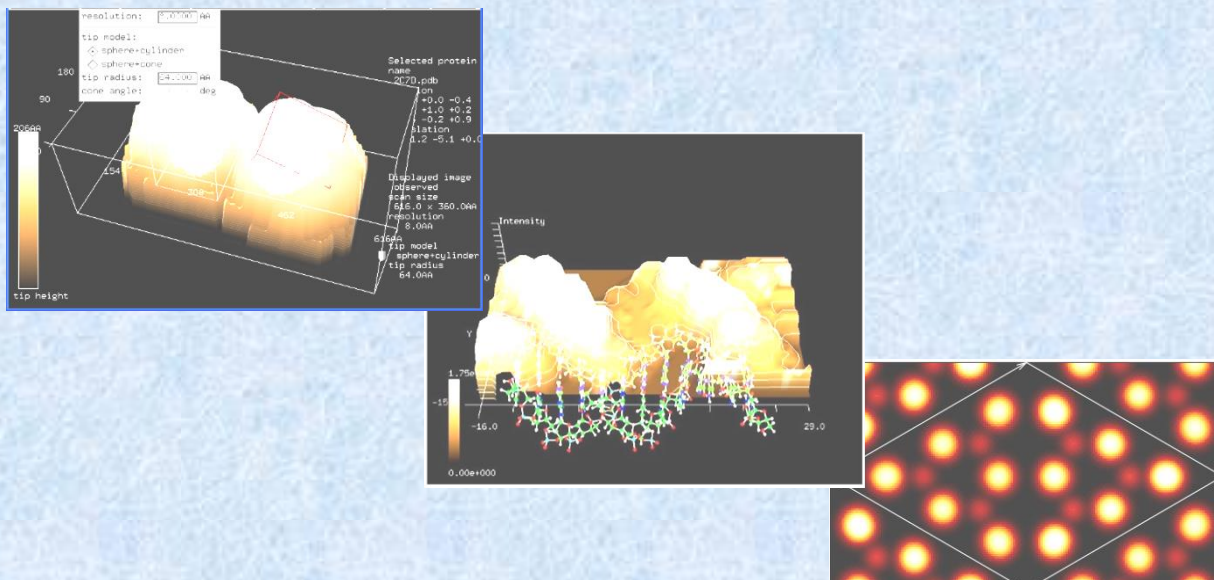


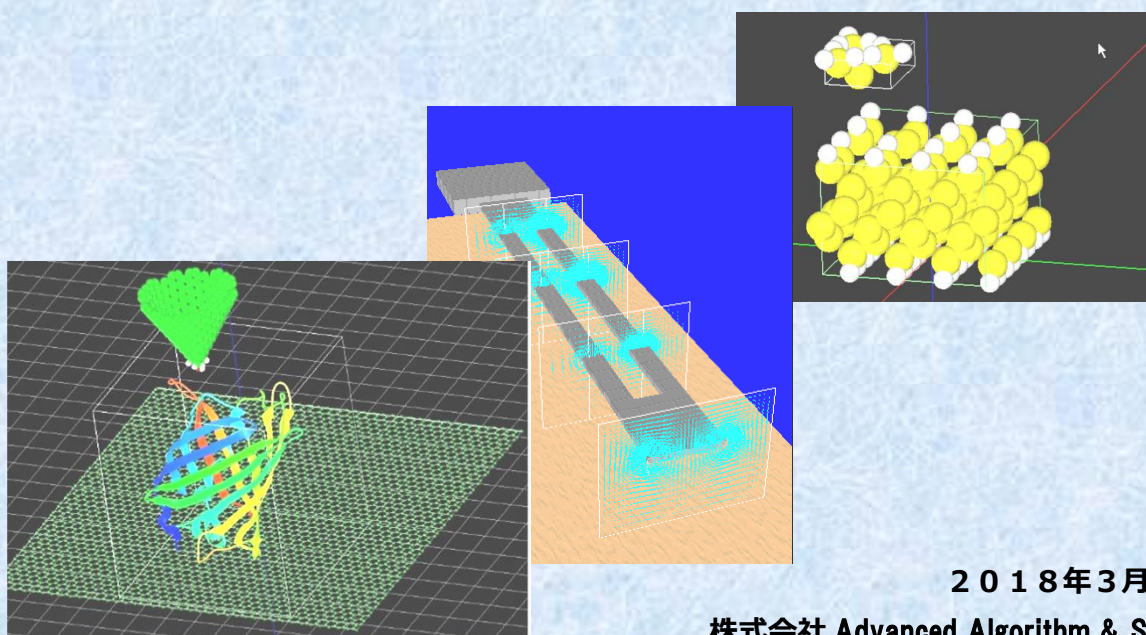


走査プローブ顕微鏡シミュレータ

Scanning Probe Microscope simulator

チュートリアル

ver.β



2018年3月24日
株式会社 Advanced Algorithm & Systems
東北大学 WPI-AIMR

目次

はじめに	5
SPM シミュレータの構成	6
第 1 章 ソフトウェアのインストールと準備	10
1 ソフトウェアのインストール	10
第 2 章 ソフトウェアの操作	19
1 GUI 概要	19
2 画面説明	20
4 プロジェクトのファイル操作	23
新規プロジェクト作成	23
既存プロジェクト読み込み	24
プロジェクトの表示	26
プロジェクトの保存	26
プロジェクトの終了	27
5 プロジェクトの編集	29
コンポーネント	29
(1) 追加・置換・削除	29
(2) 初期配置設定（移動・回転・リセット）	33
(3) データ表示・属性変更	35
スキャンエリア設定・表示	35
シミュレータ選択とパラメータ設定	36
6 シミュレーション	38
実行・再生・停止・一時停止	38
結果表示	39
7 可視化設定	45
コンポーネントの表示／非表示	45
視点の変更・Zoom All・拡大縮小・遠近法表示	45
View Option 設定	48
8 GUI の終了	52
9 その他	53
画面の表示／非表示	53
コンポーネントの選択	54
コンポーネントのデータベース登録	55
イメージの保存	55

第3章 計算事例	58
1 探針・試料・測定 AFM 像予測シミュレータ	58
はじめに	58
探針形状データおよび試料表面形状データから測定 AFM 像データを求める	59
探針形状データおよび測定 AFM 像データから試料表面形状データを求める	63
試料表面形状データおよび測定 AFM 像データから探針形状データを求める	66
2 連続弾性体 AFM シミュレータ	69
はじめに	69
高分子量ポリマーの測定 AFM 像データ予測(ノンコンタクトモード)	70
シリコン結晶表面の AFM 周波数シフト像データ予測(周波数シフト像モード)	74
シリコン結晶表面の AFM 粘弾性接触解析データ予測(粘弾性接触解析モード)	78
酸化シリコン基板上に付着している分極した水分子の AFM 画像予測(DLVO 理論解析モード)	83
3 液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ	92
はじめに	92
水中でのカンチレバーの動作	93
カンチレバーの周波数特性 —共鳴曲線—	104
より複雑な形状のカンチレバーを使ったシミュレーション	107
粘弾性接触力学を考慮したシミュレーション	109
タッピング機能による周波数シフト・位相シフト AFM 像シミュレーション	113
タッピング機能による逆問題シミュレーション	119
4 macroKPFM シミュレータ	128
帯電した球体の LCPD 像シミュレーション	128
帯電したミオシン分子の LCPD 像シミュレーション	132
DLVO 理論に基づいた、有機材料基板上に 12 個の電荷を置いた場合の LCPD 像シミュレーション	139
DLVO 理論およびファンデルワールス力を考慮した、無機材料基板上に 12 個の電荷を置いた場合の、探針が感じる力の像	149
5 原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータ	153
はじめに	153
真空中にあるペンタセンの周波数シフト像計算の例	153
水中フォースカーブ計算の例	155
アルカン分子のフォースカーブ計算の例	157
6 量子論的 SPM 像シミュレータ	160
はじめに	160
AFM (周波数シフト像) 計算の例	160

STM 計算の例	162
(1) トンネル電流像の計算.....	162
(2) STS の計算	165
KPFM 計算の例	167
バンド計算の例(1).....	169
バンド計算の例(2).....	170
第 4 章 実測画像－シミュレーション画像比較機能	179
1 概要	179
2 画面説明	180
3 Analyzer の起動と終了.....	181
4 ファイル操作.....	182
データファイルの読み込み	183
データファイルの保存	185
イメージの保存	185
5 画像のフーリエ解析・高解像度化.....	186
画像のフーリエ解析.....	186
画像高解像度化	190
6 ニューラルネットシミュレータ.....	192
ニューラルネットシミュレータの起動.....	193
学習データの設定.....	194
学習の実行・停止・一時停止	195
学習結果の保存と読み込み	196
学習結果のチェックと新規入力画像に対する試行	198
ウィンドウの表示／非表示・LogView のクリア	200
7 探針形状推定・探針影響除去	201
探針形状推定.....	201
探針影響除去.....	203
8 可視化設定	204
描画法の変更.....	204
視点の変更・Zoom All・拡大縮小・遠近法表示.....	210
9 デジタル画像処理機能	213
閾値による画像の二値化機能	213
コントラスト調整(ガンマ補正)機能.....	216
エッジ抽出(Sobel フィルタ処理)機能.....	216
ノイズ除去(メディアンフィルタ処理)機能.....	217
10 3 点で指定される角度の計測.....	218

11 その他	219
データ表示	219
傾き自動補正	220
Image View の整列・クローズ	220
第 5 章 試料モデリング機能	223
1 薄膜モデリング	223
はじめに	223
画面説明	224
モデリングツールの起動	225
画面の基本操作	225
薄膜モデルの作成事例	229
モデルの保存	232
既存モデルの読み込み	232
既存モデルのインポート	235
モデリングツールの終了	235
モデルの編集	236
結合情報の編集	238
Link Mode	239
Distance Mode	239
Angle Mode	240
編集操作の undo, redo	241
ツールバー	242
カーボンナノチューブ作成	243
グラフェンシート作成	245
SPM シミュレータでの利用に関する注意点	246
2 分子モデリング	249
はじめに	249
ChemSketch のダウンロード	249
OpenBabel のダウンロード	256
ChemSketch を用いたオクタン分子の作成	260
ChemSketch を用いたキニネ分子の作成	262
Open Babel を用いたファイル形式の変換	265
第 6 章 トラブルシューティング	269
シミュレータの実行に伴うトラブル	269
インストールに伴うトラブル	270

はじめに

走査プローブ顕微鏡（SPM）は、無機結晶表面から半導体微細構造、有機分子、自己組織化膜、タンパク質分子、DNA などの生体ナノ構造に至るまで、自然界あるいは人工的な超微細構造と微細スケールにおける物性を計測し、それらの機能開発を導く強力な実験法です。ところが、SPM の探針先端と試料間のナノ領域では、原子レベルの力学的・電子的・化学的過程が複雑に絡み合っているため、実験結果の解析に理論的な支援がなければ難しいのが現状です。

本シミュレータは、このような必要性に応えるために開発いたしました。従来の研究レベルの SPM シミュレーション技術をベースとした上で、問題に応じた計算規模の軽減が行えるように複数のソフトウェアを用意し選択できるようにいたしました。また、容易な操作を支援する GUI（グラフィカルユーザーインターフェース）を備えたものに仕上げています。

今後 SPM 計測技術は、物理化学、生命科学、電子情報工学、材料科学などの先端的基礎研究分野のみならず、半導体デバイス、表面処理技術、高分子材料、バイオ科学、農学、先端医療、環境触媒、燃料電池、洗剤・化粧品業界などの産業分野においても重要性を増すものと考えられます。このような分野での研究ツールとして本シミュレータがお役に立てば幸いです。

本書は弊社 SPM シミュレータの操作手順書となっており、ソフトウェアのインストールから操作手順、注意事項などをご紹介します。本書では初心者の方にも簡単にお使いいただけるよう、基本的な操作方法を中心に解説しております。詳細設定に関しましては別紙リファレンスマニュアルをご覧ください。

SPM シミュレータの構成

弊社 SPM シミュレータには、以下のように大きく 5 つの機能があります。

1. 高速相互予測 AFM シミュレータ
2. 連続弾性体 AFM シミュレータ
3. 液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ
4. 原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータ
5. 量子論的 SPM 像シミュレータ

そして、補助機能として薄膜構造作成ツールを備えています。

上記 5 つの機能は、以下の 6 つのシミュレータから構成されています。

① **GEO** ② **FEM** ③ **LIQ** ④ **CG** ⑤ **MD** ⑥ **DFTB**

それぞれのシミュレータの分類、機能概要、および対象領域は以下の表のようになっています。

表 1：各シミュレータの機能概要

	シミュレータ 名称	概要
高速相互予測AFMシミュレータ	GEO	探針形状データ、試料表面形状データ、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タ (シミュレーション計算においては、探針－試料間の相互作用を考慮せず、また、探針・試料の立体形状は変形しないと仮定して、純粋に幾何学的な計算により、データを相互予測する)
連続弾性体AFMシミュレータ	FEM	古典力学に基づき、探針－試料間でのファンデルワールス力を考慮し、その上で、探針及び試料が弾性方程式に従うと仮定して、測定AFM像を予測するシミュレータ (探針形状データおよび試料表面形状データを入力として、測定AFM像データを予測・出力する)
液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ	LIQ	液中でのカンチレバーの運動を、流体及び試料から受ける抗力とレバー自身の弾性変形を考慮して計算するシミュレータ
原子分子ナノ材料AFM像シミュレータ		古典力学に基づき、力場ポテンシャルを用いることにより探針－試料間の相互作用を計算し、AFM像を予測するシミュレータ
構造最適化AFM像シミュレータ	CG	エネルギー緩和法に基づいて試料の変形を考慮し、AFM像を予測するシミュレータ
分子動力学AFM像シミュレータ	MD	分子動力学法に基づいて試料の変形を考慮し、AFM像を予測するシミュレータ
量子論的SPM像シミュレータ		量子力学に基づいて系の電子状態を求め、探針－試料間の相互作用を計算。その結果からAFM像/STM像/KPFM像を予測するシミュレータ。
AFM像シミュレーション	DFTB	化学的相互作用力を計算し、AFM像を予測する機能
STM像シミュレーション		トンネル電流計算を行い、STM像を予測する機能
KPFM像シミュレーション		接触電位差を計算し、KPFM像を予測する機能

表 2：補助機能の機能概要

	概要	備考
試料表面構造予測機能	測定像とシミュレーション像を比較し、類似物から試料の構造を予測する機能	開発中
モデリング機能	初期構造の作成	
半導体薄膜構造作成ツール	結晶構造のデータからの半導体薄膜モデルの作成と編集	無償版に添付して配布
分子構造作成	分子構造の作成と編集	外部フリーソフトウェアで対応
たんぱく質	プロテインデータバンクの利用	外部フリーソフトウェアで対応

表3：各シミュレータの対象領域

	シミュレータ 名称	対象スケール		環境		対象 試料	その他特徴
		マクロ	ミクロ	真 真 中 中	液 中		
高速相互予測AFMシミュレータ	GEO	○	—	○	—	ナノスケール半 導体デバイス、 (生体)高分子 化合物	1秒以内で計算可能
連続弾性体AFMシミュレータ	FEM	○	—	○	—		試料、探針の変形を考慮可能
液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ	LIQ	○	—	○	○	高分子化合物、 生体分子等	
原子分子 ナノ材料 AFM像シ ミュレータ	構造最適化AFM像シミュ レータ	CG	—	○	●	有機低分子、無 機物質等	試料の変形を考慮可能
	分子動力学AFM像シミュ レータ	MD	—	○	●		試料の変形を考慮可能 温度を考慮可能
量子論的 SPM像シ ミュレータ	AFM像シミュレーション	DFTB	—	○	—		
	STM像シミュレーション		—	○	—		
	KPFM像シミュレーション		●	○	○		

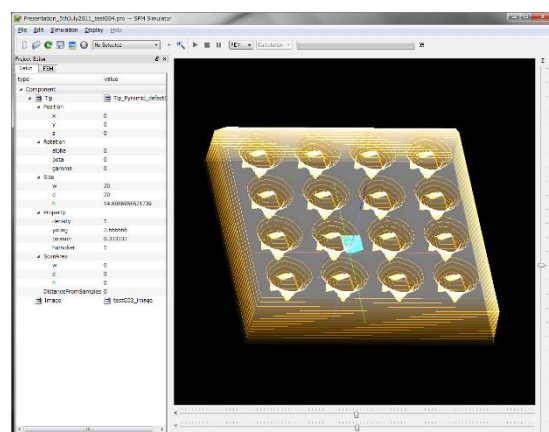
○：無償版、製品版ともに対応

●：製品版のみ対応

—：未対応

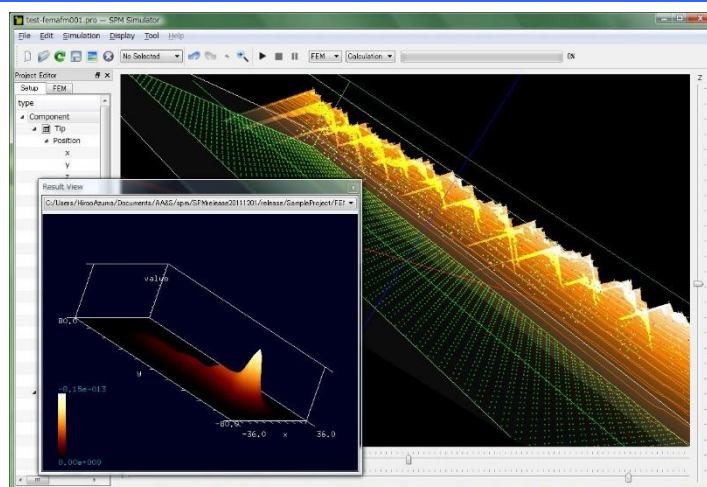
高速相互予測シミュレータ

高速相互予測シミュレータでは、「探針形状データ」、「試料表面形状データ」、「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、残り一つのデータを高速数値計算によって求めます。このシミュレータは、探針が試料に常に接しているコンタクトモード測定を仮定しており、純粋に幾何学的な計算手法によって解を求める点に特徴があります。



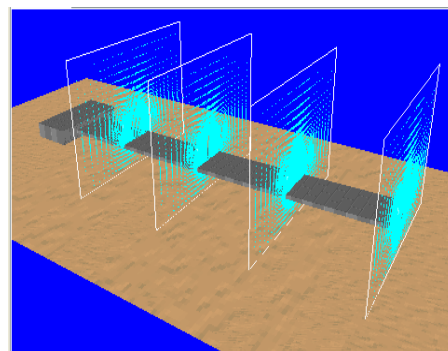
連続弾性体 AFM シミュレータ

連続弾性体 AFM シミュレータでは、探針－試料間のファンデルワールス力を考慮し、その上で、探針および試料が(古典的な)弾性方程式に従うと仮定して有限要素法計算を実行し、予測される AFM 画像を求めます。このシミュレータでは、カンチレバーの先端の探針は、常に試料表面から数 Å 程度離れており、ノンコンタクトモード測定に対応します。



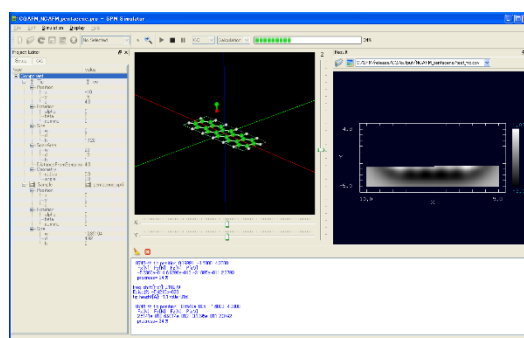
液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ

液中ソフトマテリアル AFM シミュレータでは、液中の動的 AFM に対応し、カンチレバーの振動解析、粘弾性ソフトマテリアルの SPM 計測をシミュレーションすることができます。液中でのカンチレバーの運動の様子を、周辺流体から受ける抗力、試料との接触によって受ける力、レバー自身の弾性変形の 3 つを練成して計算します。本シミュレータでは、振動モードでの粘弾性試料の AFM 像を計算することができ（開発中）、試料の弾性率などの物性値を推測することが可能です。また、液中でのカンチレバーの共鳴振動周波数を特定することができ振動特性が分かるので、カンチレバー形状の設計、振動条件の検討に役立ちます。



原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータ

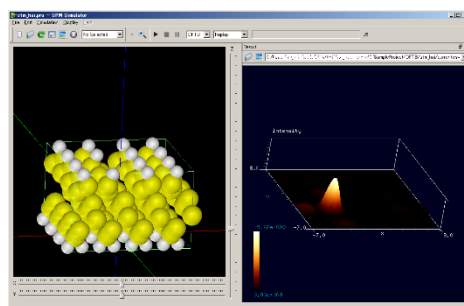
原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータは、対象とする AFM 測定試料の原子一つ一つに力場パラメータを設定し、それらに基づいて、走査される探針と試料との間の相互作用を計算することにより、AFM 測定像を予測するシミュレータです。また、探針との相互作用による試料分子の構造変化を原子スケールで予測することができることに特徴があります。このシ



ミュレータには分子構造を計算する手法として二種類用意されています。一つは、分子がエネルギー的に安定になる原子配置を探索し、分子構造を決定する「構造最適化 AFM 像シミュレータ」です。もう一つは、すべての原子についてのニュートン方程式を解くことにより分子構造の変化過程を予測する「分子動力学 AFM 像シミュレータ」です。これらのうちから目的に応じて選び、シミュレーションを行うことができます。

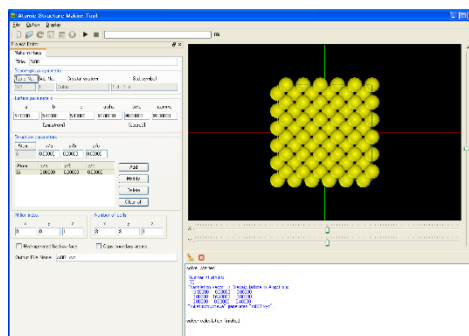
量子論的 SPM 像シミュレータ

量子論的 SPM 像シミュレータでは、量子力学的な電子状態の計算を元に、真空中のミクロスケールな表面構造に対する周波数シフト像、トンネル電流像、および局所接触電位差像のシミュレーションを行うことができます。また、トンネル電流の計算では、走査トンネル分光スペクトルとしても解析することができます。本シミュレータでは、密度汎関数理論に基づく強束縛計算法を採用しており、量子力学計算に通常付随する大きな計算コストを軽減させています。そのため、実験との比較を行う上で現実的な試料表面や、古典分子動力学法によって評価した比較的大きな系に対して適応することが可能です。



モデリング機能

薄膜構造作成ツールは、補助機能のひとつで、SPM シミュレータに利用する初期構造を作成することができます。このツールでは、ミクロスケール（DFTB 法、CG 法、MD 法）で使用される原子モデルを作成しますが、一部マクロスケールでも使用することができます。ミクロスケールで使用される原子モデルとして、理想表面を持つ薄膜モデルが作成されます。また、任意の原子・クラスタの追加・削除・移動の編集を行う事ができます。



第1章

ソフトウェアのインストールと準備

1 ソフトウェアのインストール

SPM シミュレータをご利用頂くためには、以下の URL からお申込み下さい。

<https://www.aasri.jp/pub/spm/appform/spmlicapp.php>

申し込みフォーム（画面は 2014 年 10 月 24 日現在のものです。）

以下、ご入力お願い致します。＊は入力必須項目です。

お名前：＊		全角（例：山田 太郎）
フリガナ：		全角（例：ヤマダ タロウ）
組織名：＊		全角（例：株式会社 A A システムズ）
ご所属：		全角（例：システム部）
ご職名：		全角（例：課長）
郵便番号：	〒 半角（例：150-0013）	
ご住所：		全角（例：東京都渋谷区恵比寿 1-13-6）
お電話番号：		半角（例：03-3447-5501）
メールアドレス：＊		半角
メールアドレス（確認用）：＊		半角
所属区分：＊	☐ 大学研究室等 ☐ その他（独立法人／民間企業等）	
買取契約区分：	☒ 買取契約(I)（買取） ☐ 買取契約(II)（レンタル）	
貴方のSPM知識：＊	☐ 専門家 ☐ 初心者	

ご希望者基本情報を入力

選択	構成ソルバー／略号	機能
☒ 1.	実験データ画像処理プロセッサ Analyzer	・ 探針構造推定機能 ・ 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 etc.
☒ 2.	高速相互予測AFMシミュレータ GeoAFM	・ 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）
☒ 3.	連続弾性体AFMシミュレータ FemAFM	・ 探針と試料の弾性変形を考慮したAFM像計算 ・ 探針-試料間ファンデルワールス力をレナード-ジョーンズ・ポテンシャルで再現 ・ 対象（コラーゲン、タンパク質分子）
⋮		

ご希望のソルバーを選択（複数可）

選択	原子間作用計算パラメータ
☒ 1.	シリコン系
☐ 2.	タングステン系
☐ 3.	白金系
☐ 4.	金系
☐ 5.	チタン系
☐ 6.	アルミナ系
☐ 7.	ルテニウム系

ご希望の原子間作用パラメータを
選択（複数可）

...

