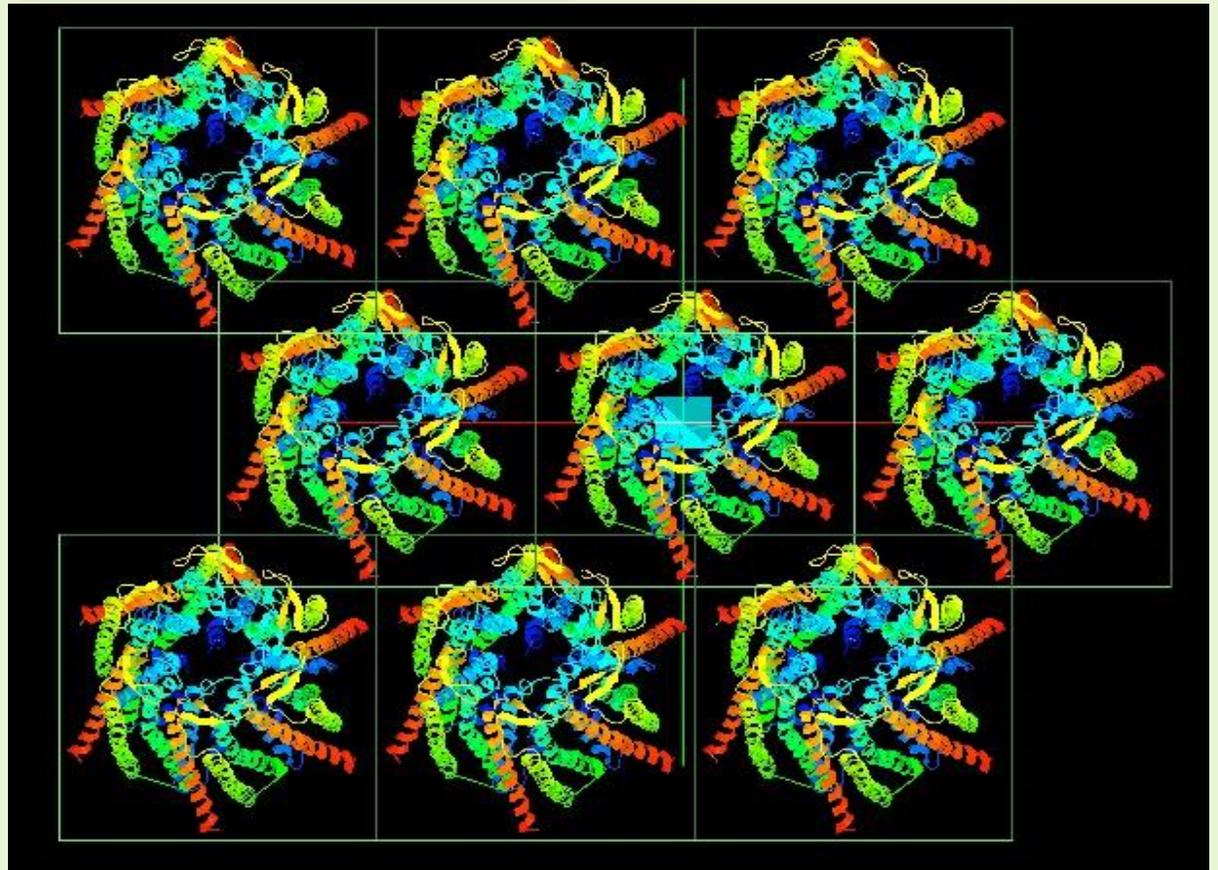
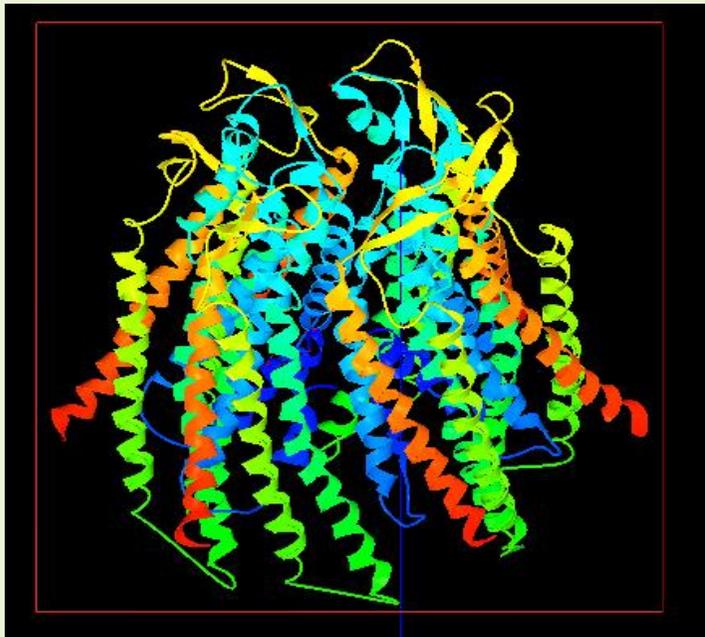


整列したコネクソン(connexon、タンパク質の複合体で細胞間のチャンネルの働きをする)

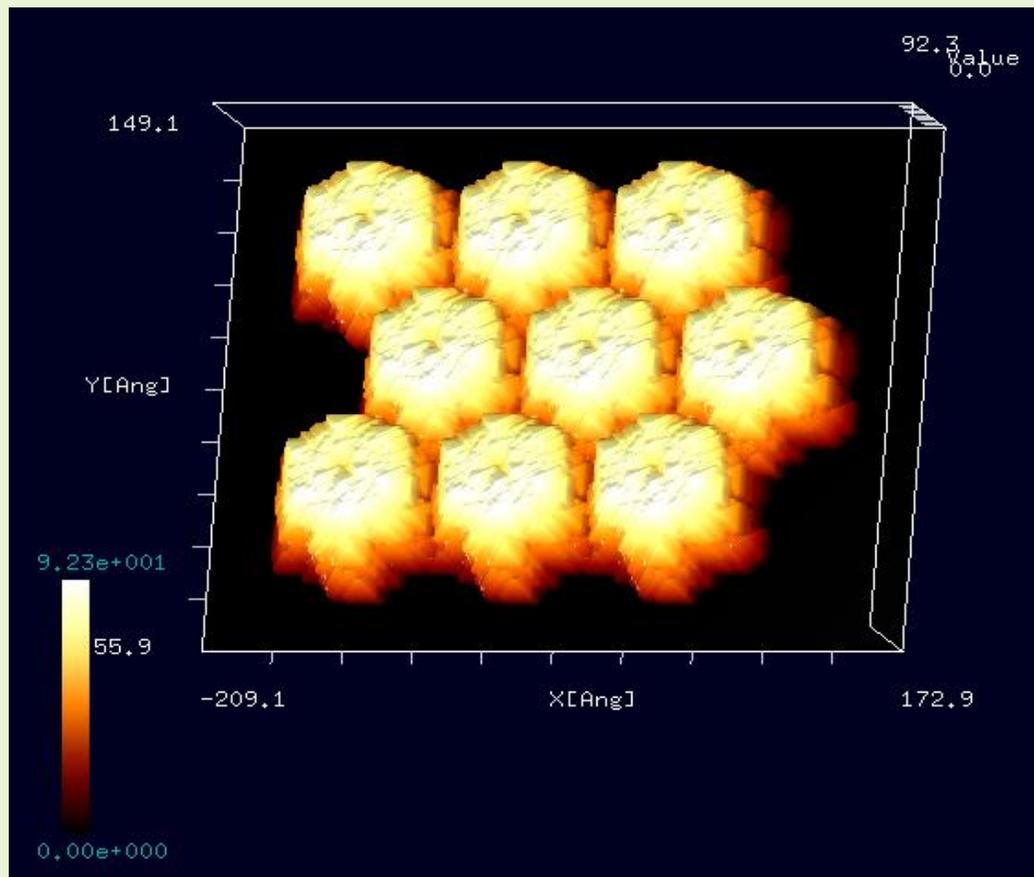
Protein Data Bank (<http://pdj.org/mine/summary/2zw3>)

2ZW3: Structure of the connexin-26 gap junction channel at 3.5 angstrom resolution

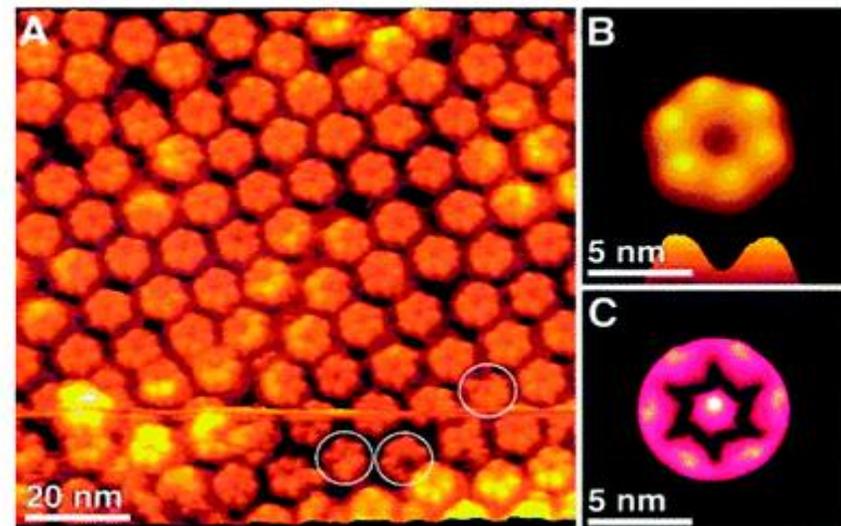
ピラミッド形探針を使用



GeoAFMによるAFMシミュレーション画像



AFM実験画像



F. Variola, 'Atomic force microscopy in biomaterials surface science', *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2015, 17, 2950.

生体物質のAFM像

実験例: http://www.asylumtec.co.jp/gallery/bio_new.html

生体物質の μm オーダーのAFM像が多数ある。

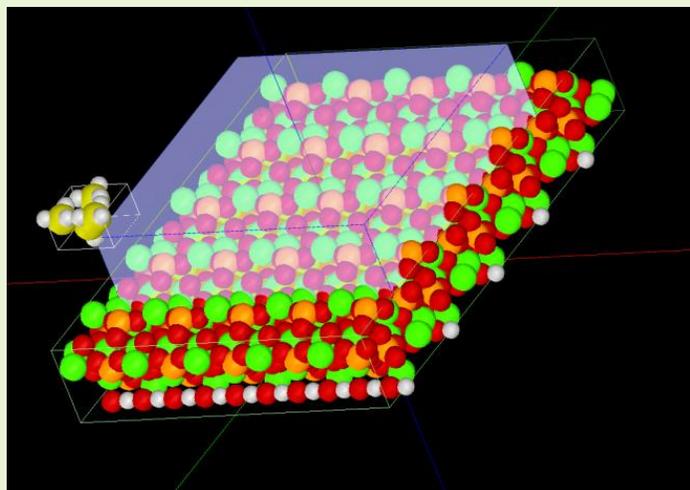
計算不可能

いずれも μm オーダーあるいはそれ以上の大きさ。

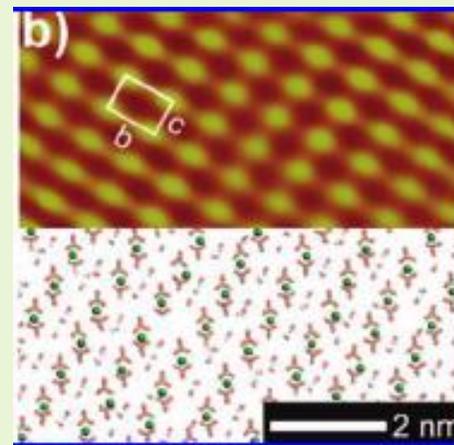
SPMシミュレータは μm オーダーのシミュレートに対応していない。

また、生体物質の分子構造データもしくは形状データを得ることができず、シミュレートできない。

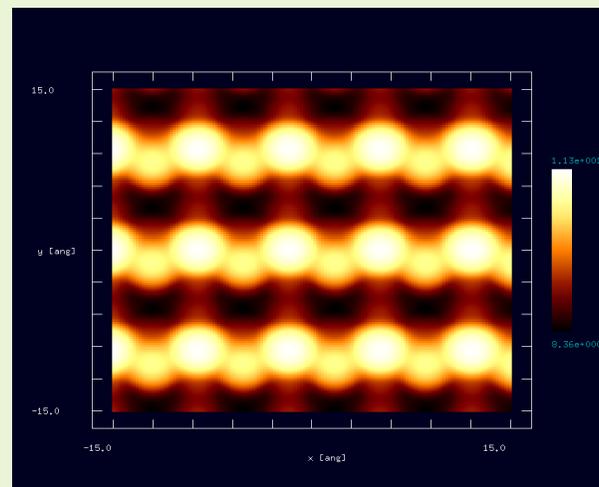
【CG】ハイドロキシアパタイト AFM



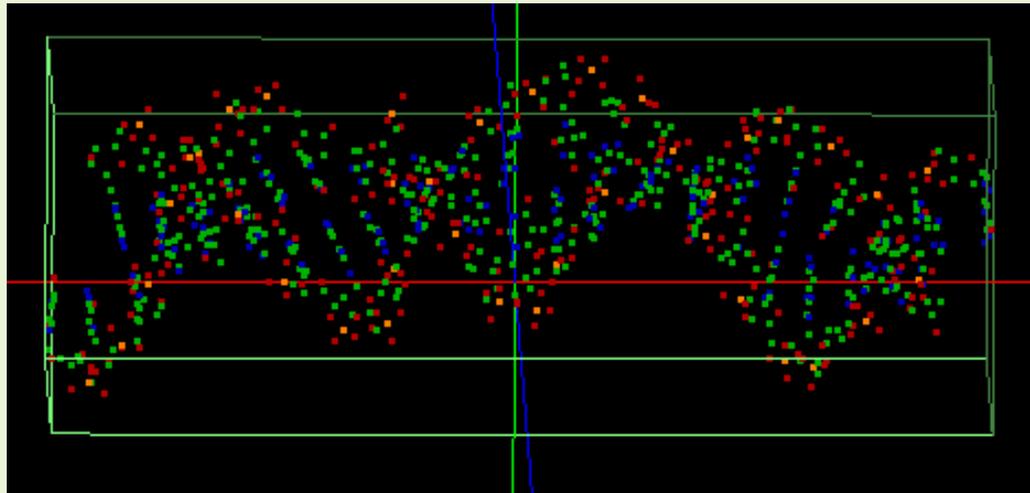
探針: シリコン
試料表面: HAP(100)



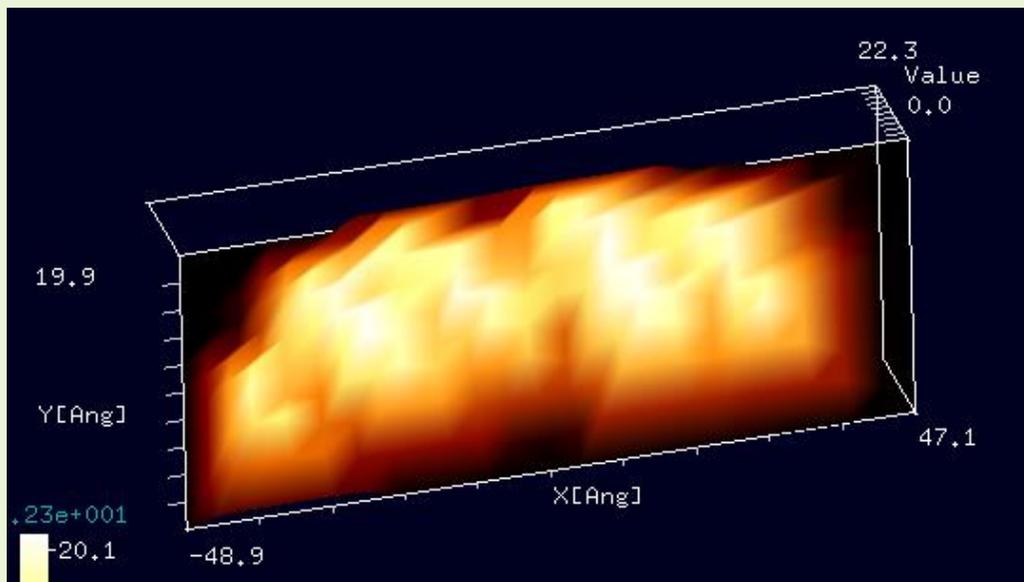
AFM実験結果
Langmuir, 24, 12446-12451 (2008)



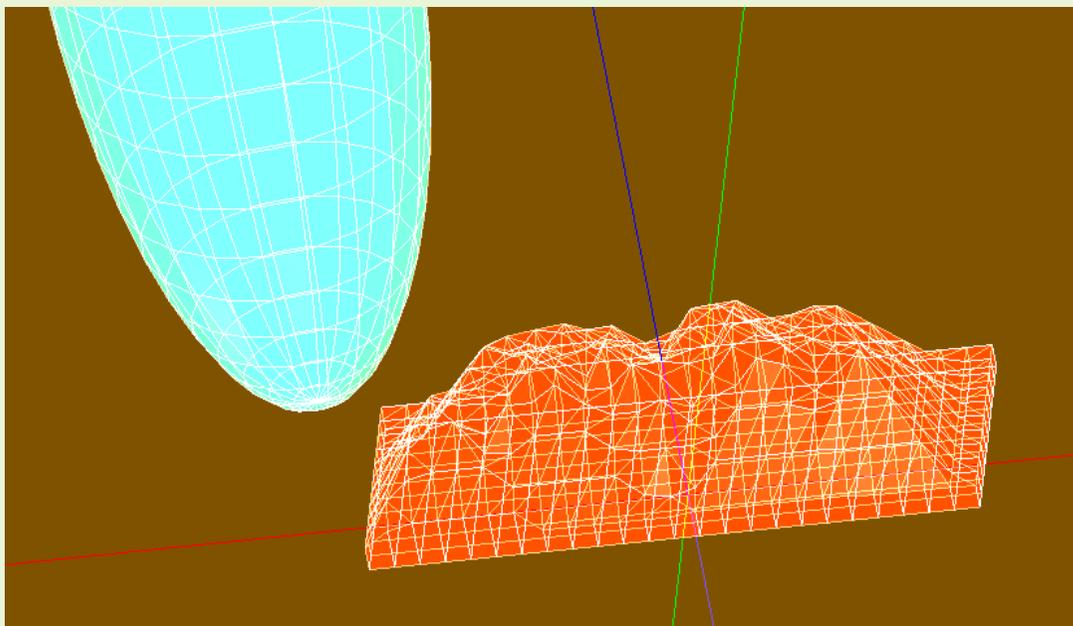
CGAFM 力一定像
原子位置固定



DNAの分子構造図



DNA分子に対して、0.4[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

基板の電位: 0[V]

探針-試料間の最短距離: 0.875[nm]

試料形状 横: 9.6[nm]

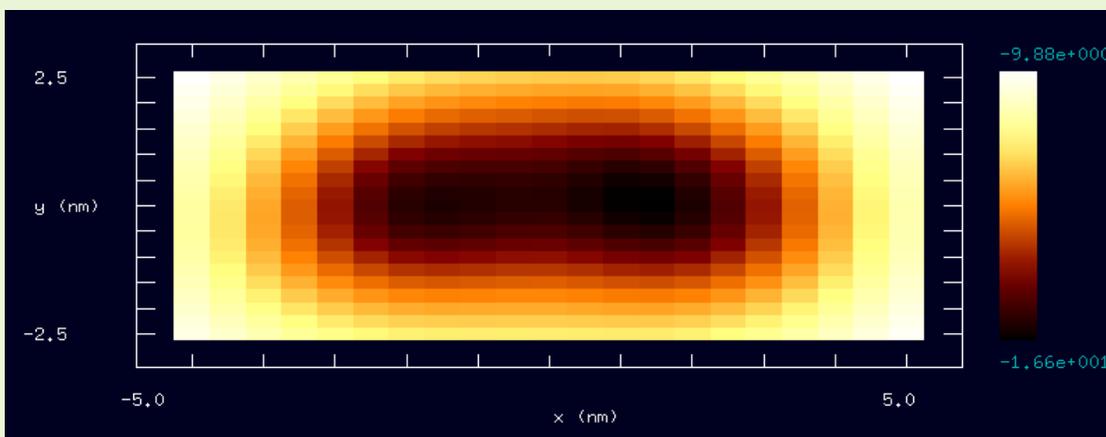
縦: 4[nm]

高さ: 2.63[nm]

試料の比誘電率: 80.4

試料表面の電荷密度:

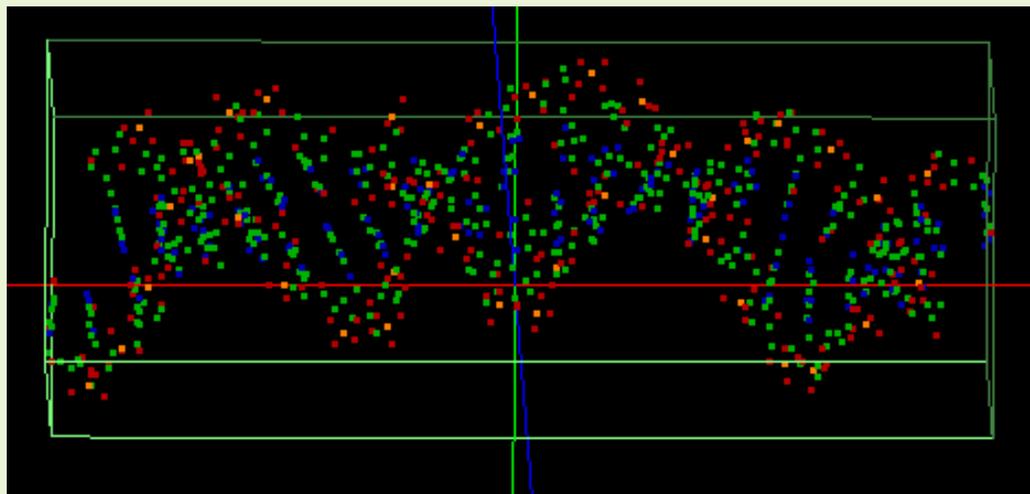
$1.0E-6[C/m^2]$



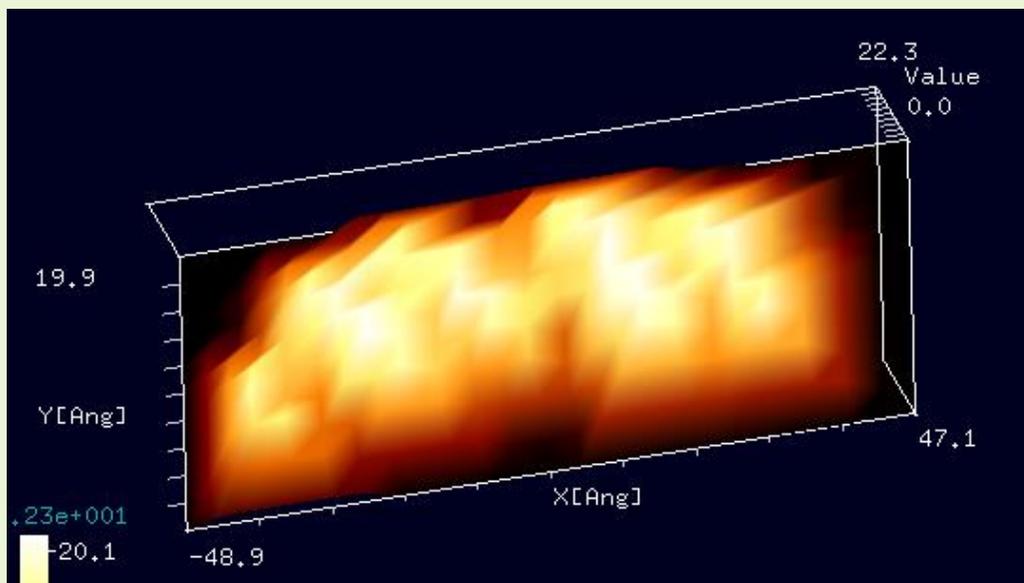
探針の感じるz方向の
力の分布

最大値: $-9.88[pN]$

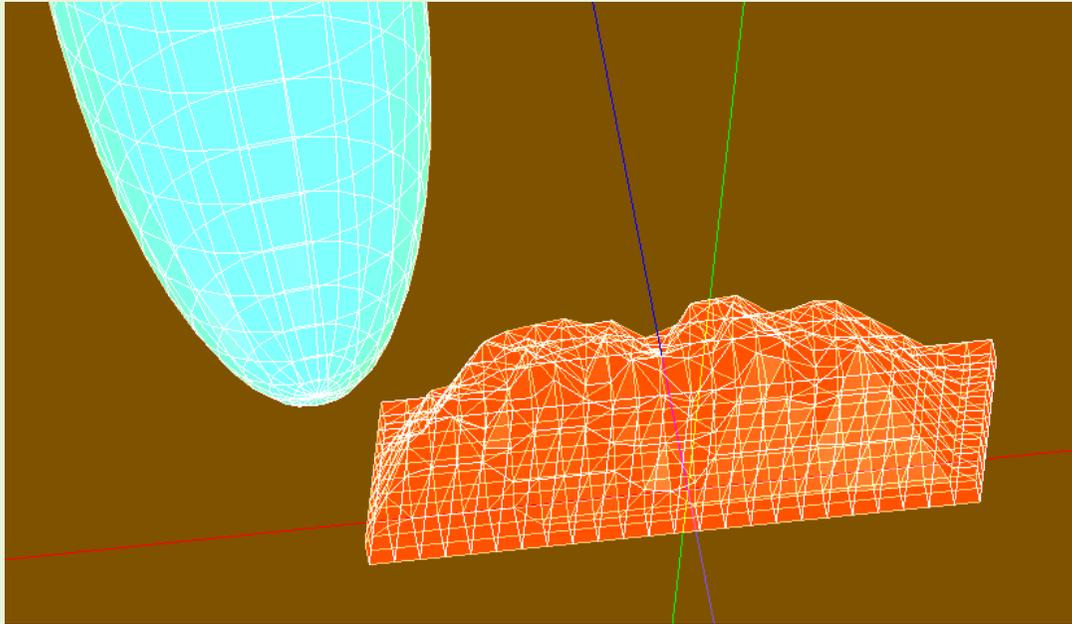
最小値: $-16.6[pN]$



DNAの分子構造図



DNA分子に対して、0.4[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]

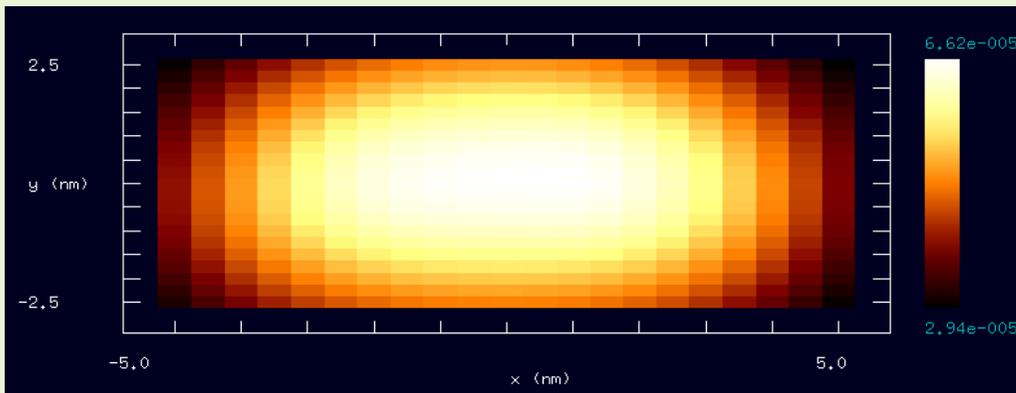
探針-試料間の最短距離: 0.875[nm]

試料形状 横: 9.6[nm]
縦: 4[nm]
高さ: 2.63[nm]

試料の比誘電率: 80.4

試料表面の電荷密度:

