

YYYY社社長のご意向

(1) バイオ・ソフトマテリアル用AFMシミュレータの開発に力を入れるべきである。これは、バイオ・ソフトマテリアル研究用AFM実験装置の販売台数が、近年、堅調を保っているからである。

- 液中環境下でのカンチレバーの振動問題の取り扱い
- 粘弾性接触解析機能の充実
- マクロスケールのソルバーとして開発すべきである

上記の事項は、LiqAFMで対応済みである。特に、液中環境下でのカンチレバーの探針を調べるソルバーは完成されているとあって良い。また、粘弾性接触解析機能も出来上がっている。従って、この課題については、ここで、開発をいったん終了として良い。

(2) 古典電磁気学で調べる範囲で良いので、KPFM像シミュレーション、分極した試料の分析を実現すべきである。試料としては、たんぱく質のような巨大な分子を想定している。

上記の事項は、macroKPFMで対応済みである。分極した水分子のAFMシミュレーション画像は、macroKPFM, FemAFMのDLVO理論機能を使うことで対応済みである。従って、この課題については、ここで、開発をいったん終了として良い等。

(3) スピン偏極STMのシミュレーションの開発について検討してみる価値はある。しかし、この課題に取り組むのは、当分、先が良い。これは、半導体・無機材料研究用のSTM実験装置の販売台数が、近年、急激に落ち込んでいるからである。


➡ DFTBソルバーによる、スピン偏極STMシミュレータの開発に関しては、基本仕様書を作成した段階でストップしている。この開発を再開するのは、ソフト・バイオマテリアル用AFMシミュレータの開発が完了してからも、遅くないと思われる。従って、この課題は後回しにして良い。

(4) 密度汎関数法ソルバーDFTBとPHASE/Oとの連携についてはあるが、この機能を必要とする研究者の数は多くないと考えられる。その理由は、現在、数を増しているバイオ・ソフトマテリアルAFM実験装置ユーザーは、PHASE/Oとの連携を、あまり必要と考えないはずだからである。従って、この課題に取り組むのは、当分先が良い。

➡ DFTBソルバーとPHASE/Oとの連携は、途中までで停止している。DFTBソルバーで原子構造の形状データをcube形式で出力するようにしたが、このデータをPHASE/Oが受け付けるかどうか確認していない。ソフト・バイオマテリアル用AFMシミュレータの開発が完了してからも、遅くないと思われる。それまではSPMシミュレータに付随するDFTBバンド構造計算実行の手引書、活用する運用の方針に立つ。

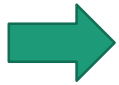
株式会社XXXX訪問纏めから(2017年10月20日)

株式会社XXXXでは、 μm オーダーのKPFM観察、誘電率、分極など、様々な試料・探針の電気特性に興味を持っている。例えば、金属基板に試料を乗せ、探針でSPM観察する際、探針に3から4個の水分子が付着した場合の影響について、興味を持っている。



この問題に関しては、macroKPFMソルバー、DLVO理論を考慮したmacroKPFMソルバー、DLVO理論とファンデルワールス力を考慮したmacroKPFMソルバー、DLVO理論を考慮したFemAFMソルバーで対応済みである。基板上に吸着した水分子も、基板データ上に正負の対の電荷を置いて分極したモーメントを表現することで対応できている。従って、この項目は、いったん、開発完了と見なして良い。

μm オーダーでKPFM等の電気的特性を調べるシミュレータがあれば良い。古典電磁気学の範囲で十分。また、SPMユーザーは、実験結果から、物性値を求めることを望んでいる。物性値をシミュレータに代入してSPM推定画像を得るのと、丁度逆のことを要求している。このような逆問題に対応できれば、ユーザーのニーズに適合する。



古典電磁気学の範囲で、 μm オーダーのKPFM等の電気的特性を取り扱う問題に関しては、macroKPFMソルバーで、対応可能となっている。従って、この課題に関しては、いったん、開発終了と見なして良い。

LiqAFMの粘弾性を考慮したtappingモードのシミュレーションには興味を持てる。大気中でカンチレバーを動かし、試料表面に薄い水の被膜が有るような系のシミュレーションは興味深い。