SPMシミュレータ・Q/A

わからないことや計算で困ったことがありましたら、弊社へ[メール](#)にてご質問・お問い合わせください。
その後は弊社担当者がサポート致します。
カスタマイズなどのご要望もご連絡ください。

送信が完了しましたら、入力されたメールアドレスにお申し込み確認のメールが送信されます。

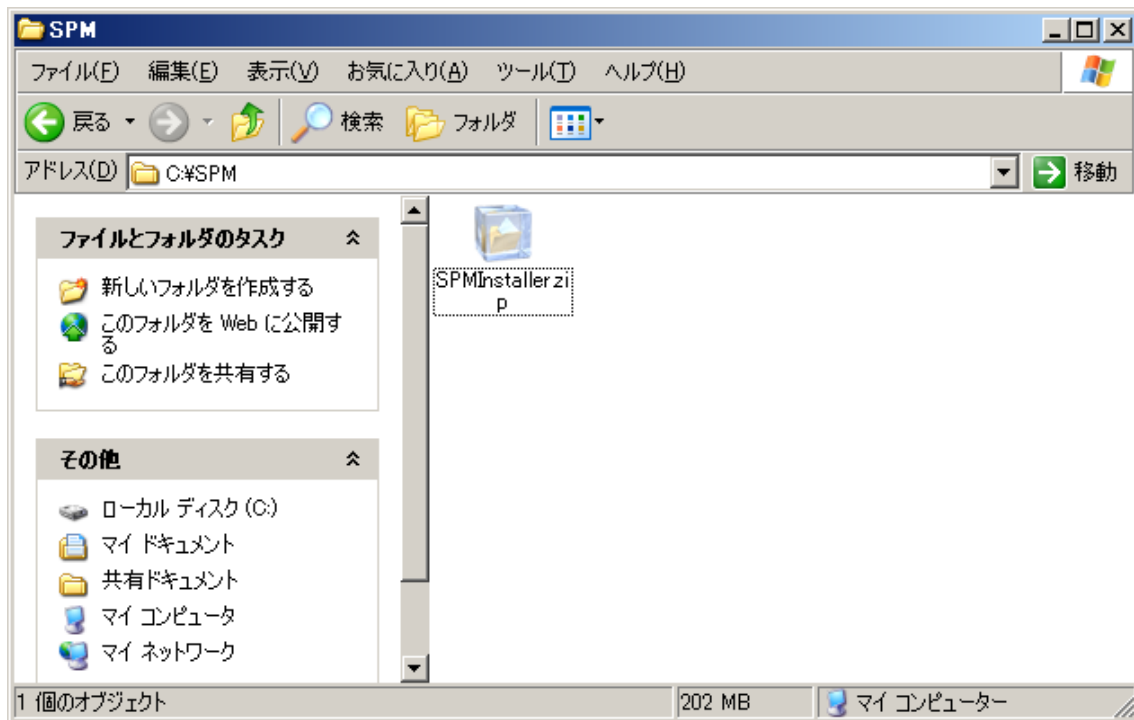
送信

上記を入力の上、送信

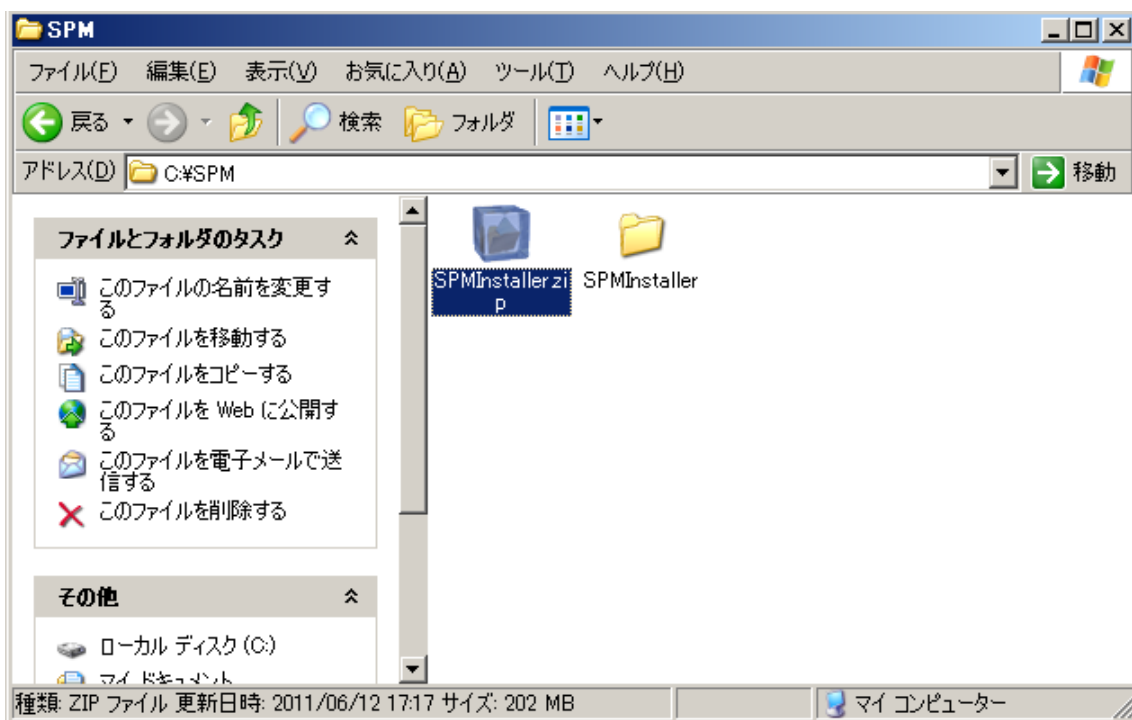
申し込みの後、e-mail にてアカウントID 及びライセンスキーと入手先のURLが提供されます。

インストールプログラムをダウンロードし、PC へ保存します。

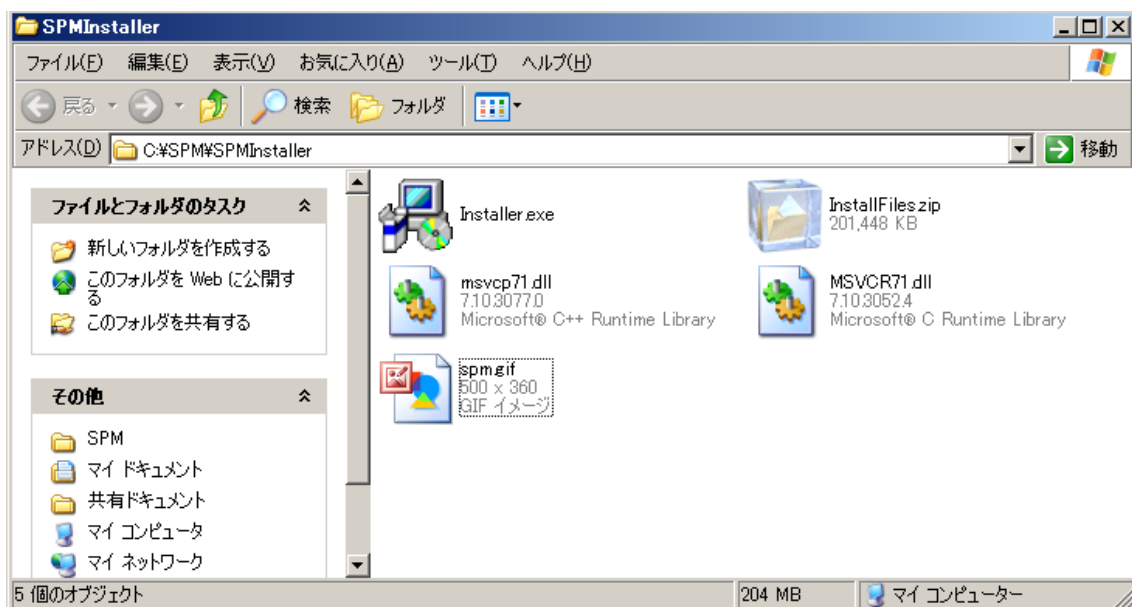
ファイル名は SPMInstaller.zip となります。



SPMInstaller.zip を解凍します。

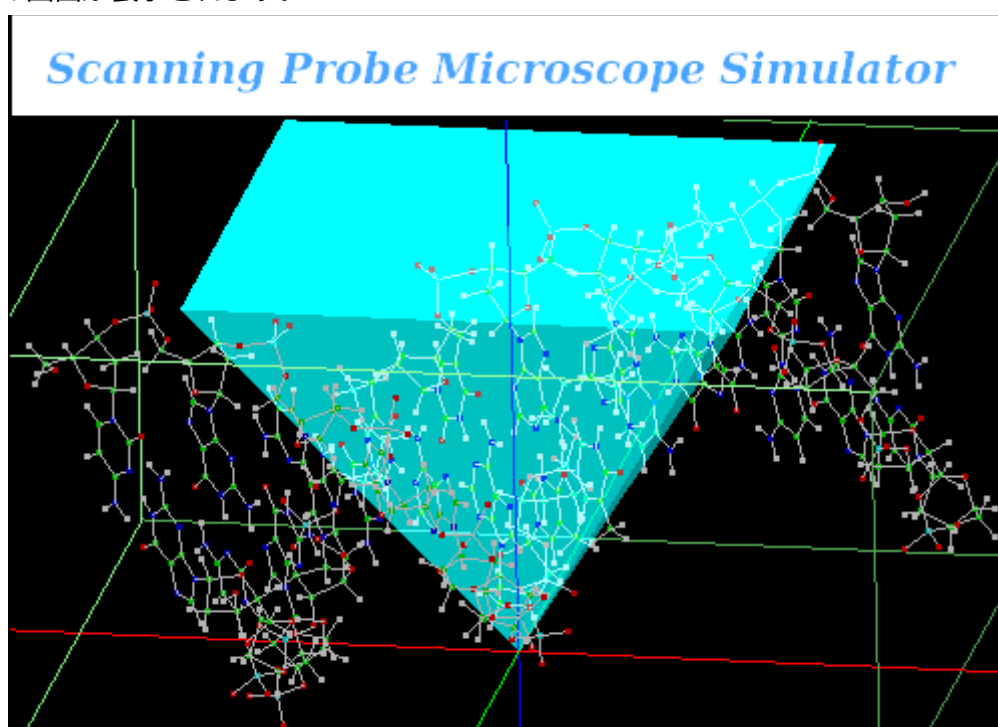


解凍すると SPMInstaller というフォルダが作成されます。SPMInstaller フォルダを開きます。

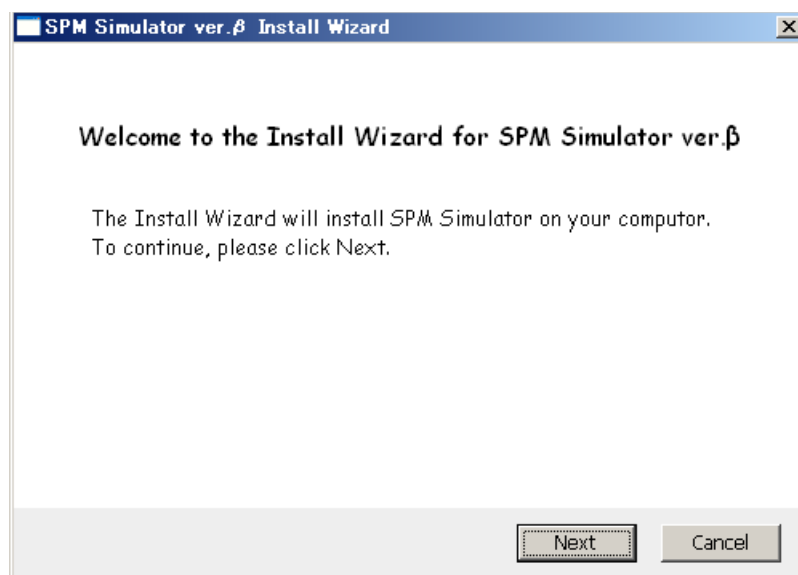


Installer.exe をダブルクリックして実行します。

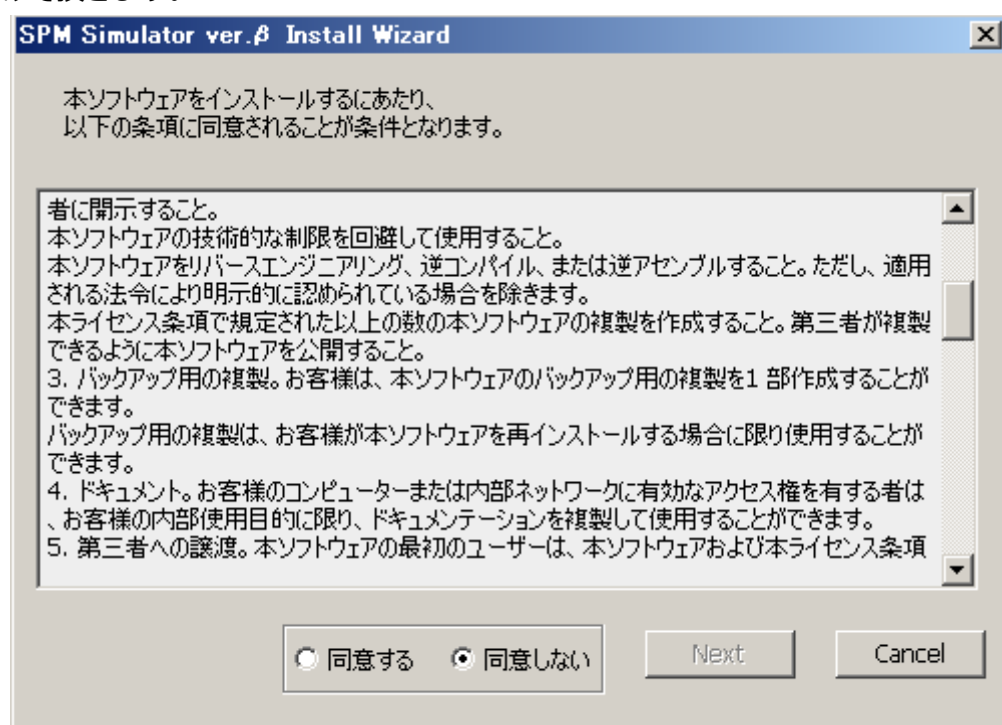
以下の画面が表示されます。



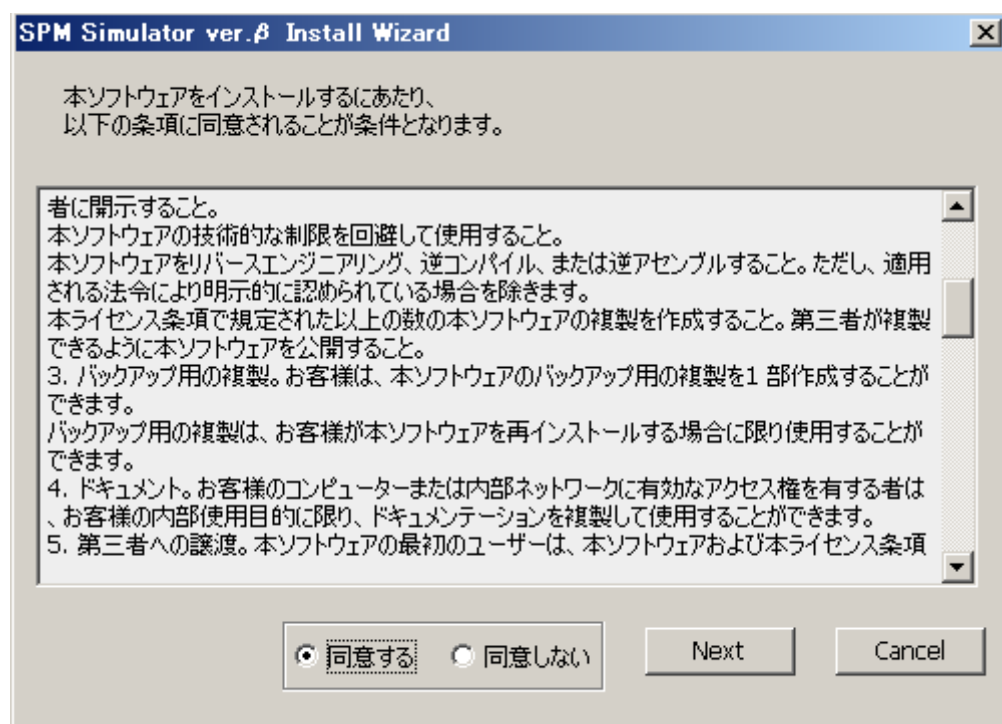
続いて以下の画面が表示されますので、Next ボタンをクリックします。



本ソフトウェアの使用条件が表示されますので、ご一読頂き、ご同意の上でインストールを続けて頂きます。



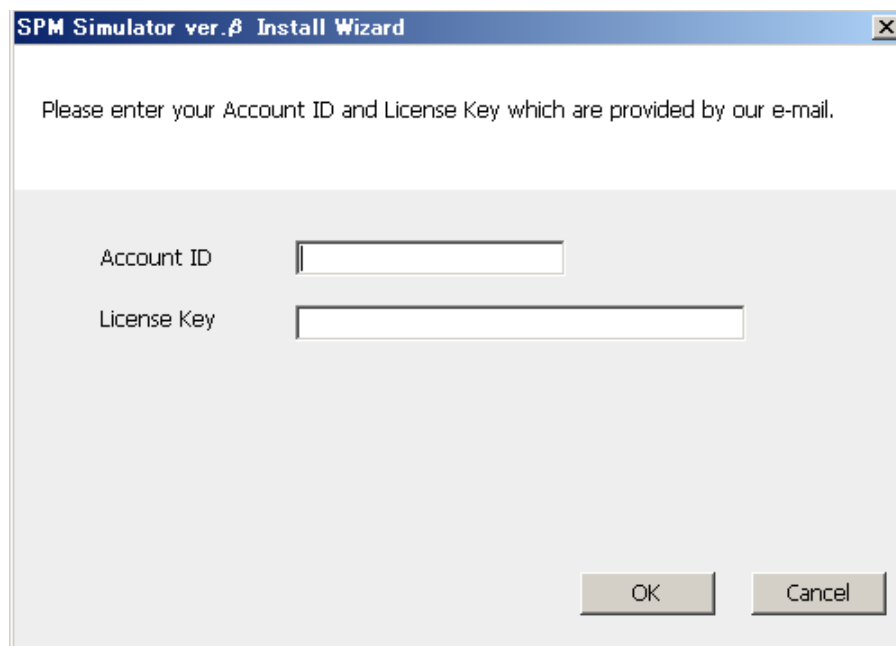
「同意する」のラジオボタンをチェックすると Next ボタンをクリックできる状態になります。続けて Next ボタンをクリックします。



アカウント ID とライセンスキーの入力画面に変わります。

e-mail にて送付されたアカウント ID とライセンスキーを入力し、OK ボタンをクリックし

ます。



SPM Simulator ver.β Install Wizard

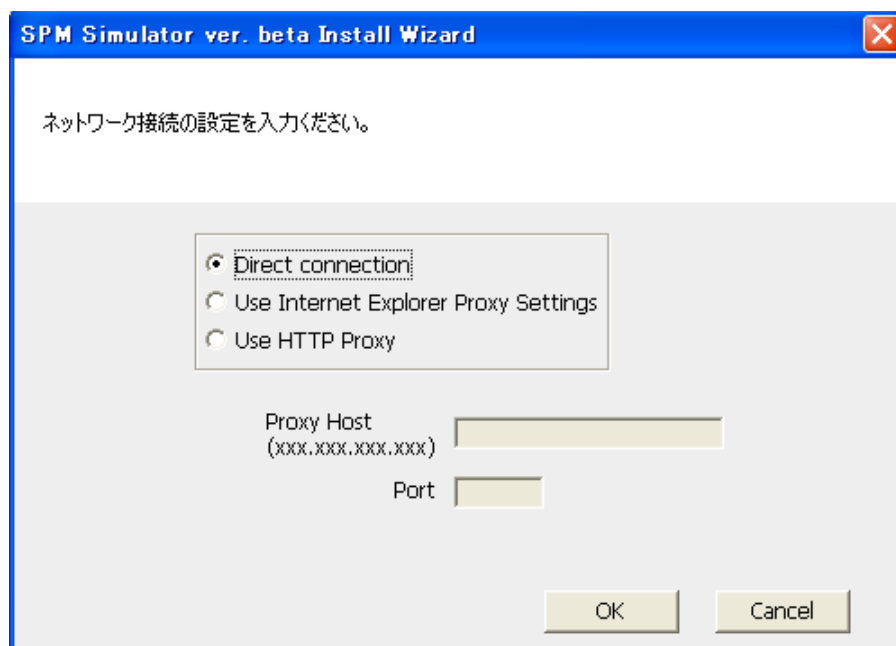
Please enter your Account ID and License Key which are provided by our e-mail.