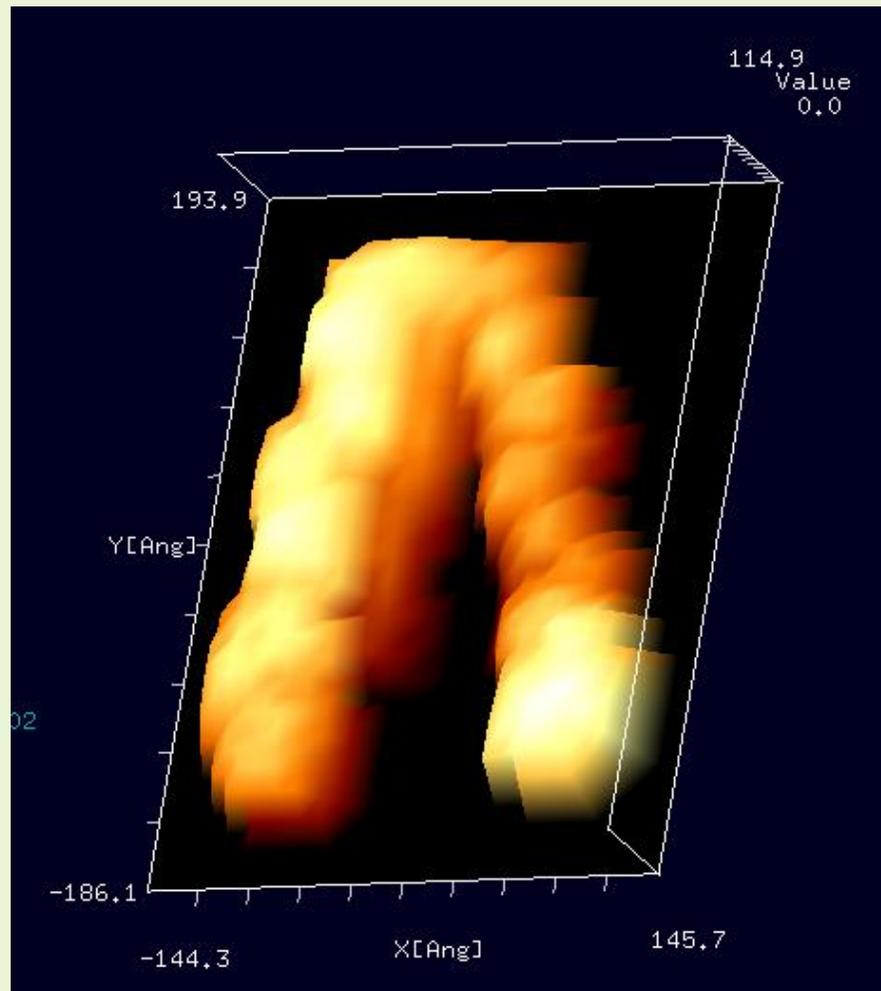
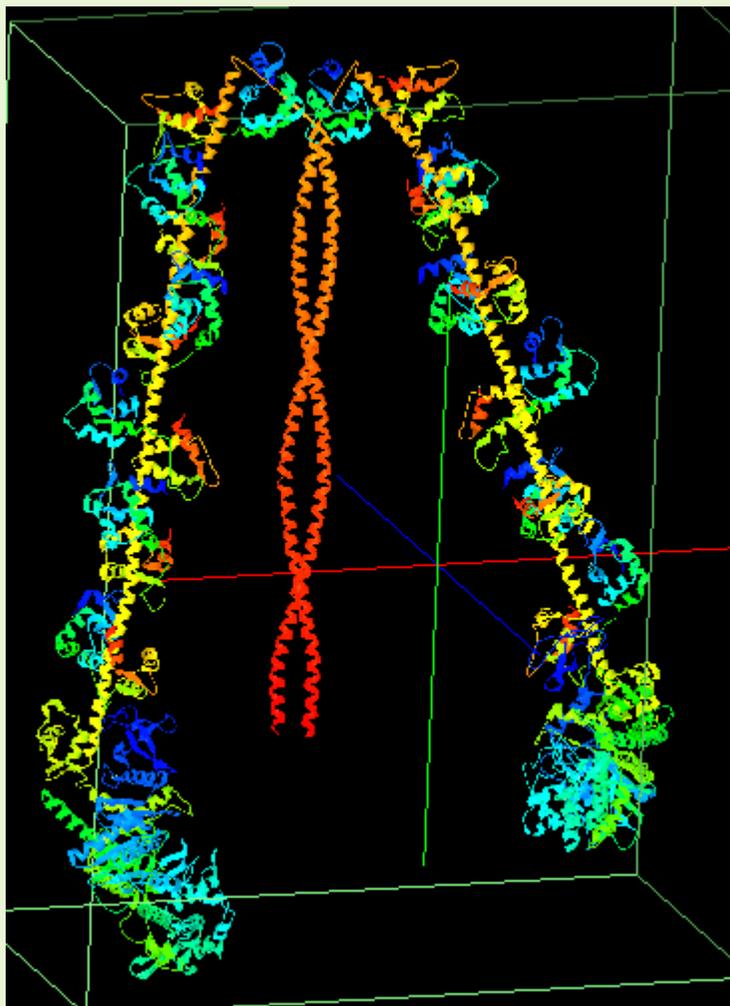
$1.0\text{E}-6[\text{C}/\text{m}^2]$



試料のLCPD像

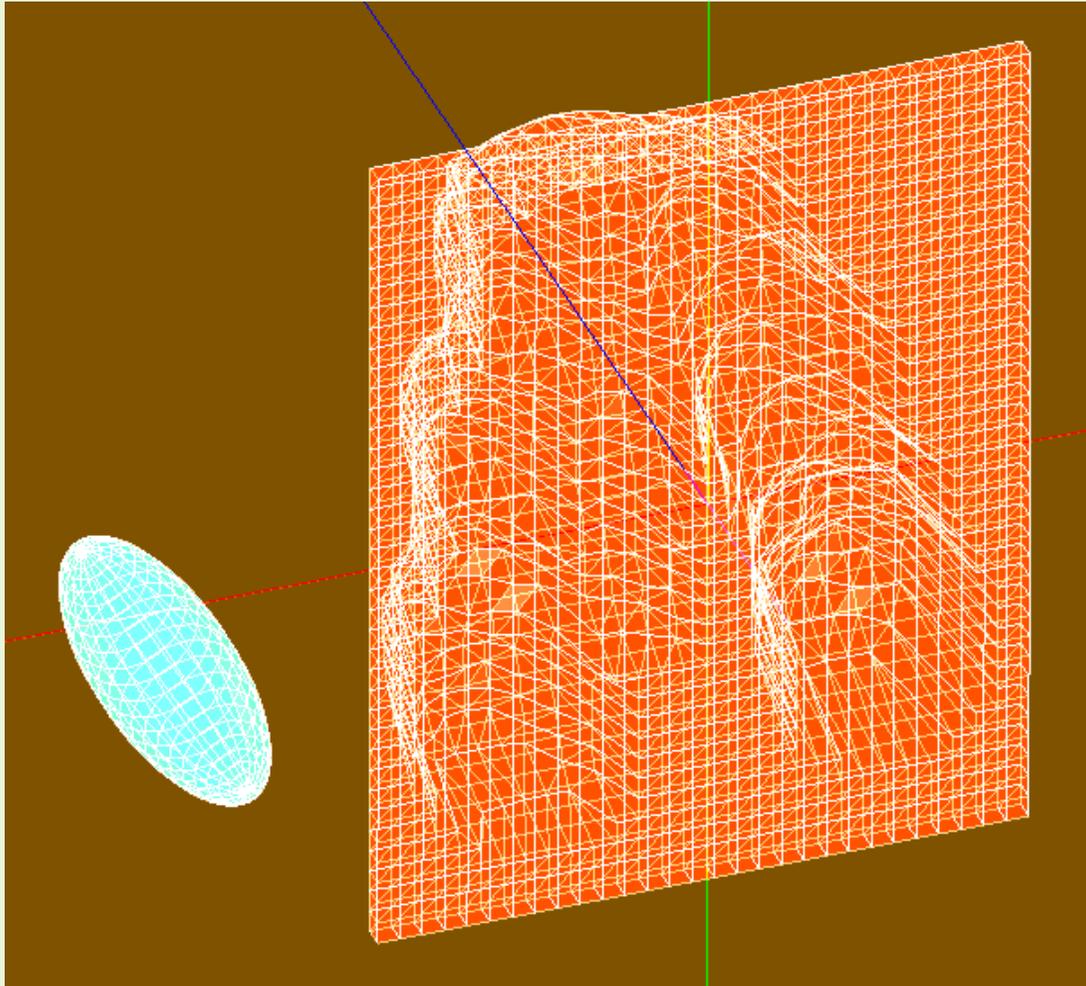
最大値: $6.62\text{E}-5[\text{V}]$

最小値: $2.94\text{E}-5[\text{V}]$



DNAの分子構造図

DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

基板の電位: 0[V]

探針-試料間の最短距離: 2.01[nm]

試料形状 横: 29[nm]

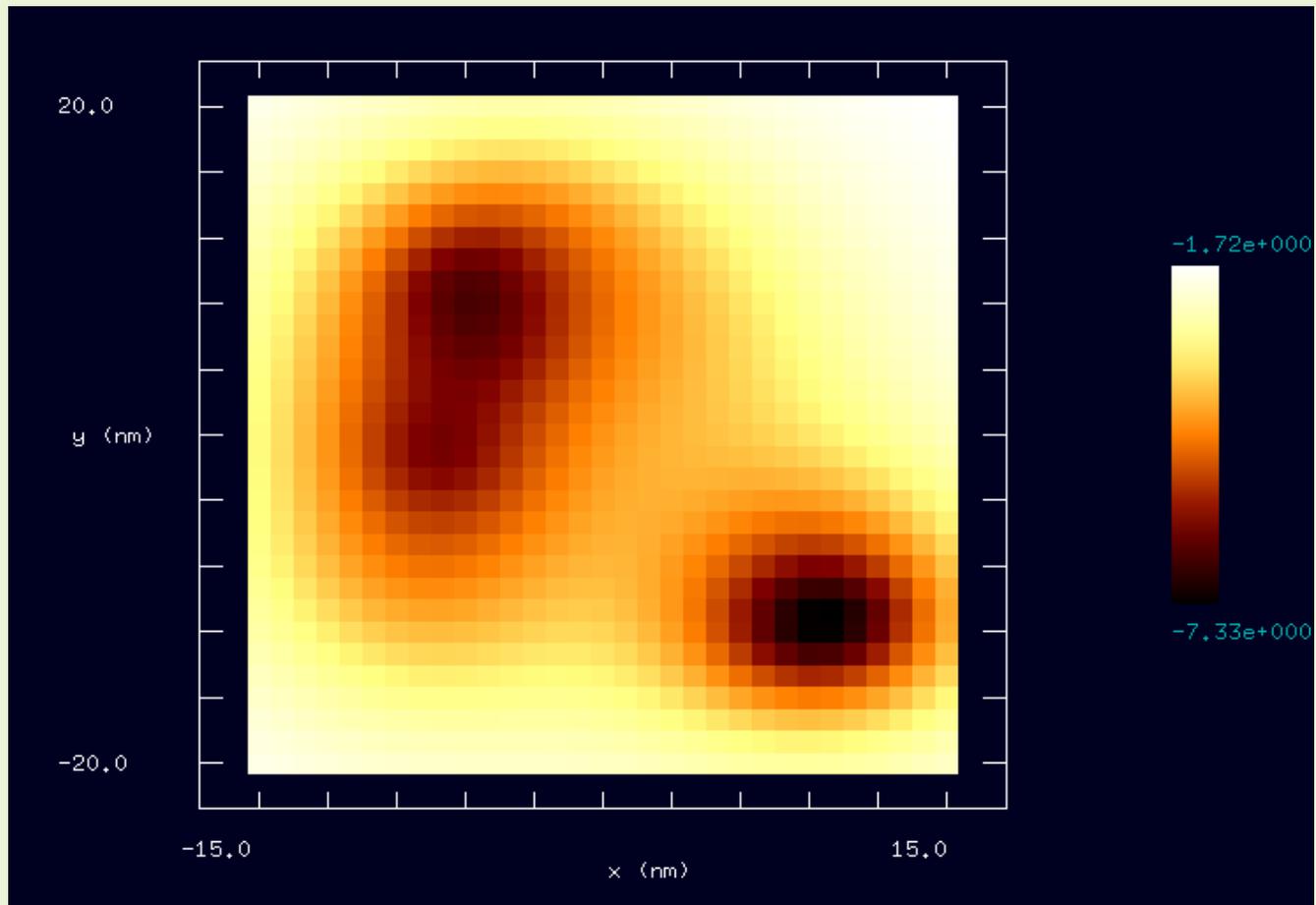
縦: 38[nm]

高さ: 12.5[nm]

試料の比誘電率: 80.4

試料表面の電荷密度:

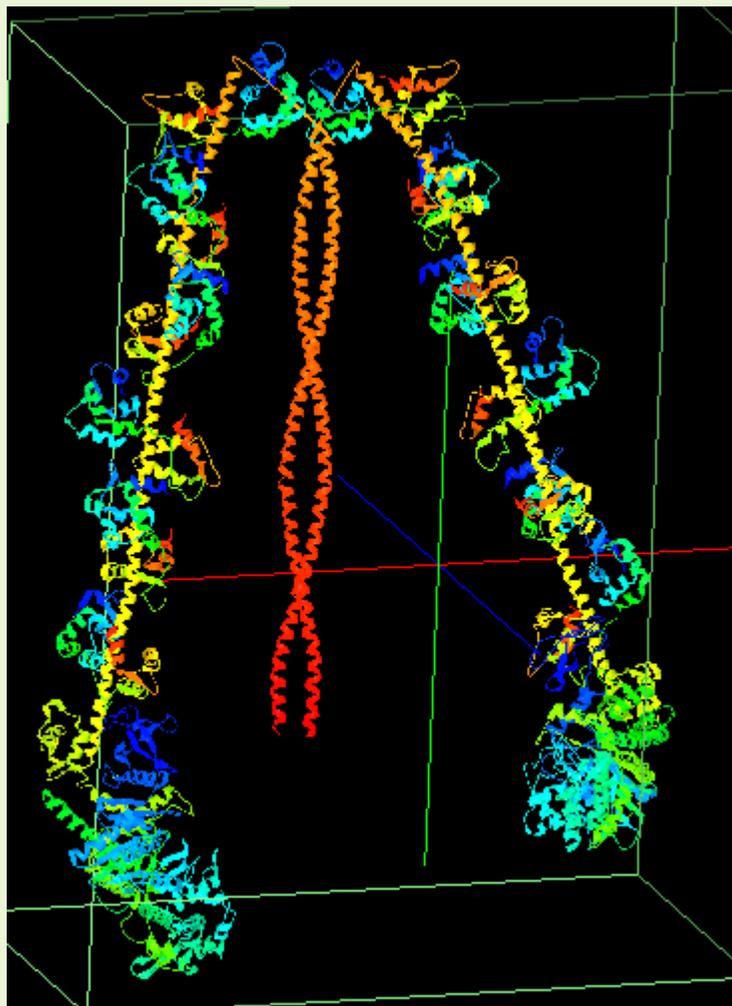
$1.0E-6[C/m^2]$



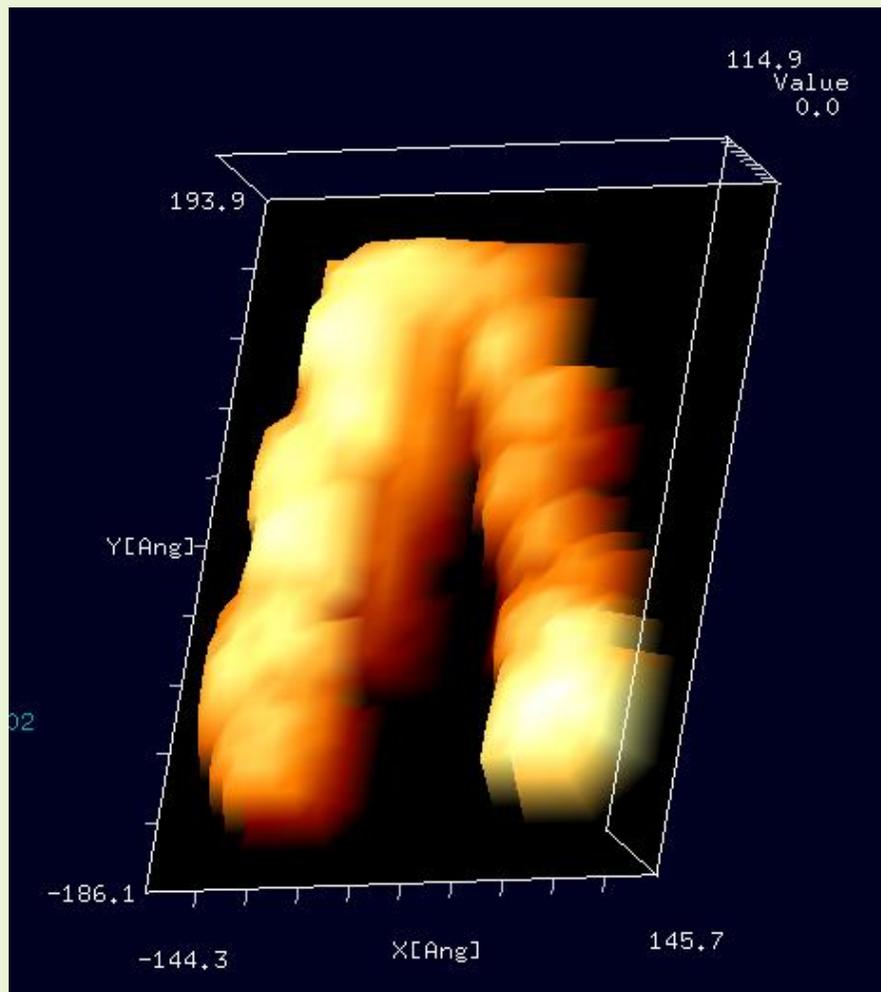
探針の感じるz方向の力の分布

最大値: -1.72 [pN]

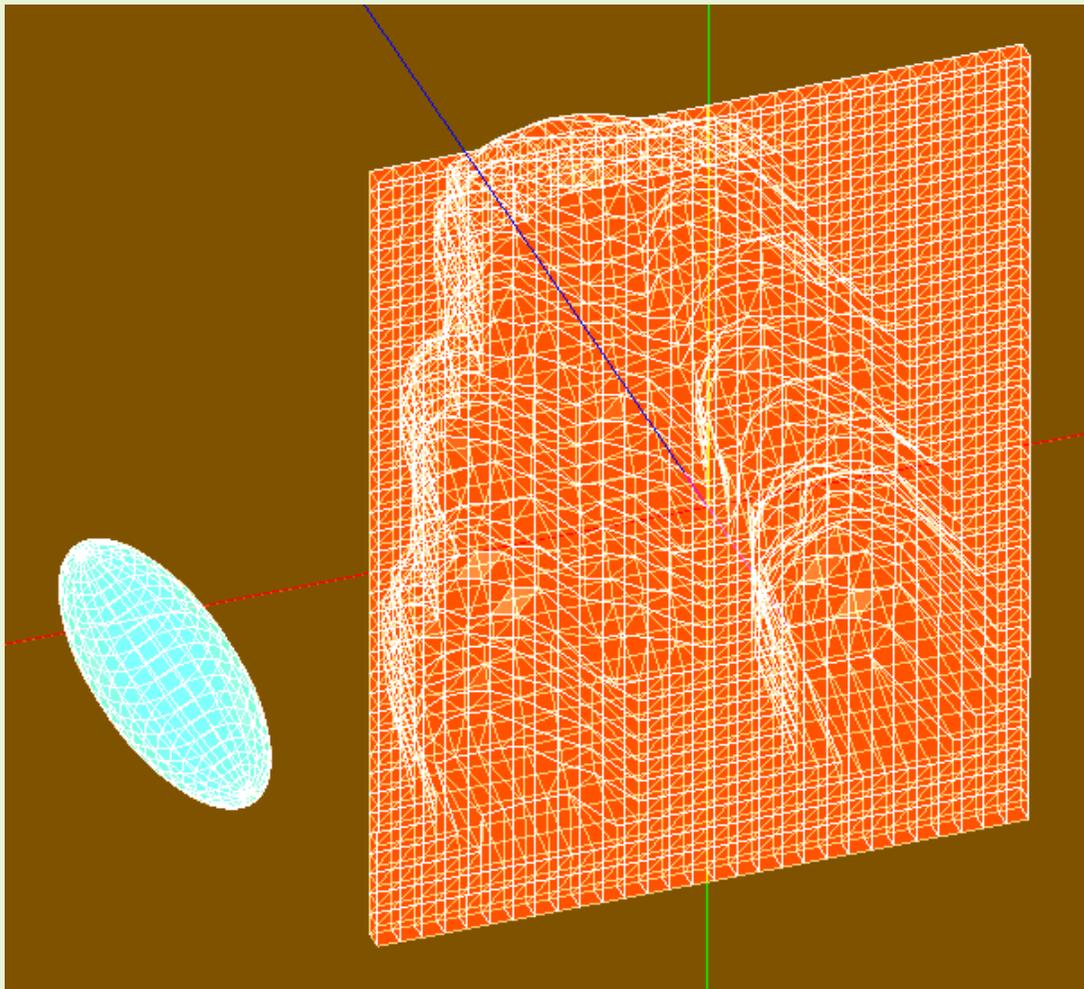
最小値: -7.33 [pN]



DNAの分子構造図



DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

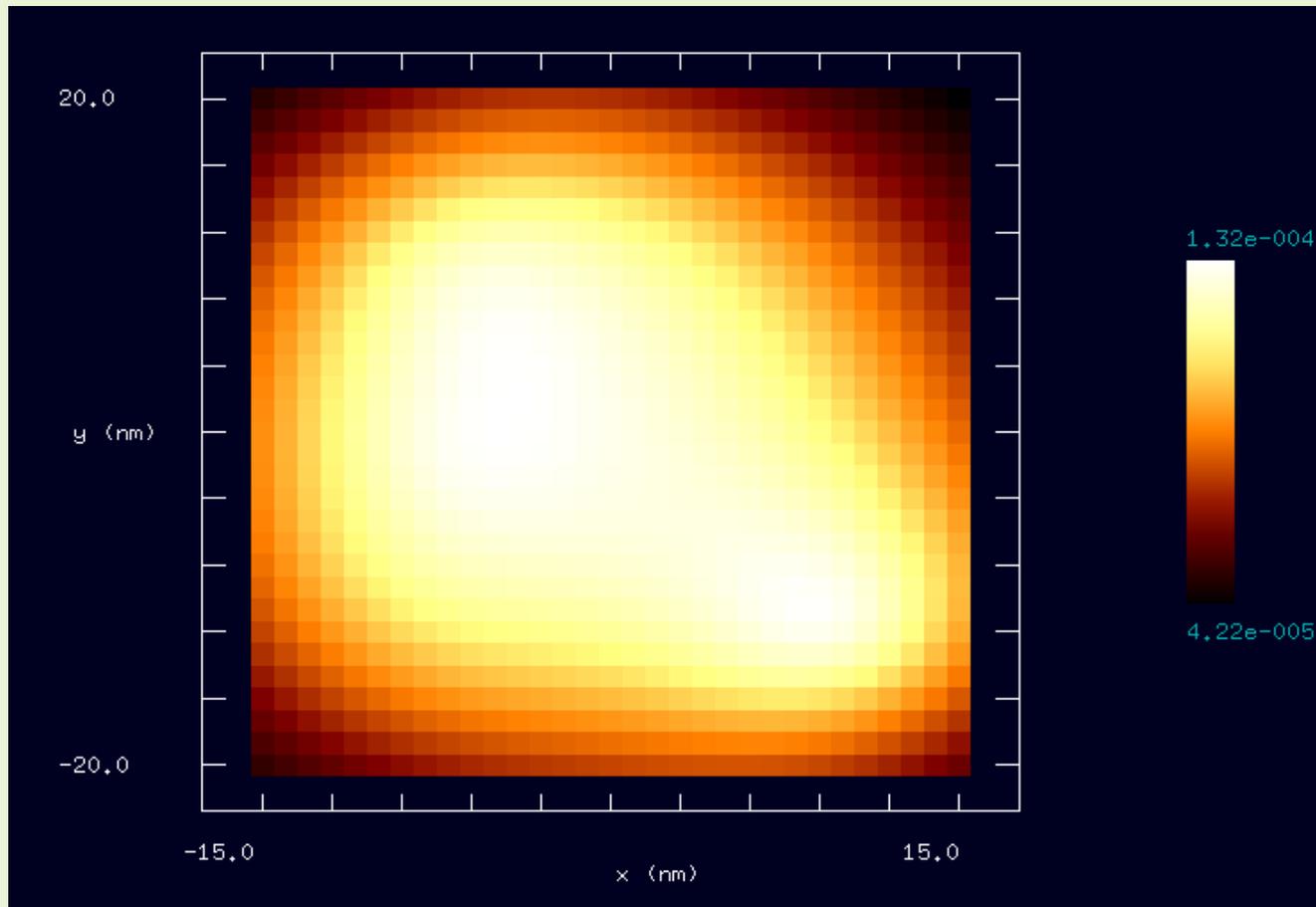
基板の電位: 0[V]

探針-試料間の最短距離: 2.01[nm]

試料形状 横: 29[nm]
縦: 38[nm]
高さ: 12.5[nm]

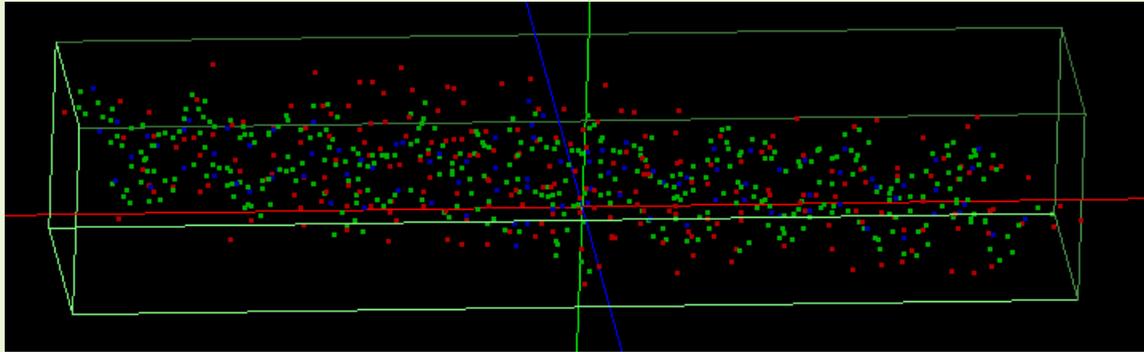
試料の比誘電率: 80.4

試料表面の電荷密度:
1.0E-6[C/m²]

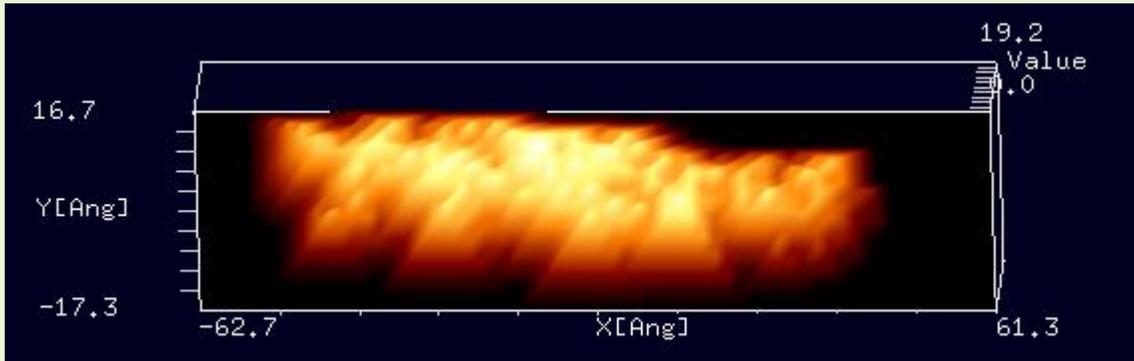


試料のLCPD像
最大値: 1.32E-4[V]
最小値: 4.22E-5[V]

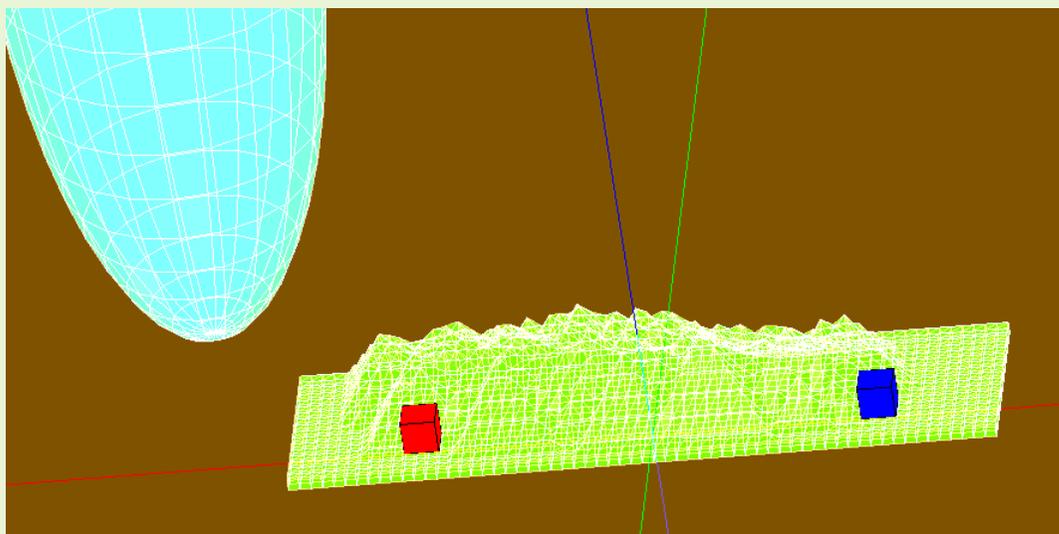
正負の電荷が埋め込まれたコラーゲン分子に対して探針が感じる力の分布



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像

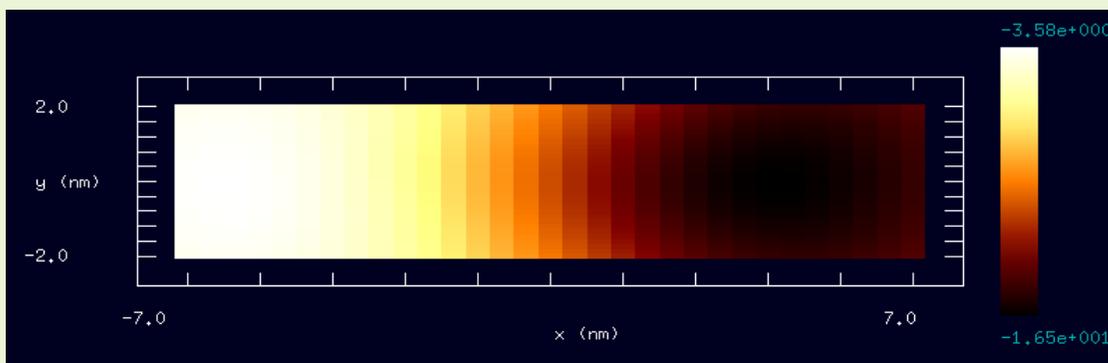


探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

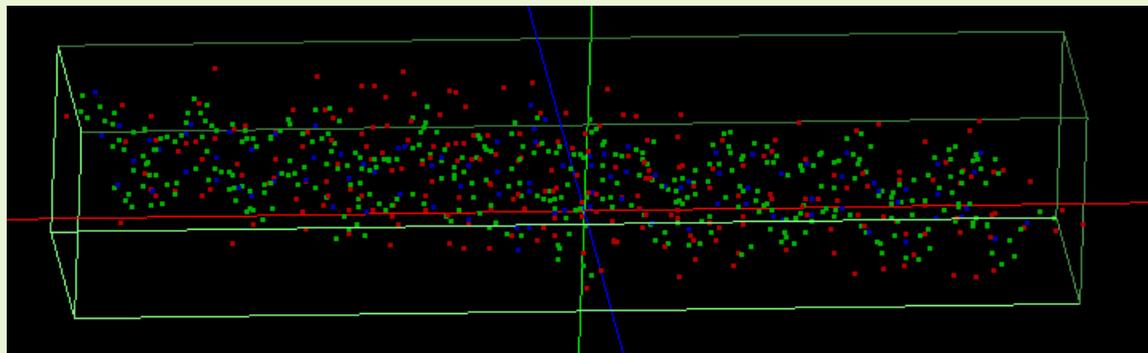
探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 1.38[nm]