この問題に関しては、LiqAFMタッピング機能で対応可能である。シリコン基板のような、硬い試料を仮定し、それに対して、液体の表面張力を付与する。そうすれば、シリコン基板上に薄い液体の被膜ができていた様子を再現できる。粘弾性接触解析機能は、既に実装されているので、この機能を使って分析すれば良い。従って、この項目は、いったん、開発終了と見なして良い。

DLVO理論のように、電気二重層による斥力を考慮したシミュレーションには期待が持てる。メゾスコピック系のシミュレーションとして力を入れるべきである。



この問題に関しては、かなり良いレベルで解決されている。すでに、macroKPFMソルバー、FemAFMソルバーに、DLVO理論機能が実装されている。

どのソルバにおいても、単に、シミュレーションをするのではなく、物理的な量が分かりやすく計算・導出されるようにした方が望ましい。物理量が絶対的な値で表示されるように工夫してほしい。

塚田メモ

- 1 溶液中のソフトマター計測は重要。
計測データが解釈できるようになると良い。
- 2 探針のより大きな領域までの形状などが、計測データに効くこともある。
- 3 試料の物理量の絶対値を評価できるようになるようにすることが、重要。
- 4 たんぱく質などの動的な振る舞いまで
シミュレーションできるようになると良い。
- 5 様々な材質の微粒子の計測データについて、探針効果を明確に
デコンボリユートできるようになるとよい。

感想

- (1) 実験者、装置メーカーなどが、本当に欲しいと思っている
シミュレータ機能を把握して、それに対応することが必要。
- (2) 何がどこまでシミュレーションで分かることが
意義があるのかを知る必要がある。

短期課題

- (1) 溶液中の帯電試料のAFM計測シミュレーション
- (2) 大気中帯電試料のKPFM巨視的シミュレーション
- (3) 粘弾性系タッピングモードの具体化

塚田先生がお考えになっている、バイオ・ソフトマテリアルAFMシミュレータ

目的：バイオ系・高分子系・電気化学系のAFM計測に対応するシミュレータ開発

計測対象：高分子系、粘弾性系、生体ナノ構造（細胞、たんぱく質等）、電気化学系、接触系

液中、特に電界液中における探針－試料間力をDLVO力などで扱い、試料の変形を含めたAFMシミュレーションを効率良く、迅速に行う。試料の表面電荷・電気二重層の効果を含め、バイオ系や電気化学系に対応する。

➡ この問題については、macroKPFM, FemAFMに、DLVO理論機能を付与することで、既に対応済みである。

メニスカス形成距離を接触問題で扱い、電気化学SPM用のシミュレーションを行う。

➡ リリースされたソルバーの使用実績を検証の上、展開方針を決める。

散逸量を計算して、バイオ系や粘弾性系・接触系のAFM法を提案し、そのシミュレータを開発する。



散逸量の計算は、LiqAFM, FemAFMに粘弾性接触問題解析機能を付与する際、フォースカーブがヒステリシスを持つようにするモデルを構築することで対応してきた。散逸量の計算は、AFM位相シフトの計算において必要である。従って、これまでの開発で、既に散逸量の計算は行ってきたといえる。

SPMシミュレータの現時点での構成

Analyzer SPM実験画像データのデジタル処理プロセッサ

GeoAFM 幾何学情報に基づく高速相互予測AFMシミュレータ

FemAFM 連続弾性体AFMシミュレータ DLVO理論機能追加済み

LiqAFM 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ 簡易逆問題機能追加済み

macroKPFM マクロスケールKPFMシミュレータ DLVO理論機能追加済み

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 量子論的SPMシミュレータ

SetModel 原子モデル作成ツール

LiqAFMに本格的な逆問題計算機能を追加する作業が進行中

LiqAFMに追加する本格的な逆問題機能について

現状では、以下の特徴を持つ逆問題計算機能が実装されている。

- 与えられたAFM周波数シフト、位相シフトの値から、試料のヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの三つの物理量について推定する。
- 三つの物理量のうち、一つの物理量の値が確定しているとして、残り二つの物理量を推定する。
- AFM周波数シフト、位相シフトの値のずれ関数を定義し、そのずれ関数が最小となる点を探す、一種の最適化問題として定式化されている。
- 推定方法として、二つの物理量から成る2次元パラメータ空間を、格子メッシュ状に分割して、すべての格子点について、ずれ関数を計算する`global_mode`が用意されている。
- メッシュ上の格子点を、ランダムウォークの要領で推移し、最小のずれ関数値を与える点を推測する`local_mode`が用意されている。
- 2次元パラメータ空間上で、ずれ関数値が極小となる直線を、最小二乗法の方法で求め、その直線上でずれ関数値が最小となる点を探す方法も用意されている。