Account ID

License Key

OK Cancel

以下の画面が表示されます。



SPM Simulator ver. beta Install Wizard

ネットワーク接続の設定を入力ください。

☒ Direct connection
☐ Use Internet Explorer Proxy Settings
☐ Use HTTP Proxy

Proxy Host
(xxx.xxx.xxx.xxx)

Port

OK Cancel

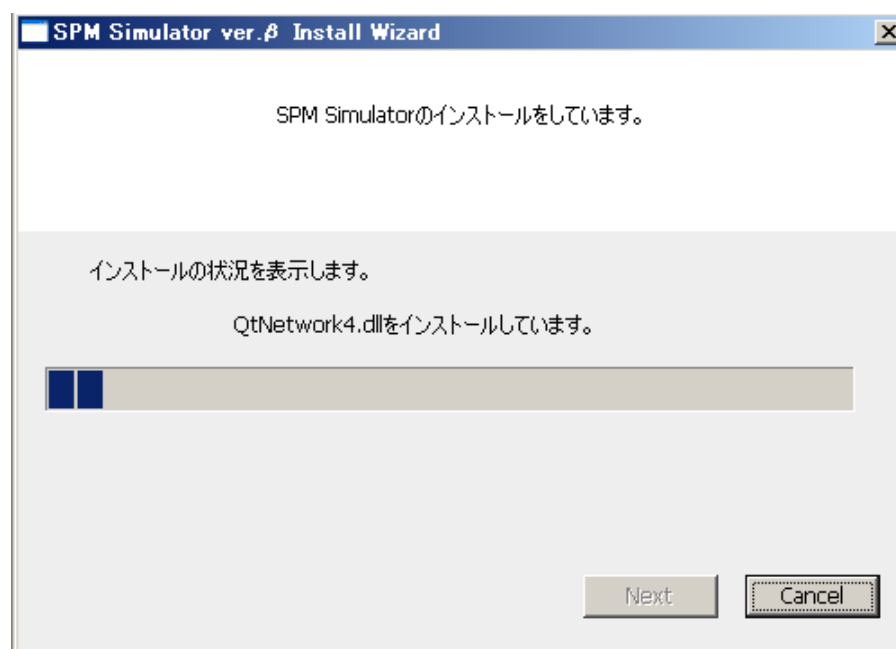
ネットワークについての設定です。お使いのネットワーク環境に従ってプロキシ等の設定を選択してください。

OK ボタンをクリックすると、以下の画面が表示されます。

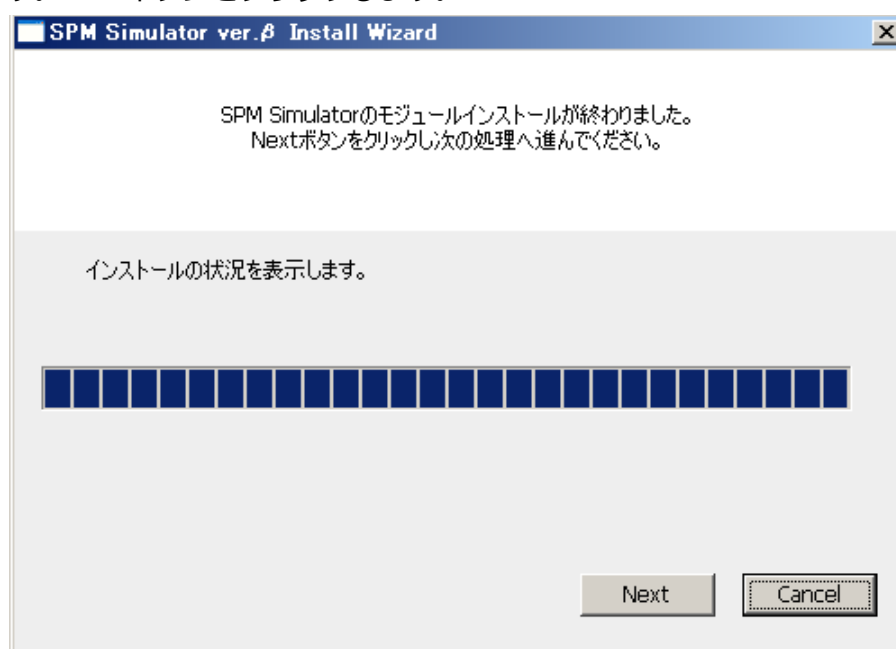
インストール先のフォルダを選択し、OK ボタンをクリックします。



SPM Simulator モジュールのインストールが開始されます。



SPM Simulator モジュールのインストールが終了すると Next ボタンをクリックできる状態になります。Next ボタンをクリックします。



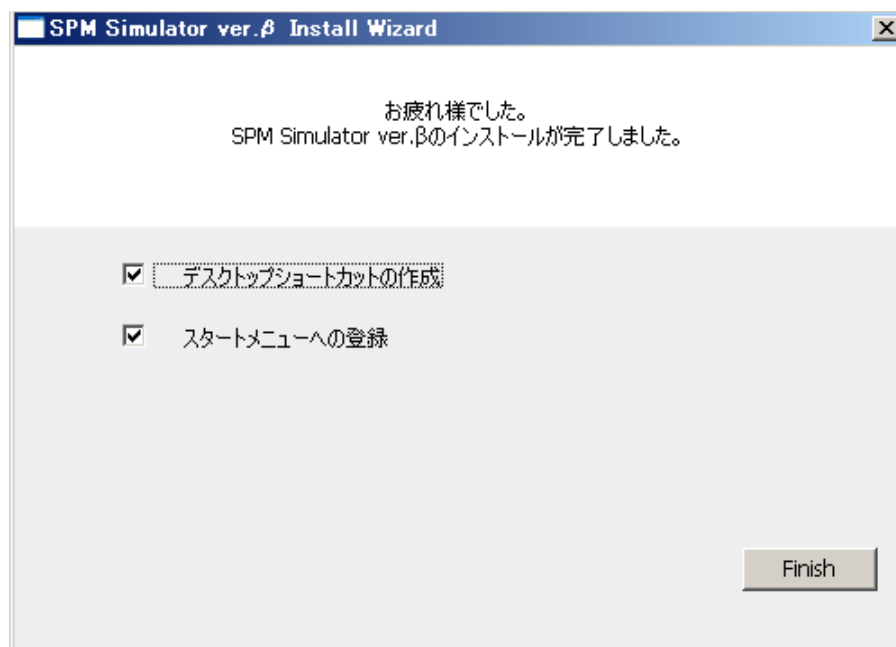
サーバへの登録画面が表示されます。



サーバへの登録が完了すると以下が表示され、Next ボタンをクリックできる状態になります。Next ボタンをクリックします。



終了の画面が表示されます。デスクトップショートカットならびにスタートメニューへの登録ができます。チェックボックスの必要箇所をチェックし Finish ボタンをクリックします。インストールは以上で終了です。

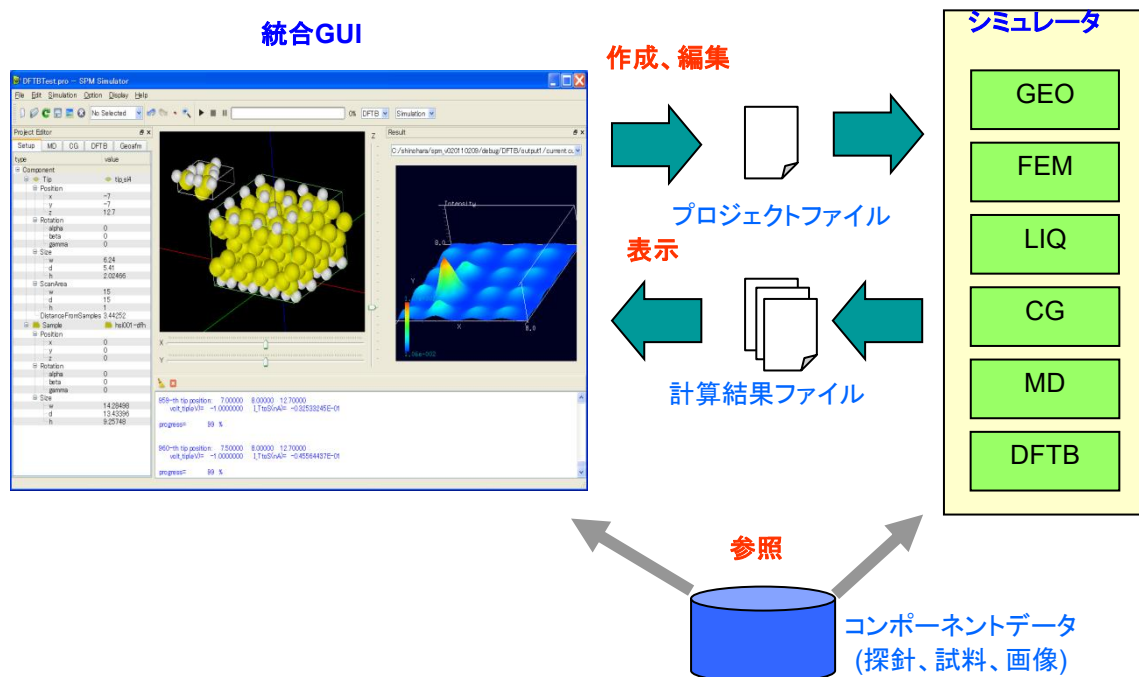


第2章

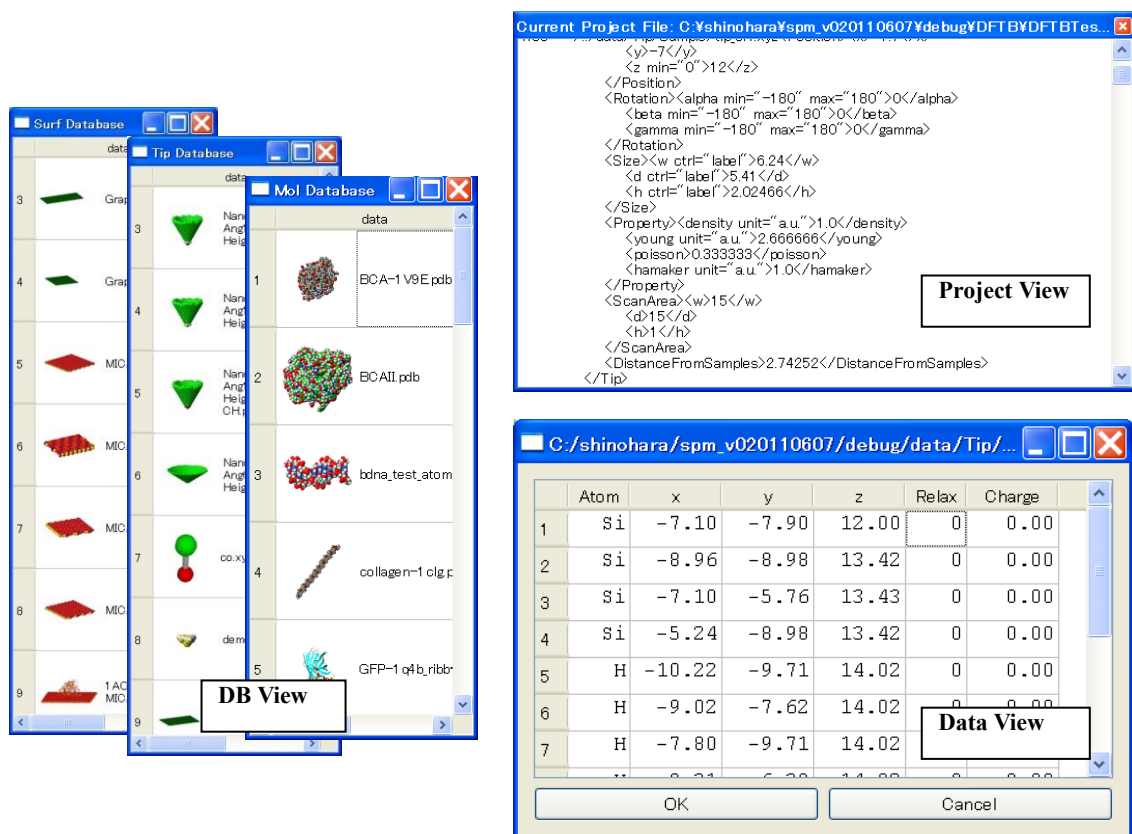
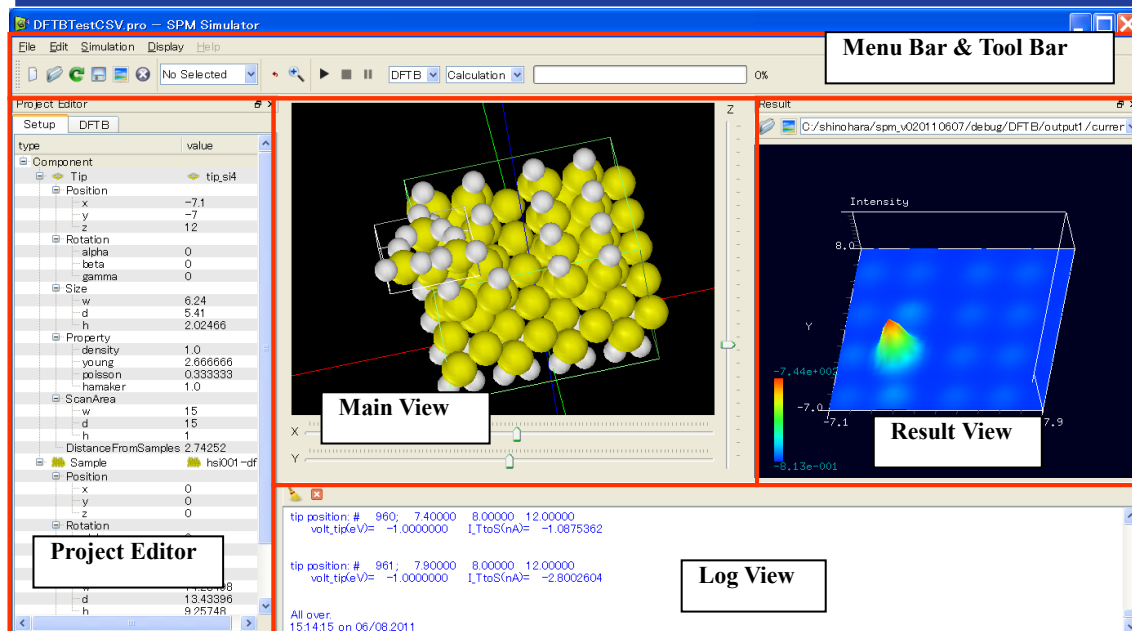
ソフトウェアの操作

1 GUI 概要

本ソフトウェアでは、探針、試料、画像などのコンポーネントデータやそれらの初期配置、各シミュレータで用いられるパラメータ、計算結果出力ファイルパスなど、シミュレーションに必要な全ての情報を『プロジェクト』と呼ばれる XML 形式のファイルで一括管理しています。各シミュレータは、このプロジェクトファイルを入力とし、計算途中あるいは終了後、結果を指定されたパスに出力します。統合 GUI を用いることで、プロジェクトファイルの作成・編集を簡単に行うことができ、また結果ファイルを様々な形態で可視化・表示することができます (図)。



2 画面説明



以下では画面ごとの主な機能について説明します。

【Menu Bar & Tool Bar】

プロジェクトの新規作成や読み込み、保存などのファイル操作、シミュレータの選択や実行、再生、一時停止、停止などのシミュレーション制御操作、各画面の表示／非表示の切り替えなどを行います。

【Project Editor】

プロジェクトファイルの内容をツリービューとして表示します。表示された値は直接編集することができます。変更内容は即座に Main View 上の描画に反映されます。

【Main View】

プロジェクトファイルに書かれているコンポーネントやそれらの初期配置、スキャンエリアなどのセットアップ情報を可視化します。マウスやキーボード、スライダーバーの操作によってコンポーネントのレイアウトを変更でき、その内容は即座に Project Editor に反映されます。またシミュレーション実行中には、探針の移動や試料の変形の様子を可視化します。

【Result View】

シミュレーション途中や終了後の計算結果を可視化し、2D、3D など様々な形態で表示します。

【Log View】

シミュレータや GUI からのメッセージを表示します。

【DB View】

予めデータベースに登録されたコンポーネント（探針や試料の分子データ）の一覧表を表示します。一覧表の中からコンポーネントを選択・ダブルクリックするだけでプロジェクトに取り込むことができます。

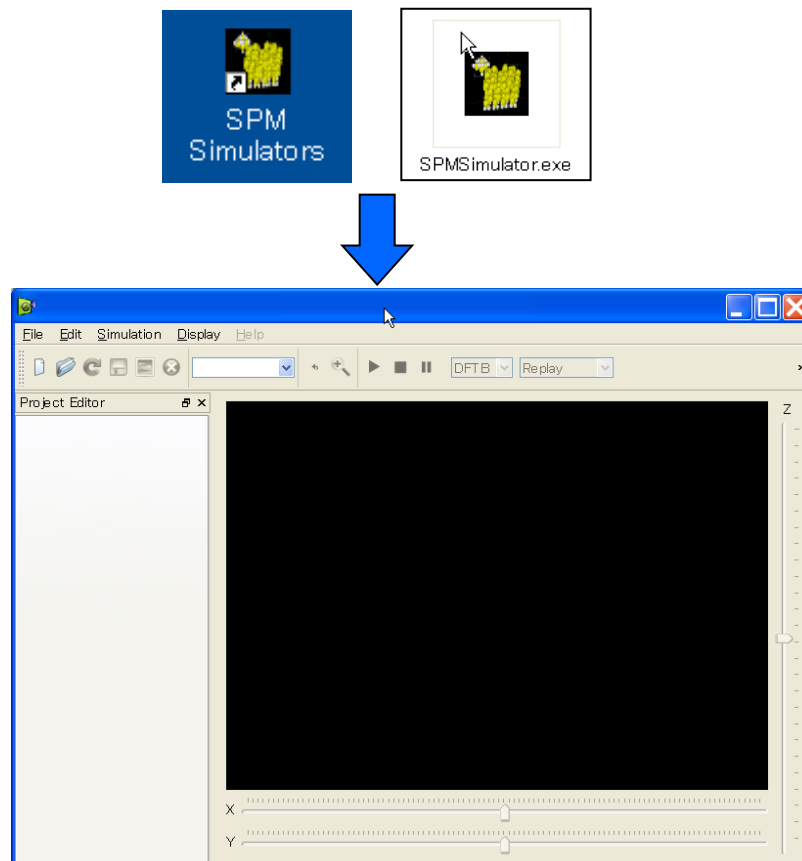
【Project View】

プロジェクトファイルの内容をテキスト表示します。直接編集することはできません。

【Data View】

コンポーネントのデータを表示します。分子データの場合、原子ごとに電荷情報と移動可／不可の情報を設定・編集することができます。ただし原子種と原子座標は編集できません。

3 GUI の起動



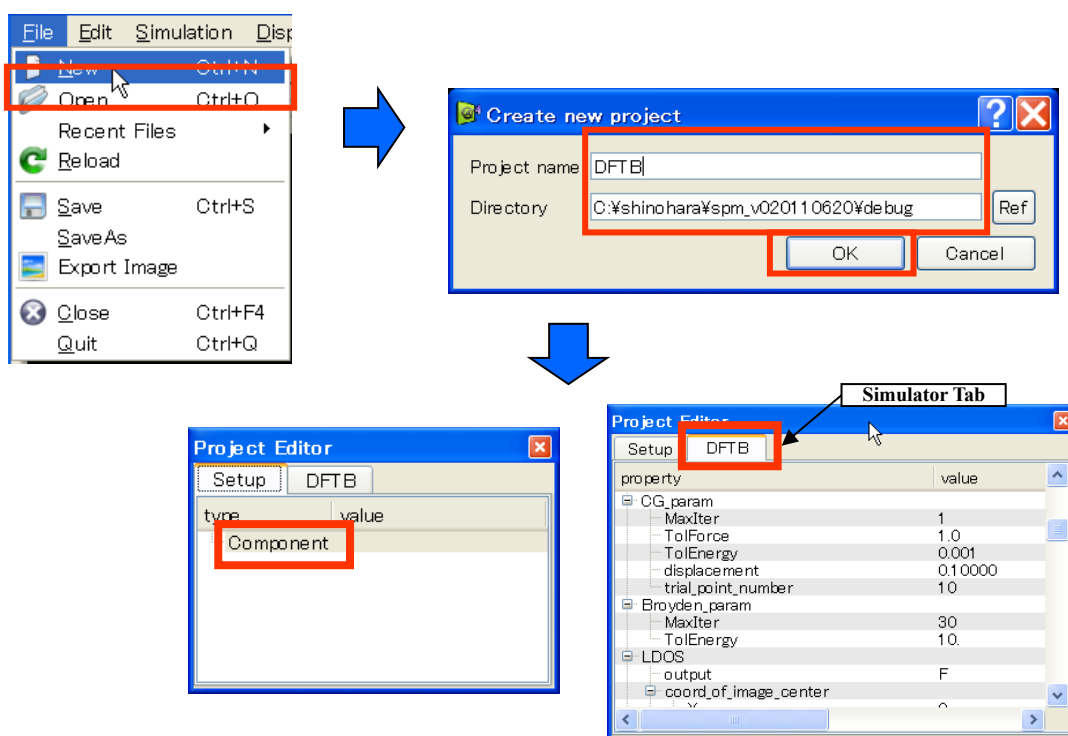
1. a. デスクトップ “SPM Simulators”アイコン ダブルクリック
1. b. インストールディレクトリ¥SPMSimulator.exe ダブルクリック