試料形状 横: 12.4[nm]
縦: 3.4[nm]
高さ: 2.12[nm]

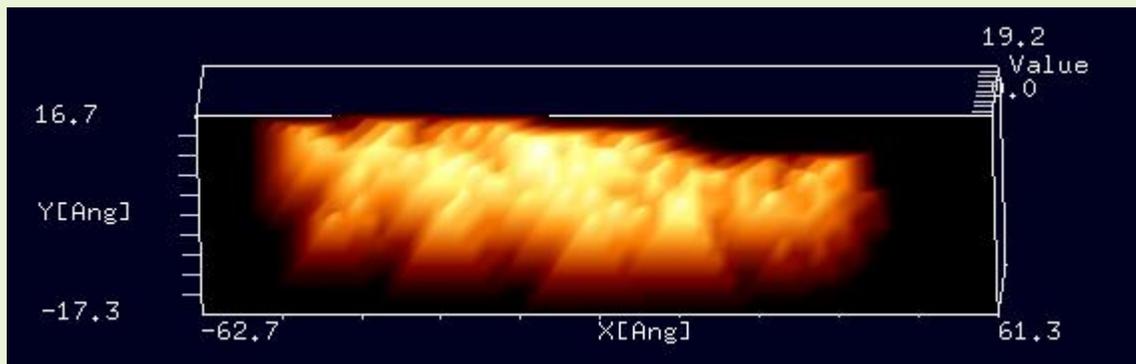
試料の比誘電率: 80.4
試料内部に、正負二個の電荷
が配置されている



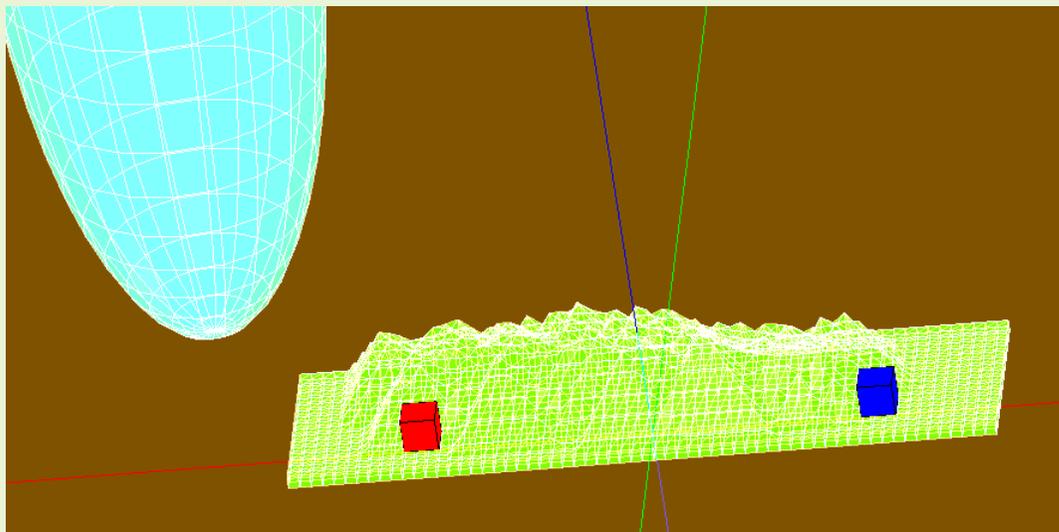
探針の感じるz方向の
力の分布
最大値: -3.58[pN]
最小値: -16.5[pN]



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像

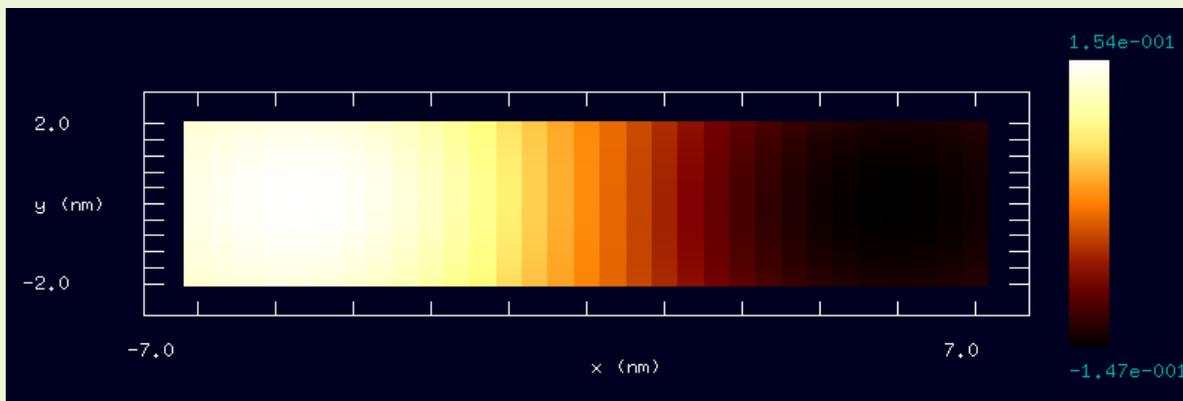


探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 1.38[nm]

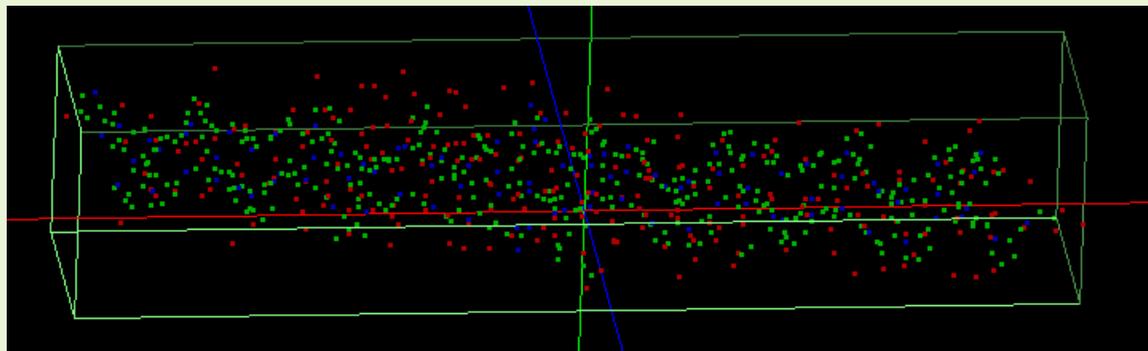
試料形状 横: 12.4[nm]
縦: 3.4[nm]
高さ: 2.12[nm]

試料の比誘電率: 80.4
試料内部に、正負二個の電荷
が配置されている

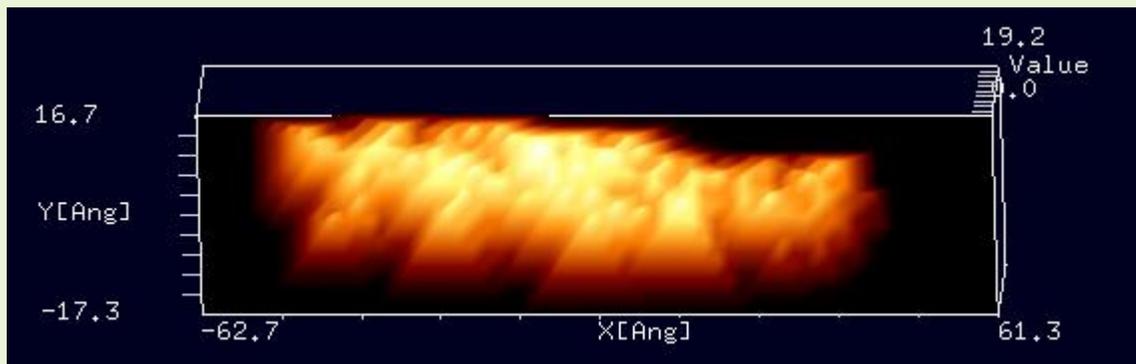


試料のLCPD像
最大値: 1.54E-1[V]
最小値: -1.47E-1[V]

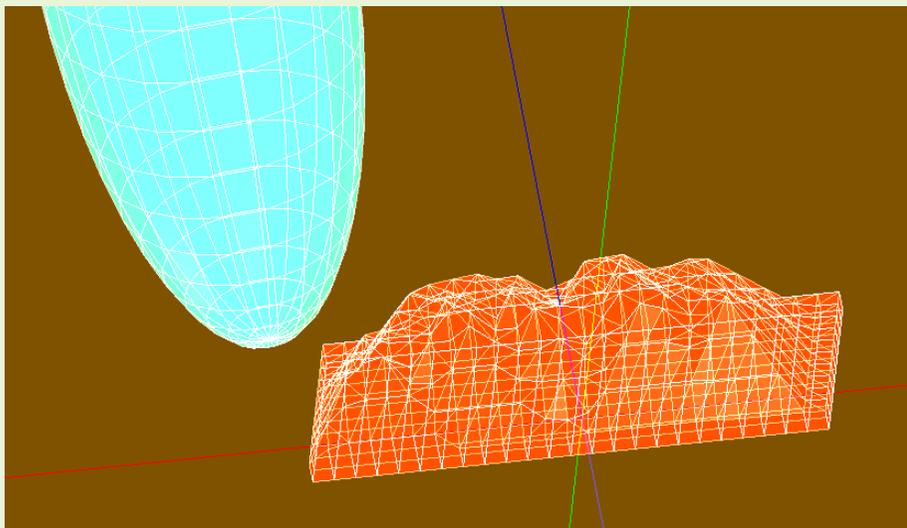
均一な表面電荷を持つコラーゲン分子に対して探針が感じる力の分布



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像

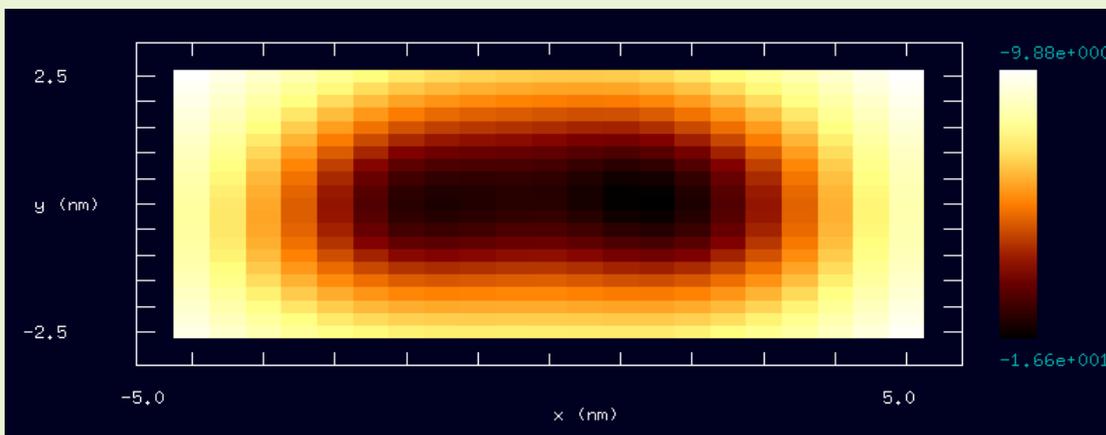


探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

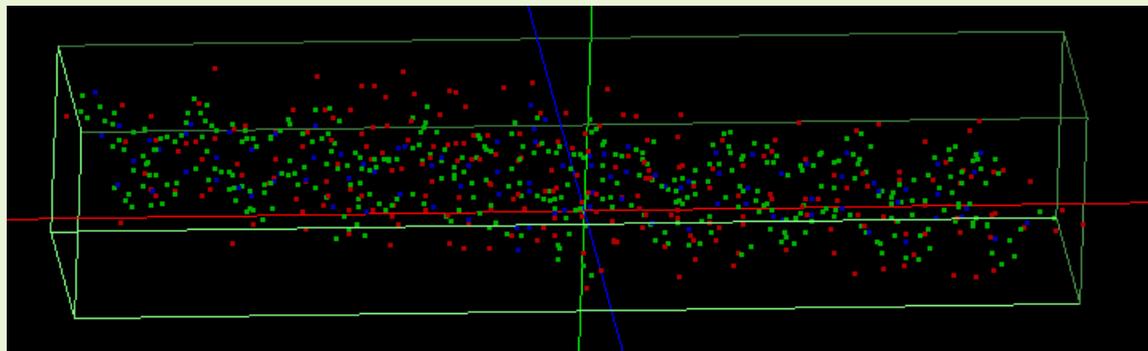
探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 1.38[nm]

試料形状 横: 12.4[nm]
縦: 3.4[nm]
高さ: 2.12[nm]

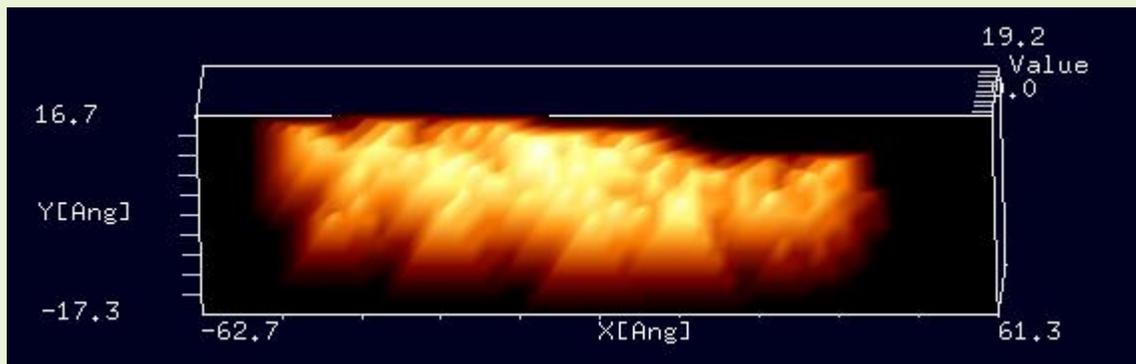
試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
1.0E-6[C/m²]



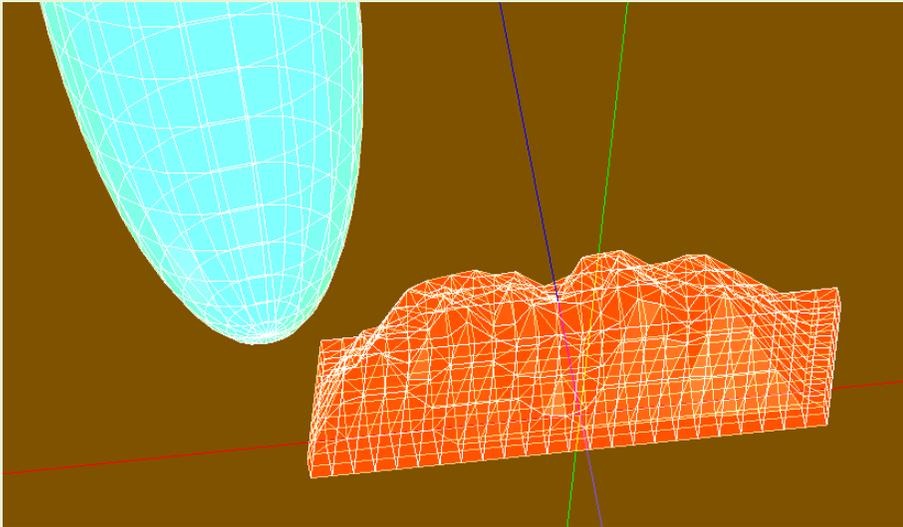
探針の感じるz方向の
力の分布
最大値: -9.88[pN]
最小値: -16.6[pN]



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像

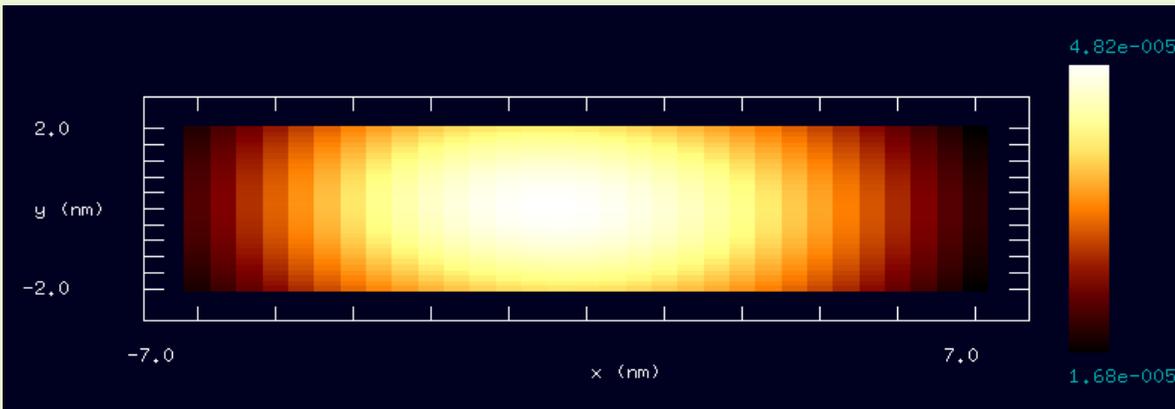


探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 1.38[nm]

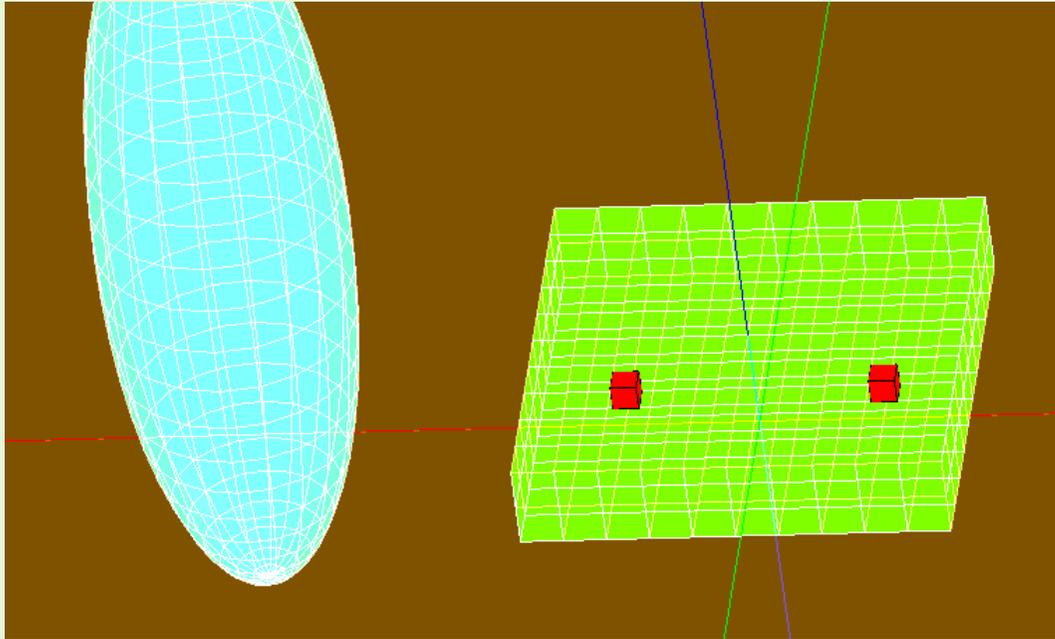
試料形状 横: 12.4[nm]
縦: 3.4[nm]
高さ: 2.12[nm]

試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
1.0E-6[C/m²]



試料のLCPD像
最大値: 4.82E-5[V]
最小値: 1.68E-5[V]

内部に二個の正電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO_2)に対して
探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

基板の電位: 0[V]

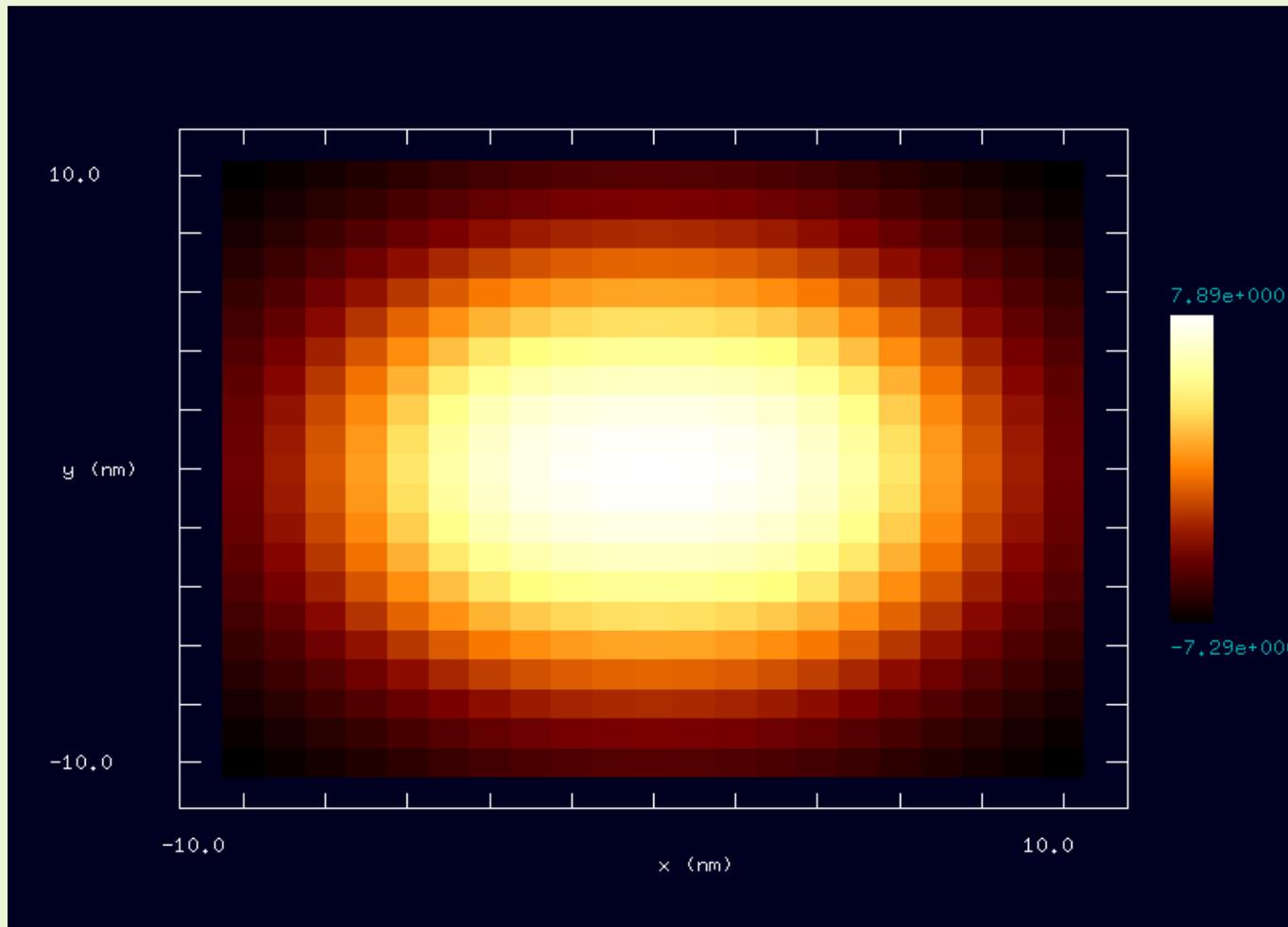
探針-試料間の最短距離: 1[nm]

試料の縦、横長さ: 10[nm]

試料の高さ: 2[nm]

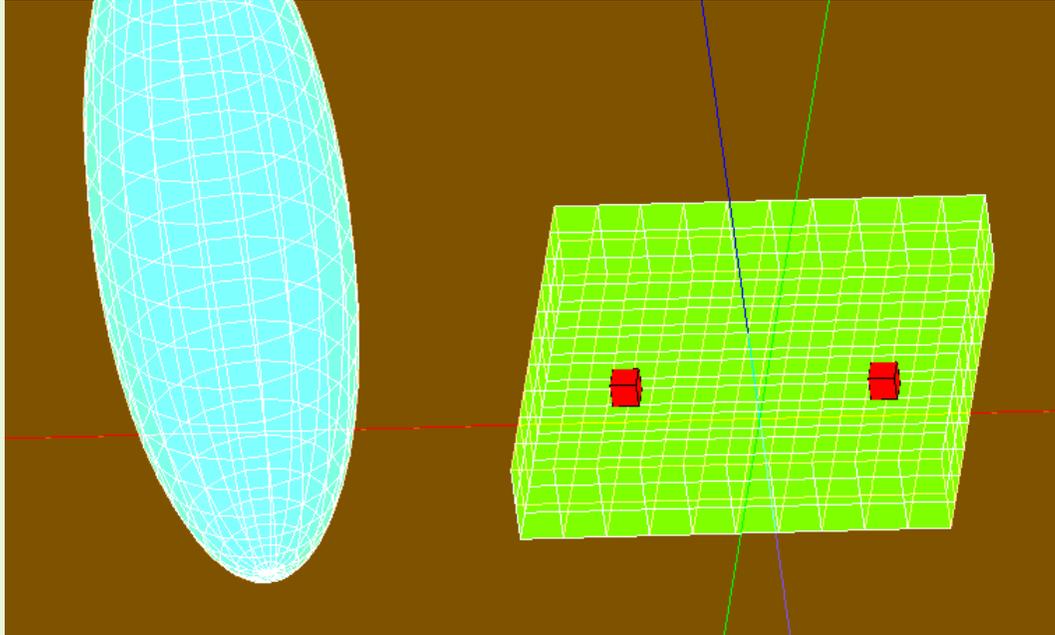
試料の比誘電率: 3.8

試料内部に、二個の正電荷が配置されている



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: 7.89[pN]
最小値: -7.29[pN]

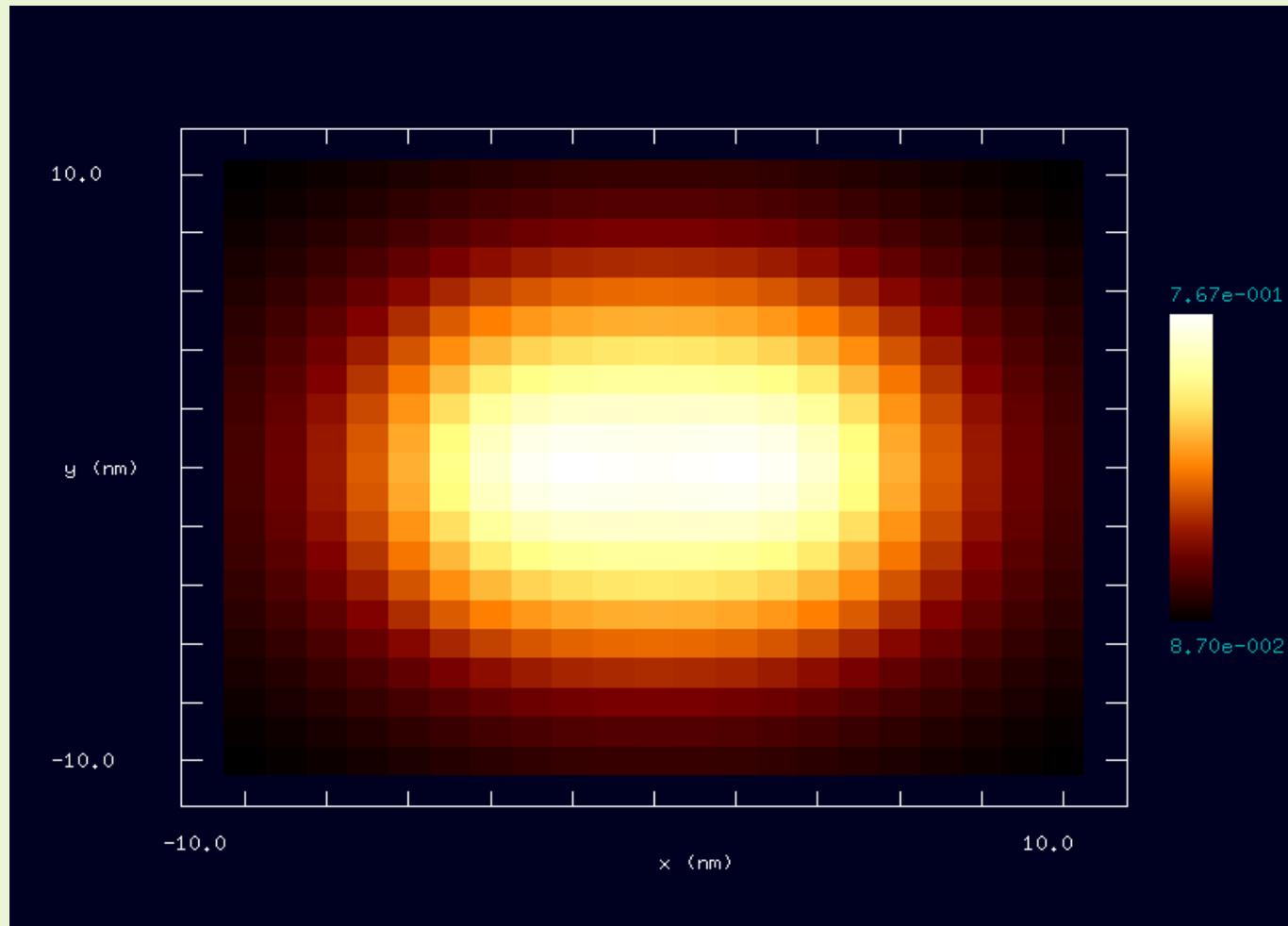
内部に二個の正電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO_2)の
LCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 1[nm]