青い文字が、新たに追加される機能

赤い文字が、新たに追加されたバイオ・ソフトマテリアル関連ユーザー向けの機能

ソルバー	特徴	機能
Analyzer 実験データ画像 処理プロセッサ	シミュレーションの前処理を行う。 実験データを補正して計算用入力 データへ変換する。探針形状の予 測と形状効果の補正を行う。	<ul style="list-style-type: none">・探針形状推定機能・メーカー各社のSPM実験データの読み込み機能・画像データの傾斜補正機能等
SetModel 原子モデリング ツール	シミュレーションの前処理を行う。 探針と試料の原子構造モデルを作 成する。	<ul style="list-style-type: none">・半導体薄膜等の結晶性の周期構造を持ったモデルを作成する機能・個々の原子を操作して欠陥・不純物や探針構造を作成する機能・他のソフトでモデリングした構造の読み込みや、終端に水素を付加する機能
GeoAFM 高速相互予測 AFMシミュレ ータ	像解像度は原子尺度ではなく、メ ゾからマクロスケールでのシミュ レーションである。精密でないが、 試料構造・探針構造・AFM像の二 つから、残りを一つを高速で予測 することができる。液中・大気 中・ソフトマター全てに対応する。 近似的ではあるが実用的といえる。	<ul style="list-style-type: none">・試料と探針から計測像を予測する機能・計測像と探針から試料形状を予測する機能・計測像と試料から探針形状を予測する機能・対象（コラーゲン、タンパク質分子）

実用・開発者向き

FemAFM 連続弾性体AFM シミュレータ

試料および探針の弾性変形を考慮して、メゾからマクロスケールの像解像度でAFMイメージを計算する。GeoAFMとの併用、あるいはLiqAFM(tapping)との併用で活用する。

DLVO理論シミュレーション機能が追加されている。

- ・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応
- ・単振動加振・二重加振／多モードに対応
- ・カンチレバーの共鳴曲線（真空中、大気中、液中）を描く
- ・マルチコア並列計算機能
- ・対象（コラーゲン、タンパク質分子）
- ・DLVO理論機能追加により、コロイド溶液中の電気二重層による斥力の効果が評価可能となった
- ・DLVO理論機能により、探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価できるようになった。また、ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べることも可能となった。
- ・ μm オーダーのKPFM観察、誘電率、分極など、様々な試料・探針の電気特性に興味を持っているユーザーに適している。例えば、金属基板に試料を乗せ、探針でSPM観察する際、試料表面に3から4個の水分子が付着した場合の影響について、シミュレーションが可能となった。
- ・電気二重層による斥力を考慮したシミュレーションによって、メゾスコピック系を調べることが可能になった。

LiqAFM (tapping)

液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ

液中のカンチレバー振動を考慮しつつ、ソフトマターおよび粘弾性凝着系のタッピングモードシミュレーションを行うことができる。単振子に射影した計算では、標準理論を用いると効率的である。適用領域は(液中)ソフトマター、高分子など広範囲であり、使いやすさニーズは高いと思われる。

簡易版の逆問題機能が追加されている。

- ・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応
- ・単振動加振・二重加振/多モードに対応
- ・カンチレバーの共鳴曲線（真空中、大気中、液中）を描く
- ・マルチコア並列計算機能
- ・対象（コラーゲン、タンパク質分子）