正常に起動しない場合は、第 6 章
トラブルシューティングをご覧ください。

4 プロジェクトのファイル操作

GUI を起動後、全ての操作はプロジェクトを読み込むことから始まります。プロジェクト読み込み後、GUI を用いてそのプロジェクトを編集・保存し、最後にシミュレーションを実行するという手順になります。ここでは、プロジェクトの新規作成や読み込み、保存などのファイル操作について説明します。

新規プロジェクト作成



1. “Menu Bar” → [File] → [New]¹ → “Create new project”ダイアログ
2. “Project name”入力 → “Directory”入力 → [OK]

“Create new project”ダイアログでは、プロジェクト名(Project name)およびプロジェクト作成ディレクトリ(Directory)を指定します。[Ref]ボタンを押すとダイアログを用いてディレクトリを指定できます。[OK]ボタンを押すと “Directory”で指定されたディレクトリの中に、プロジェクトと同名のディレクトリが作成され、その中にプロジェクトファイルが作成されます。例えば test というプロジェクト名を指定した場合、

指定したディレクトリ¥test¥test.pro

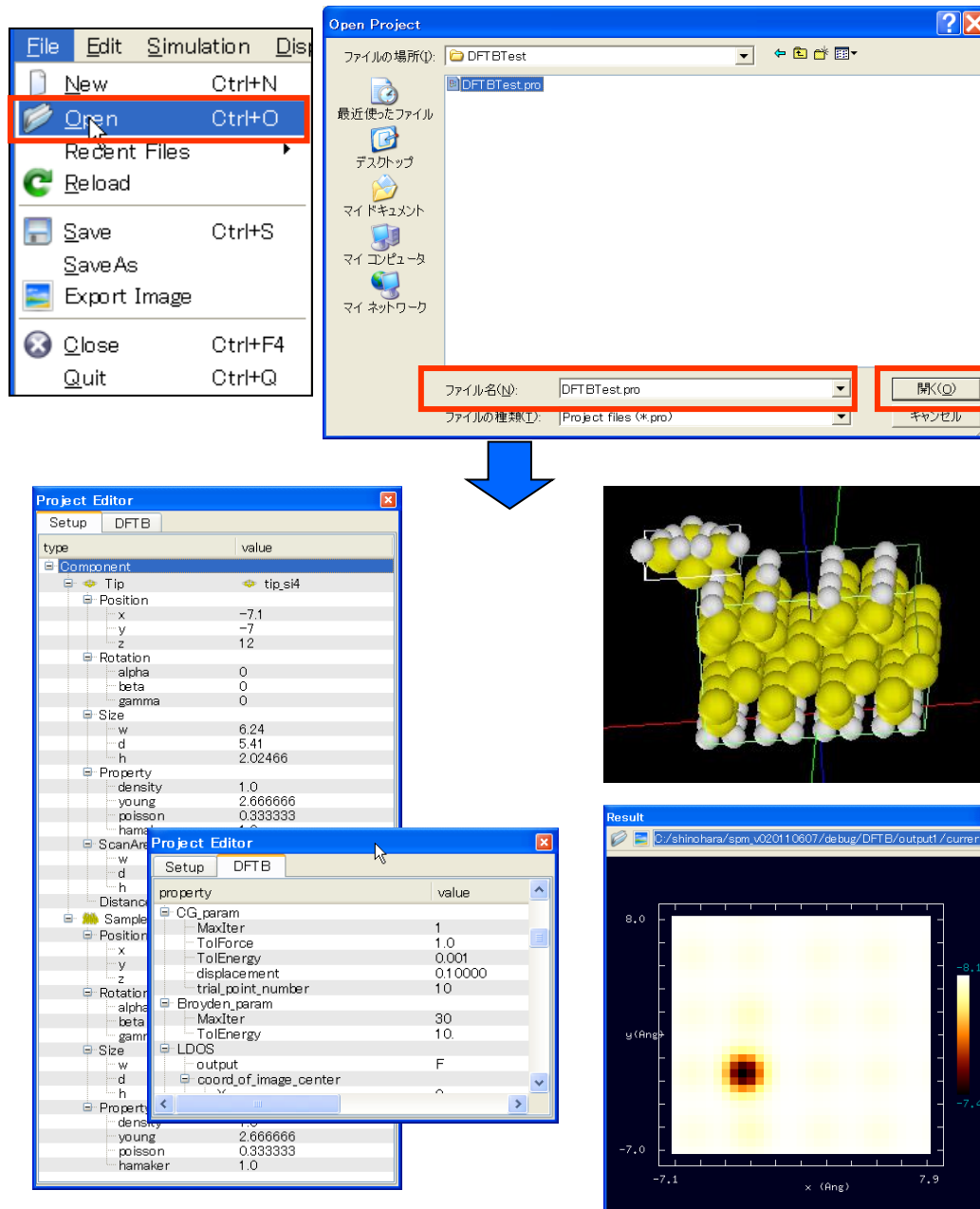
というプロジェクトが作成されます。プロジェクトが作成されると、“Project Editor”

¹ この操作は、“Tool Bar” → New アイコンをクリックすることでも行えます。

の”Setup”タブ内には”Component”項目が追加され、”Simulator Tab”（図では”DFTB”）内にはデフォルトのパラメータ値が自動設定されます。

既存プロジェクト読み込み

【ファイルダイアログを使用した読み込み】

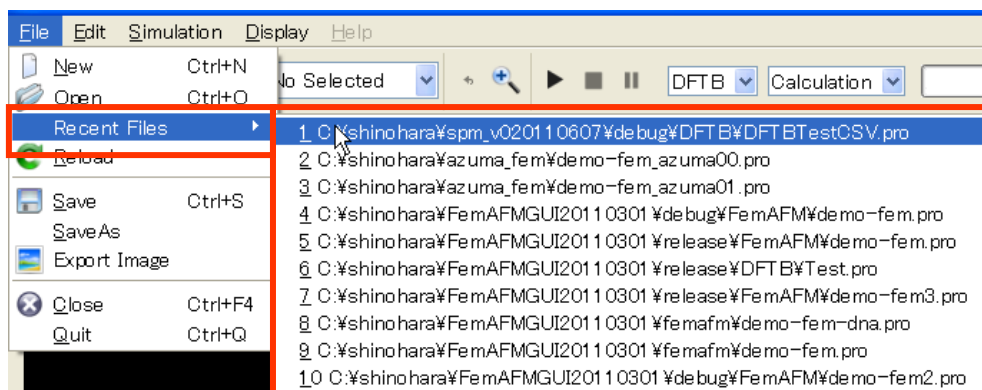


1. “Menu Bar” → [File] → [Open]² → ”Open Project”ダイアログ
2. プロジェクトファイル(～.pro)指定 → [開く]

² この操作は、” Tool Bar ” → Open アイコンをクリックすることでも行えます。

指定されたプロジェクトが読み込まれると、“Project Editor”の各タブ内にセットアップ情報やシミュレータのパラメータ情報などが表示されます。同時に Main View 上に探針や試料などのコンポーネントが描画されます。また既に計算結果がある場合は、“Result View”に結果情報がセットされます。

【最近使用したプロジェクトの読み込み】



1. “Menu Bar” → [File] → [Recent Files] → プロジェクト一覧³→ファイル指定

【再読み込み】



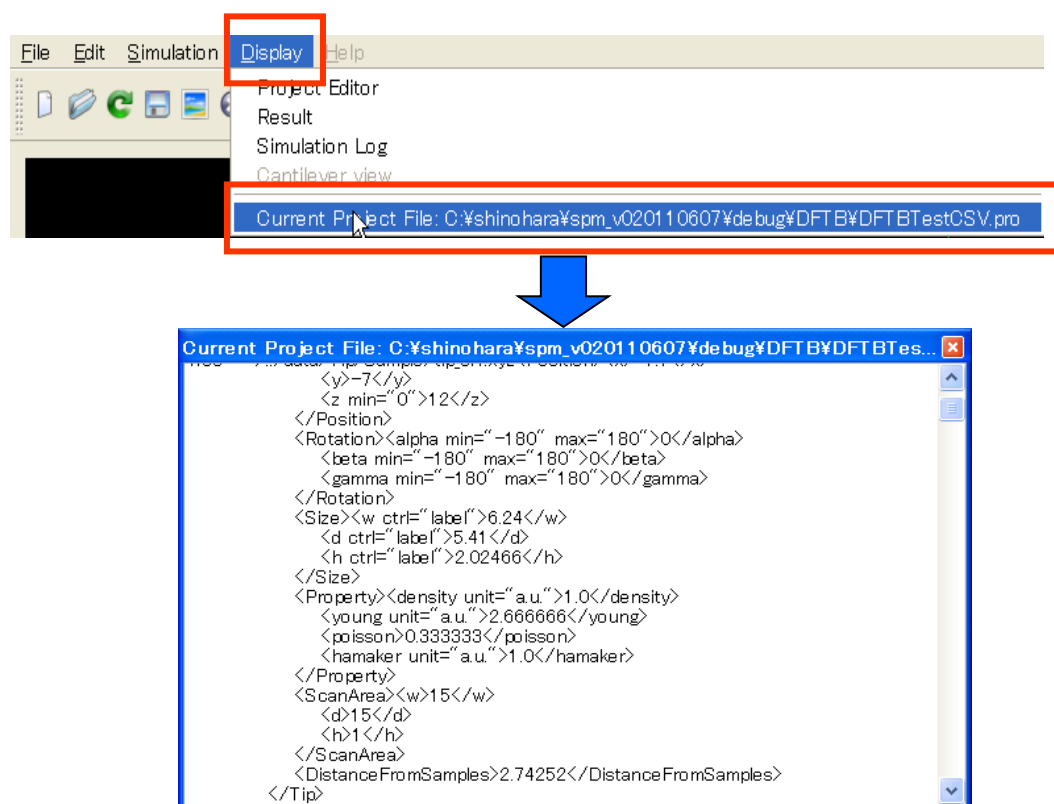
1. “Menu Bar” → [File] → [Reload]⁴

セットアップ情報やパラメータ値を変更した時、保存前であれば、再読み込みすることで前回保存した時点のプロジェクトに戻すことができます。

³ 最近使ったプロジェクトファイルは最大 10 個まで表示されます。

⁴ この操作は、“Tool Bar” → Reload アイコンクリックでも行えます。

プロジェクトの表示



1. “Menu Bar” → [Display] → [Current Project File:ファイル名]

Current Project File:の後には、現在のプロジェクトファイル名が表示されます。このメニューをクリックすることで、“Project View”が立ち上がり、プロジェクトファイルの内容を閲覧することができます。なお、“Project View”上でファイルを直接編集することはできません。編集は“Project Editor”から行います。

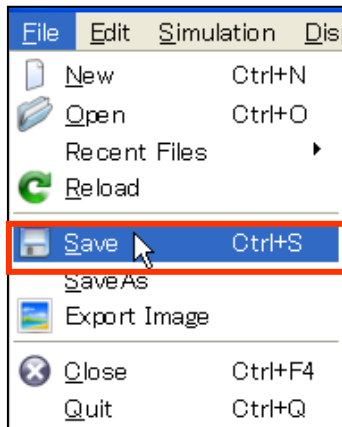
プロジェクトの保存

GUI 上でプロジェクトを編集した場合、その内容が直ちにプロジェクトファイルに反映されるわけではありません。保存をしてはじめてプロジェクトファイルが更新されます。各シミュレータはプロジェクトファイルを参照して計算を行うため、プロジェクトの変更内容をシミュレーション結果に反映させるためには、実行前にファイルを保存しておく必要があります。以下では保存方法について説明します。

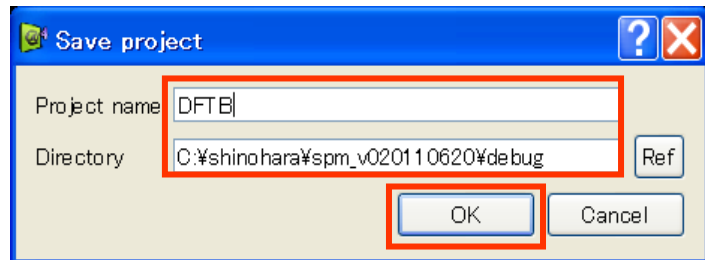
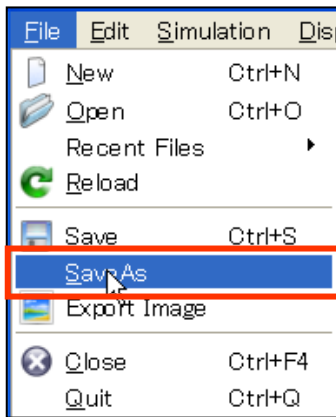
【保存】

1. “Manu Bar” → [File] → [Save]⁵

⁵ この操作は“Tool Bar”のSaveアイコンをクリックすることでも行えます。



【名前を付けて保存】

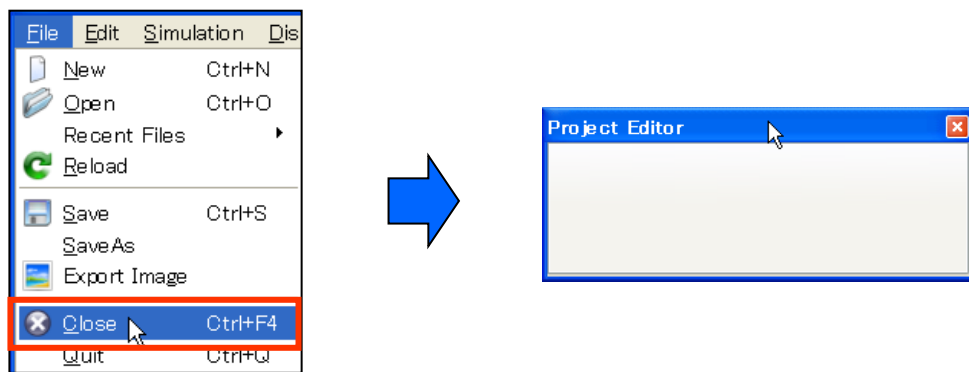


1. “Manu Bar”→ [File] → [Save As] → “Save Project”ダイアログ
2. “Project name”入力 → “Directory”入力 → [OK]

” Save Project”ダイアログでは、プロジェクト名(Project name)およびプロジェクトファイル作成ディレクトリ(Directory)を指定します。[Ref]ボタンを押すとダイアログを用いてディレクトリを指定できます。[OK]ボタンを押すと “Directory”で指定されたディレクトリの中に、プロジェクトと同名のディレクトリ（プロジェクトディレクトリ）を作成し、その中にプロジェクトファイルを作成・保存します。その際、データファイルなどプロジェクトに必要な全てのファイルがプロジェクトディレクトリにコピーされます。

GUI 上部のタイトルバーに現在のプロジェクトファイル名が表示されていますが、編集してファイルを書き換えた場合には、このファイル名の後に”*”という記号が表示されます。保存が完了するとこの記号が消えます。

プロジェクトの終了



1.“Manu Bar”→ [File] → [Close]⁶

プロジェクトを終了すると、“Project Editor”から全項目が削除されます。また“Main View”上の描画も全て消去されます。

⁶ この操作は“Tool Bar”のCloseアイコンをクリックすることでも行えます。

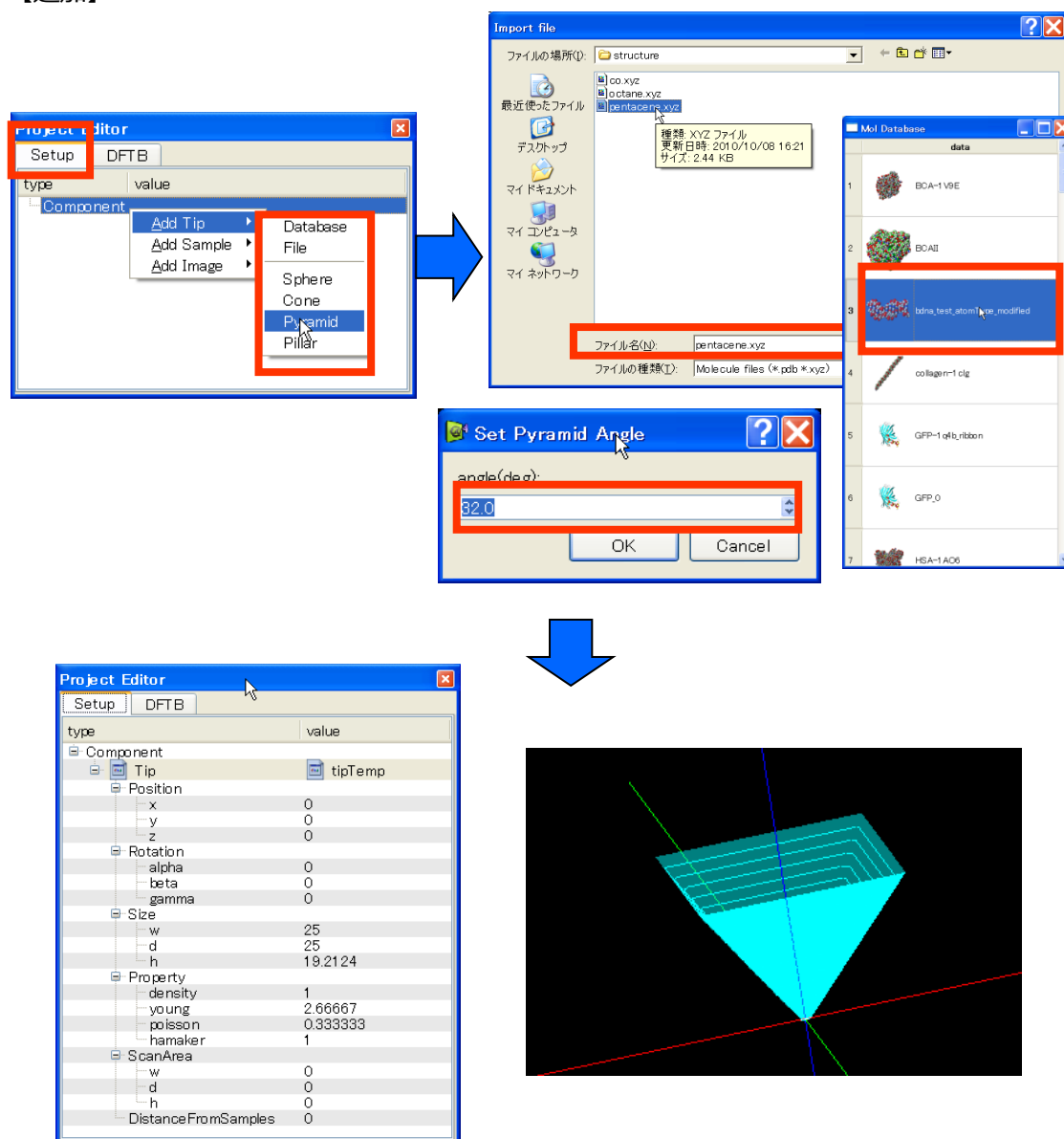
5 プロジェクトの編集

コンポーネント

(1) 追加・置換・削除

コンポーネントは、探針・試料・画像の3種類ありますが、以下では探針の場合を例にとって説明します。

【追加】



1. “Project Editor” → “Setup”タブ
2. “Component”右クリック → コンテキストメニュー⁷

⁷このメニューは、“Menu Bar” → [Edit] を選択すること、あるいは “Main View” 上で右クリックすることでも

3. a. [Add Tip] → [Database] → “DB View” → コンポーネントダブルクリック
b. [Add Tip] → [File] → “Import File”ダイアログ → ファイル指定 → [開く]
c. [Add Tip] → [Sphere/Cone/Pyramid/Pillar] → パラメータ入力ダイアログ → 半径・角度入力 → [OK]

探針の場合、追加データは[Database]（データベース）、[File]（ファイル）および4種類の形状モデル[Sphere][Cone][Pyramid][Pillar]から選択可能ですが、各々入力ダイアログが異なります⁸。データベースからの入力の場合、一覧からコンポーネントを選択し、ダブルクリックするだけで追加できます。ファイルからの入力の場合は、ファイルダイアログを使います。形状モデルの場合は、形状に応じて角度や半径などの入力ダイアログが立ち上がります。

以上の操作で、指定されたデータが読み込まれると、“Component”の下に“Tip”という項目が追加され、探針の情報が表示されます。同時に Main View 上に探針が描画されます。試料、画像についても同様の手順で追加していくことができます⁹。

【画像ファイルの追加】

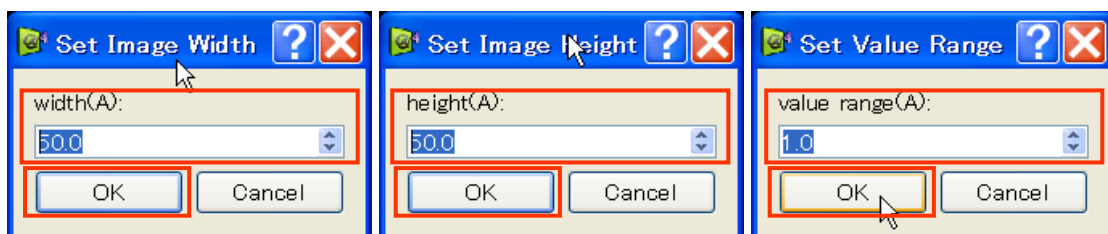
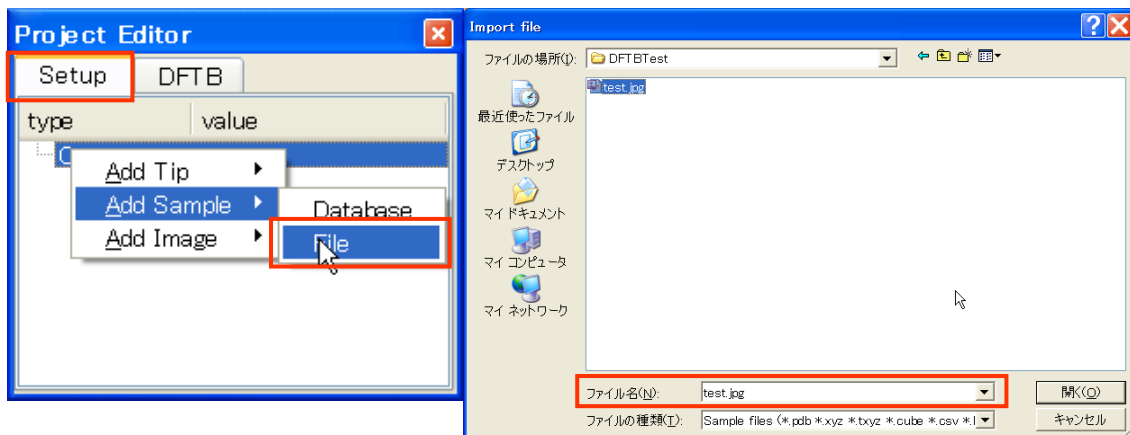
bmp や jpg などの画像ファイルは、明るさの情報はもちますが、高さ情報はもっていません。したがって、明度をコンポーネントの高さ情報に変換する処理が必要となります¹⁰。また、画像の大きさ（幅、高さ）が現実は何Åに相当するかを指定する必要があります。以下では試料の場合を例にとって画像ファイルの読み込みについて説明します。