試料の縦、横長さ: 10[nm]
試料の高さ: 2[nm]
試料の比誘電率: 3.8
試料内部に、二個の正電荷が配置されている

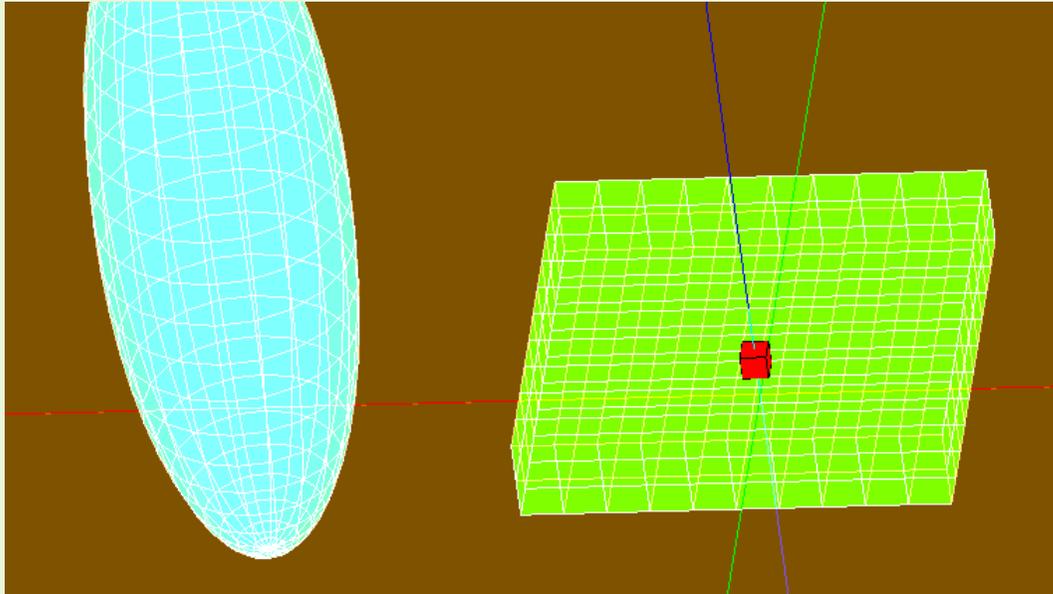


試料のLCPD像

最大値: 7.67E-1[V]

最小値: 8.70E-2[V]

内部に一個の正電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO_2)に対して
探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

基板の電位: 0[V]

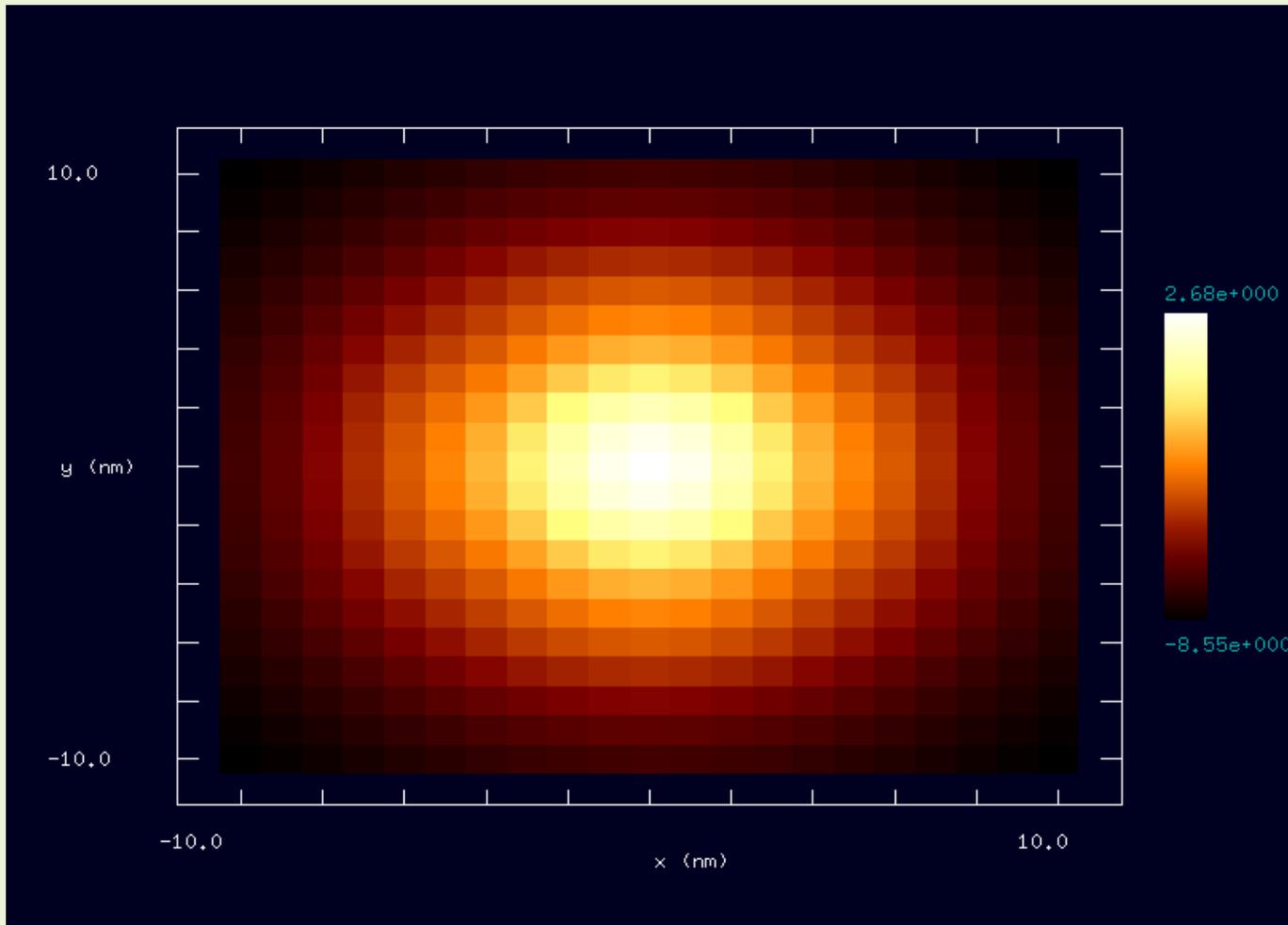
探針-試料間の最短距離: 1[nm]

試料の縦、横長さ: 10[nm]

試料の高さ: 2[nm]

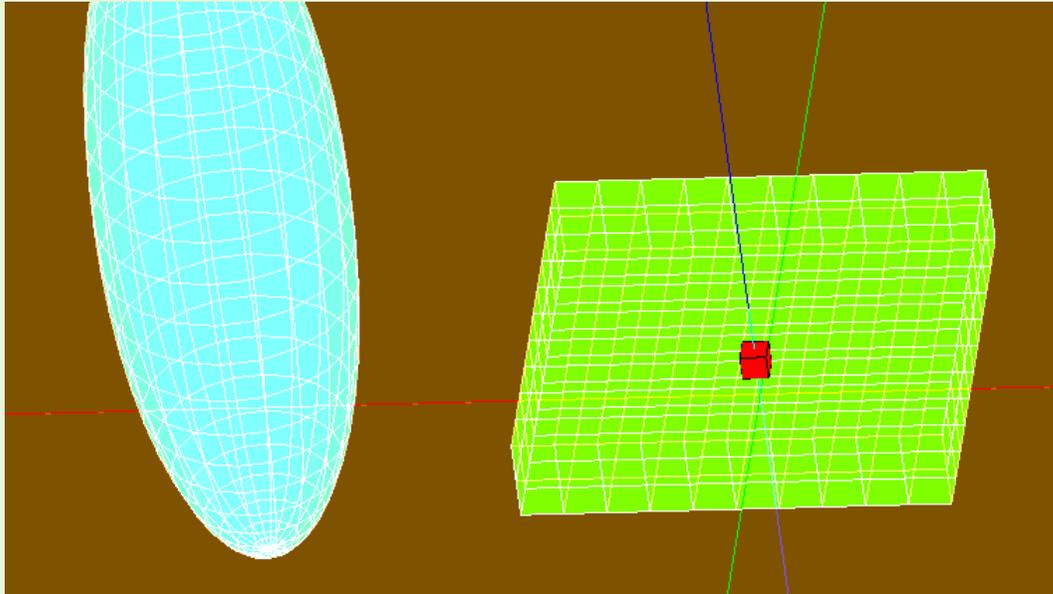
試料の比誘電率: 3.8

試料内部中央に、一個の正電荷が配置されている



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: 2.68[pN]
最小値: -8.55[pN]

内部に一個の正電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO_2)の
LCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]

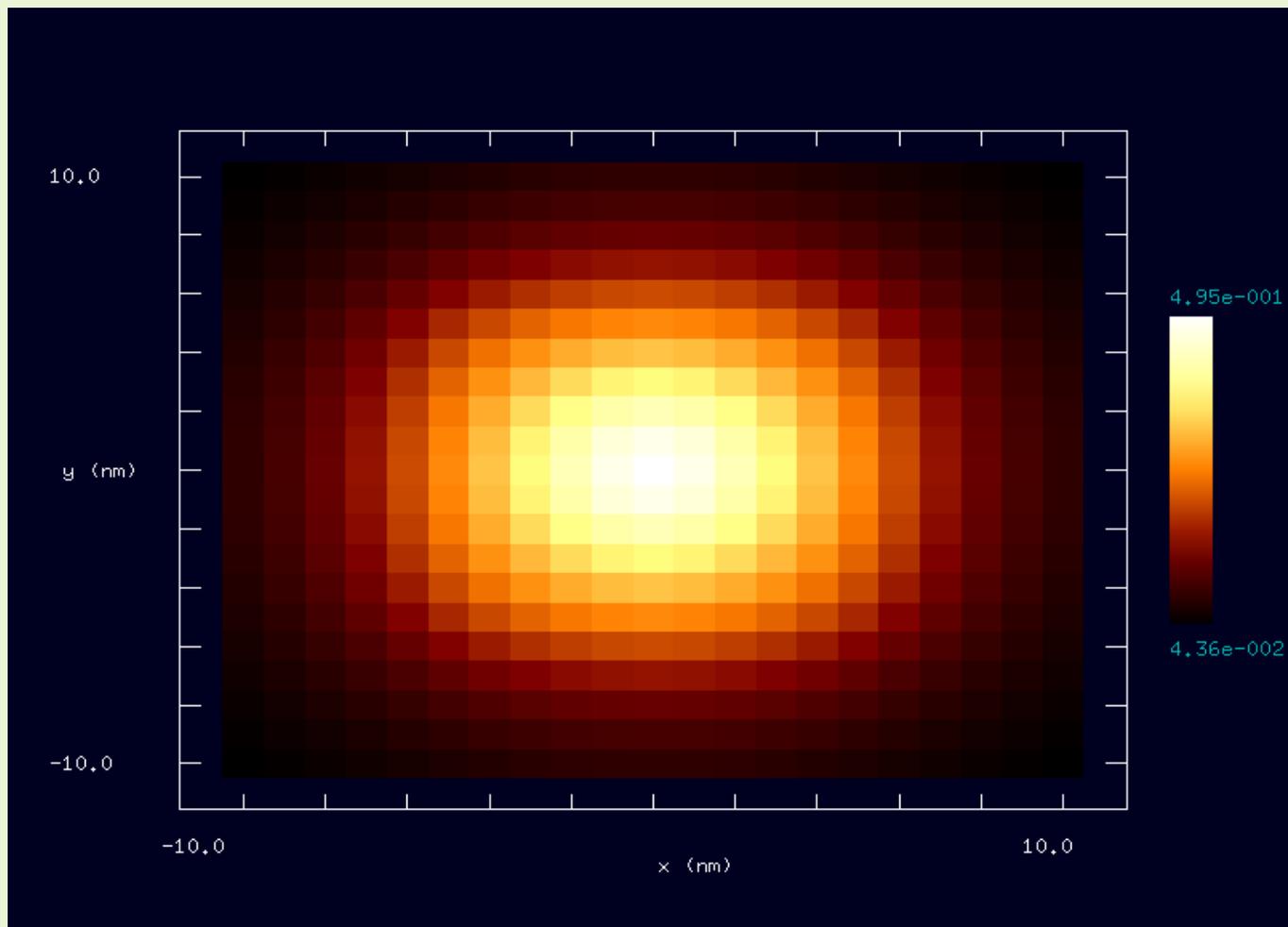
探針-試料間の最短距離: 1[nm]

試料の縦、横長さ: 10[nm]

試料の高さ: 2[nm]

試料の比誘電率: 3.8

試料内部中央に、一個の正電荷が配置されている

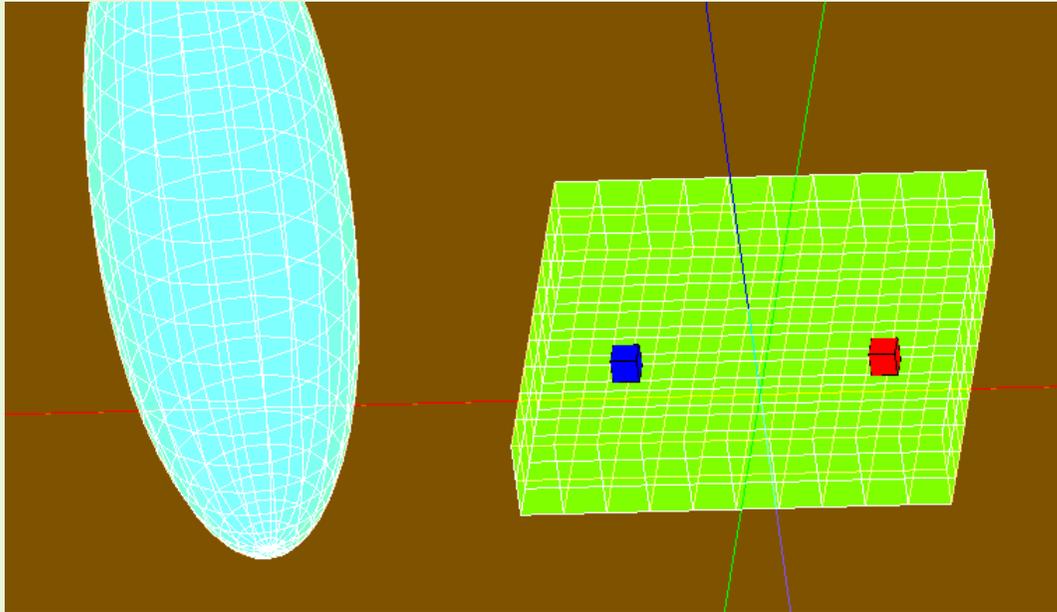


試料のLCPD像

最大値: $4.95E-1[V]$

最小値: $4.36E-2[V]$

内部に正負二個の電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO_2)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

基板の電位: 0[V]

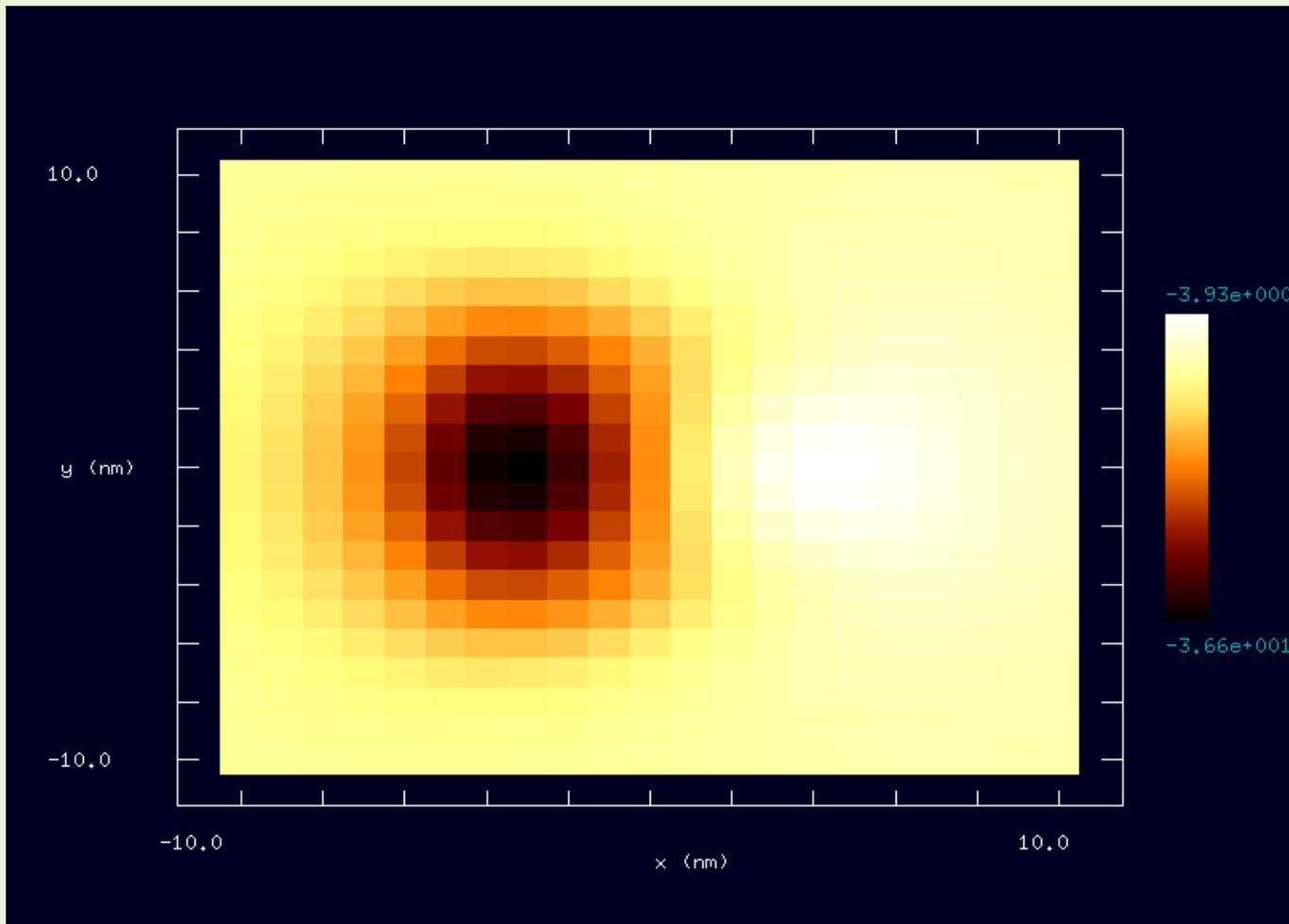
探針-試料間の最短距離: 1[nm]

試料の縦、横長さ: 10[nm]

試料の高さ: 2[nm]

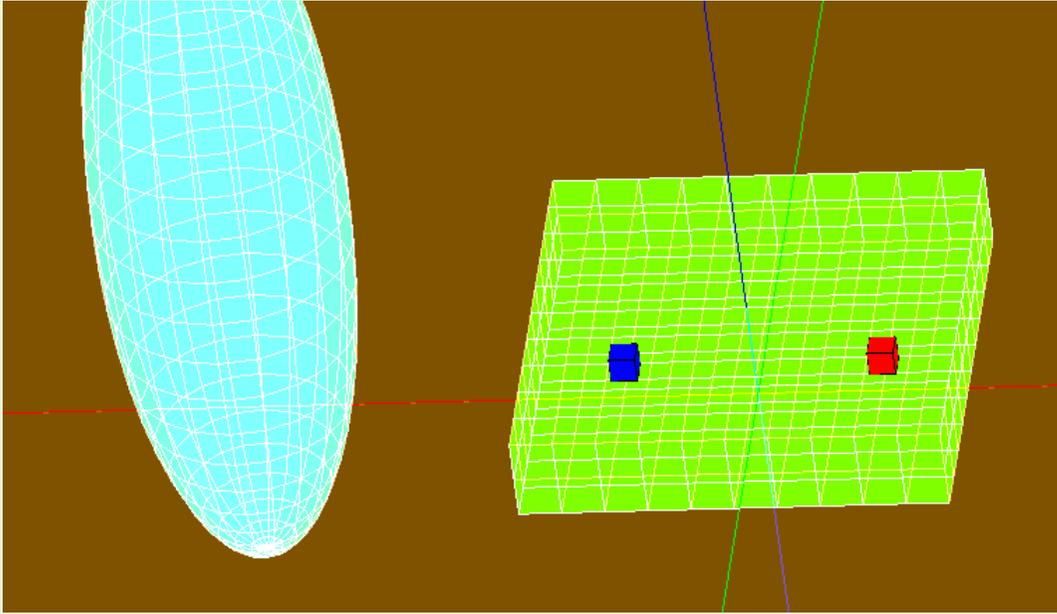
試料の比誘電率: 3.8

試料内部に、正負二個の電荷が配置されている



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: -3.93 [pN]
最小値: -36.6 [pN]

内部に正負二個の電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO_2)の
LCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]

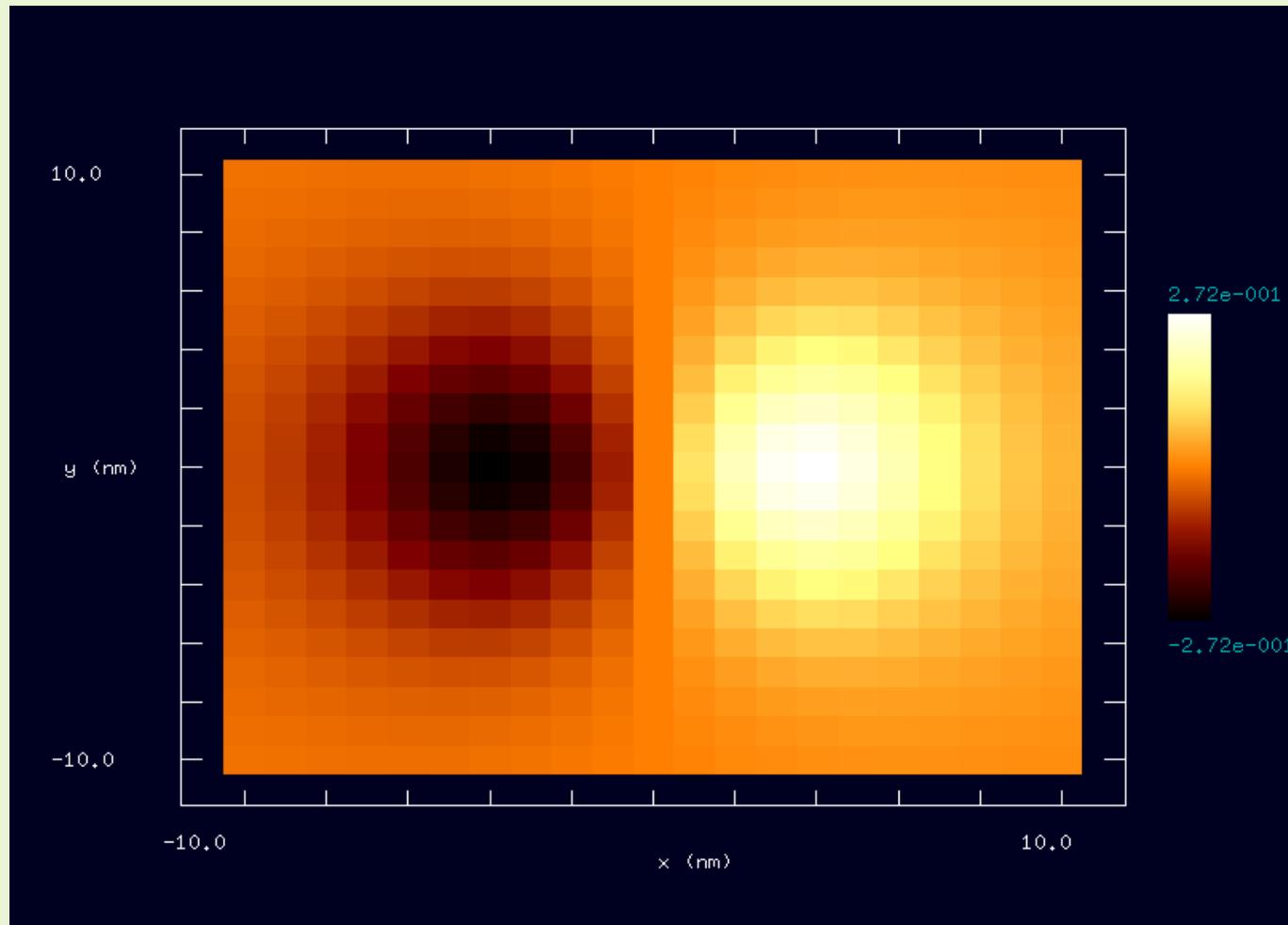
探針-試料間の最短距離: 1[nm]

試料の縦、横長さ: 10[nm]

試料の高さ: 2[nm]

試料の比誘電率: 3.8

試料内部に、正負二個の電荷が配置されている

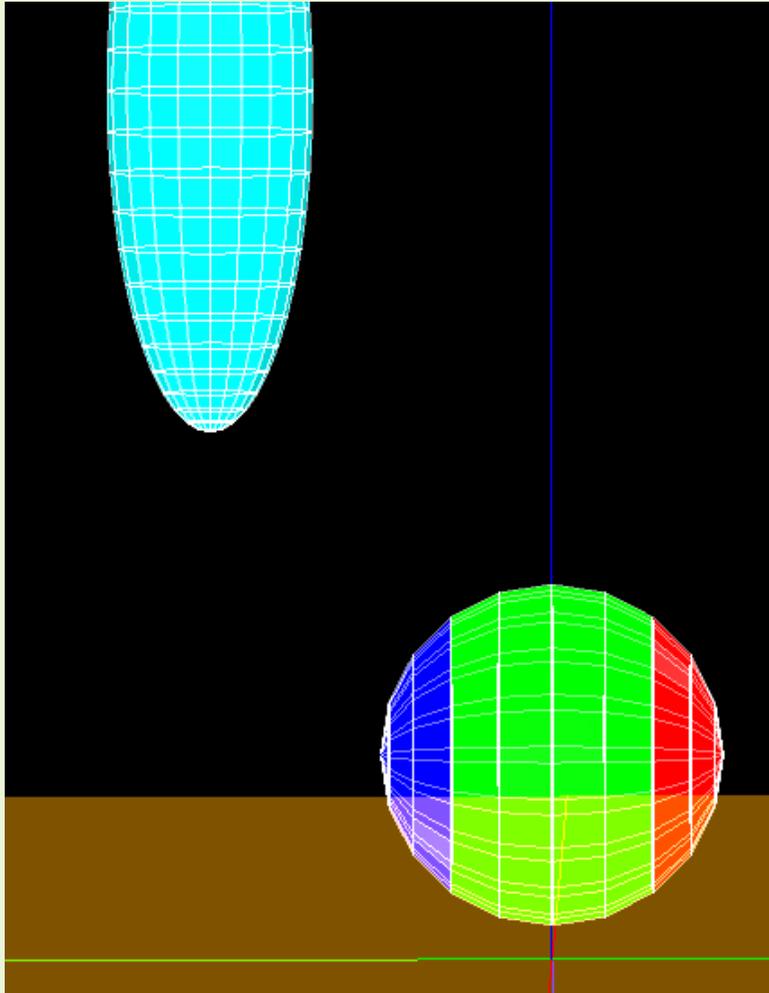


試料のLCPD像

最大値: 0.272[V]

最小値: -0.272[V]

Y軸の正の側が正の、y軸の負の側が負の表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO₂)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

基板の電位: 0[V]

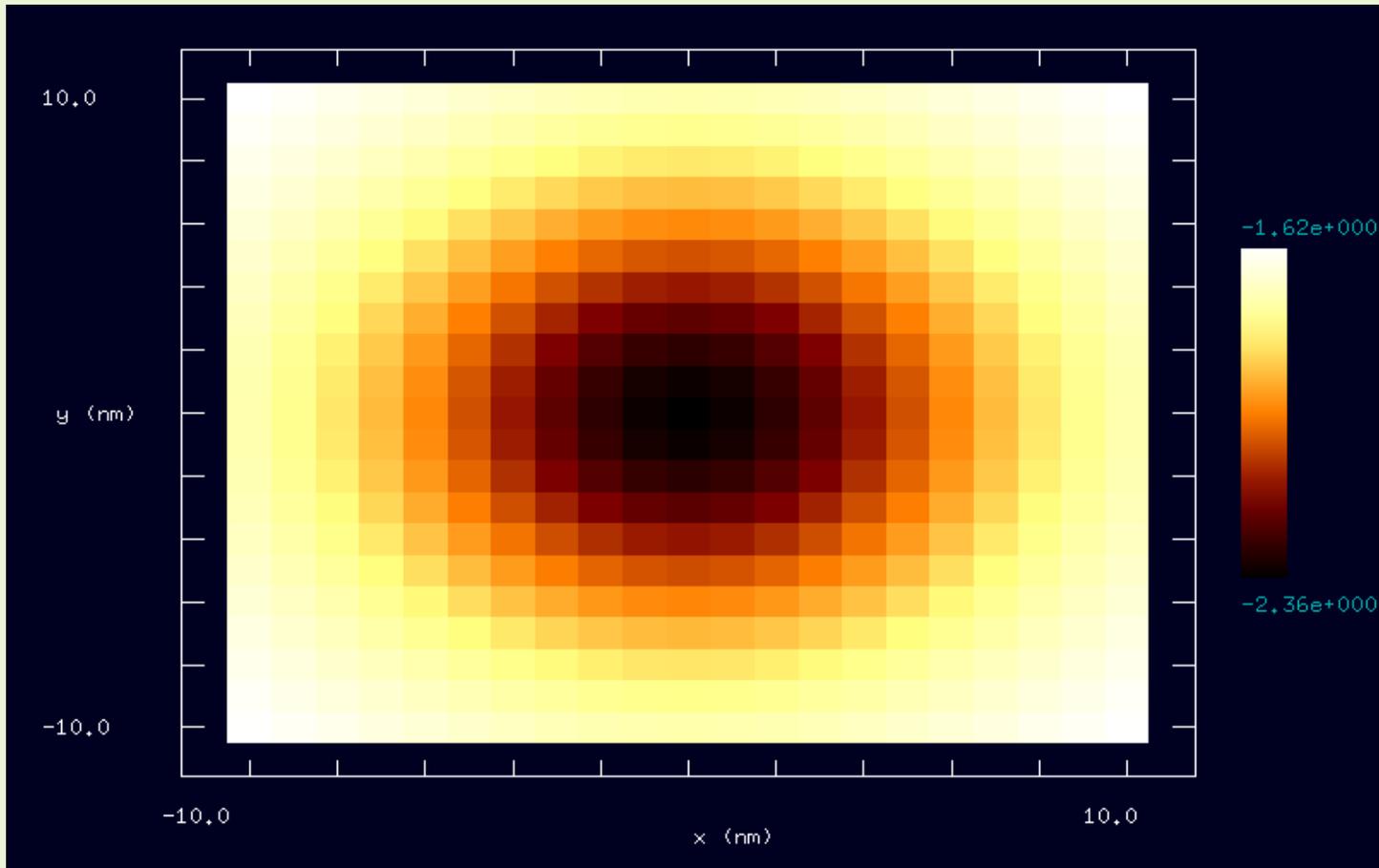
探針-試料間の最短距離: 4[nm]