・逆問題解析機能が追加された。これにより、AFM周波数シフト、位相シフトの値から、試料のヤング率、表面張力、高さ情報が逆算できるようになった。

- ・タッピング機能が強化された。これにより、探針-試料間の粘弾性凝着効果を考慮したスキャンをシミュレーションすることが可能となった。
- ・タッピング・モードの逆問題計算機能が強化された。これにより、周波数シフト・位相シフトの観測データより、試料のヤング率、表面張力、高さ情報を逆算することが可能となった。
- ・粘弾性を考慮したタッピング・モードのシミュレーションによって、大気中でカンチレバーを動かす、試料表面に薄い水の被膜が有るような系のシミュレーションが実行可能となった。

macroKPFM
巨視的KPFM像シミュレータ

KPFM像シミュレーションを、 μm から nm のオーダーで行う。境界要素法を用いて、古典電磁気学のポテンシャル問題を解くことに相当する。
現在、DLVO理論機能追加作業中である。

- ・ 任意の形状の誘電体を試料として設定可能
- ・ 試料表面に電荷の分布を指定可能
- ・ 任意の位置の電荷を置くことができる
- ・ 対象(高分子、トナー粒子)
- ・ DLVO機能追加により、コロイド溶液中の電気二重層による斥力の効果が評価できる予定である。
- ・ DLVO理論機能により、探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価できるようになった。また、ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べるのが可能となった。
- ・ μm オーダーでKPFM等の電気的特性を調べるシミュレータである。古典電磁気学の範囲で調べる。
- ・ 将来的には、実験結果から物性値を求めることを望んでいるSPMユーザーに対して、物性値をシミュレータに代入してSPM推定画像を得るのと、丁度逆のことを行う、逆問題計算機能を提供する予定である。
- ・ 電気二重層による斥力を考慮したシミュレーションによって、メゾスコピック系を調べることが可能になった。

<p>CG 構造最適化AFM 像シミュレータ</p>	<p>古典力学法による原子モデルの最適化計算を行う。液中CG-RISM計算も可能である。 摩擦顕微鏡シミュレーション機能を追加する可能性あり。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 散逸像・周波数シフト像、フォースマップ等を計算 ・ 接触高さ、力一定のコンタクトモード像計算 ・ 振幅一定、周波数シフト一定のダイナミックモード像計算 ・ 対象（コラーゲン、タンパク質分子） ・ ゴム・高分子等の摩擦顕微鏡画像シミュレーション機能追加予定
<p>MD 分子動力学AFM 像シミュレータ</p>	<p>古典力学法による原子モデルの分子動力学計算を行う。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ フォースカーブの計算 ・ 三次元力場の計算、散逸像・周波数シフト像予測に対応 ・ AFM探針－測定試料間の相互作用に伴う試料の動的変形挙動を予測計算 ・ 液中計算に伴う溶媒の分子動力学計算 ・ 対象（コラーゲン、タンパク質分子）
<p>DFTB 量子論的SPM像 シミュレータ</p>	<p>量子力学計算による探針力とトンネル電流の計算を行う。 STM/STS, AFM, KPFMに対応している。KPFMはより実用的に拡張したいと考えている。 スピン偏極走査型トンネル顕微鏡シミュレーション機能追加可能性あり。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ AFM像：力、周波数シフト分布を計算 ・ STM像：高さ一定モードのトンネル電流像を計算 ・ STM像：電流一定モードのトポグラフィ像を計算 ・ KPFM像：局所接触電位差分布を計算 ・ 多重極静電力、軌道混成力の計算可(KPFM) ・ 分子修飾探針の影響を考慮可(STM) ・ 対象（半導体ドーパント） ・ バンド構造計算機能が追加された。PHASE/Oとの連携運用も視野に入れている。 ・ スピン偏極走査型トンネル顕微鏡シミュレーション機能により、スピントロニクス分野への展開も視野に入れている。

バイオ・ソフトマテリアル関連ユーザー向けに、新たに追加された機能

LiqAFM タッピング機能

探針-試料間の粘弾性凝着効果を考慮したスキャン

LiqAFM タッピング・モードの逆問題計算機能

周波数シフト・位相シフトの観測データより、試料のヤング率、表面張力、高さ情報を逆算

FemAFM_DLVO機能

探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価
ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べる

macroKPFM_DLVO機能

探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価
ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べる

今後の展開としては、逆問題機能が残されている