表示できます。

⁸ 試料は[Database]および[File]から、画像は[File]からのみ入力可能です。

⁹ 試料は複数個追加することができますが、探針および画像はひとつだけしか追加できません。

¹⁰ 画像の明度と試料の高さが比例関係にない場合には、画像ファイルを追加しても正しい計算は行えません。

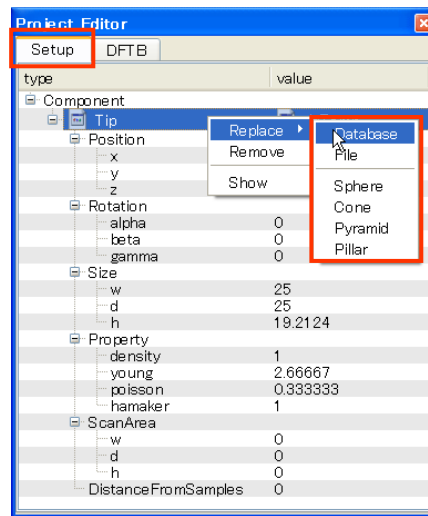


1. “Project Editor” → “Setup”タブ
2. “Component”右クリック → コンテキストメニュー¹¹
3. [Add Sample] → [File] → “Import File”ダイアログ → 画像ファイル指定 → [開く]
- 4.”Set Image Width”ダイアログ → “width”入力 → [OK]
- 5.”Set Image Height”ダイアログ → “height”入力 → [OK]
- 6.”Set Value Range”ダイアログ → “value range”入力 → [OK]

“Set Image Width”および“Set Image Height”ダイアログで、画像ファイルの幅と高さが実際に何Åに相当するのかを指定します。さらに“Set Value Range”ダイアログで、画像の明度[0.0,1.0](黒=0.0、白=1.0で表現)がどれくらいの試料の高低差(Å)に相当するのかを指定します。

【置換】

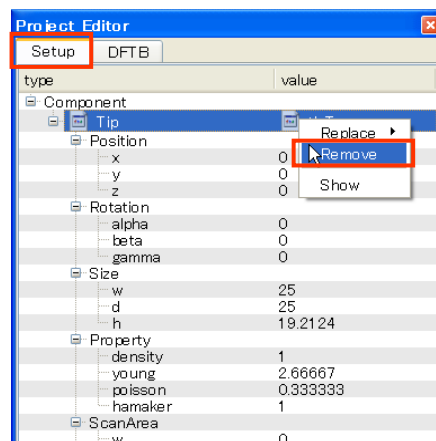
¹¹このメニューは、“Menu Bar” → [Edit] を選択すること、あるいは “Main View” 上で右クリックすることでも表示できます。



1. “Project Editor” → “Setup”タブ
2. “Tip”右クリック → コンテキストメニュー
3. a. [Replace] → [Database] → “DB View” → コンポーネントダブルクリック
 b. [Replace] → [File] → “Import File”ダイアログ → ファイル指定 → [開く]
 c. [Replace] → 形状モデル → パラメータ入力ダイアログ → 半径・角度入力 → [OK]

置換と追加の違いは、2.の操作において“Component”ではなく、置換したいコンポーネント（探針の場合は“Tip”）を右クリックすることと、3.の操作においてコンテキストメニューの内容が、[Add Tip]ではなく[Replace]に変わることです。

【削除】



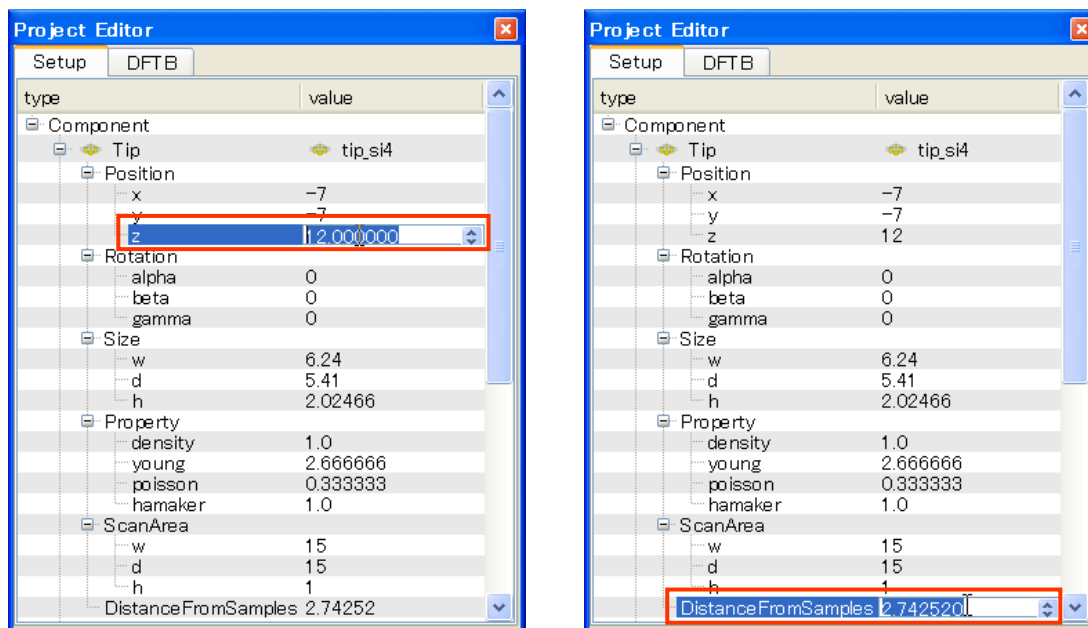
1. “Project Editor” → “Setup”タブ
2. “Tip”右クリック → コンテキストメニュー
3. [Remove]

指定されたデータが削除されると、“Component”の下から“Tip”という項目が削除されます。同時に Main View 上からも探針の可視化画像が削除されます。

(2) 初期配置設定(移動・回転・リセット)

コンポーネントは、探針・試料・画像の3種類ありますが、以下では探針の場合を例にとりて説明します。

【移動】



ここでは、z 座標の移動を例にとりて説明します。

1. “Project Editor” → “Setup”タブ
 2. a. “Tip” → “Position”¹² → “z”の“value”ダブルクリック → スピンボックス
b. “Tip” → “DistanceFromSamples”¹³の“value”ダブルクリック → スピンボックス¹⁴
 3. 数値入力¹⁵ → リターン
- 以上の操作で、Main View 上に表示されている探針が、指定された座標に移動します。

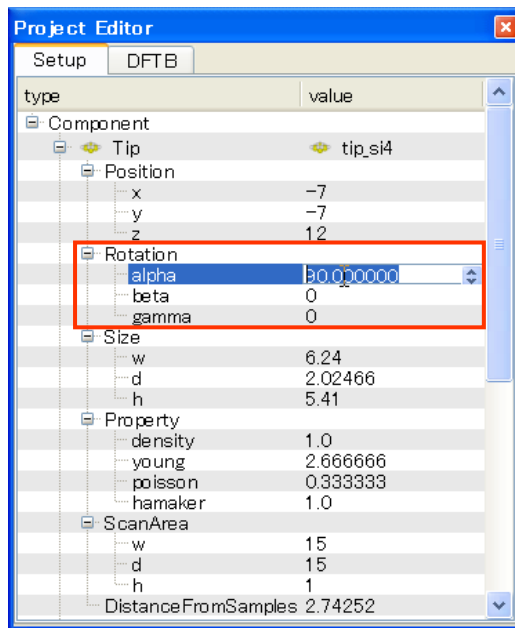
【回転】

¹² “Position” 以下には、コンポーネントの座標（単位はÅ）が格納されています。探針に関して、“x”、“y”、“z”の“value”値は、探針最下端位置の座標を表します。一方、試料と画像に関しては、“x”と“y”の“value”値は、各々コンポーネント中心の x 座標 (xmin+xmax)/2、y 座標 (ymin+ymax)/2 を表します。“z”の“value”値はコンポーネント最下端の z 座標 (zmin) を表します。

¹³ “DistanceFromSamples”の“value”値（単位はÅ）は、（探針最下端の z 座標－試料最上端の z 座標）を表します。試料が存在しない場合、この値は0となります。

¹⁴ この操作は z 座標移動の場合のみ有効となります。

¹⁵ 数値変更は、“Main View”内のスライダー／つまみを移動させること、あるいは“Main View”上で“Shift”キーを押しながらマウスを移動させることによっても行えます。ただし“Main View”上のマウス操作でコンポーネントを移動・回転（後述）させる場合、“Project Editor”の“Setup”タブ内で、そのコンポーネントを選択（9 節）しておく必要があります。何も選択されていない場合は、視点が変更されます。

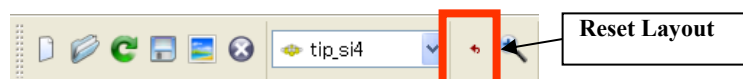


ここでは、x 方向軸に関する回転を例にとって説明します¹⁶。

1. “Project Editor” → “Setup”タブ
2. “Tip” → “Rotation”¹⁷ → “alpha”の“value”ダブルクリック → スピンボックス
3. 数値入力¹⁸ → リターン

以上の操作で、Main View 上に表示されている探針が、x 方向の軸を中心に、指定された角度だけ回転します。y および z 方向軸の回転に関しても同様です。なお、画像に関しては回転操作を行うことができません。

【リセット】



1. “Tool Bar” → [Reset Layout]

以上の操作で各コンポーネントの位置座標および回転角度は、その時点で保存されているプロジェクトファイルの値にリセットされます。同時に、Main View 上に描画されているコンポーネントの配置もリセットされます。

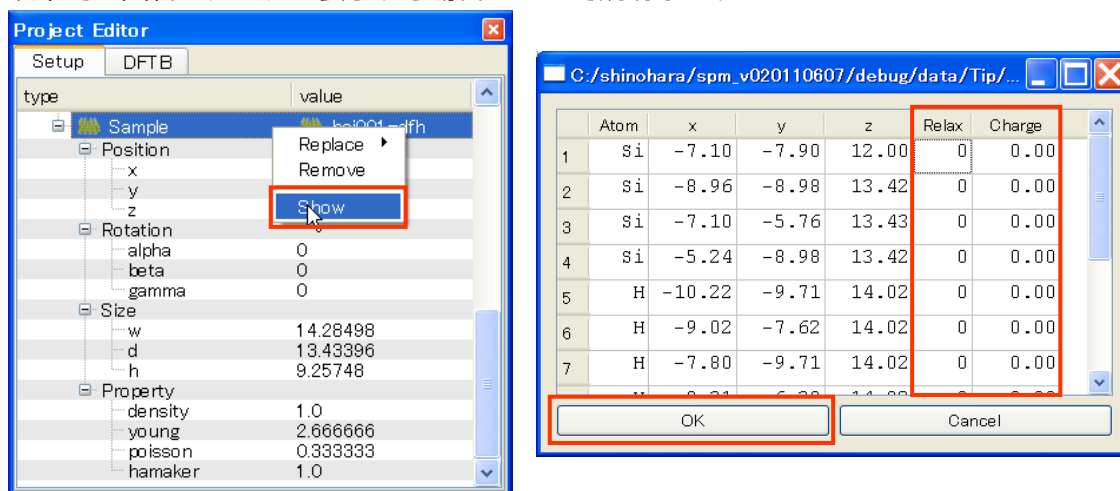
¹⁶ 現在回転操作を行えるのは、“～.pdb”、“～.xyz”、“～.txyz”形式のデータをもつコンポーネントのみとなっています。

¹⁷ “Rotation”以下には、軸に対する回転角度（単位は degree）が格納されています。“alpha”、“beta”、“gamma”の“value”値は、各々回転中心を原点とした場合の x、y、z 方向の軸に対する回転角度を表します。回転中心は、探針の場合、探針最下端位置となります。一方試料の場合、コンポーネントの中心座標が回転中心となります。回転は“alpha”→“beta”→“gamma”の順序で行います。

¹⁸ 入力できる数値の範囲は[-180degree, 180degree]となっています。数値変更は、“Main View”上でマウスを移動させることによっても行えます。

(3) データ表示・属性変更

以下では試料のデータを表示する場合について説明します。



- 1.“Project Editor” → “Setup”タブ
- 2.“Sample”右クリック → コンテキストメニュー → [Show] → “Data View”
- 3.“Relax”¹⁹および“Charge”列の数値入力²⁰ → [OK]

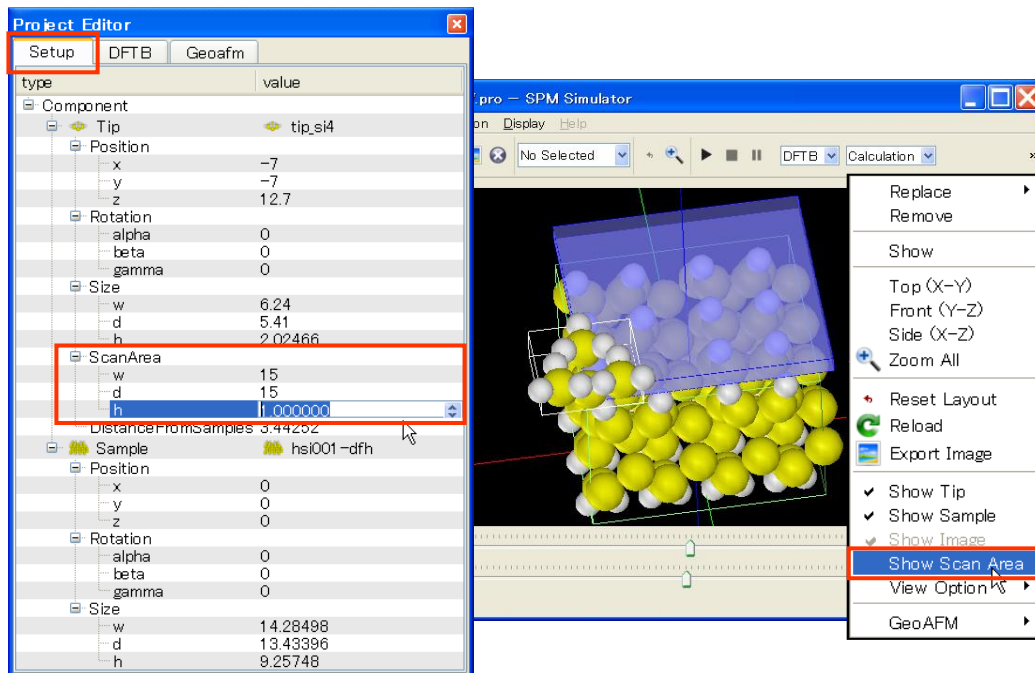
以上の操作で、各原子の属性が書き換えられ、変更内容はプロジェクトファイルに保存されます。“Relax”の値を 1 にした場合、シミュレーション途中で働く力に応じて原子が動くことがあります。この場合、原子の配置が変更されることにより分子（コンポーネント）が変形します。

スキャンエリア設定・表示

ここでは、スキャンエリアの高さ（z 軸方向の走査範囲）の変更を例にとって説明します。

¹⁹ “Relax” = 0 は原子座標の「移動不可」、 “Relax” = 1 は「移動可」を表します。

²⁰ 現在属性変更を行えるのは、“～.pdb”、“～.xyz”、“～.txyz”形式のデータをもつコンポーネントのみとなっています。なお、原子種および原子座標は編集することができません。



1. “Project Editor” → “Setup”タブ
2. “Tip” → “ScanArea”²¹ → “h”の“value”ダブルクリック → スピンボックス
3. 数値入力 → リターン
4. “Main View”右クリック → コンテキストメニュー → [Show Scan Area]²²

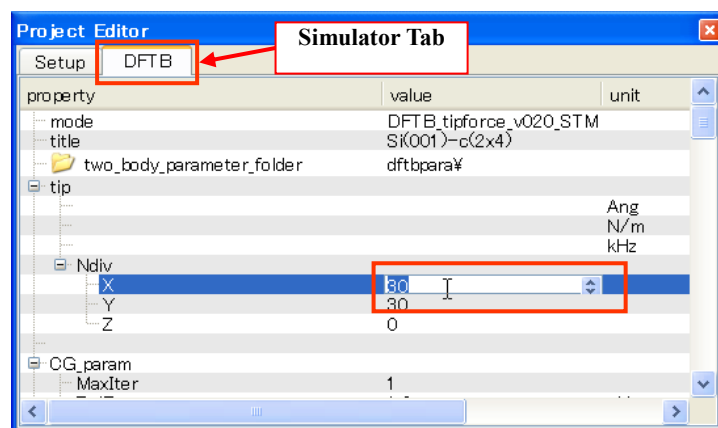
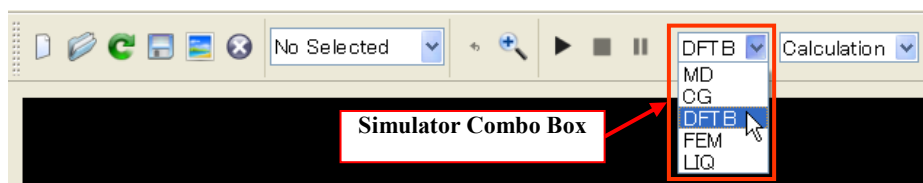
以上の操作で、プロジェクトの走査範囲が変更され、その範囲が“Main View”上に青色の直方体で表示されます。同様にして、走査範囲の幅（x 軸方向）や深さ（y 軸方向）についても、“ScanArea”の“w”や“d”を用いて変更できます。

シミュレータ選択とパラメータ設定

以下では量子論的 SPM 像シミュレータ(DFTB)を選択する場合について説明します。

²¹ “ScanArea” 以下には、走査範囲の幅 w、奥行き d、高さ h（単位はÅ）が格納されています。w、d、h 各々の値は、探針の最下端を始点とし、x 方向、y 方向、-z 方向へどれだけ走査するかを表します。

²² [Show Scan Area]はトグルボタンであり、繰り返しクリックすることで走査範囲の表示／非表示を交互に切り替わります。



1. "Tool Bar" → "Simulator Combo Box" → [MD/CG/DFTB/FEM/LIQ]²³
2. "Project Editor" → "Simulator Tab"
3. 各パラメータの"value"ダブルクリック → 各種入力コントロール²⁴
4. データ入力 → リターン

パラメータ設定を行うためには、まず設定したいシミュレータを選択する必要があります。"Simulator Combo Box"から MD/CG/DFTB/FEM/LIQ の内、いずれかを選択します²⁵。選択されたシミュレータに応じて"Simulator Tab"の文字は自動的に変更されます（図では DFTB）。次に"Simulator Tab"内で各パラメータ値を入力します。各パラメータの意味については、別紙「リファレンスマニュアル」を参照してください。なお新規プロジェクトを作成した場合でも、各パラメータには予めデフォルト値が設定されています。

どのシミュレータを選択しても、"Simulator Tab"内に"Output"という項目が存在し、その直下に"Directory"という項目があります。"Directory"以下は計算結果ファイル名のリストです。シミュレーション実行時に、このディレクトリにファイルが出力されますが、既に同名ファイルが存在する場合、それらのファイルは上書きされますので注意してください²⁶。

²³ シミュレータ選択は、"Menu Bar" → [Simulation] → [Solver]からでも行えます。

²⁴ 入力コントロールは、数値の場合はスピンボックス、文字の場合はテキストボックスといったように、要求されるデータ形式に応じて自動的に変化します。

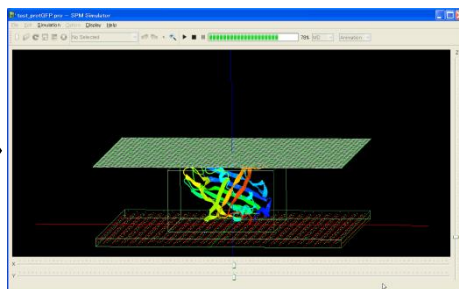
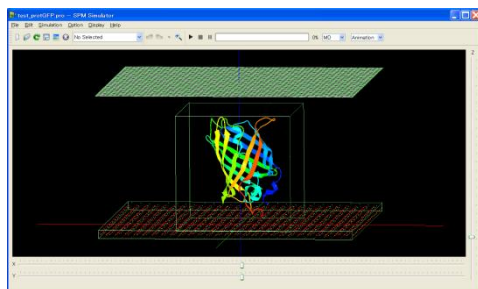
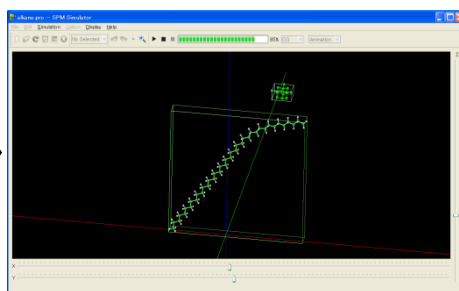
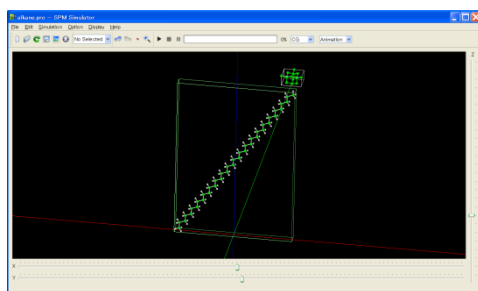
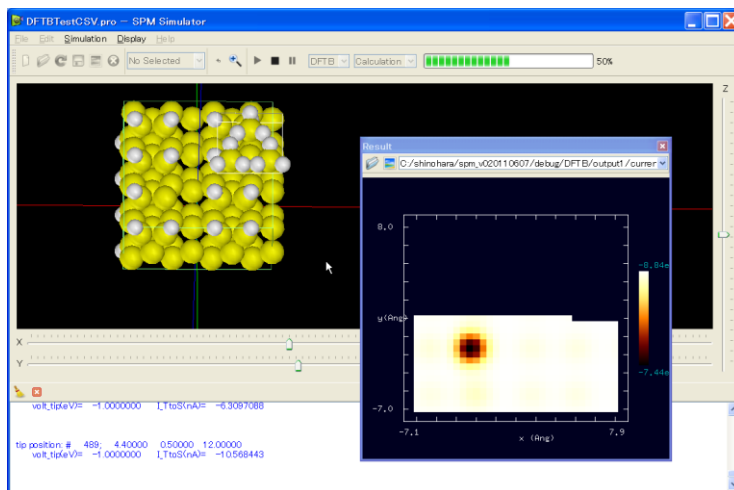
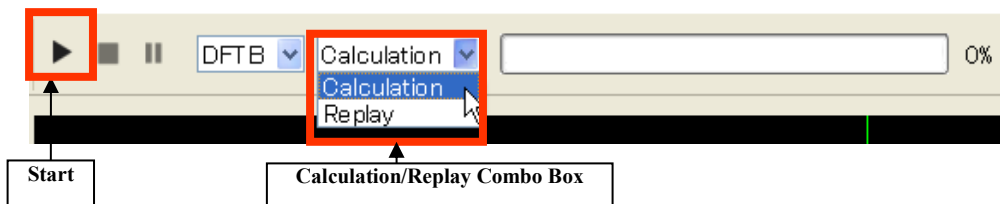
²⁵ GEO に関しては使用法が異なります。3 章 1 節『高速相互予測 AFM シミュレータ』の説明をご覧ください。