試料球面体の半径: 5[nm]

試料の比誘電率: 3.8

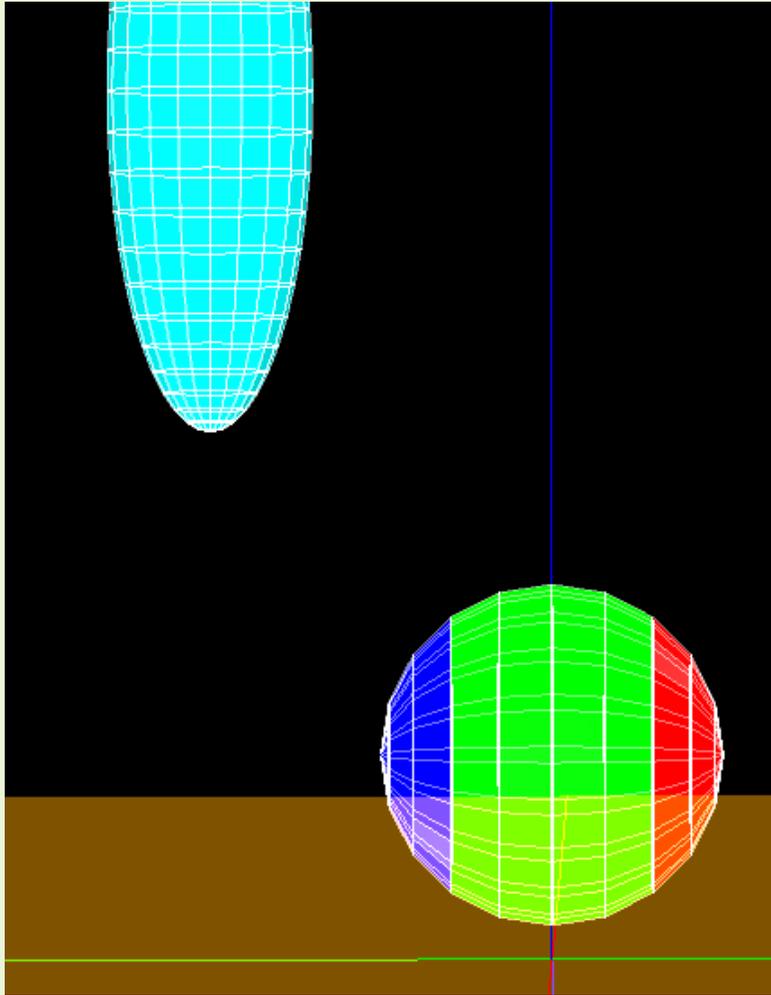
球体試料のy軸の正の側付近での、
表面の電荷密度: $-1.0E-5[C/m^2]$

球体試料のy軸の負の側付近での、
表面の電荷密度: $1.0E-5[C/m^2]$



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: $-1.62[\text{pN}]$
最小値: $-2.36[\text{pN}]$

Y軸の正の側が正の、y軸の負の側が負の表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO₂)のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]

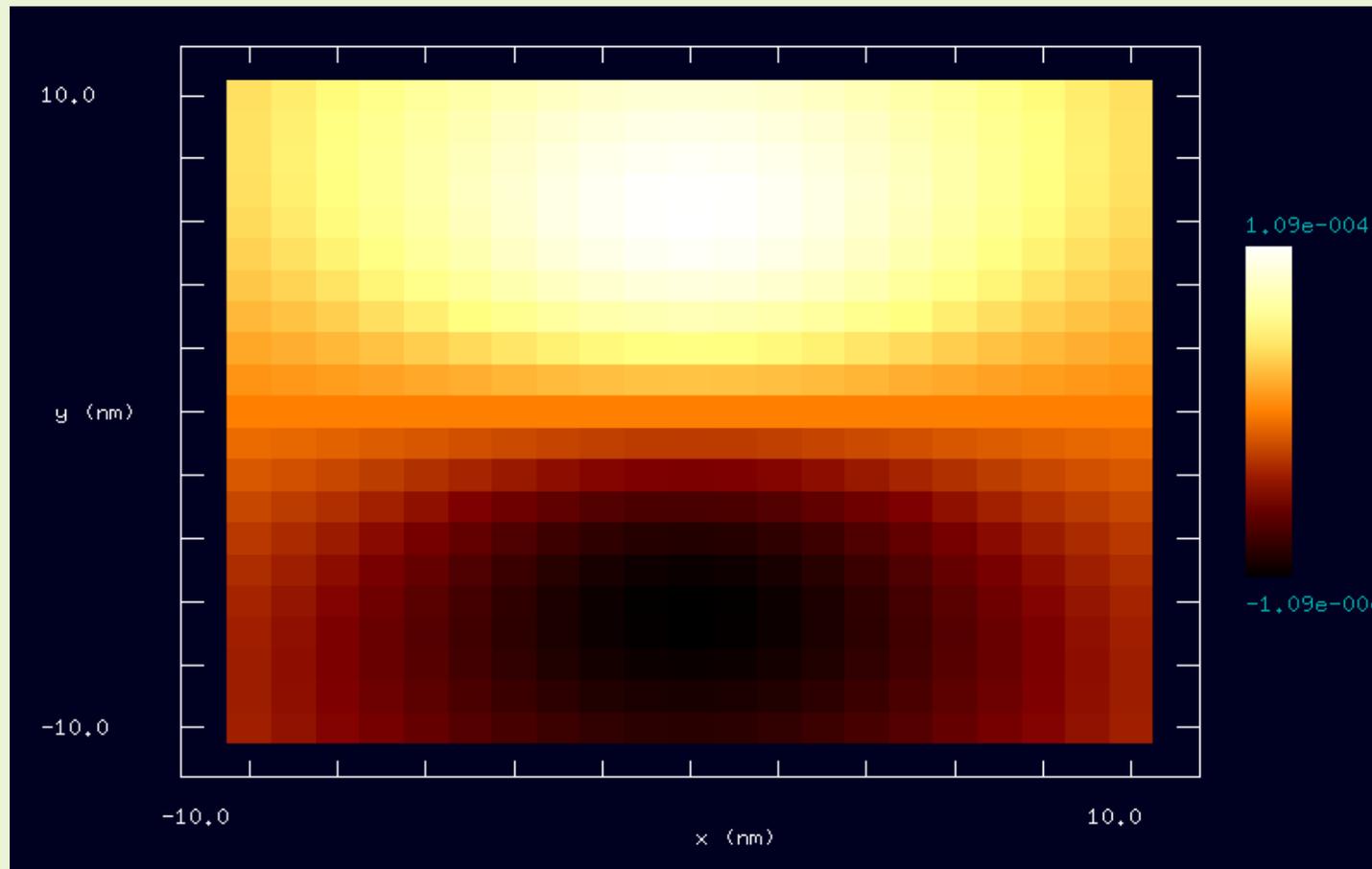
探針-試料間の最短距離: 4[nm]

試料球体の半径: 5[nm]

試料の比誘電率: 3.8

球体試料のy軸の正の側付近での、
表面の電荷密度: $-1.0E-5[C/m^2]$

球体試料のy軸の負の側付近での、
表面の電荷密度: $1.0E-5[C/m^2]$

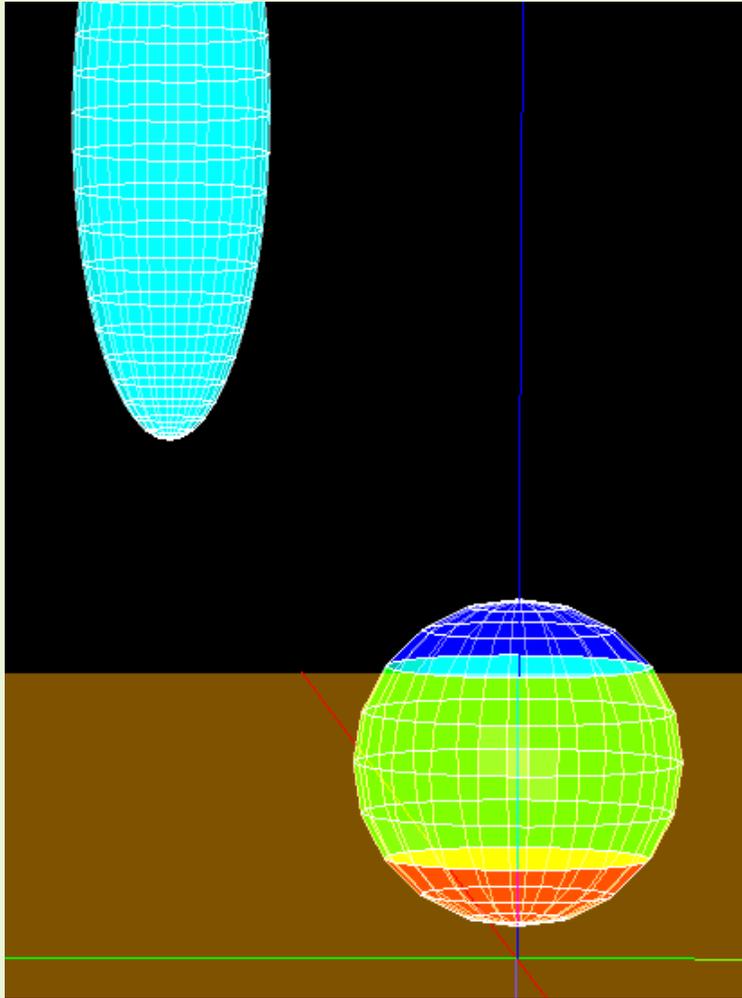


試料のLCPD像

最大値: $1.09E-4[V]$

最小値: $-1.09E-4[V]$

北極付近が負の、南極付近が正の表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO₂)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

基板の電位: 0[V]

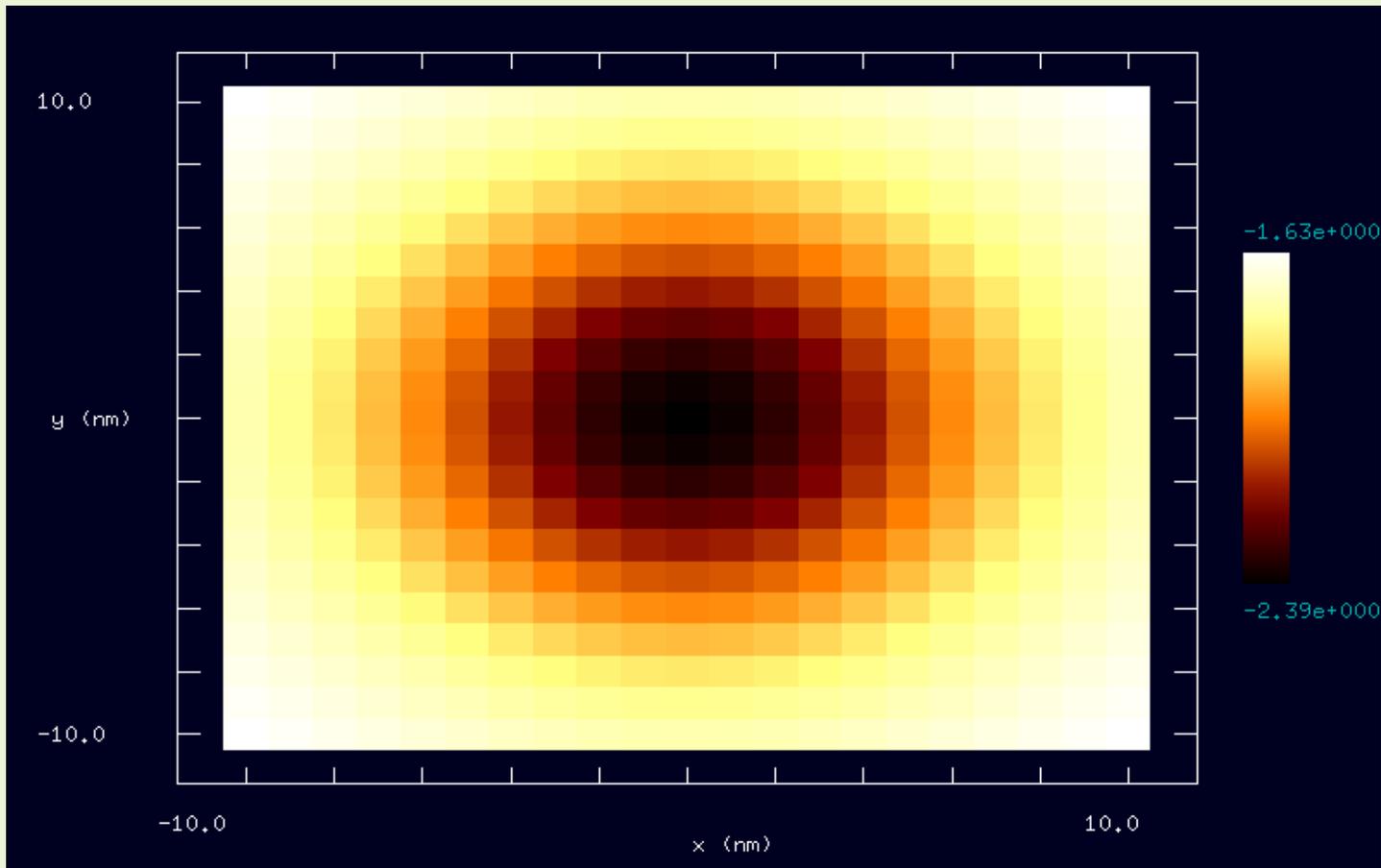
探針-試料間の最短距離: 4[nm]

試料球体の半径: 5[nm]

試料の比誘電率: 3.8

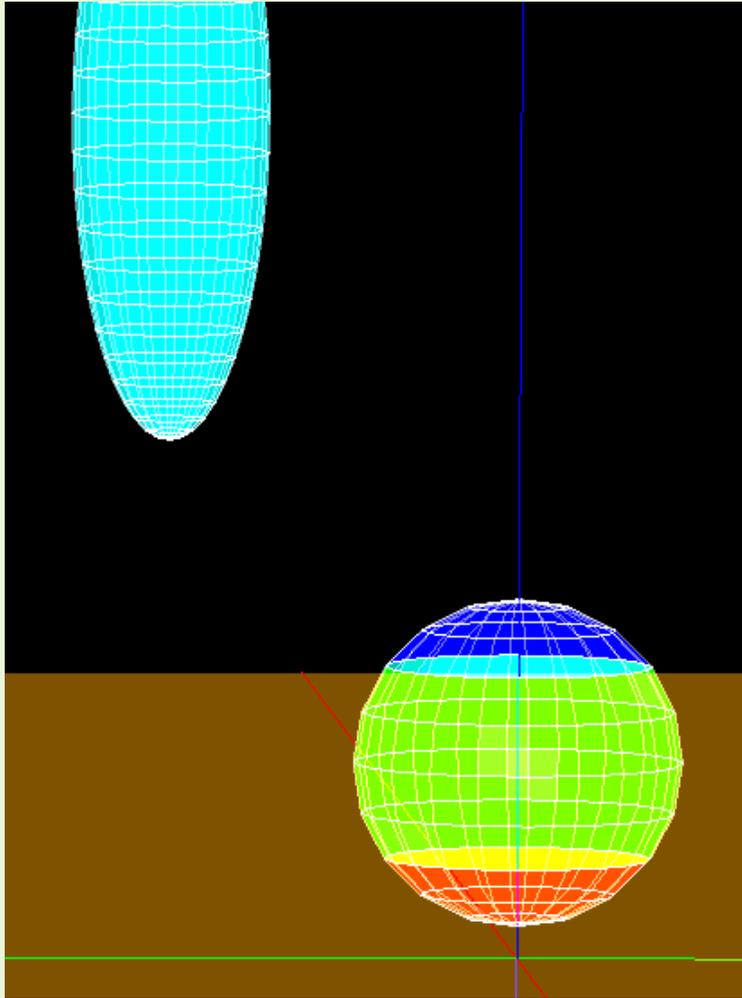
球体試料の北極付近での、表面の
電荷密度: $-1.0E-5[C/m^2]$

球体試料の南極付近での、表面の
電荷密度: $1.0E-5[C/m^2]$



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: $-1.63[\text{pN}]$
最小値: $-2.39[\text{pN}]$

北極付近が負の、南極付近が正の表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO₂)のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]

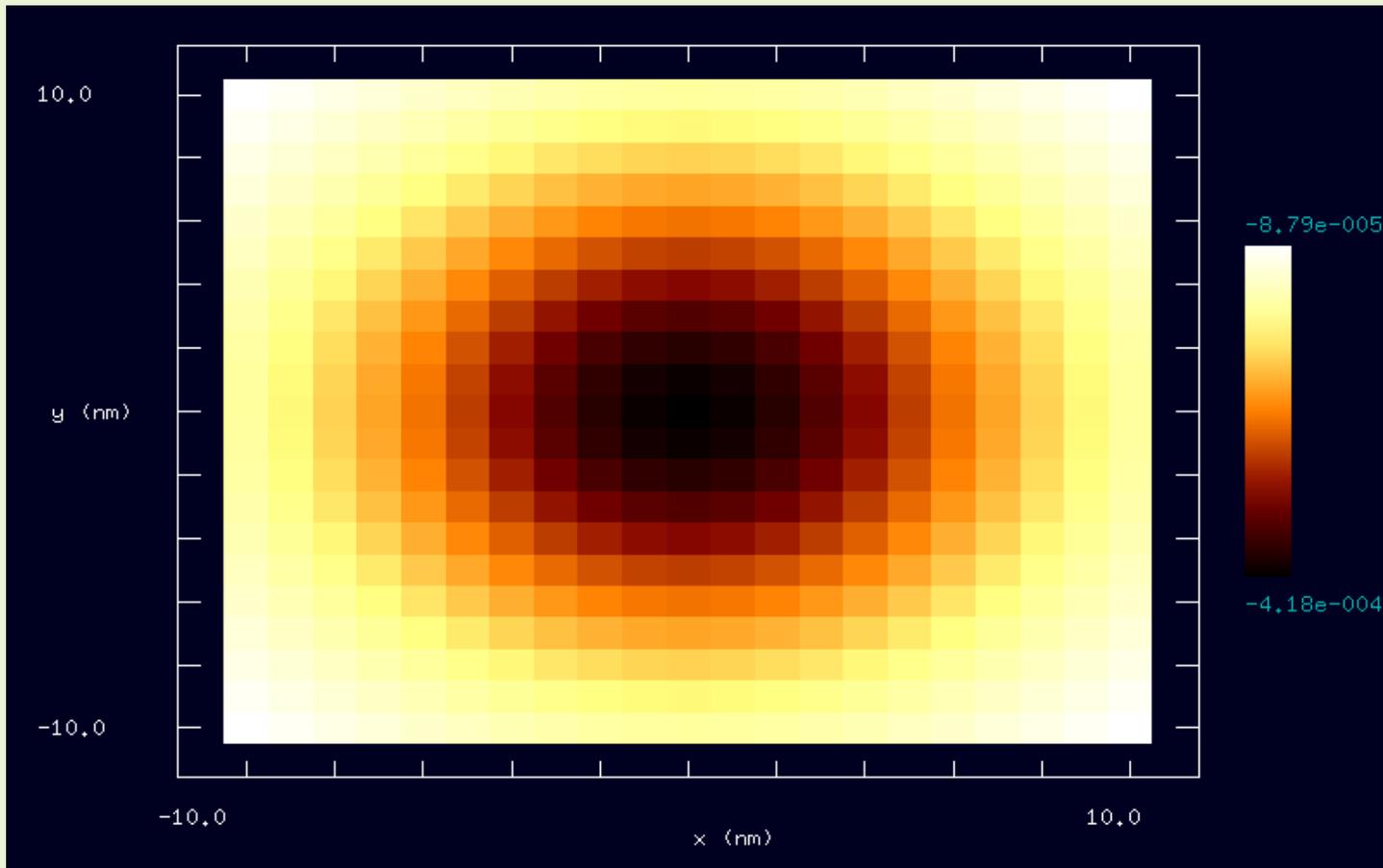
探針-試料間の最短距離: 4[nm]

試料球体の半径: 5[nm]

試料の比誘電率: 3.8

球体試料の北極付近での、表面の
電荷密度: $-1.0E-5[C/m^2]$

球体試料の南極付近での、表面の
電荷密度: $1.0E-5[C/m^2]$

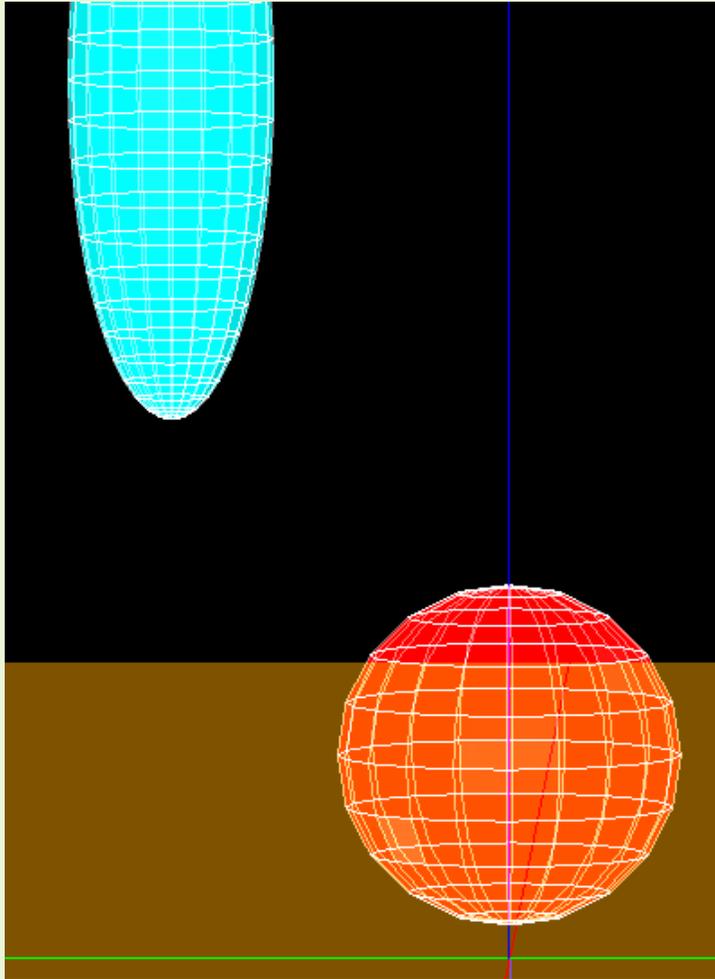


試料のLCPD像

最大値: -8.79×10^{-5} [V]

最小値: -4.18×10^{-4} [V]

均一な表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO_2)に対して探針が
感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

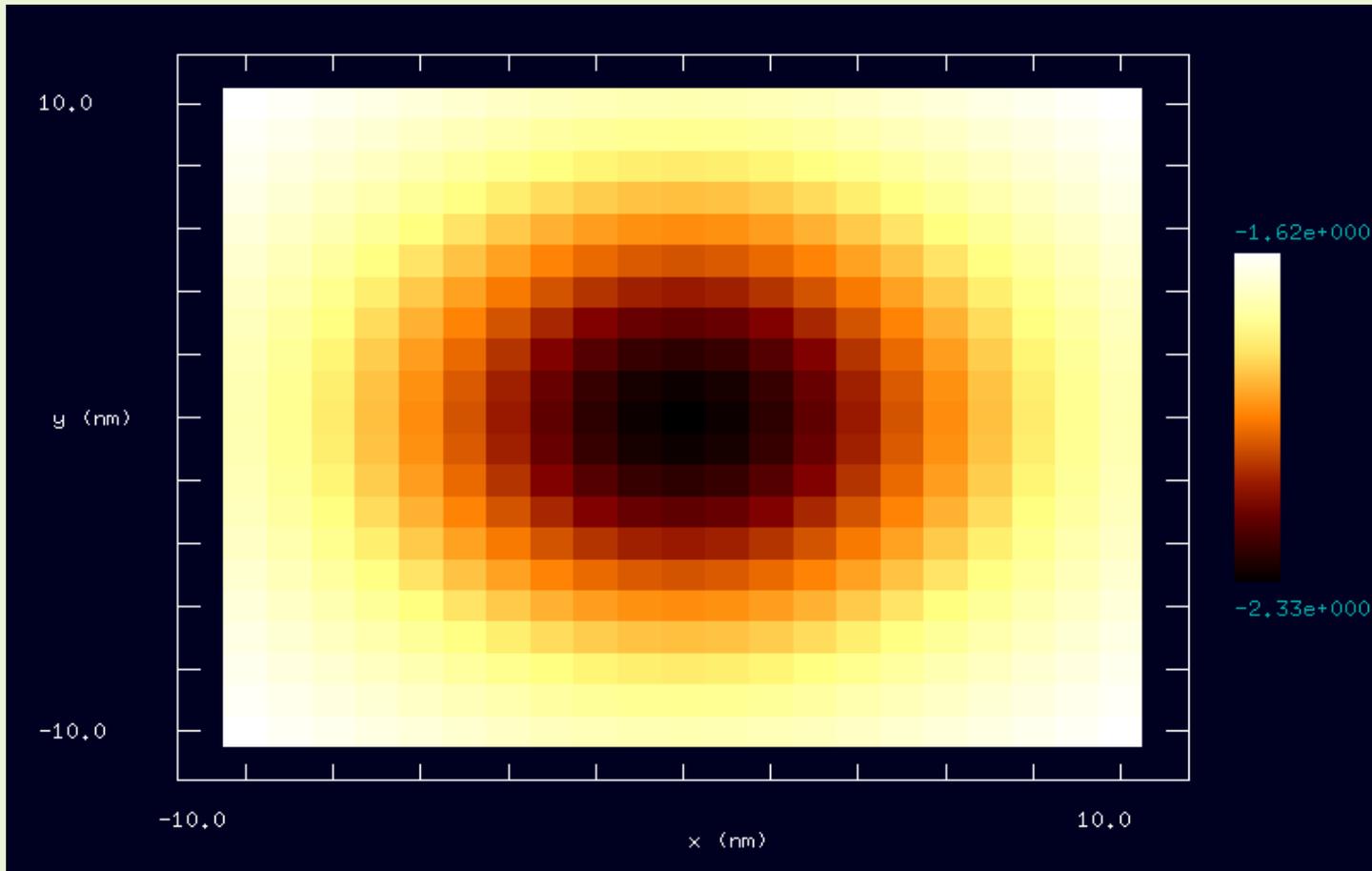
基板の電位: 0[V]

探針-試料間の最短距離: 4[nm]

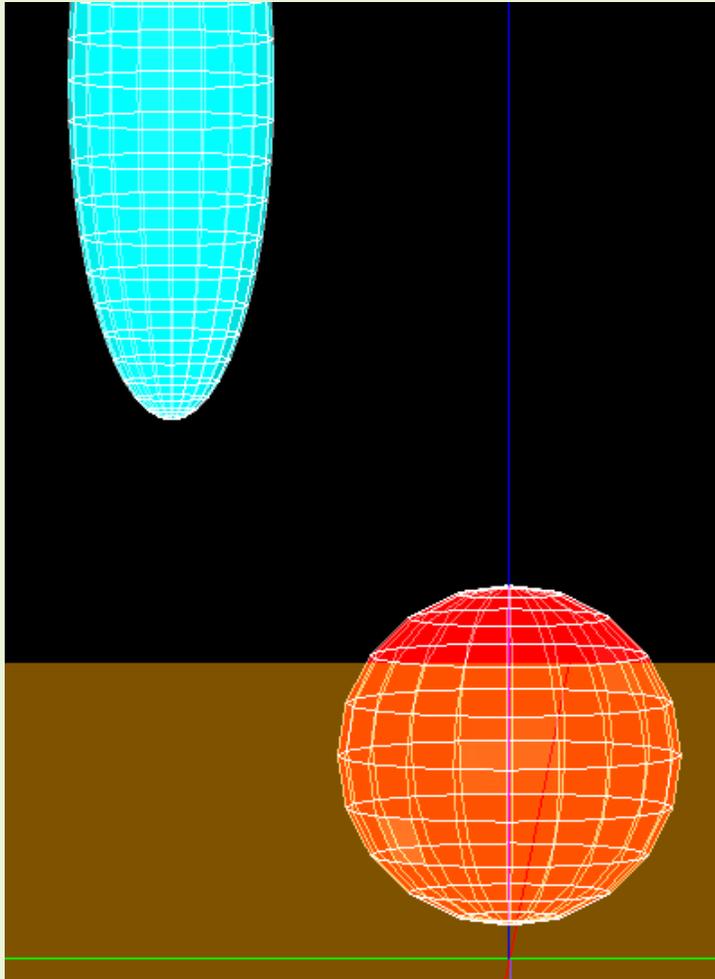
試料球体の半径: 5[nm]