²⁶ ただし、以前のファイルに対しては、"ファイル名~"というバックアップファイルが自動作成されます。

6 シミュレーション

実行・再生・停止・一時停止

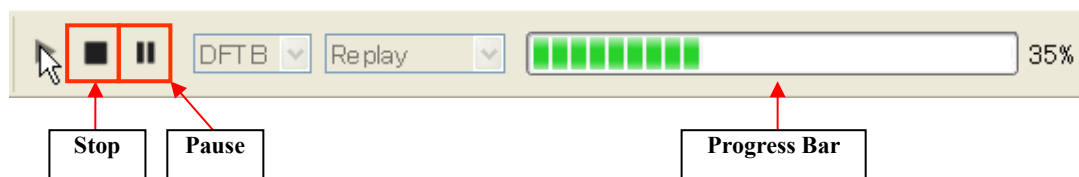
【実行・再生】



1. "Tool Bar" → "Calculation/Replay Combo Box" → [Calculation/Replay]
2. "Tool Bar" → [Start]

まず“Calculation/Replay Combo Box”で、計算を行う²⁷（Calculation）か、予め行われた計算結果を再生（Replay）するかを決定します。次に、[Start]ボタンを押すと、計算／再生が開始されます。実行中“Main View”上で、時々刻々変化する探針移動や試料の変形の様子を見ることができます。また計算結果は可視化され“Result View”上に表示されます。シミュレータからのメッセージは、“Log View”上に表示されます。

【停止・一時停止】

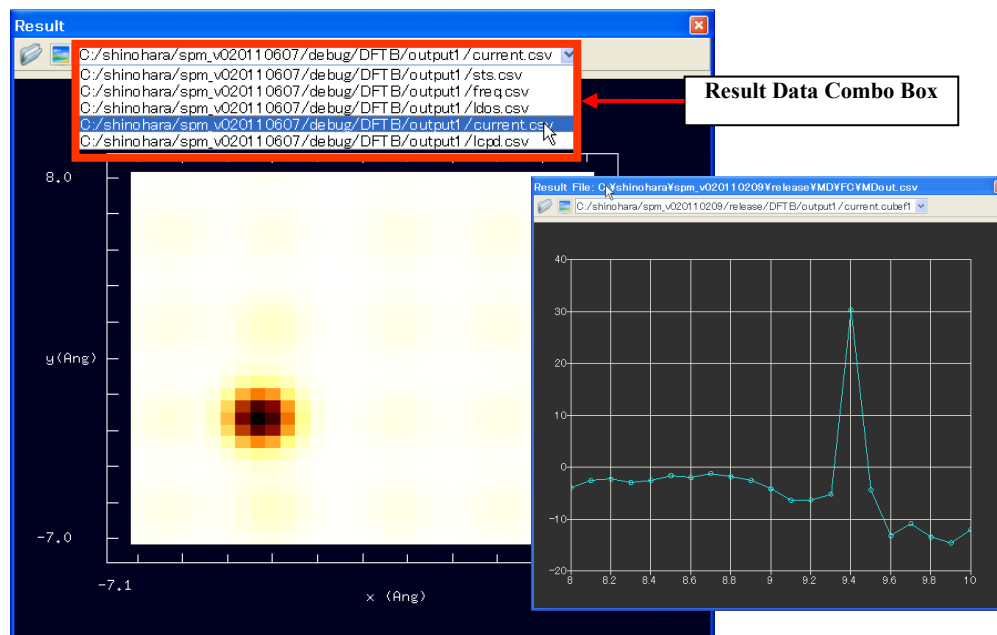


1.“Tool Bar” → [Stop] or [Pause]

計算／再生開始後、[Start]ボタンが使用不可となり、[Stop]ボタンが使用可能となります。[Stop]ボタンを押せば実行を停止します。[Pause]ボタンは再生の場合のみ使用可能です。このボタンを押すことで、再生を一時停止できます。再開するには、再び[Start]ボタンを押します。なおシミュレーションの進捗状況は、“Progress Bar”で見ることができます。

結果表示

【表示データ選択】



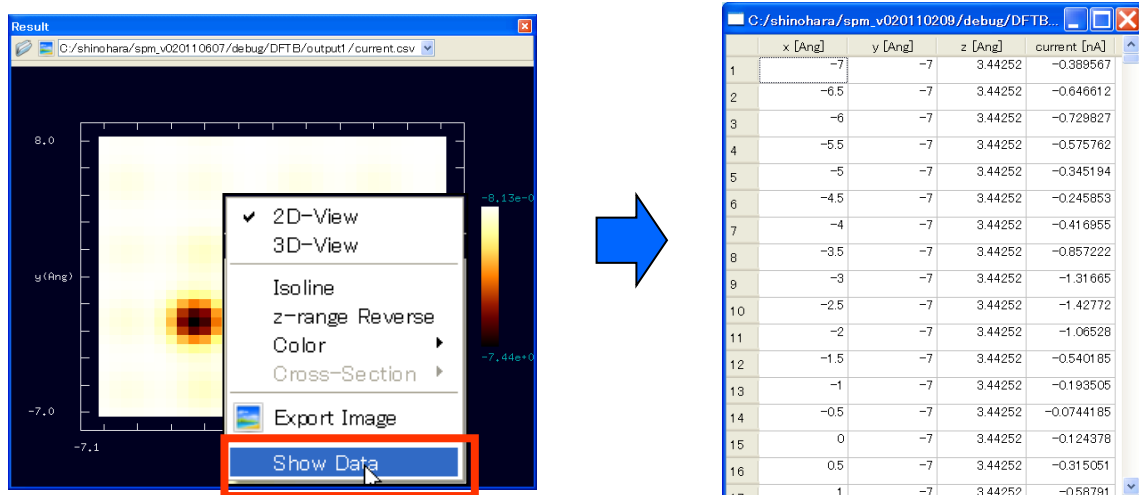
1.“Result View” → [Result Data Combo Box] → 結果出力ファイル選択

²⁷ “Simulator Combo Box” で選択されたシミュレータが実行されます。

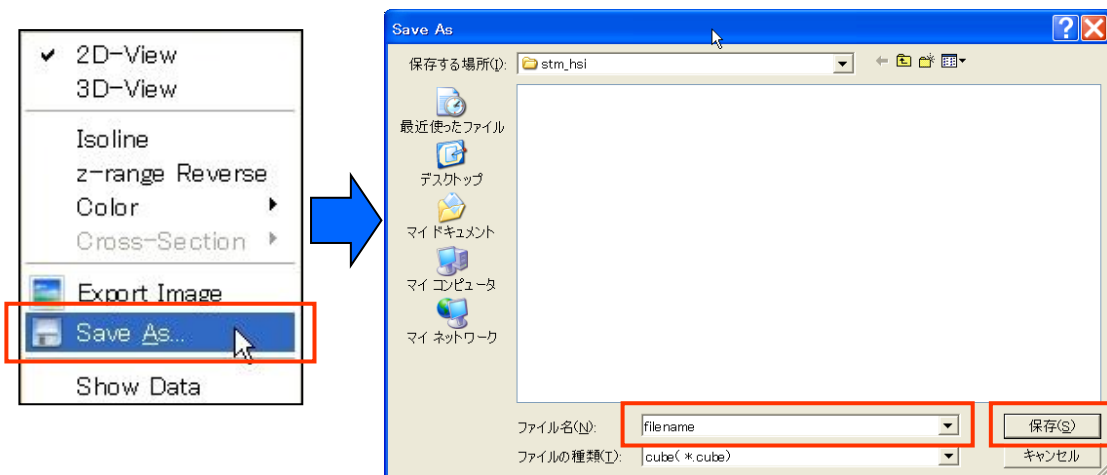
”Result Data Combo Box”内には、”Project Editor” → ”Simulator Tab” → ”Output” → ”Directory”以下に書かれている出力結果ファイルのリストが表示されます²⁸。リストからデータを選択すると、データ形式に応じて、グラフや濃淡図などが”Result View”上に描画されます。

【数値表示】

1.”Result View”右クリック → コンテキストメニュー → [Show Data]



【名前を付けて保存】



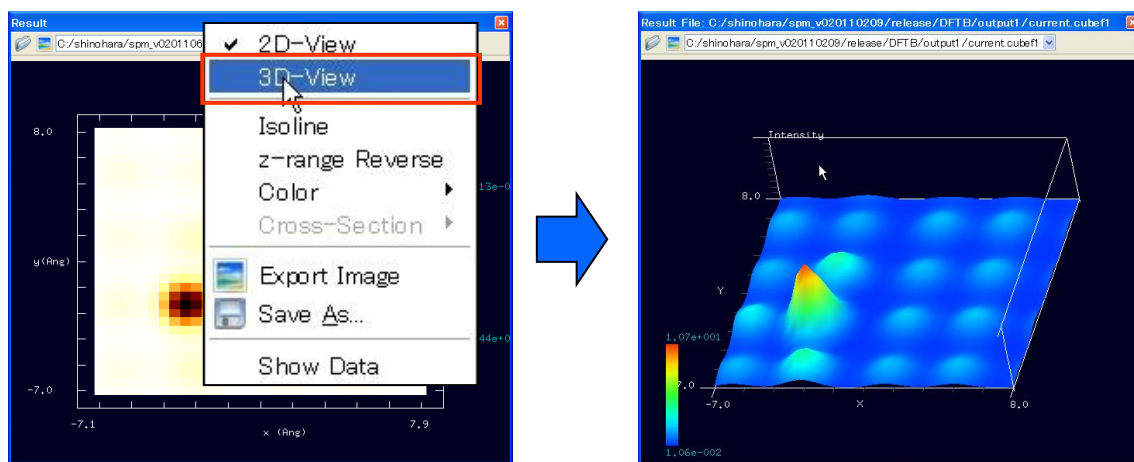
1.”Result View”右クリック → コンテキストメニュー → [Save As...] → ”Save As”ダイアログ

2. ファイル名入力 → [保存]

この操作によって、結果出力ファイルを別名、および別の形式で保存できます。

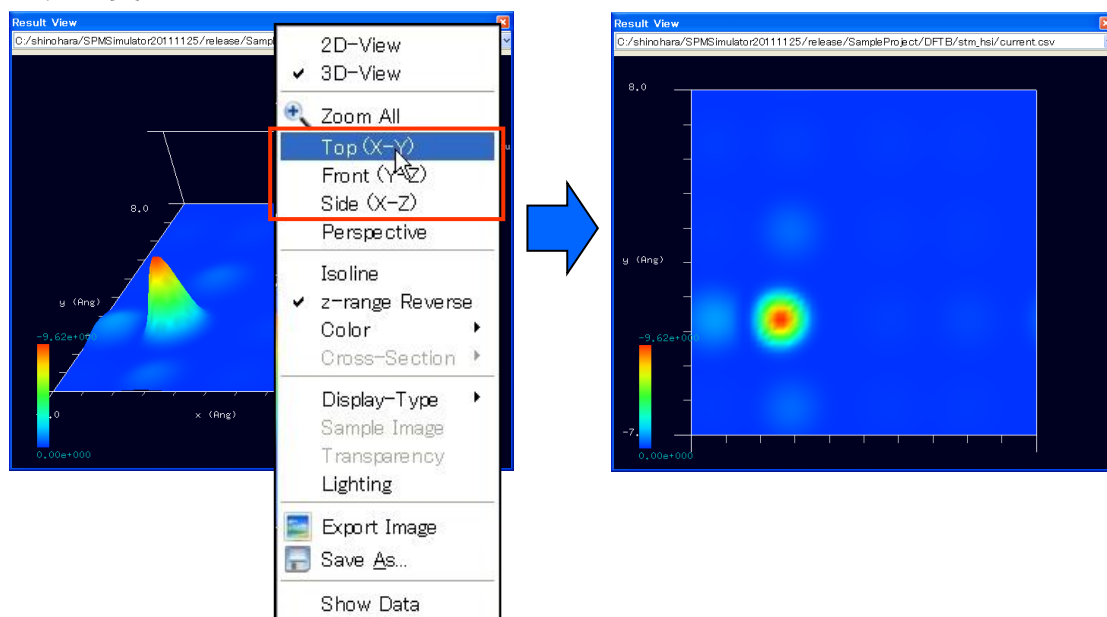
²⁸ 表示されるリストは、” Simulator Combo Box” で選択されるシミュレータに応じて変化します。

【濃淡図 3D 表示】



1.“Result View”右クリック → コンテキストメニュー → [3D-View]

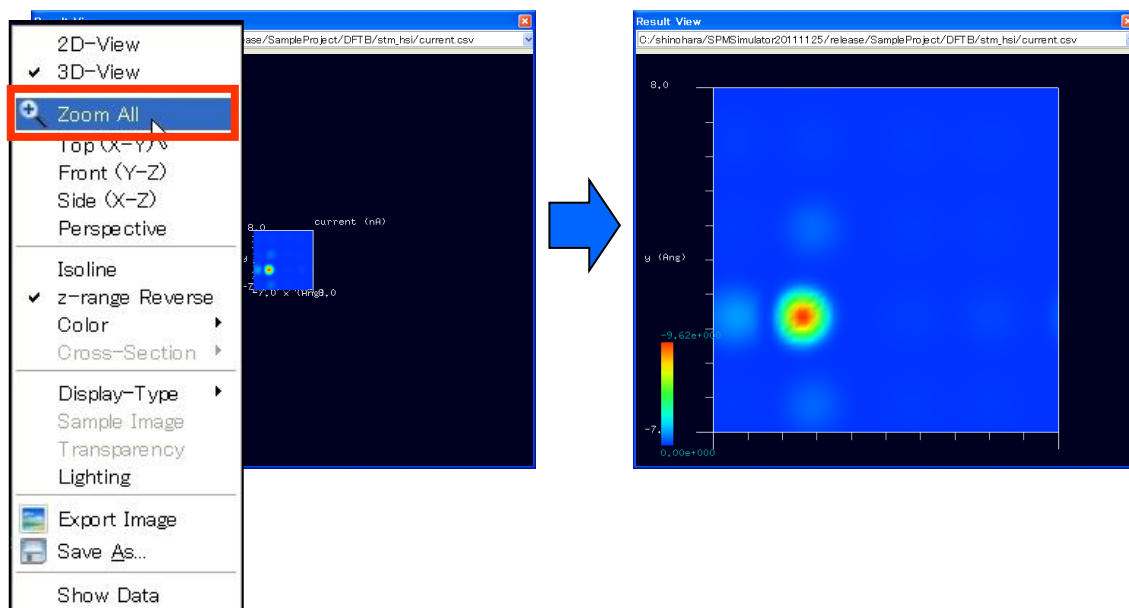
【視点の変更】



1.“Result View”右クリック → コンテキストメニュー → [Top/Front/Side]

この操作を行うことで、真上（Top）、正面（Front）、真横（Side）に視点を変更されます。
また、Result View 上をドラッグすることにより視角を自由に変更することもできます。
[Shift]+ドラッグすることにより、視点を平行移動させることができます。

【Zoom All】



1. "Result View"右クリック → コンテキストメニュー → [Zoom All]²⁹

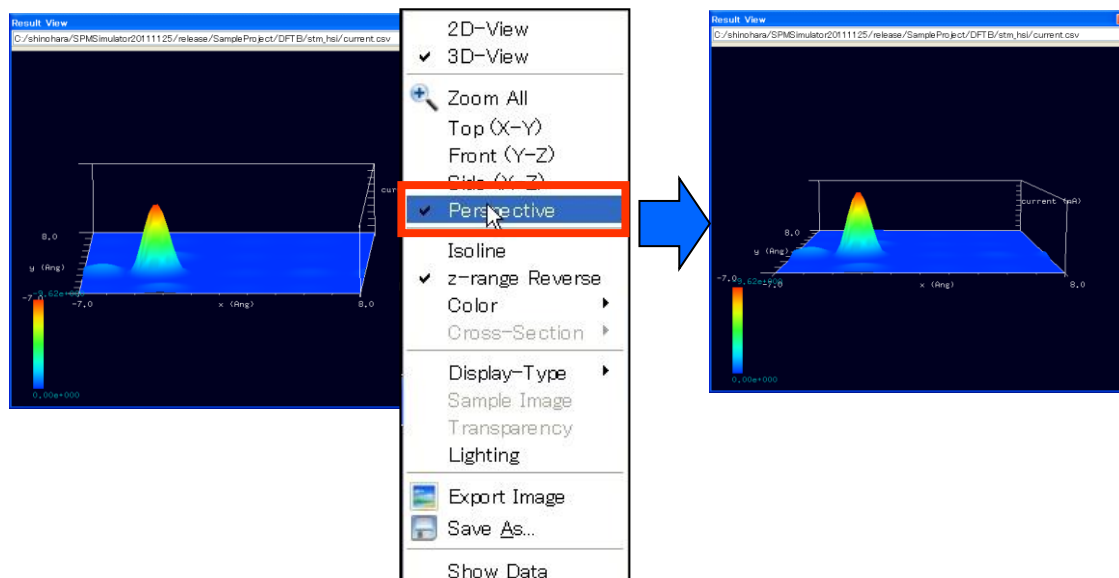
この操作によって、描画が"Result View"画面全体に収まるように、自動的に拡大縮小および平行移動が行われます。

【拡大縮小】

1. マウスホイール→回転

マウスホイールを回転させることで、任意の倍率にスケーリングすることができます。

【遠近法表示】

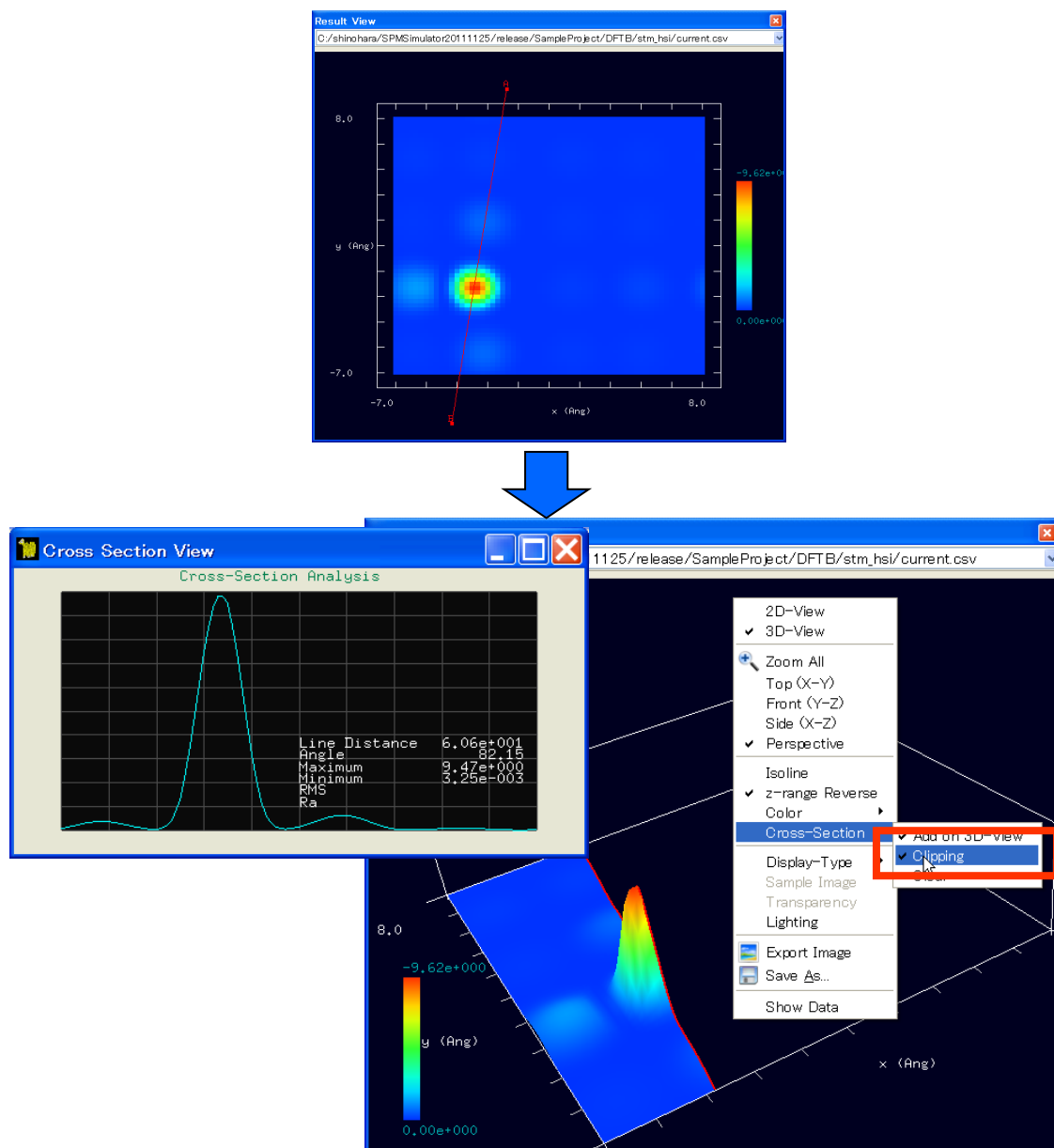


1. "Result View"右クリック → コンテキストメニュー → [Perspective]

²⁹ この操作は、“Tool Bar” → “Zoom All” ボタンをクリックすることによっても行えます。

[Perspective]はトグルボタンであり、この操作によって遠近法表示のオンオフを切り替えることができます。

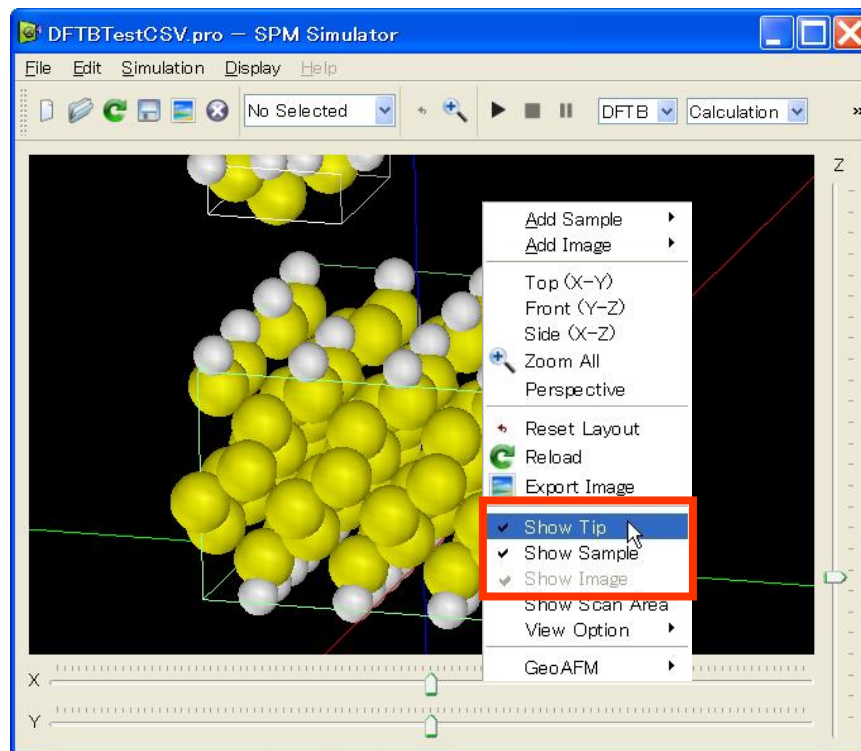
【濃淡図断面図】



7 可視化設定

コンポーネントの表示／非表示

以下では探針の場合を例にとって説明します。



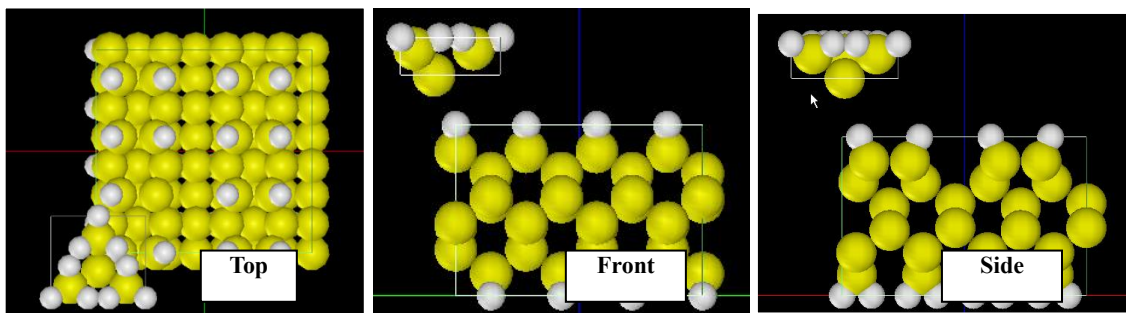
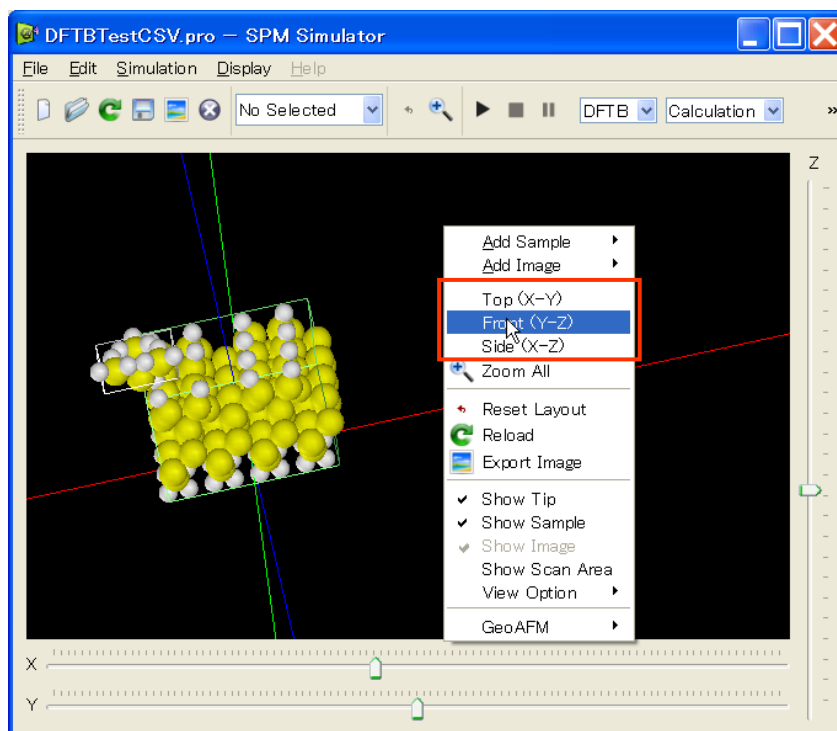
1. "Main View" 右クリック → コンテキストメニュー → [Show Tip]³⁰

試料、画像の表示／非表示も同様の操作で切り替えることができます。

視点の変更・Zoom All・拡大縮小・遠近法表示

【視点の変更】

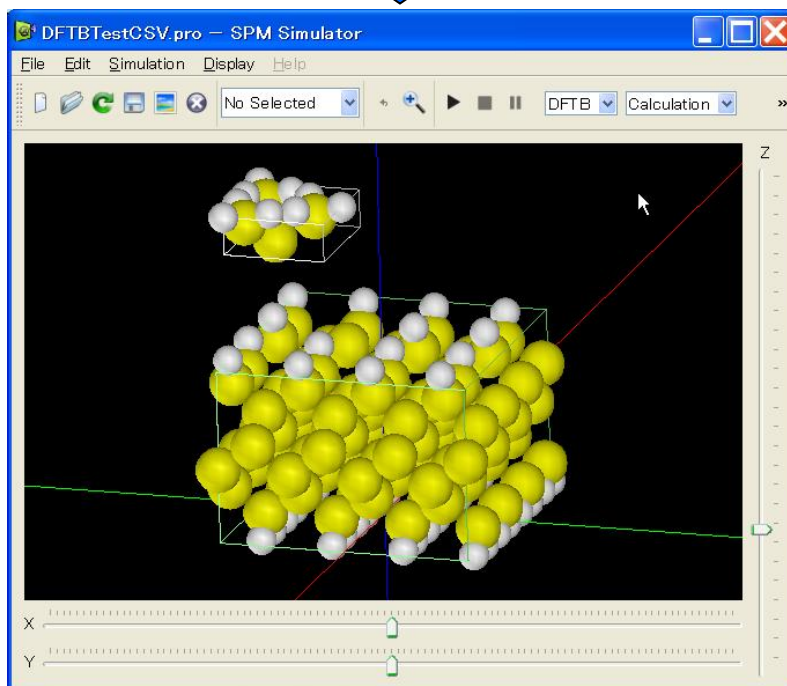
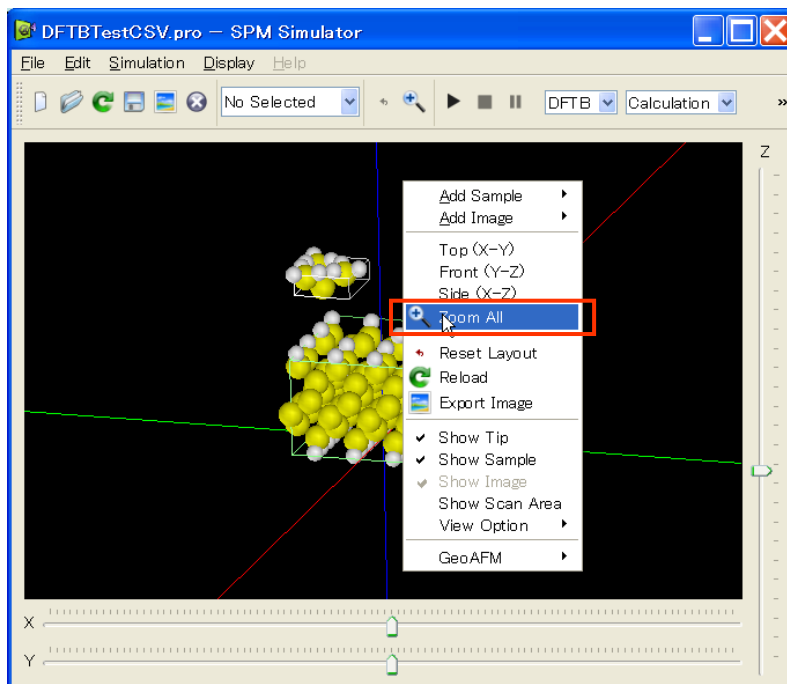
³⁰ [Show Tip] [Show Sample] [Show Image]は各々トグルボタンであり、繰り返しクリックすることでコンポーネントの表示／非表示を交互に切り替えられます。



1."Main View"右クリック → コンテキストメニュー → [Top/Front/Side]

この操作を行うことで視角が変更され、真上（Top）、正面（Front）、真横（Side）から見たコンポーネントが描画されます。また、どのコンポーネントも選択していない状態で Main View 上をドラッグすることにより視角を自由に変更することもできます。[Shift]+ドラッグすること、あるいは x と z スライダーバーを動かすことにより、視点を平行移動させることができます。

【Zoom All】



1."Main View"右クリック → コンテキストメニュー → [Zoom All]³¹

この操作によって、コンポーネントが"Main View"画面全体に収まるように、自動的に拡大縮小および平行移動が行われます。

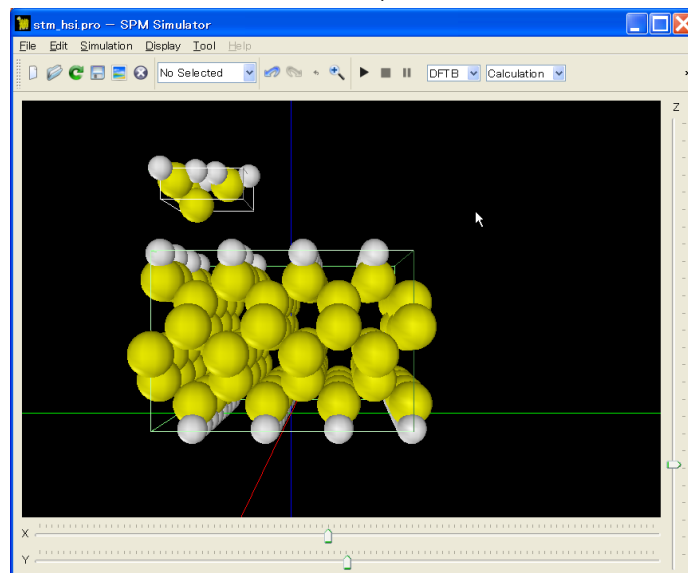
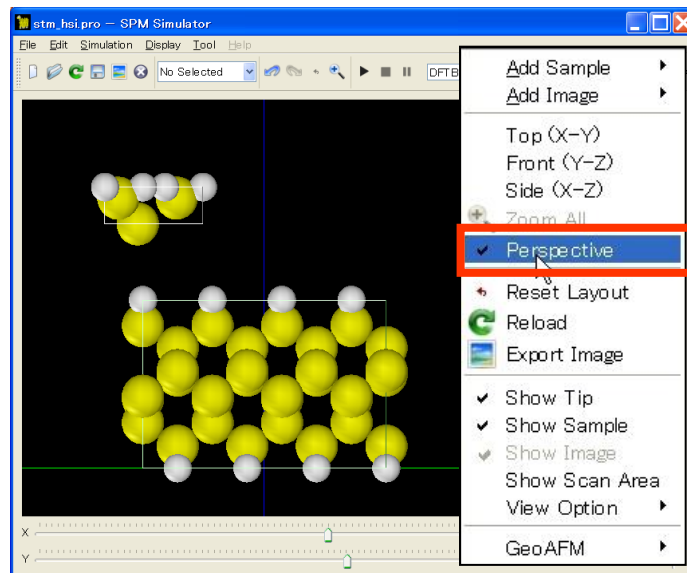
³¹ この操作は、“Tool Bar” → “Zoom All” ボタンをクリックすることによっても行えます。

【拡大縮小】

1. マウスホイール→回転

マウスホイールを回転させることで、任意の倍率にスケーリングすることができます。

【遠近法表示】

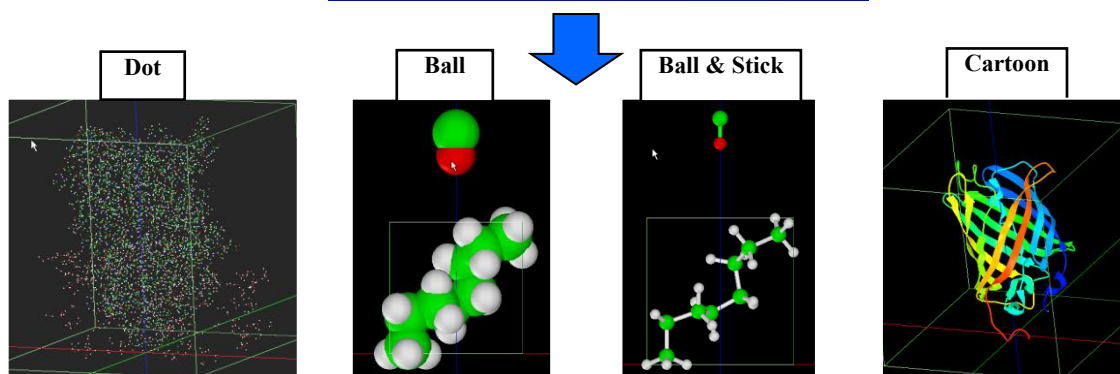
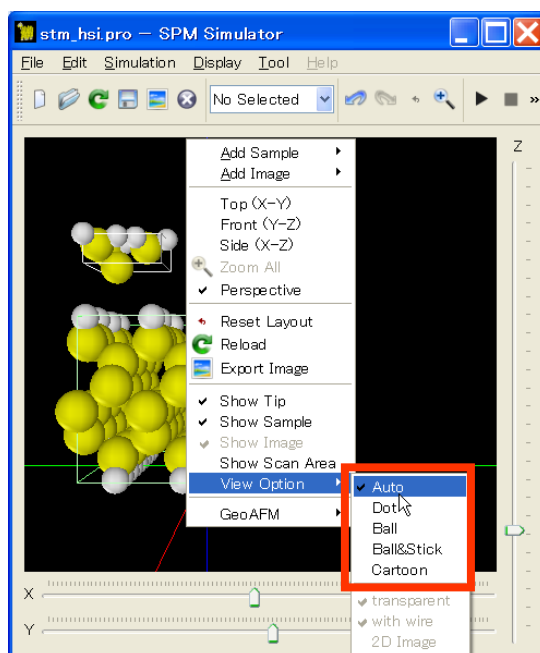


1. "Main View"右クリック → コンテキストメニュー → [Perspective]

[Perspective]はトグルボタンであり、この操作によって遠近法表示のオンオフを切り替えることができます。

View Option 設定

【分子描画法切り替え】³²

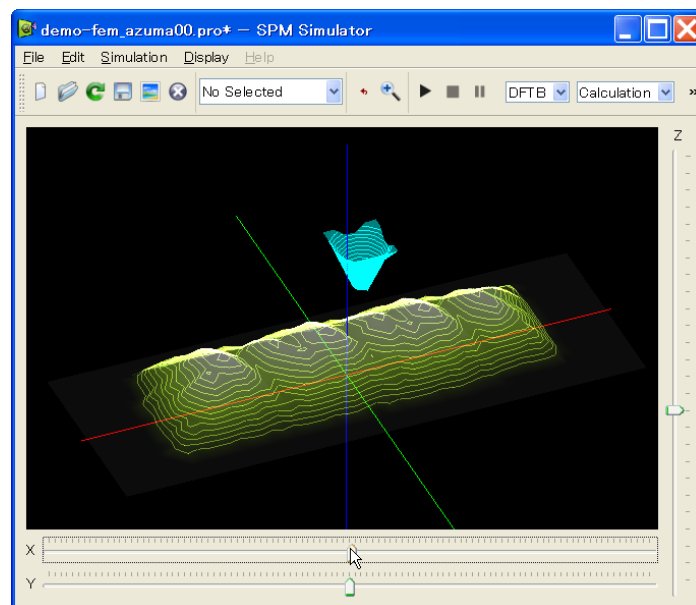
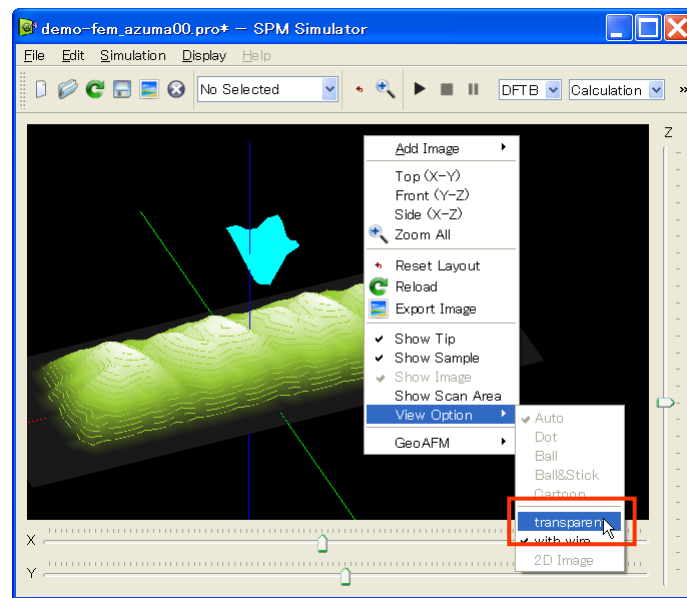


1. "Main View"右クリック → コンテキストメニュー
2. [View Option] → [Auto/Dot/Ball/Ball&Stick/Cartoon]

この操作によって、分子の描画法を変更できます。[Auto]はコンポーネントデータから適切な描画法を自動判定します。なお、これらの表示はファイル形式によって表示できないものがあります。Ball&Stick は原子間結合情報が必要で、Cartoon は PDB ファイルのみに対応しています。

【半透明／不透明切り替え】

³²現在この操作を行えるのは、".pdb"、".xyz"、".txyz" の拡張子をもつコンポーネントデータのみとなっています。



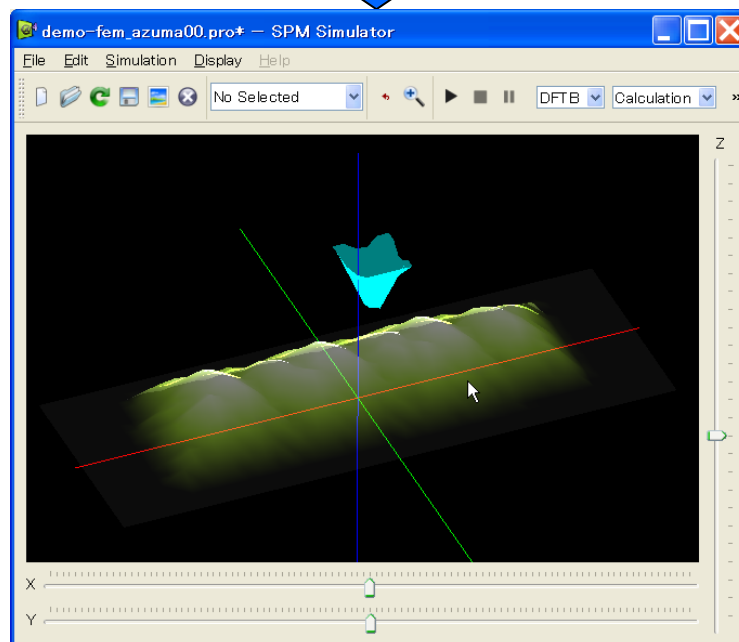
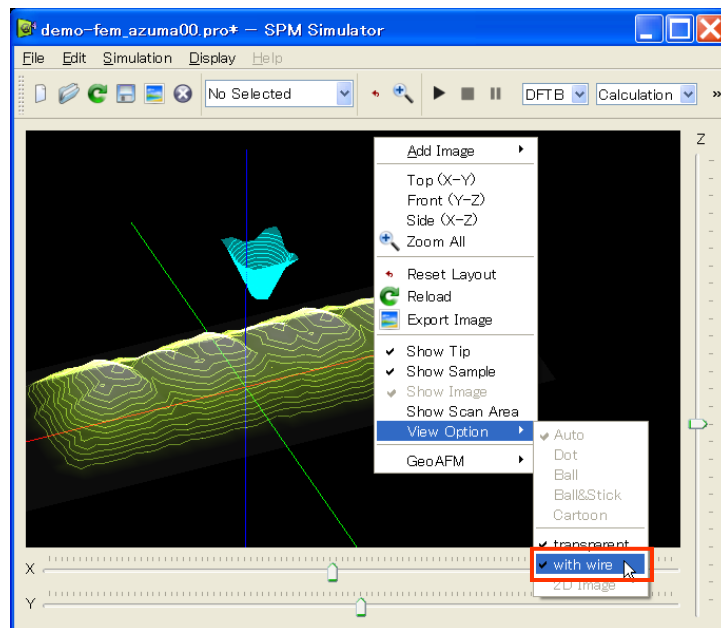
1."Main View"右クリック → コンテキストメニュー