試料の比誘電率: 3.8

電荷密度: $1.0\text{E}-5[\text{C}/\text{m}^2]$



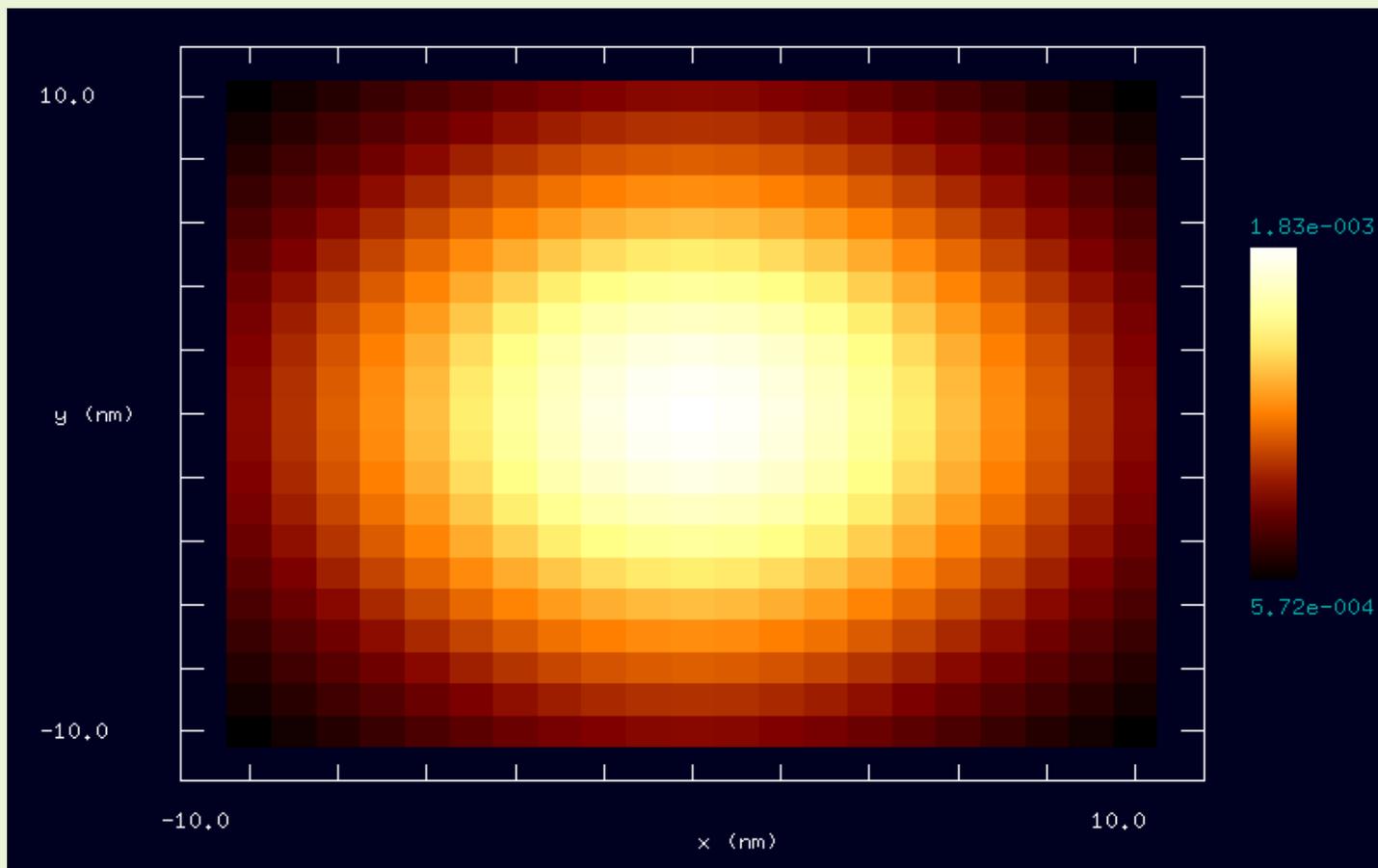
探針の感じるz方向の力の分布
最大値: $-1.62[\text{pN}]$
最小値: $-2.33[\text{pN}]$



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 4[nm]

試料球体の半径: 5[nm]
試料の比誘電率: 3.8
電荷密度: $1.0\text{E}-5[\text{C}/\text{m}^2]$

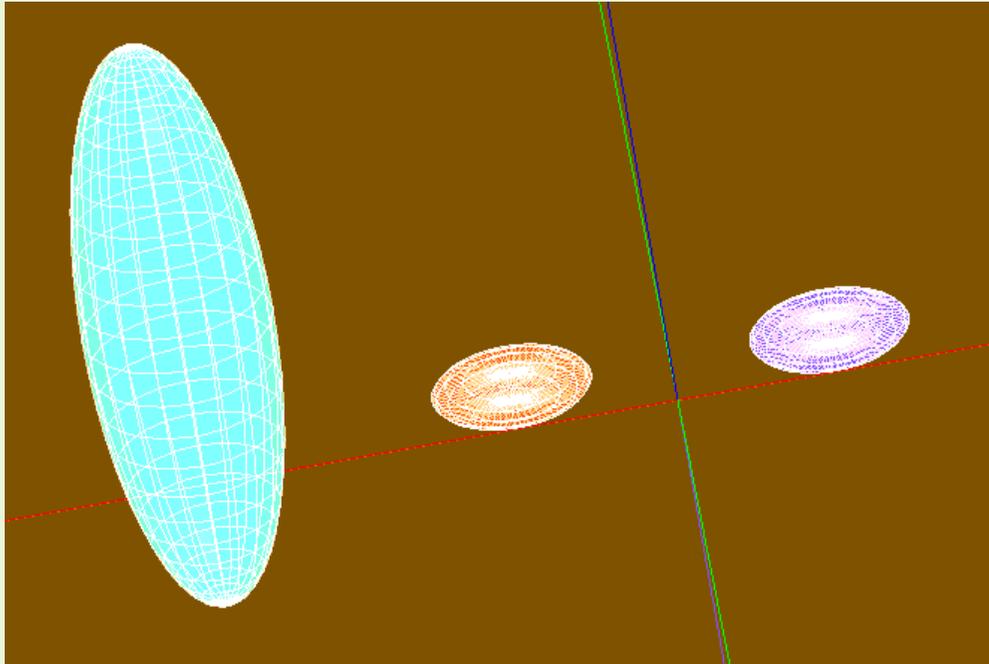


試料のLCPD像

最大値: $1.83E-3[V]$

最小値: $5.72E-4[V]$

右側に負に帯電した誘電体、左側に正に帯電した誘電体を配置した場合の探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

基板の電位: 0[V]

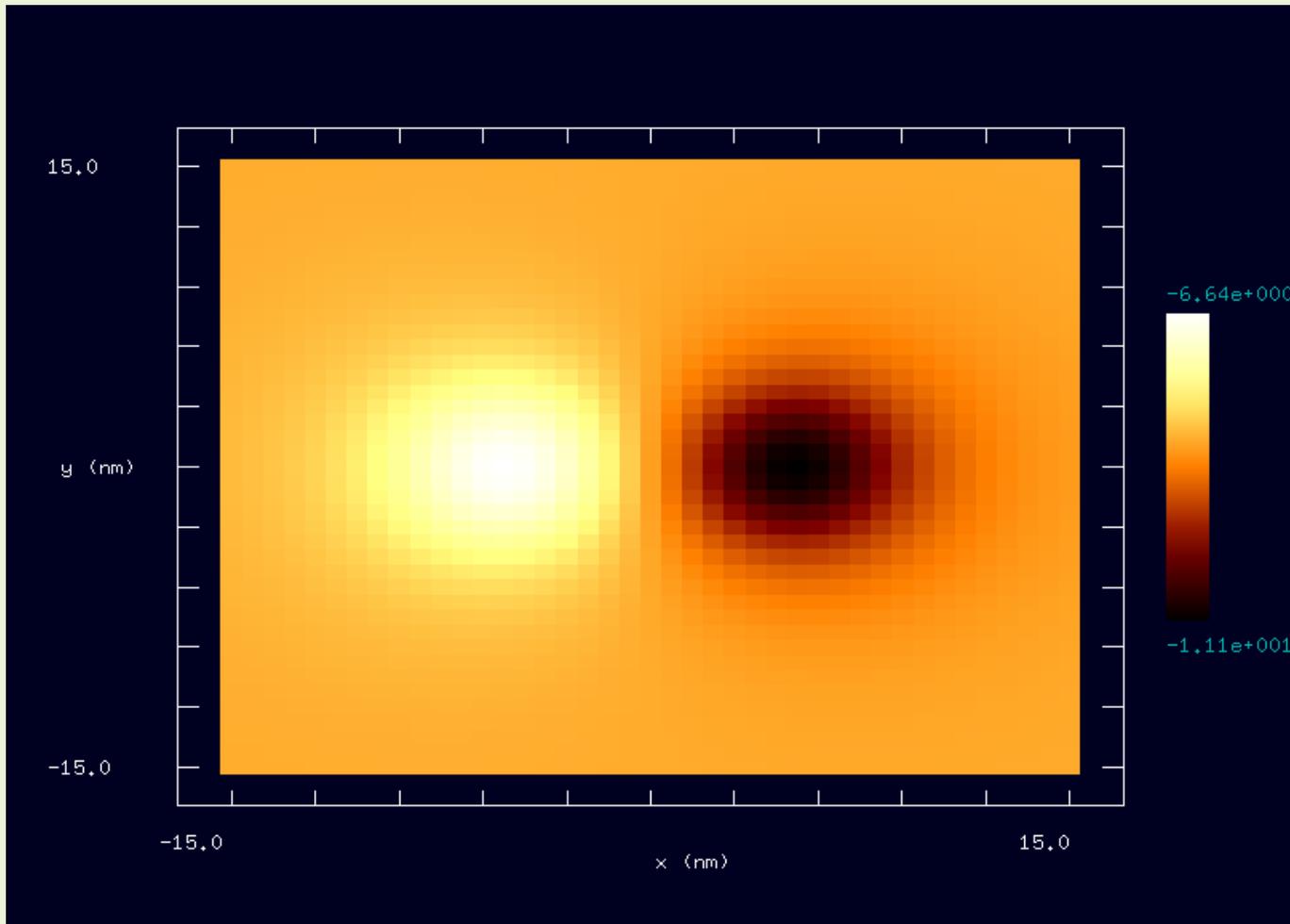
探針-試料間の最短距離: 2[nm]

試料の形状は、横方向半径が2.5[nm]、縦方向半径が0.5[nm]の回転楕円体

試料の比誘電率: 1.5

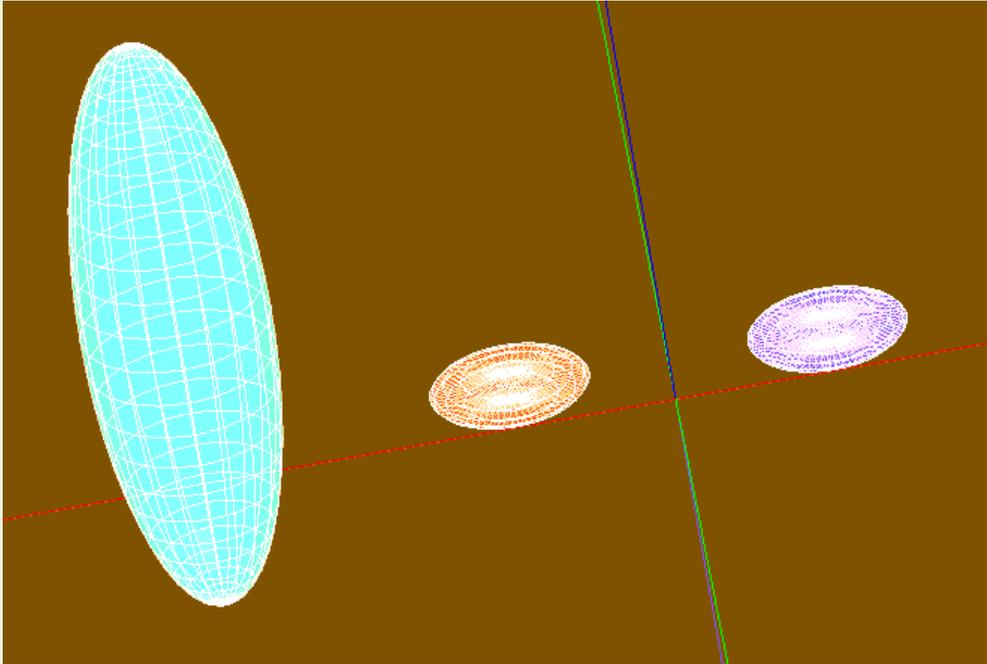
右側の誘電体の電荷密度: $-0.001[\text{C}/\text{m}^2]$

左側の誘電体の電荷密度: $0.001[\text{C}/\text{m}^2]$



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: -6.64 [pN]
最小値: -11.1 [pN]

右側に負に帯電した誘電体、左側に正に帯電した誘電体を配置した場合のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]

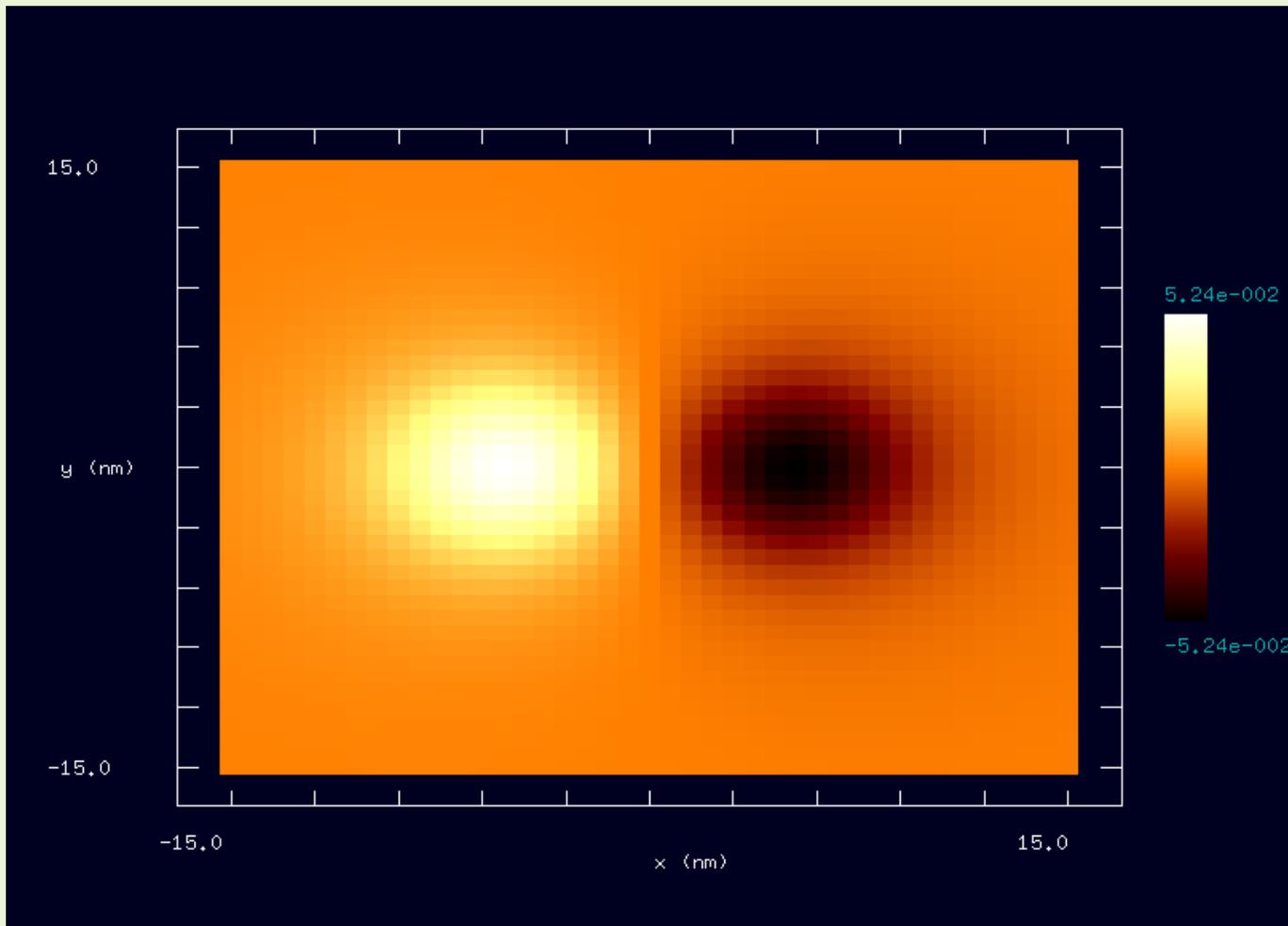
探針-試料間の最短距離: 2[nm]

試料の形状は、横方向半径が2.5[nm]、縦方向半径が0.5[nm]の回転楕円体

試料の比誘電率: 1.5

右側の誘電体の電荷密度: $-0.001[\text{C}/\text{m}^2]$

左側の誘電体の電荷密度: $0.001[\text{C}/\text{m}^2]$

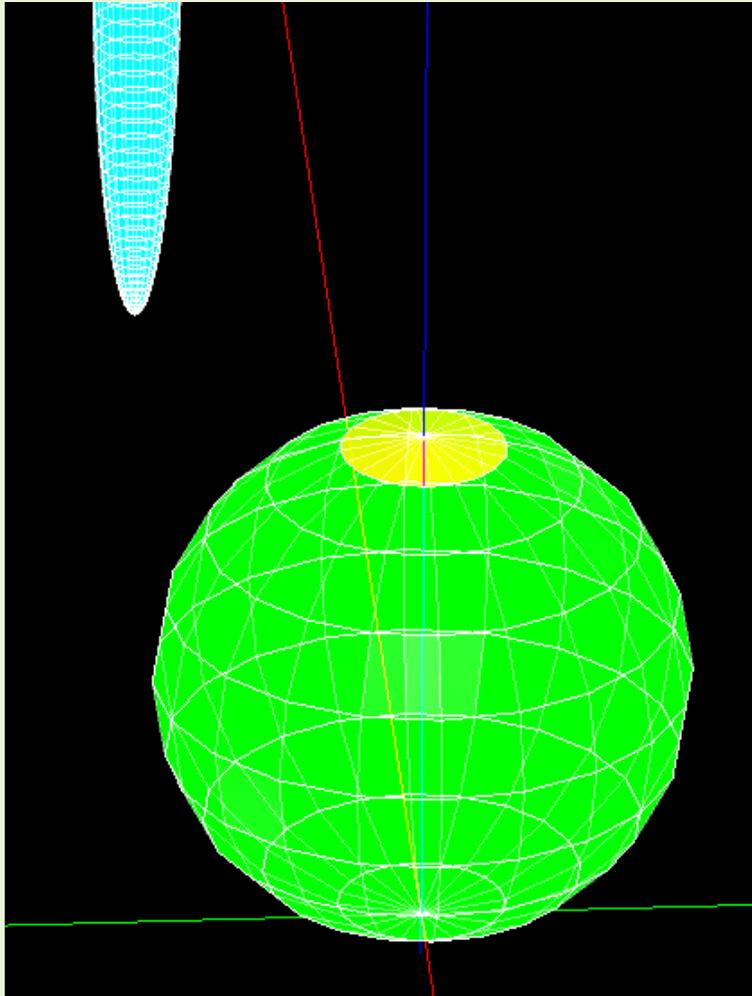


試料のLCPD像

最大値: $5.24E-2[V]$

最小値: $-5.24E-2[V]$

北極付近が正の表面電荷を持つトナー粒子に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径 $1[\mu\text{m}]$ 、
縦方向半径 $10[\mu\text{m}]$ の回転楕円体

探針の電位: $1[\text{V}]$

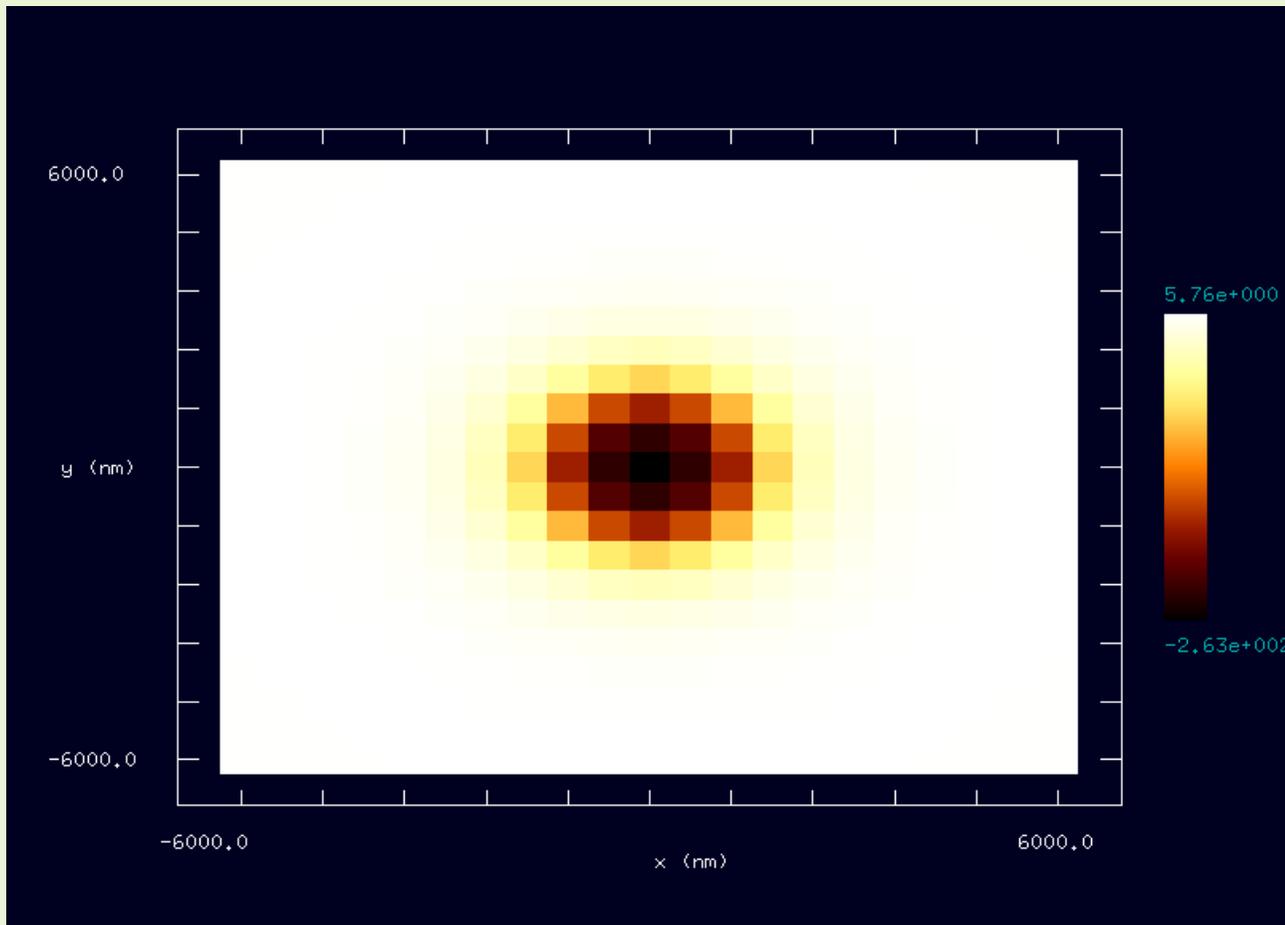
基板の電位: $0[\text{V}]$

探針-試料間の最短距離: $100[\text{nm}]$

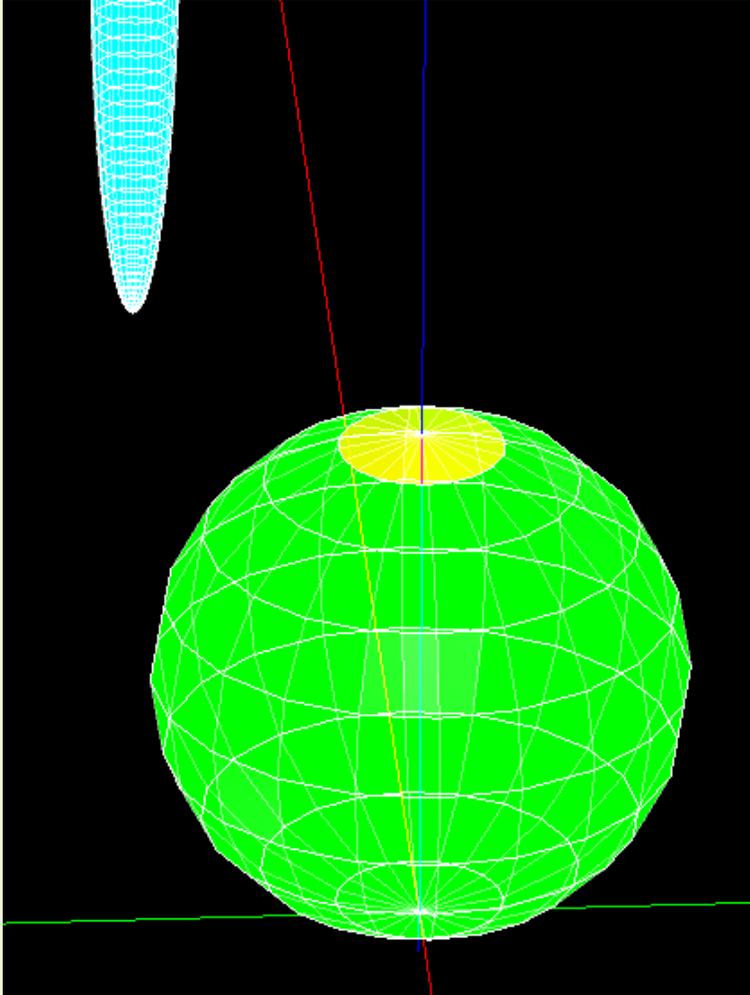
トナー粒子の半径: $6[\mu\text{m}]$

試料の比誘電率: 3.8

トナー粒子の北極付近での、表面の
電荷密度: $1.0\text{E}-4[\text{C}/\text{m}^2]$



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: 5.76[pN]
最小値: -2.63E+2[pN]



探針の形状は、横方向半径 $1[\mu\text{m}]$ 、
縦方向半径 $10[\mu\text{m}]$ の回転楕円体

探針の電位: $1[\text{V}]$

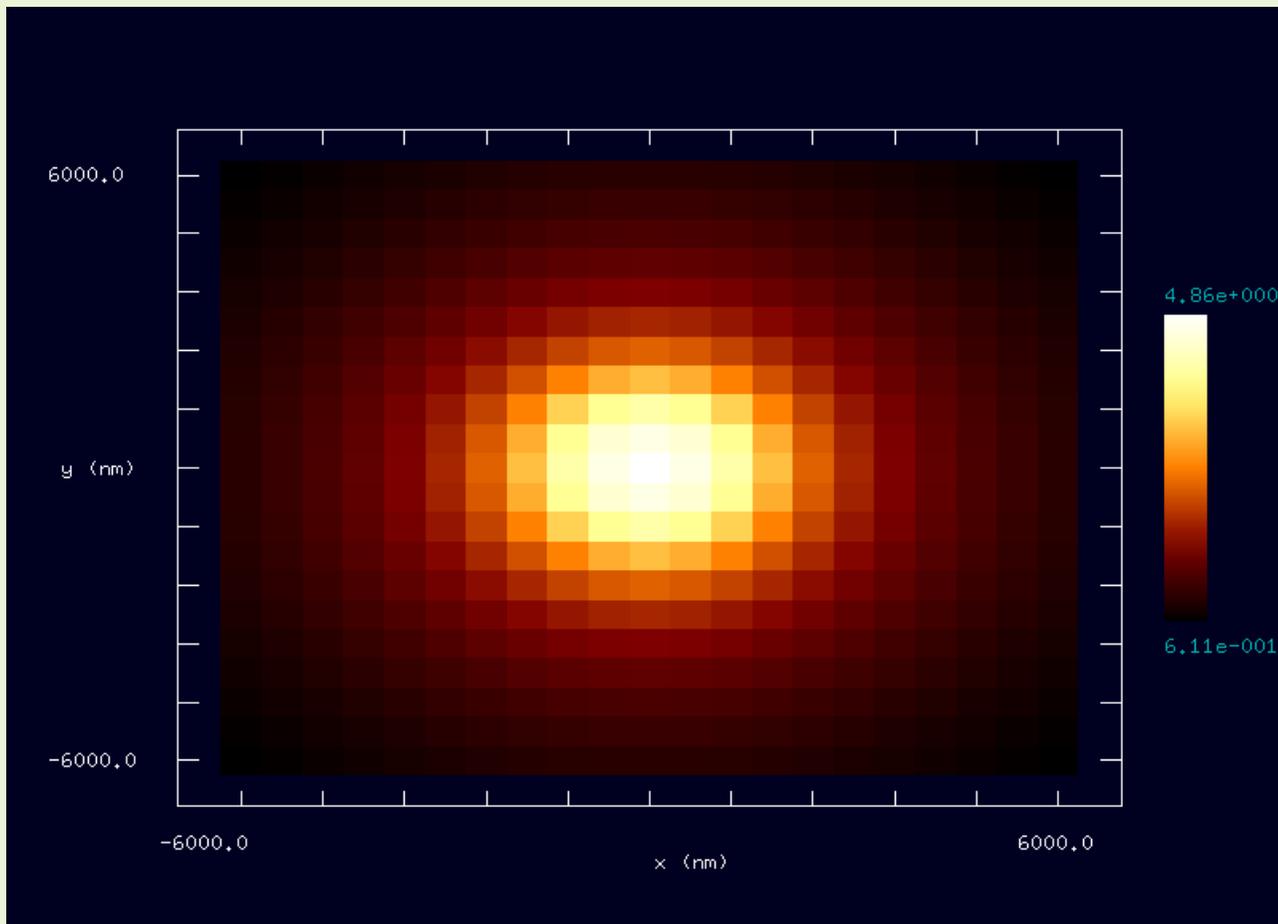
基板の電位: $0[\text{V}]$

探針-試料間の最短距離: $100[\text{nm}]$

トナー粒子の半径: $6[\mu\text{m}]$

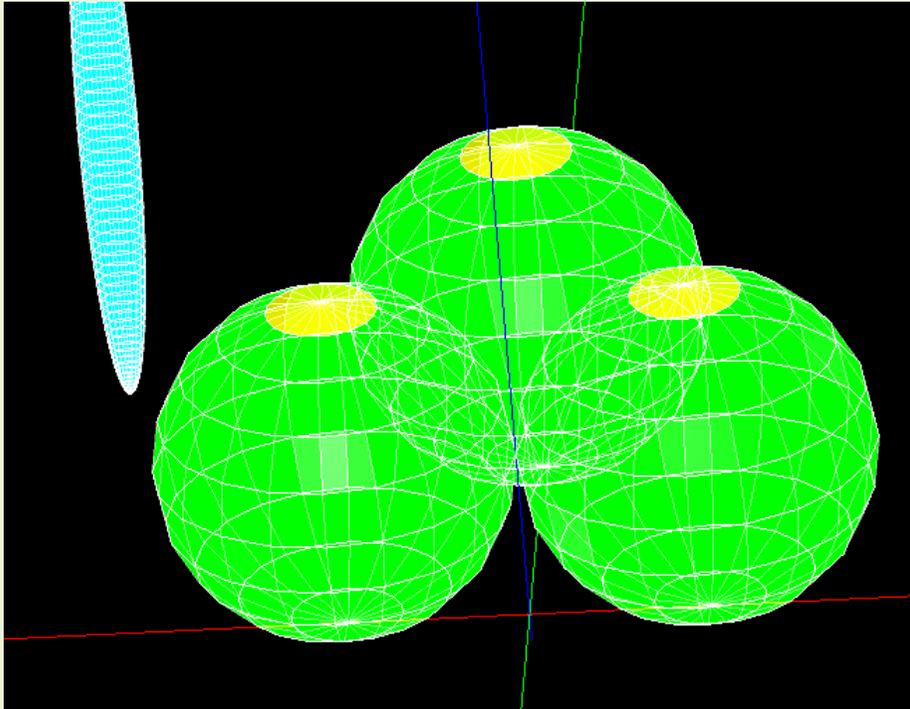
試料の比誘電率: 3.8

トナー粒子の北極付近での、表面の
電荷密度: $1.0\text{E}-4[\text{C}/\text{m}^2]$



試料のLCPD像
最大値: 4.86[V]
最小値: 0.611[V]

北極付近が正の表面電荷を持つトナー粒子3個に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径 $1[\mu\text{m}]$ 、
縦方向半径 $10[\mu\text{m}]$ の回転楕円体

探針の電位: $1[\text{V}]$

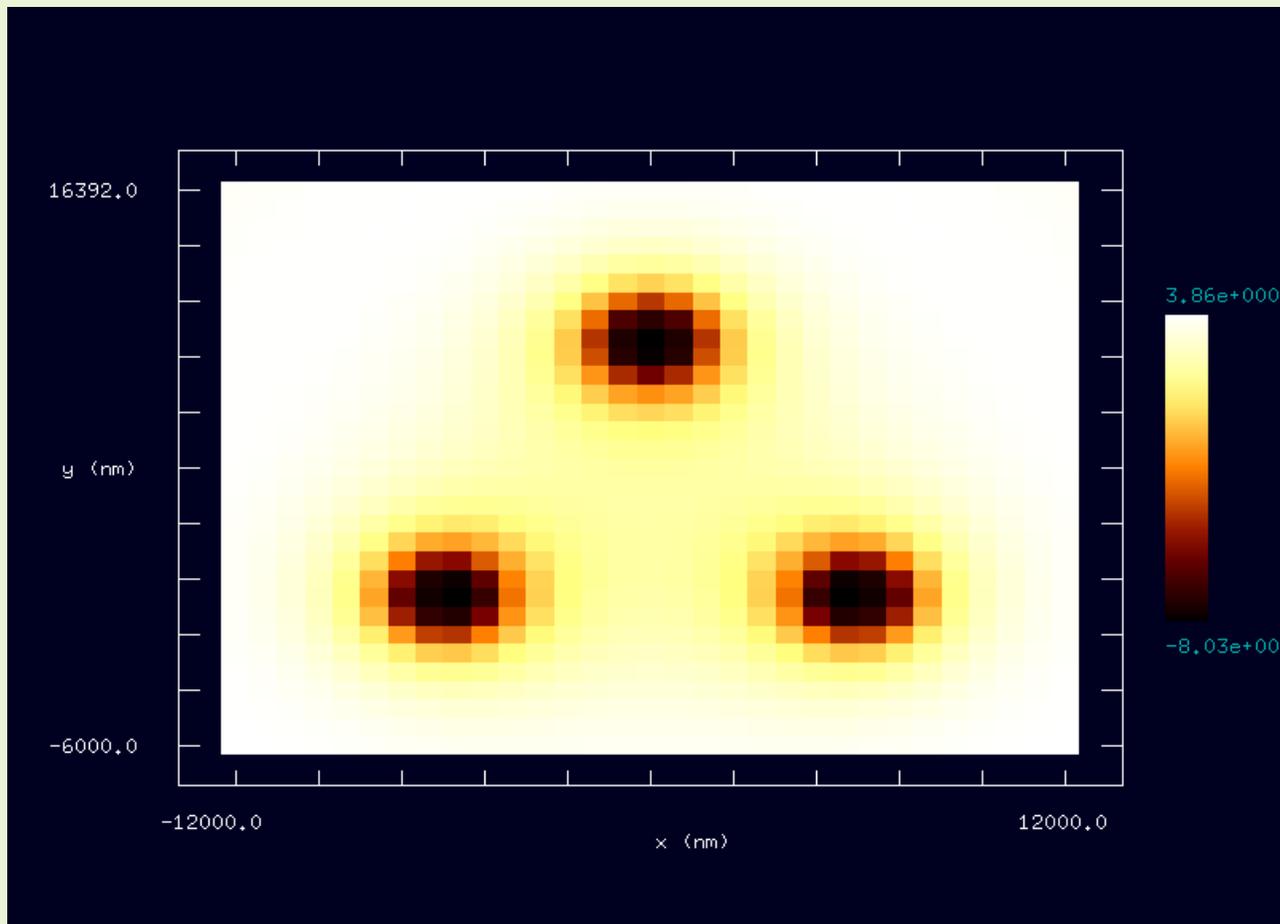
基板の電位: $0[\text{V}]$

探針-試料間の最短距離: $100[\text{nm}]$

トナー粒子の半径: $6[\mu\text{m}]$

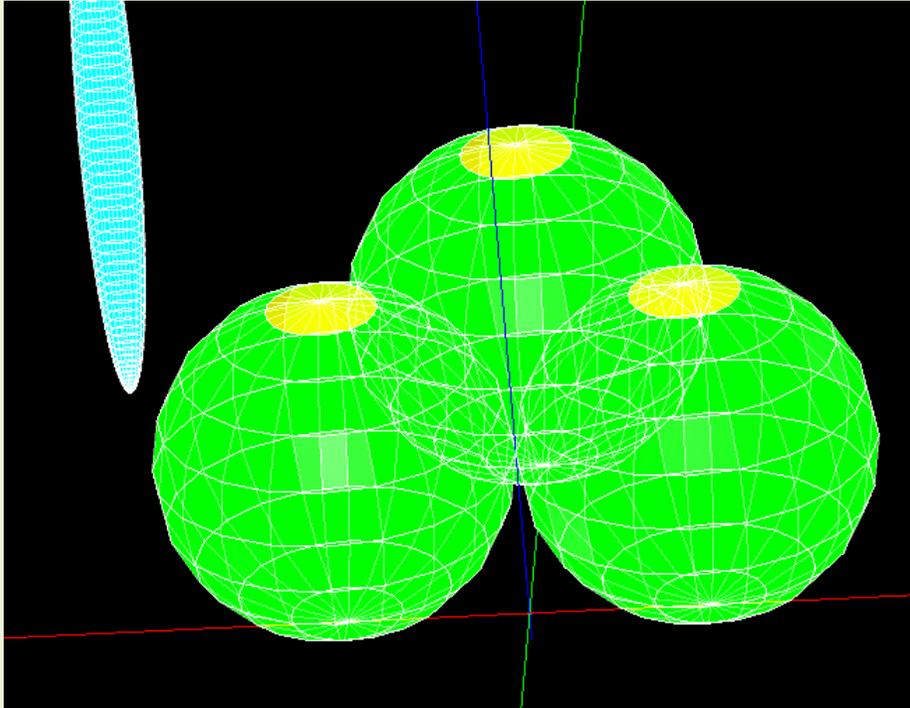
試料の比誘電率: 3.8

トナー粒子の北極付近での、表面の
電荷密度: $1.0\text{E}-4[\text{C}/\text{m}^2]$



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: 3.86[pN]
最小値: -80.3[pN]

北極付近が正の表面電荷を持つトナー粒子3個に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径 $1[\mu\text{m}]$ 、
縦方向半径 $10[\mu\text{m}]$ の回転楕円体

探針の電位: $1[\text{V}]$

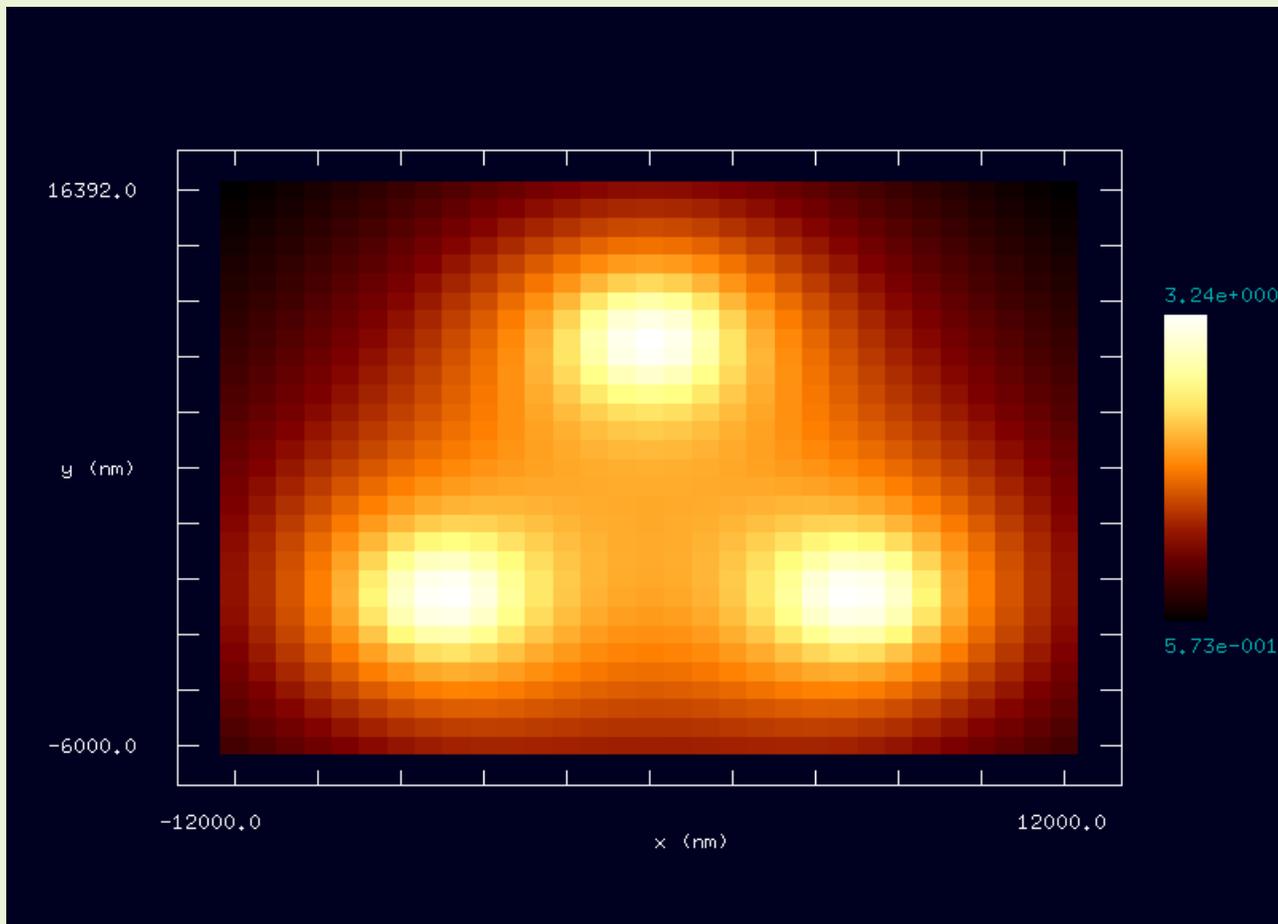
基板の電位: $0[\text{V}]$

探針-試料間の最短距離: $100[\text{nm}]$

トナー粒子の半径: $6[\mu\text{m}]$

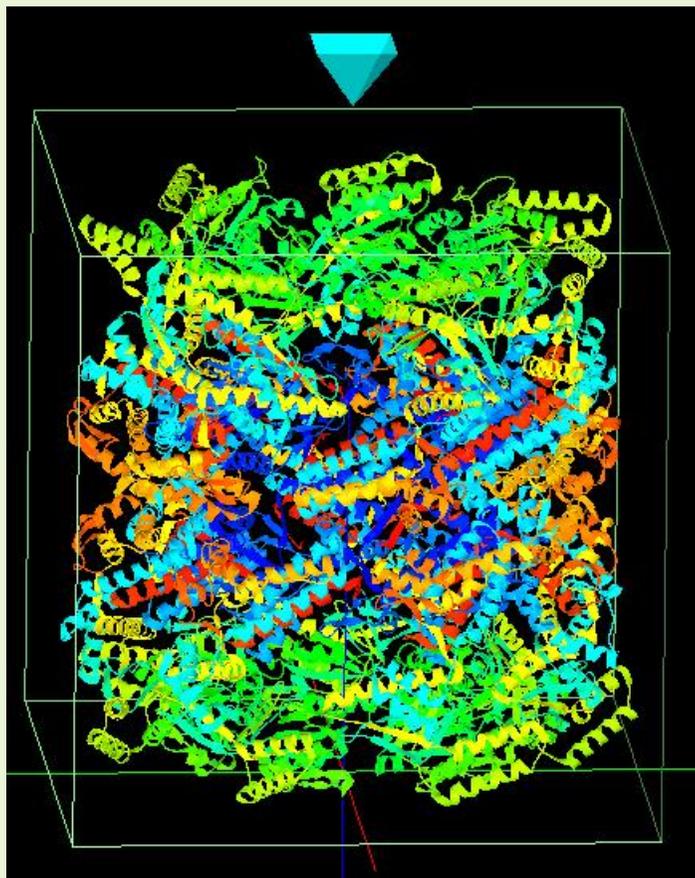
試料の比誘電率: 3.8

トナー粒子の北極付近での、表面の
電荷密度: $1.0\text{E}-4[\text{C}/\text{m}^2]$

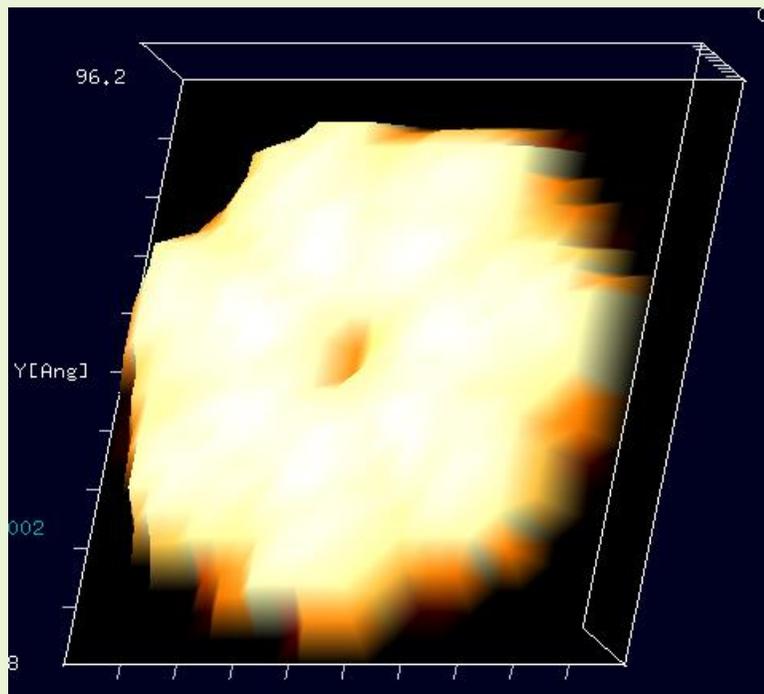


試料のLCPD像
最大値: 3.24[V]
最小値: 0.573[V]

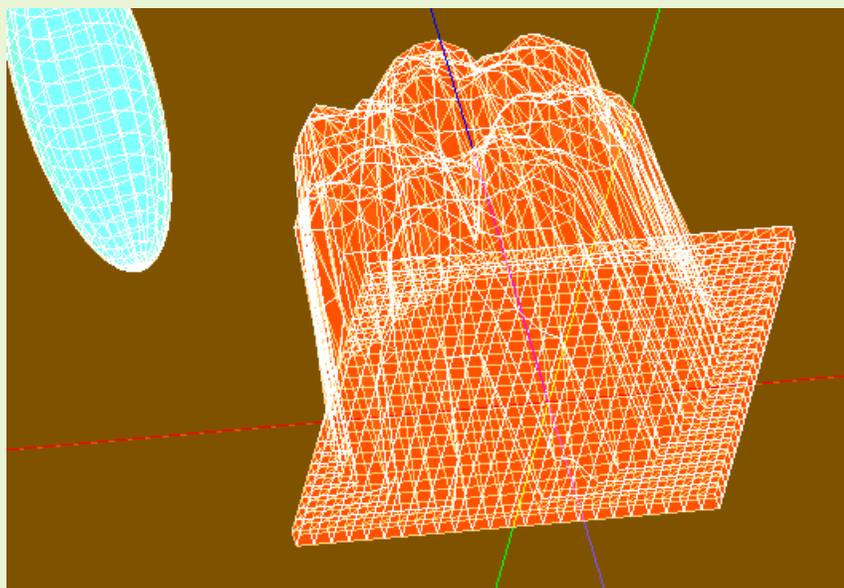
均一な表面電荷を持つシャペロニンGroEL分子に対して探針が
感じる力の分布



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、
0.8[nm]の分解能で得られたAFM像

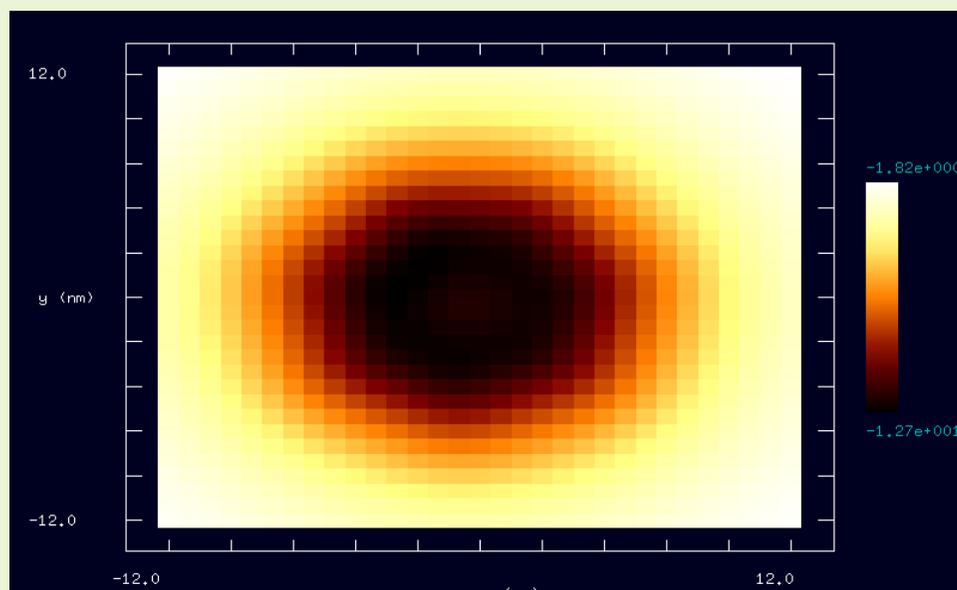


探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 1.62[nm]

試料形状 横: 19.2[nm]
縦: 19.2[nm]
高さ: 15.9[nm]

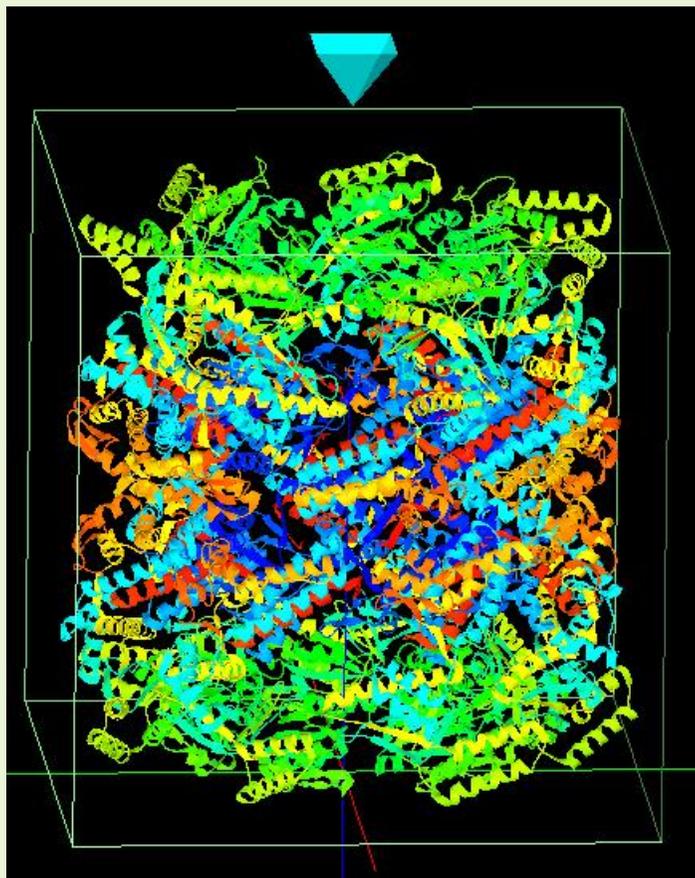
試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
1.0E-6[C/m²]



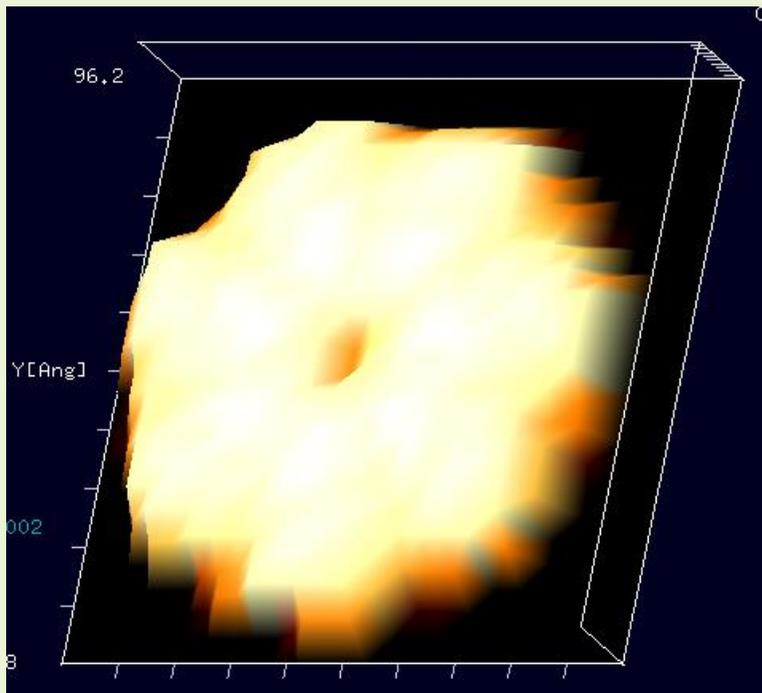
探針の感じるz方向の
力の分布

最大値: -1.82[pN]

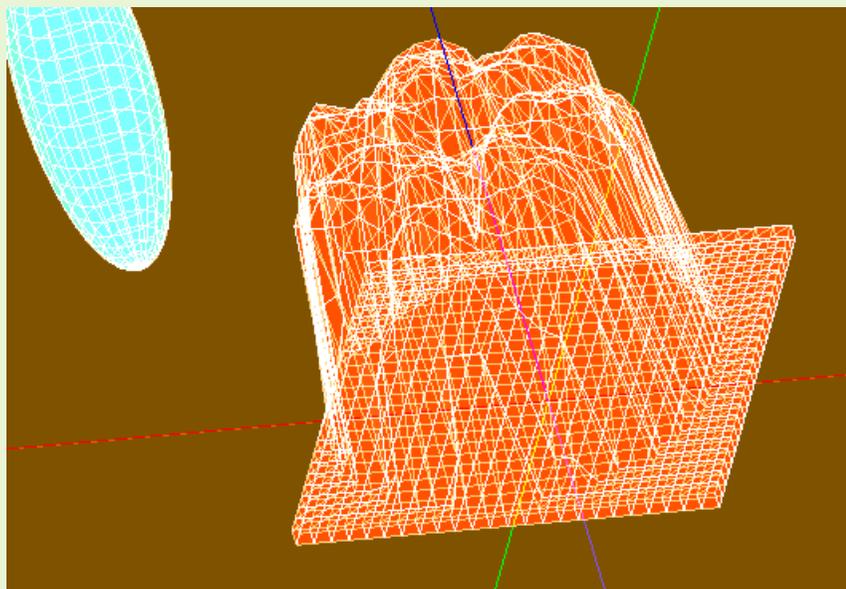
最小値: -12.7[pN]



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、
0.8[nm]の分解能で得られたAFM像

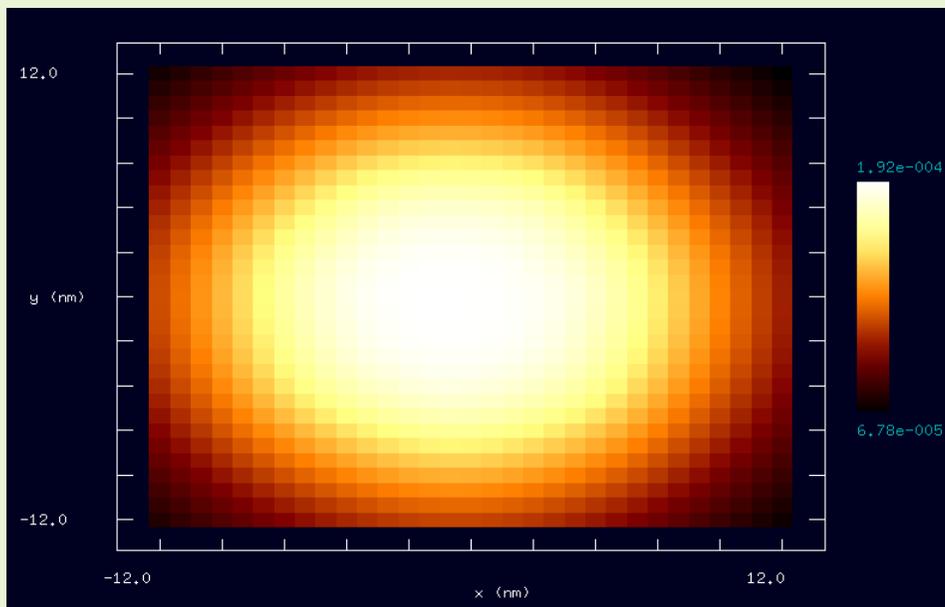


探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 1.62[nm]

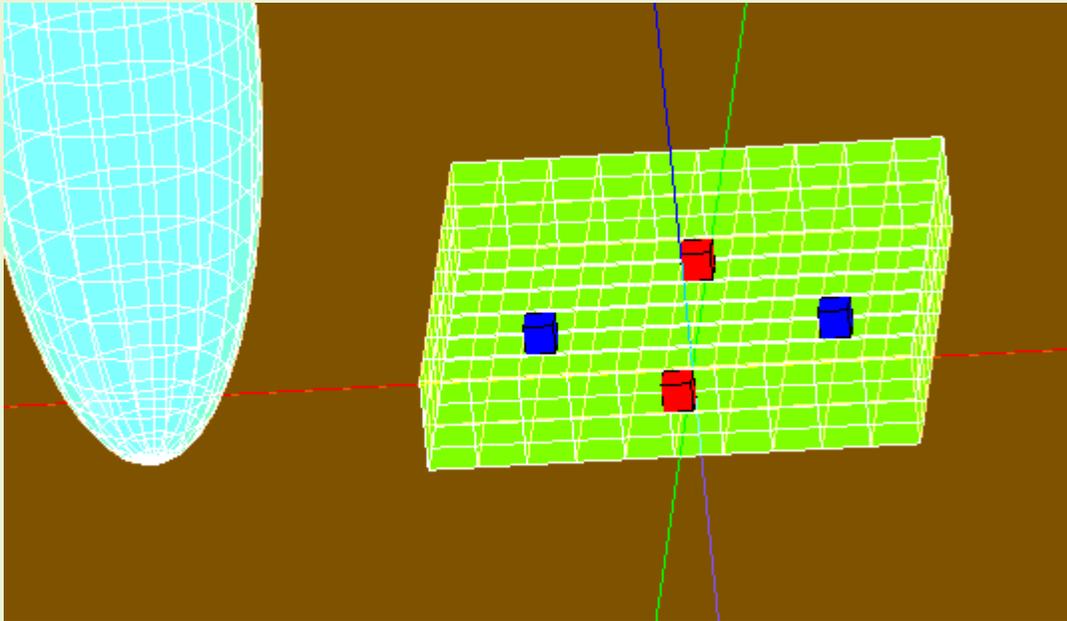
試料形状 横: 19.2[nm]
縦: 19.2[nm]
高さ: 15.9[nm]

試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
1.0E-6[C/m²]



試料のLCPD像
最大値: 1.92E-4[V]
最小値: 6.78E-5[V]

内部に正負四個の電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO_2)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

基板の電位: 0[V]

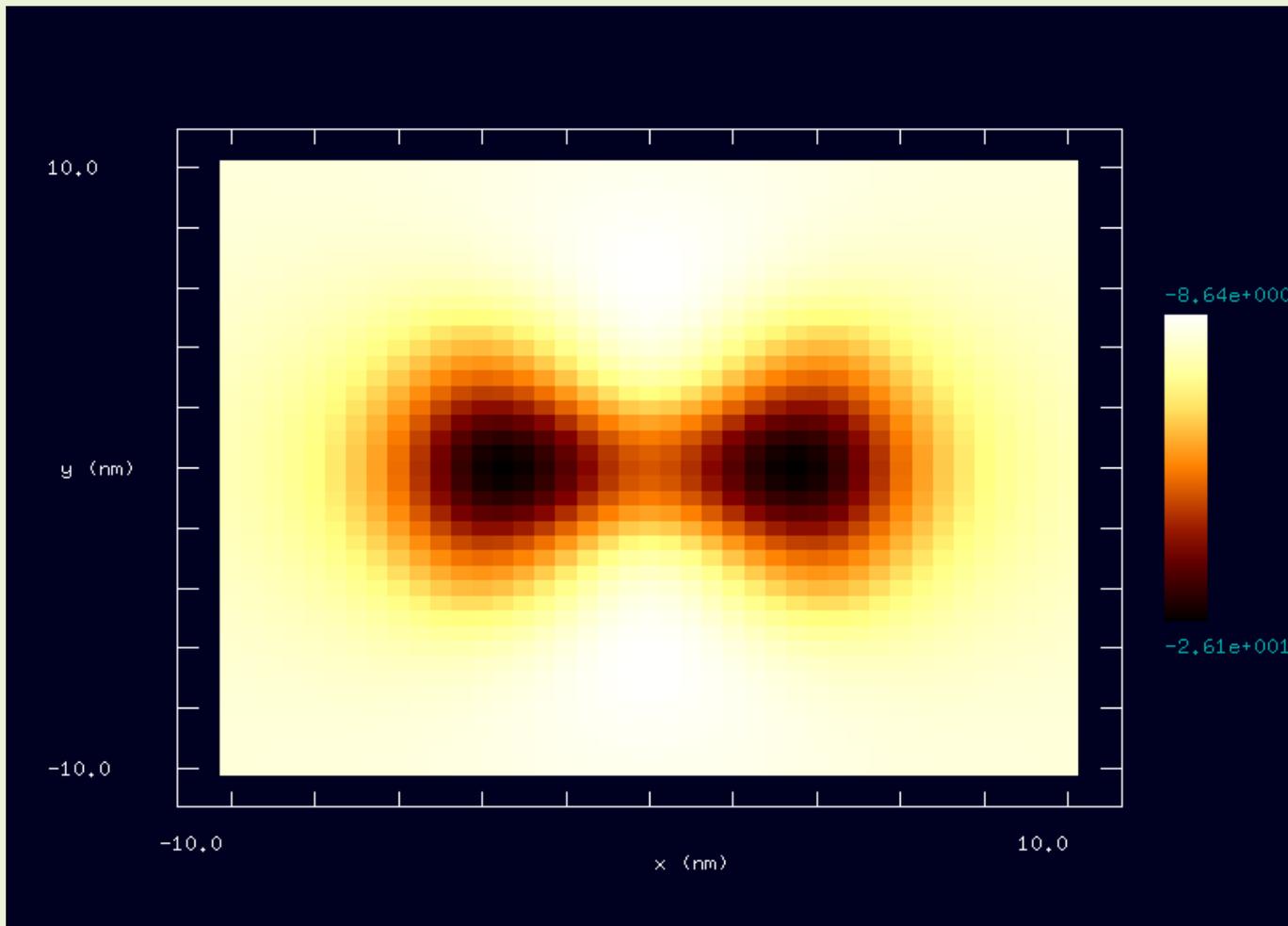
探針-試料間の最短距離: 1[nm]

試料の縦、横長さ: 10[nm]

試料の高さ: 2[nm]

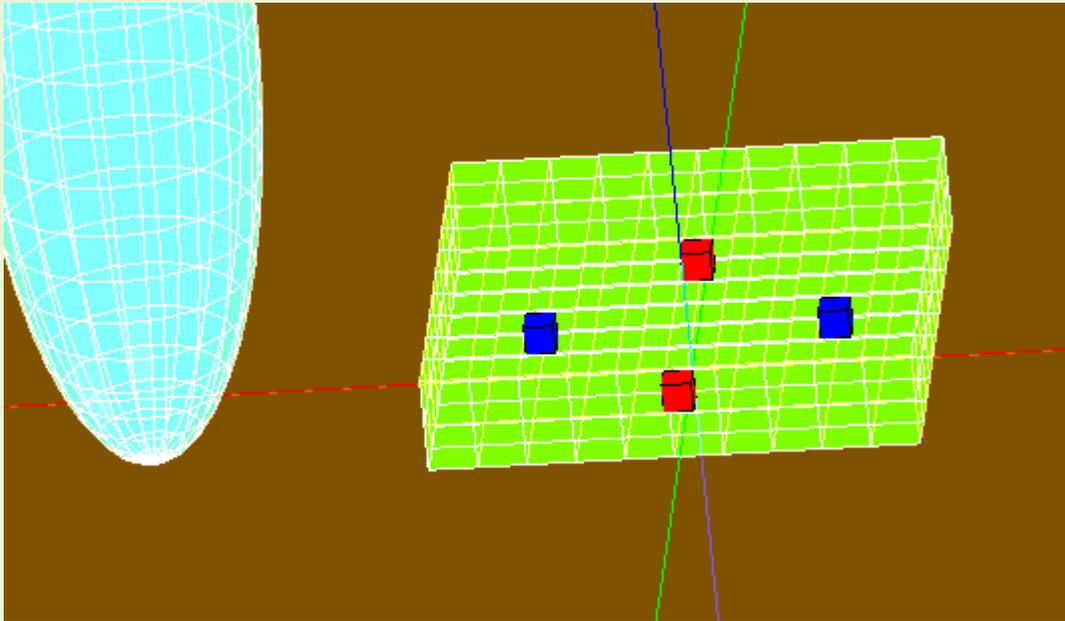
試料の比誘電率: 3.8

試料内部に、正負四個の電荷が配置されている



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: -8.64 [pN]
最小値: -26.1 [pN]

内部に正負四個の電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO_2)の
LCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]

基板の電位: 0[V]

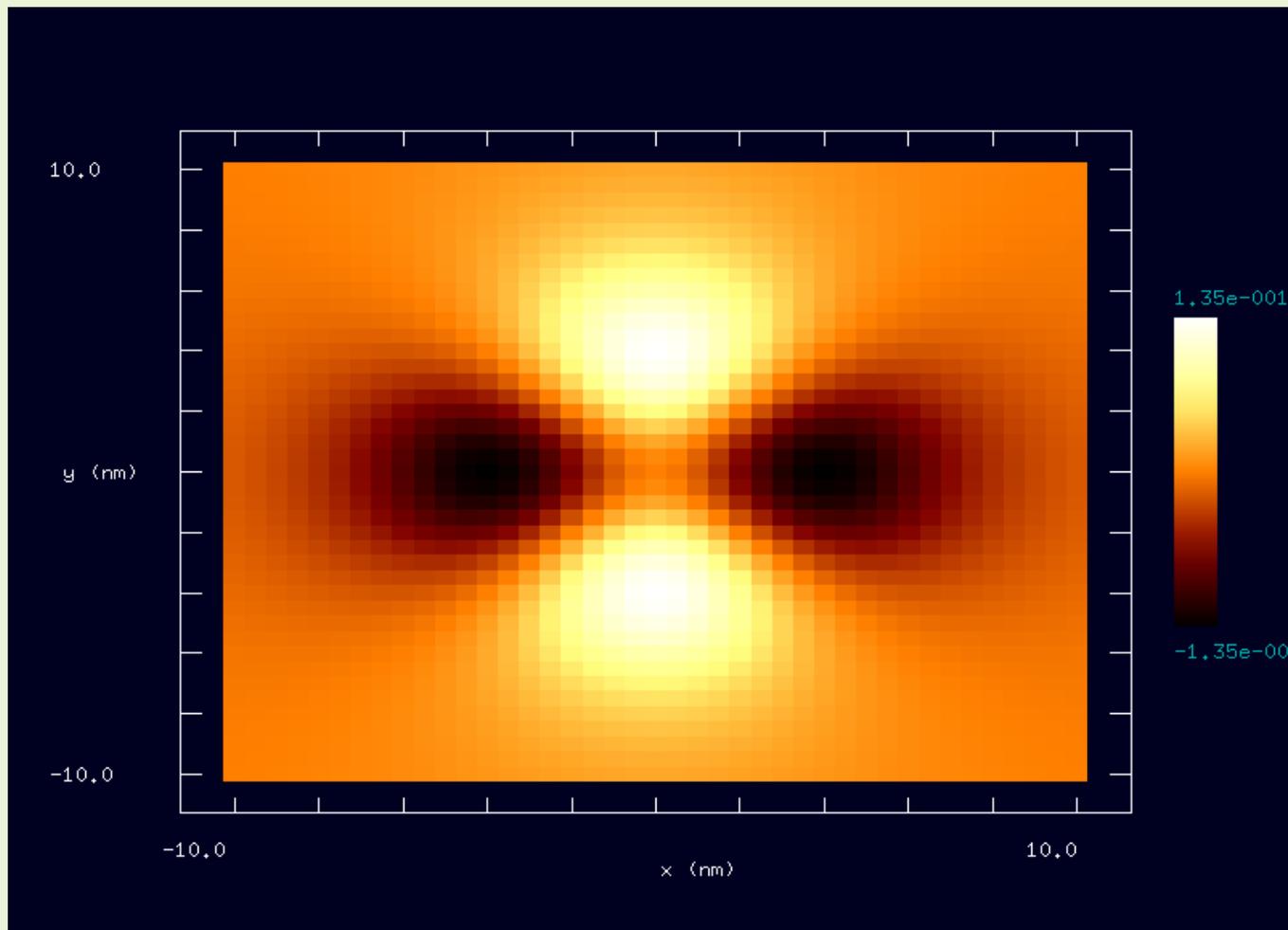
探針-試料間の最短距離: 1[nm]

試料の縦、横長さ: 10[nm]

試料の高さ: 2[nm]

試料の比誘電率: 3.8

試料内部に、正負四個の電荷が配置されている



試料のLCPD像
最大値: 0.135[V]
最小値: -0.135[V]

世界初SPM「実験—計算」画像比較型・世界標準仕様(計算機能)、粘弾性接触解析手法新規適用、及び DFTB計算元素69種活用に依り、あらゆる(有機・無機)化合物に対してシミュレーションが、各研究テーマ及び用途区分に対して、実行可能です。

各研究テーマ

バイオ・ソフトマテリアル

繊維状高分子

有機半導体

金属・無機半導体

触媒

リチウム電池・透明電極

SPMシミュレータはPHASE/0のプリプロセッサとして運用

用途区分

食品

製薬

化粧品

バイオ

合成ゴム

医療用品

繊維

化学合成

炭素素材

プラスチック

電子デバイス

有機EL

半導体素子

ハードディスク

金属材料

セラミックス

情報通信機器

自動車

化学プラント

バッテリー

液晶

販売形態

ライセンス買取契約

レンタル契約

統合型セット

Standard型

DFTBを除くすべてのソルバのセットです

バイオ・ソフトマテリアル向け

Professional型

DFTBを含むすべてのソルバのセットです
元素の種類を12、27、69種類と選べます

あらゆる材料分野向け

構成ソルバ型セット

構成ソルバと、Analyzer、SetModelの組み合わせセットです

GeoAFM型

FemAFM型

LiqAFM型

CG型

MD型

バイオ・ソフトマテリアル向け

DFTB型

元素の種類を12、27、69種類と選べます

無機・有機材料向け

ソフトウェアはCD-ROMの形で郵送されます。

ライセンスファイルを発行することで管理を行っています。メンテナンス費用、レンタル料が支払われない場合、ライセンスファイルが期限切れとなり、ソフトは使用不可能となります。

各販売セットの特徴

Standard型

統合型セット

- DFTB以外のすべてのソルバを含んでいます
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- Protein Data Bankで提供されている分子構造データに対応しています
- 探針と試料の表面張力による凝着等の粘弾性接触力学を調べることができます
- 分子動力学法を使って、探針を試料に押し込んだときの変形を再現できます
- 試料の緩和現象による変形を調べることができます

Professional型

統合型セット

- すべてのソルバを含んでいます(DFTBも含みます)
- バイオ・ソフトマテリアルに加えて、無機・有機半導体等のあらゆる化合物を調べることができます
- 量子力学的ソルバDFTBで使用可能な元素の種類を、12、27、69種類の中から選べます
- 使用可能な元素が合計69種類と多いため、事実上、あらゆる化合物が調べられます
- STM、STS、AFM、KPFMのシミュレーションが可能です
- 試料化合物のバンド構造を計算する機能が付いています
- 第一原理計算ソフトPHASE/0のプリプロセッサ(入力データ準備)機能が付いています

GeoAFM型

構成ソルバセット

- GeoAFM、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- Protein Data Bankで提供されている分子構造データに対応しています
- 計算時間は約1分弱で非常に高速で動作します

FemAFM型

構成ソルバセット

- FemAFM、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- 有限要素法により、探針、試料の変形を調べることができます
- 探針と試料の表面張力による凝着等の粘弾性接触力学を調べることができます
- 周波数シフトAFM像もシミュレーション可能です

LiqAFM型

構成ソルバセット

- LiqAFM、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- 液中環境下でのカンチレバーの振動を解析できます
- 探針と試料の表面張力による凝着等の粘弾性接触力学を調べることができます
- 周波数シフト・位相シフトAFM像もシミュレーション可能です

CG型 構成ソルバセット

- CG、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- エネルギー的に安定な分子構造を探索し、緩和現象を再現します
- 探針の感じるフォースカーブを求めることができます

MD型 構成ソルバセット

- MD、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- 分子動力学法により、試料の変形を調べることができます
- 探針の感じるフォースカーブを求めることができます

DFTB型 構成ソルバセット

- DFTB、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル、無機・有機半導体等、あらゆる材料研究分野でご利用できます
- 量子力学的ソルバDFTBで使用可能な元素の種類を、12、27、69種類の中から選べます
- 使用可能な元素が合計69種類と多いため、事実上、あらゆる化合物が調べられます
- STM、STS、AFM、KPFMのシミュレーションが可能です
- 試料化合物のバンド構造を計算する機能が付いています
- 第一原理計算ソフトPHASE/0のプリプロセッサ(入力データ準備)機能が付いています

統合型SPMシミュレータ購入契約体系・価格(DFTB69元素・標準装備)

Standard 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	160万(注)	270万
	メンテナンス費用	30万/年(注)	40万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	81万/年	108万/年
	4年目以降	40万/年	60万/年

Standard型: DFTB以外のすべてのソルバが含まれています
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です

(注)学術機関による買い取り契約の場合、初年度は合計190万円の支払いとなります。

Professional 型	DFTB 12元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	210万	350万
	メンテナンス費用	30万/年	48万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	90万/年	120万/年
	4年目以降	50万/年	70万/年

Professional型: すべてのソルバと、DFTBでの12種類の元素が含まれています
あらゆる材料分野でご利用できます(2017/7改正、DFTB69元素標準装備・価格転嫁無し)

統合型SPMシミュレータ購入契約体系・価格

Professional 型	DFTB 27元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	210万	350万
	メンテナンス費用	30万/年	48万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	90万/年	120万/年
	4年目以降	50万/年	70万/年

**Professional型: すべてのソルバと、DFTBでの27種類の元素が含まれています
あらゆる材料分野でご利用できます(2017/7改正、DFTB69元素標準装備・価格転嫁無し)**

Professional 型	DFTB 69元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	210万	350万
	メンテナンス費用	30万/年	48万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	90万/年	120万/年
	4年目以降	50万/年	70万/年

**Professional型: すべてのソルバと、DFTBでの69種類の元素が含まれています
あらゆる材料分野でご利用できます(2017/7改正、DFTB69元素標準装備・価格転嫁無し)**

SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

GeoAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	140万	160万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	50万/年	70万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

GeoAFM型 : Analyzer、SetModel、GeoAFMの3本セットです
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

FemAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	140万	180万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	50万/年	70万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

FemAFM型 : Analyzer、SetModel、FemAFMの3本セットです
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

LiqAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	150万	190万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	50万/年	70万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

LiqAFM型: Analyzer、SetModel、LiqAFMの3本セットです
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

CG 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	150万	190万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	50万/年	70万/年
	4年目以降	55万/年	65万/年

CG型: Analyzer、SetModel、CGの3本セットです
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

MD 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	150万	190万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	50万/年	70万/年
	4年目以降	55万/年	65万/年

MD型: Analyzer、SetModel、MDの3本セットです
 バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

DFTB 型	DFTB 12元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	60万/年	80万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

DFTB型: Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素12種類の場合の価格です。
 半導体等の無機・有機材料分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

DFTB 型	DFTB 27元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	80万/年	100万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

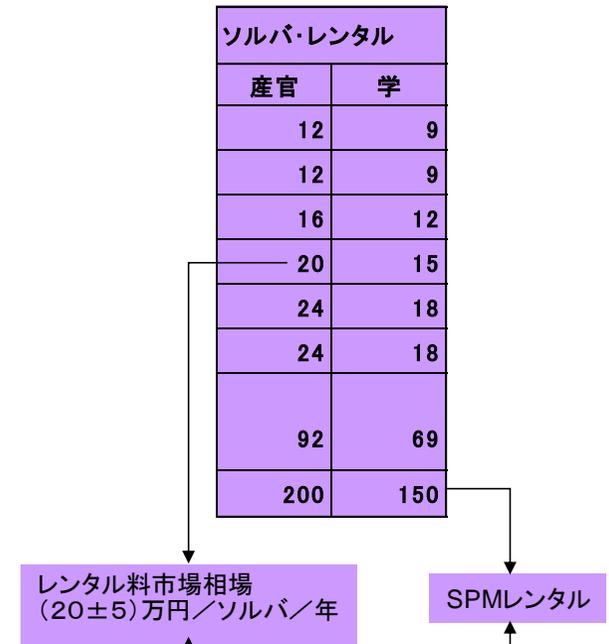
DFTB型: Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素27種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

DFTB 型	DFTB 69元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	60万/年	80万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

DFTB型: Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素69種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

SPMシミュレータ構成ソルバ(7本)の価格(買取・レンタル)の設定

Professional型		難度	構成ソルバ・マスマリット価格(買取)							
			7	6	5	4 ●	3	2	1	
Analyzer	実験データ画像処理プロセッサ	0.60	20.6万	22.1万	23.7万	25.3万	26.9万	28.4万	30万	
GeoAFM	高速相互予測AFMシミュレータ	0.60	20.6万	22.1万	23.7万	25.3万	26.9万	28.4万	30万	
FemAFM	連続弾性体AFMシミュレータ ●	0.80	27.4万	29.5万	31.6万	33.7万 ●	35.8万	37.9万	40万	
LiqAFM	液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ	1.00	34.3万	36.9万	39.5万	42.1万	44.8万	47.4万	50万	
CG	構造最適化AFM像シミュレータ ●	1.20	41.1万	44.3万	47.4万	50.6万 ●	53.7万	56.9万	60万	
MD	分子動力学AFM像シミュレータ ●	1.20	41.1万	44.3万	47.4万	50.6万 ●	53.7万	56.9万	60万	
DFTB	量子論的SPM像シミュレータ ●	1.60	54.8万	59万	63.2万	67.3万 ●	71.6万	75.8万	80万	
構成ソルバ7本毎の設定価格の総和 学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格(基準値) 学(アカデミック)への特別配慮 239.9/350			239.9万	構成ソルバ7本毎の設定価格の総和 (市場相場に遜色なし) 産・官SPM価格(基準値)			350万			
			239.9万				350万			



Standard型		難度	構成ソルバ・マスマリット価格(買取)						
			6	5	4	3 ▲	2	1	
Analyzer	実験データ画像処理プロセッサ	0.60	17.8万	20.2万	22.7万	25.1万	27.6万	30万	
GeoAFM	高速相互予測AFMシミュレータ ▲	0.60	17.8万	20.2万	22.7万	25.1万 ▲	27.6万	30万	
FemAFM	連続弾性体AFMシミュレータ	0.80	23.7万	27.0万	30.2万	33.5万	36.7万	40万	
LiqAFM	液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ ▲	1.00	29.6万	33.7万	37.8万	41.9万 ▲	45.9万	50万	
CG	構造最適化AFM像シミュレータ	1.20	35.6万	40.4万	45.3万	50.2万	55.1万	60万	
MD	分子動力学AFM像シミュレータ ▲	1.20	35.6万	40.4万	45.3万	50.2万 ▲	55.1万	60万	
構成ソルバ6本毎の設定価格の総和 学(アカデミック)への特別配慮 160/270			160.1万	構成ソルバ6本毎の設定価格の総和 (市場相場に遜色なし)			270万		
学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格 (基準値相当)				産・官SPM価格 (基準値相当)					



統合型SPMシミュレータ購入契約体系・価格(非正規版(DLVO追加、DFTB111元素へ追加後まで、参考価格))

Standard 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	160万	270万
	メンテナンス費用	30万/年	40万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	81万/年	108万/年
	4年目以降	40万/年	60万/年

Standard型: DFTB以外のすべてのソルバが含まれています
 バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です

(注)学術機関による買い取り契約の場合、初年度は合計190万円の支払いとなります。

Professional 型	DFTB 12元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	210万	350万
	メンテナンス費用	30万/年	48万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	90万/年	120万/年
	4年目以降	50万/年	70万/年

Professional型: すべてのソルバと、DFTBでの12種類の元素が含まれています
 あらゆる材料分野でご利用できます

統合型SPMシミュレータ購入契約体系・価格

Professional 型	DFTB 27元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	270万	450万
	メンテナンス費用	50万/年	60万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	100万/年	140万/年
	4年目以降	65万/年	80万/年

Professional型: すべてのソルバと、DFTBでの27種類の元素が含まれています
あらゆる材料分野でご利用できます

Professional 型	DFTB 69元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	343万	500万
	メンテナンス費用	50万/年	60万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	150万/年	200万/年
	4年目以降	65万/年	80万/年

Professional型: すべてのソルバと、DFTBでの69種類の元素が含まれています
あらゆる材料分野でご利用できます

SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

GeoAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	168万	210万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	72万/年	90万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

**GeoAFM型 : Analyzer、SetModel、GeoAFMの3本セットです
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です**

FemAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	184万	230万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	80万/年	100万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

**FemAFM型 : Analyzer、SetModel、FemAFMの3本セットです
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です**

SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

LiqAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	88万/年	110万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

LiqAFM型: Analyzer、SetModel、LiqAFMの3本セットです
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です

CG 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	88万/年	110万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

CG型: Analyzer、SetModel、CGの3本セットです
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です

SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

MD 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	88万/年	110万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

**MD型: Analyzer、SetModel、MDの3本セットです
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です**

DFTB 型	DFTB 12元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	264万 + 指定元素使用料	330万 + 指定元素使用料
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	72万/年	90万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

**DFTB型: Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素12種類の場合の価格です。
半導体等の無機・有機材料分野に最適です**

SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

DFTB 型	DFTB 27元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	264万 + 指定元素使用料	330万 + 指定元素使用料
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	80万/年	100万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

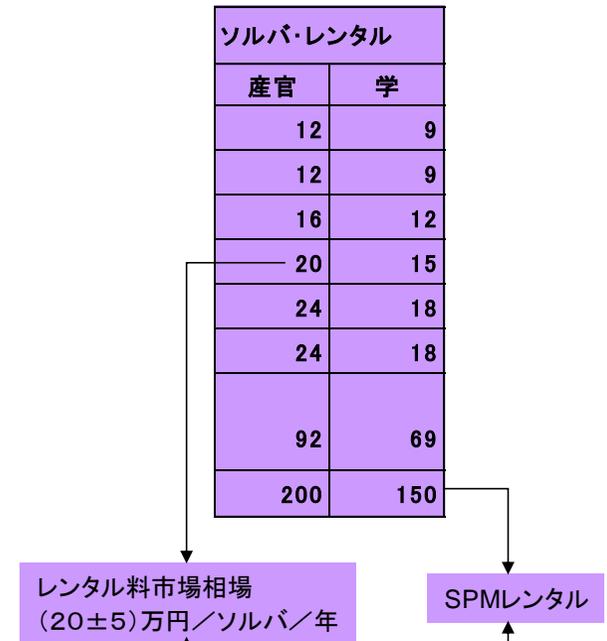
DFTB型 : Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素27種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です

DFTB 型	DFTB 69元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	264万 + 指定元素使用料	330万 + 指定元素使用料
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	88万/年	110万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

DFTB型 : Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素69種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です

SPMシミュレータ構成ソルバ(7本)の価格(買取・レンタル)の設定

Professional型		難度	構成ソルバ・マスマリット価格(買取)							
			7	6	5	4 ●	3	2	1	
Analyzer	実験データ画像処理プロセッサ	0.60	20.6万	22.1万	23.7万	25.3万	26.9万	28.4万	30万	
GeoAFM	高速相互予測AFMシミュレータ	0.60	20.6万	22.1万	23.7万	25.3万	26.9万	28.4万	30万	
FemAFM	連続弾性体AFMシミュレータ ●	0.80	27.4万	29.5万	31.6万	33.7万 ●	35.8万	37.9万	40万	
LiqAFM	液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ	1.00	34.3万	36.9万	39.5万	42.1万	44.8万	47.4万	50万	
CG	構造最適化AFM像シミュレータ ●	1.20	41.1万	44.3万	47.4万	50.6万 ●	53.7万	56.9万	60万	
MD	分子動力学AFM像シミュレータ ●	1.20	41.1万	44.3万	47.4万	50.6万 ●	53.7万	56.9万	60万	
DFTB	量子論的SPM像シミュレータ ●	4.60	157.7万	169.8万	181.8万	193.9万 ●	205.9万	218万	230万	
構成ソルバ7本毎の設定価格の総和 学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格(基準値) 学(アカデミック)への特別配慮 342.9/500			342.9万	構成ソルバ7本毎の設定価格の総和 (市場相場に遜色なし) 産・官SPM価格(基準値)				500万		
			342.9万					500万		



Standard型		難度	構成ソルバ・マスマリット価格(買取)							
			6	5	4	3 ▲	2	1		
Analyzer	実験データ画像処理プロセッサ	0.60	17.8万	20.2万	22.7万	25.1万	27.6万	30万		
GeoAFM	高速相互予測AFMシミュレータ ▲	0.60	17.8万	20.2万	22.7万	25.1万 ▲	27.6万	30万		
FemAFM	連続弾性体AFMシミュレータ	0.80	23.7万	27.0万	30.2万	33.5万	36.7万	40万		
LiqAFM	液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ ▲	1.00	29.6万	33.7万	37.8万	41.9万 ▲	45.9万	50万		
CG	構造最適化AFM像シミュレータ	1.20	35.6万	40.4万	45.3万	50.2万	55.1万	60万		
MD	分子動力学AFM像シミュレータ ▲	1.20	35.6万	40.4万	45.3万	50.2万 ▲	55.1万	60万		
構成ソルバ6本毎の設定価格の総和 学(アカデミック)への特別配慮 160/270			160.1万	構成ソルバ6本毎の設定価格の総和 (市場相場に遜色なし)				270万		
学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格 (基準値相当)				産・官SPM価格 (基準値相当)						



ユーザ様の意見を拝聴させて頂く、特別措置として、 販売契約以外、取引形態の弾力的運用のご案内

- DFTB計算元素種類を削減することで、価格ダウンご提案。
- SPM実験装置メーカー様、販売代理店様、戦略的コラボご一緒の方々には、業務提携次元での価格ダウン、ご提案。
- レンタル契約適用時には、レンタル料単金／月を下げ、レンタル契約期間を延ばし、初期支払いを軽くする。
- SPMシミュレーションでのカスタマイズ開発、シミュレーション委託、コンサル委託等、別立単金で見積書、申し上げます。

- 1) SPM導入前に、SPMシミュレータ実技習得の為に計算を体験希望の方へ
- 2) SPMユーザーの皆様がご研究されている、材料・試料の系につき、計算要望テーマの計算結果/自身で計算をご希望の方々
- 3) 購入前にSPMシミュレー機能を検証したいの方々へ
各位の計算テーマを、お試しとして計算してみて、或は計算に携わり、その結果を見て頂き、ソルバ製品の性能を評価頂けるコンサル致します。
- 4) SPMユーザーの皆様が研究/担当されている、材料・試料の系につき、計算要望テーマの計算の委託ご希望の方々
- 5) 粘弾性接触解析機能組込/DFTB元素27種使用可能I/「実験—計算」画像比較型SPMシミュレータへのコンサルテーション委託
計算実行可視化マニュアル相当・SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ操作支援システム、が示す運用手順に従う条件に立ち、
https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_assistant_top.htm
初心者から非専門家まで、参加者は「独力で計算実行工程を誰でもOJT的に完了させる手法」を獲得可能となります。
- 6) PHASEシステムソフトウェア ユーザーの皆様
<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/event/event.php?id=77>
<https://azuma.nims.go.jp/events/semi2015/semi20160119>