2.[View Option] → [transparent]^{33, 34}

³³ [transparent]はトグルボタンであり、繰り返しクリックすることで不透明／半透明の表示を交互に切り替えられます。

³⁴ この操作は、"～.cube"、"～.csv"、"～.bmp"、"～.jpg"の拡張子をもつGrid形式のファイルに対して有効です。

【等高線表示／非表示切り替え】



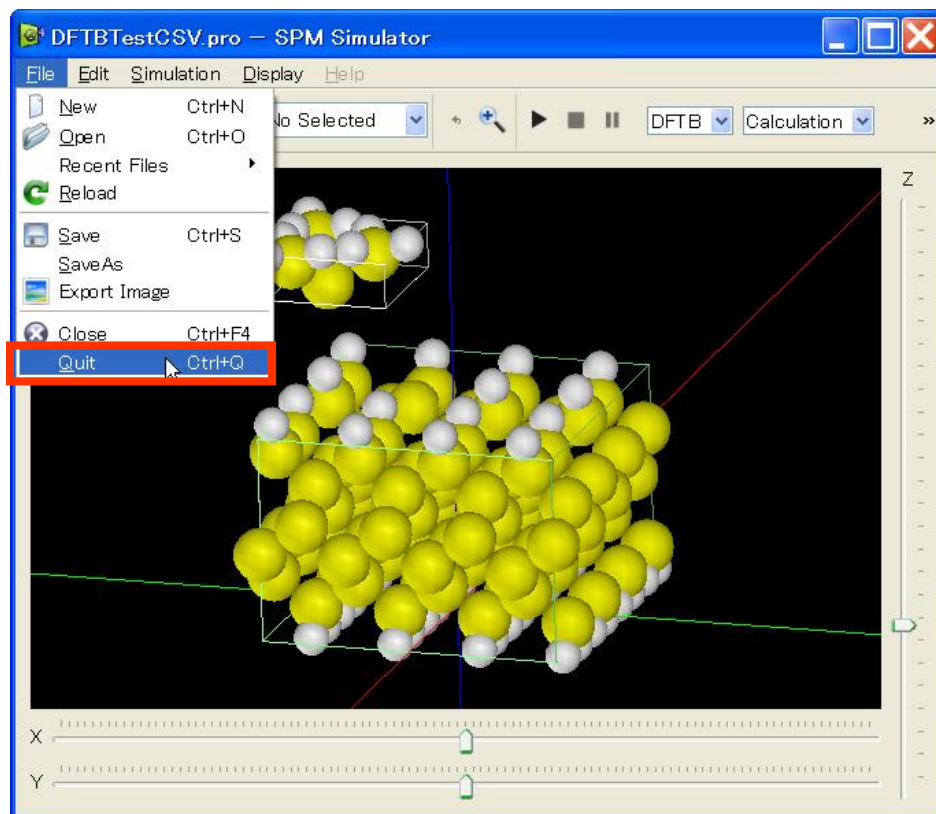
1."Main View"右クリック → コンテキストメニュー

2.[View Option] → [with wire]³⁵ ³⁶

³⁵ [with wire]はトグルボタンであり、繰り返しクリックすることで等高線の表示／非表示を交互に切り替えられます。

³⁶ この操作は、" ~.cube"、" ~.csv"、" ~.bmp"、" ~.jpg" の拡張子をもつ形式のファイルに対して有効です。

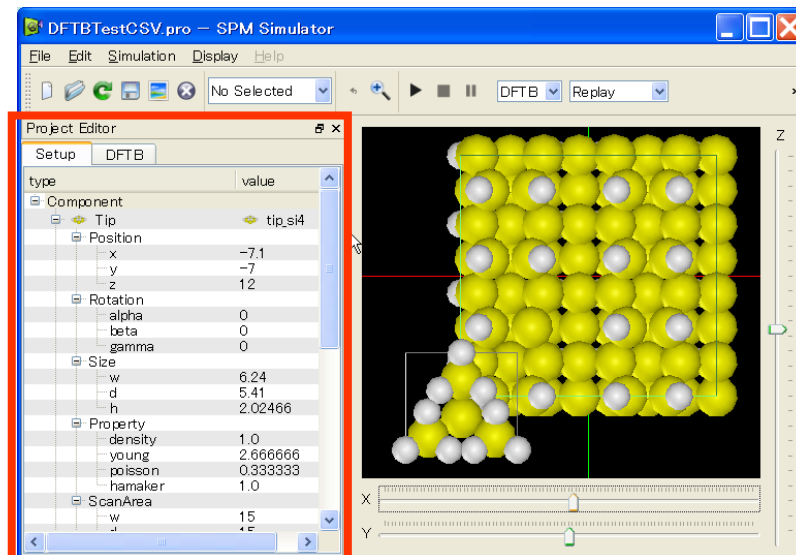
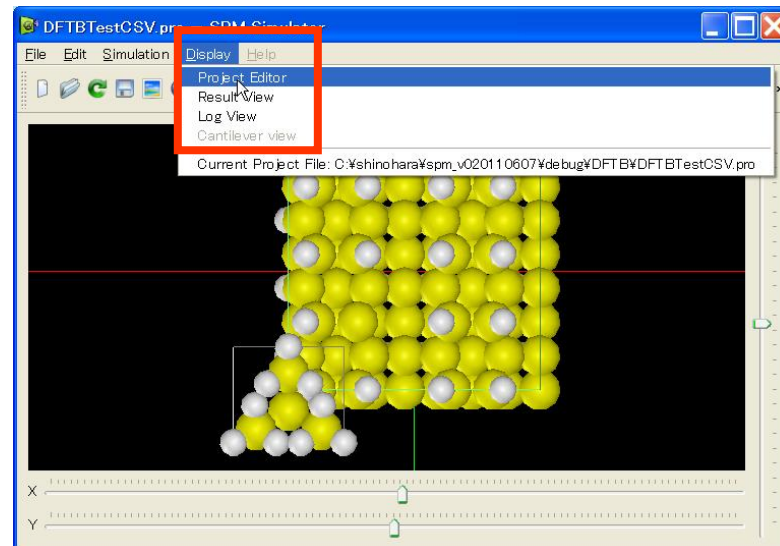
8 GUI の終了



1."Menu Bar" → [File] → [Quit]

9 その他

画面の表示／非表示



1. "Menu Bar" → [Display] → [Project Editor/Result View/Log View]³⁷

以上の操作で画面の表示／非表示³⁸の切り替えを行うことができます。また各画面上部の名称 ("Project Editor" など) が書かれているバーをダブルクリックすることで、GUI との切り

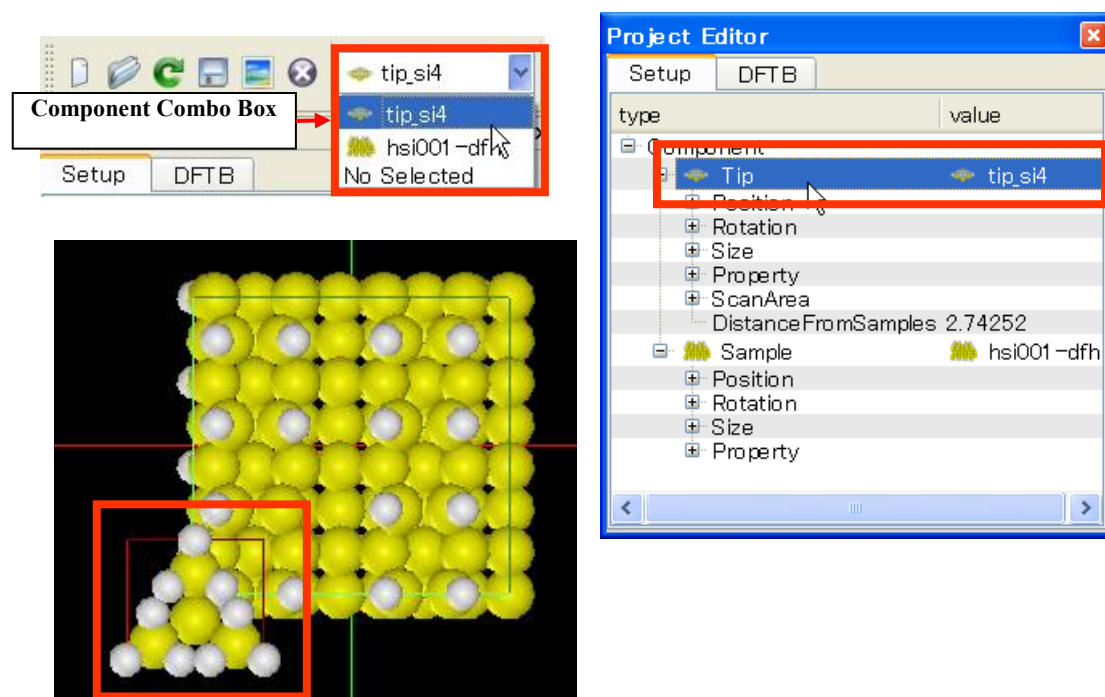
³⁷ [Project Editor] [Result View] [Log View] はトグルボタンであり、繰り返しクリックすることで画面の表示／非表示を交互に切り替えられます。

³⁸ 非表示は、各画面上部の "×" 印をクリックすることでも行えます。

離し／ドッキングが行えます。なお、“Main View”を非表示にすることや、GUI と切り離すことはできません。

コンポーネントの選択

【選択】



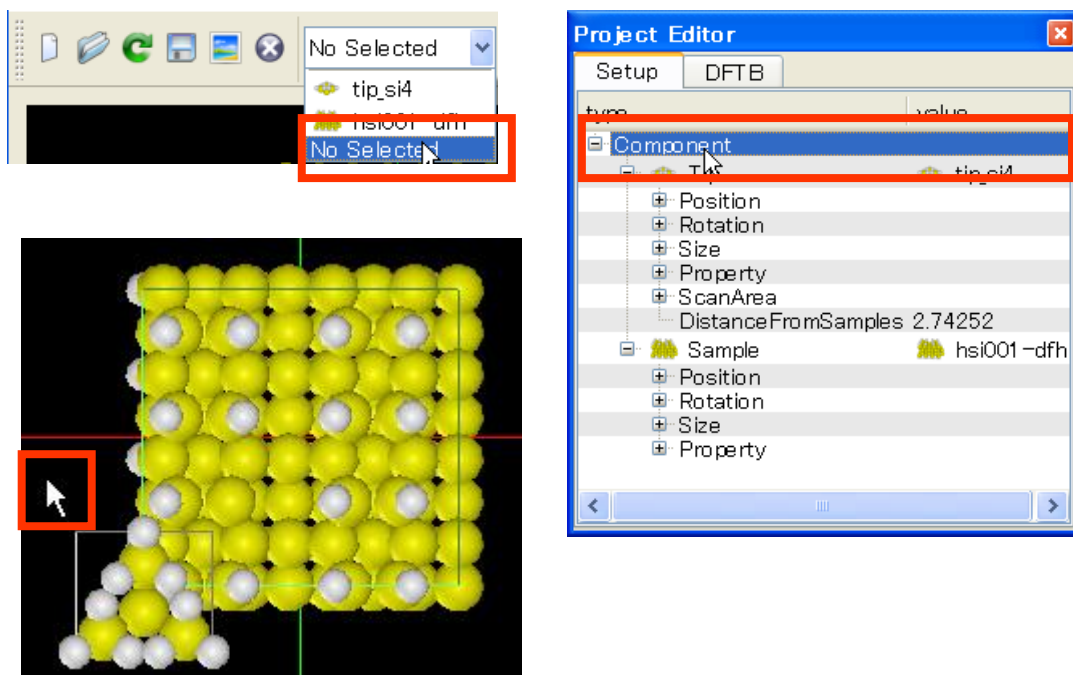
1. a. "Tool Bar" → "Component Combo" → コンポーネント名選択³⁹
- b. "Project Editor" → コンポーネント項目クリック
- c. "Main View" → コンポーネント周辺ダブルクリック⁴⁰

1a、1b、1c いずれの方法でもコンポーネントを選択できます。コンポーネントが選択されると、“Main View”上で選択コンポーネントを囲む外枠の色が緑から赤に変化します。あるコンポーネントが選択されている場合、マウスやスライダバー、キーボードなどの操作によって、そのコンポーネントの移動、回転を行えます。一方何も選択されていない場合、同様の操作を行うと視点が変更されます。

【選択解除】

³⁹ “Project Editor” に表示されているコンポーネントのリストがここに表示されます。

⁴⁰ この方法で選択できるのは、“～.pdb”、“～.xyz”、“～.txyz”の拡張子をもつコンポーネントデータのみとなっています。



1. a."Tool Bar" →"Component Combo" →[No Selected]
- b."Project Editor" → "Component"クリック
- c."Main View" → 背景ダブルクリック

1a、1b、1c いずれの方法でもコンポーネントの選択を解除できます。

コンポーネントのデータベース登録

探針データは

“インストールディレクトリ¥data¥Tip¥”

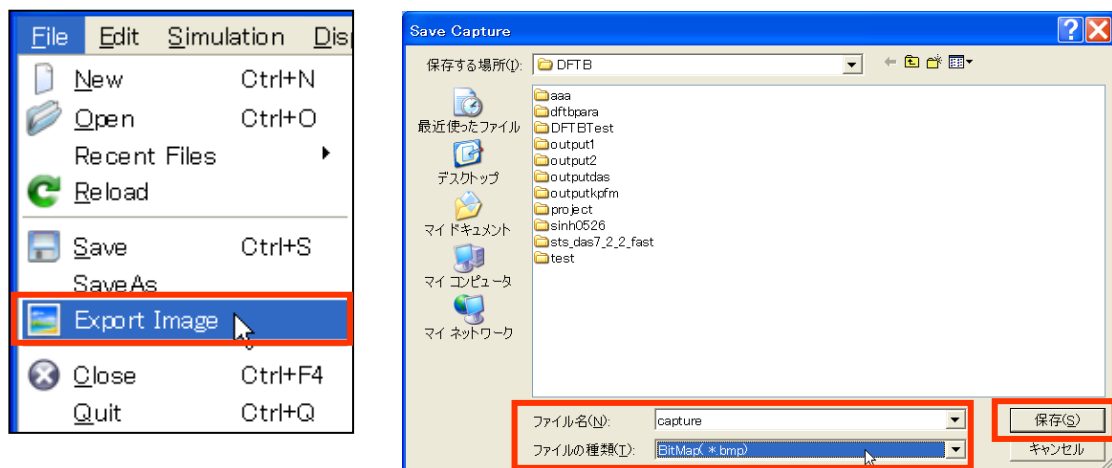
試料データは

“インストールディレクトリ¥data¥Sample¥”

以下にデータを直接コピーしてください。ここに登録されたデータは、探針用と試料用の"DB View"に各々表示されます。なお登録は、“～.pdb”、“～.xyz”、“～.txyz”の拡張子をもつコンポーネントデータのみ可能です。また、データ同名の画像ファイル ("データファイル名.gif") を同じディレクトリに置いておくと、"DB View"にアイコンが表示されます。

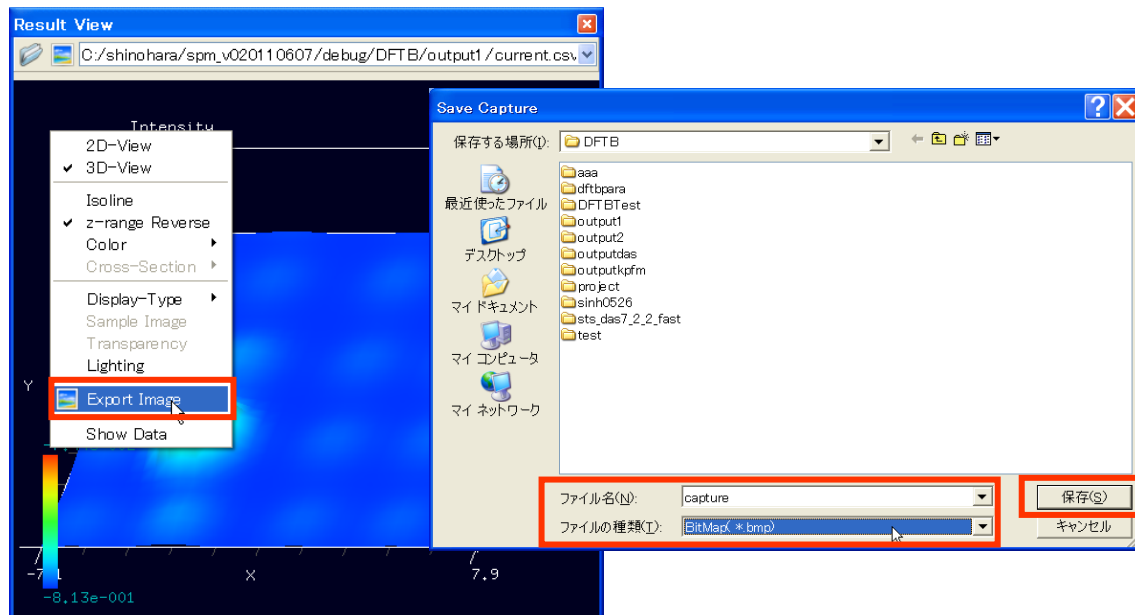
イメージの保存

【Main View 画面の保存】



1. "Menu Bar" → [File] → [Export Image] → "Save Capture"ダイアログ
2. 画像ファイル名入力 → [保存]

【Result View 画面の保存】



1. "Result View"右クリック → コンテキストメニュー
2. [Export Image] → "Save Capture"ダイアログ
3. 画像ファイル名入力 → [保存]

第3章

計算事例

この章では、SPM シミュレータに同梱されているサンプルデータファイルを使って、各シミュレータに代表的な事例と、その計算方法をご紹介します。

なお、ここで紹介されている図は実際のものとは異なる場合がございます。

1 探針・試料・測定 AFM 像高速相互予測シミュレータ

はじめに

「探針・試料・測定 AFM 像高速相互予測シミュレータ」は、探針の立体的な形状データ、試料表面の凹凸を表現した形状データ、測定 AFM 像データ、の三種類のデータのうち、二種類のデータから、残り一種類のデータを高速に予測するシミュレーションを実行します。実際のシミュレーション計算においては、探針－試料間の相互作用(ファンデルワールス力)は考慮されず、また、探針・試料の 3 次元立体形状は変形しないと仮定して、純粋に幾何学的な計算により、データを相互予測します。本シミュレーション計算では、カンチレバーは常に試料に接していると仮定しており、いわゆる AFM のコンタクトモードの測定に対応しています。

本シミュレータは、古典論あるいは量子論の物理学的な方程式を一切考慮せず、探針、試料、AFM 測定像を、単なる幾何学的な構造物としてとらえ、「測定中、探針は常に試料と接触している」という仮定だけで、計算を行います。従って、量子論的な性質が支配的なミクロの領域での現象を調べるには、本シミュレータは、適していません。一方、ナノスケールオーダーの半導体デバイスの AFM 像をシミュレートする、あるいは、高分子有機化合物からなる生体試料の AFM による観察画像をシミュレートする、といった、マクロとミクロの中間的な領域のスケールでの用途に、本シミュレータは非常に適しています。

以下に、本シミュレータの使用方法を、具体例を交えて説明します。探針・試料・測定 AFM 像高速相互予測シミュレータ(以下、GeoAFM と略する)の使い方として、以下の三種類を紹介します。

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

これらのシミュレーション方法を、順を追って見て行きます。

探針形状データおよび試料表面形状データから測定 AFM 像データを求める

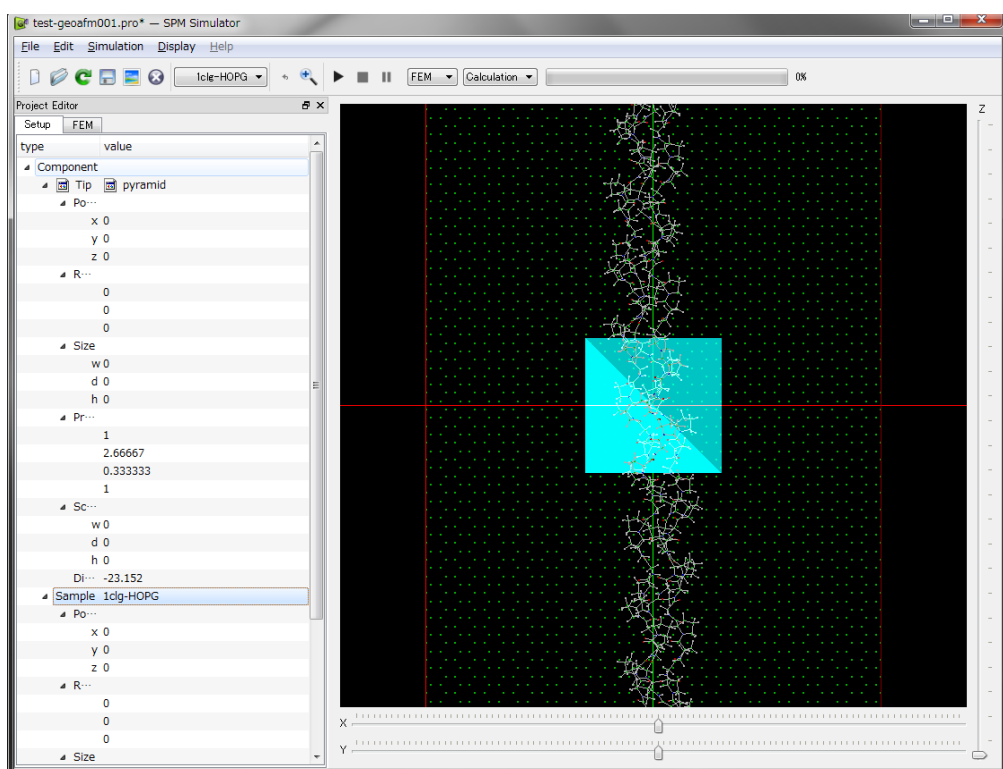
ここでは、探針がピラミッド型のカンチレバーを使って、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite : 高配向熱分解黒鉛) 上に配置された一個のラクトン系高分子量ポリマー (CLG : ϵ カプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体) の AFM 像を求めることにします。

まず、新しいプロジェクトファイルを作成します。[File]→[New]をクリックすることにより、[Create new project]というタイトルのボックスが現れます。[Project name]の欄は空欄になっています。ここでは、"test-geoafm001"という文字列を直接タイプ入力して、この名前のプロジェクトファイルを作成することにします。

なお、[Create new project]のボックスの、上から二つ目の項目[Directory]の欄には、本シミュレータの実行ファイルが収められているディレクトリの絶対パスが、予め自動的に書き込まれています。これは、[Directory]欄内に書き込まれている絶対パスの指定するディレクトリの直下に、プロジェクト名と同じ名前のディレクトリが作られ、そのディレクトリ内に、プロジェクトファイルを始めとする様々なデータファイルが自動的に収められることを意味します。今の場合、このような設定の方が、シミュレーションに関係するデータファイルが、一か所にまとめられて便利なので、このまま[OK]をクリックします。

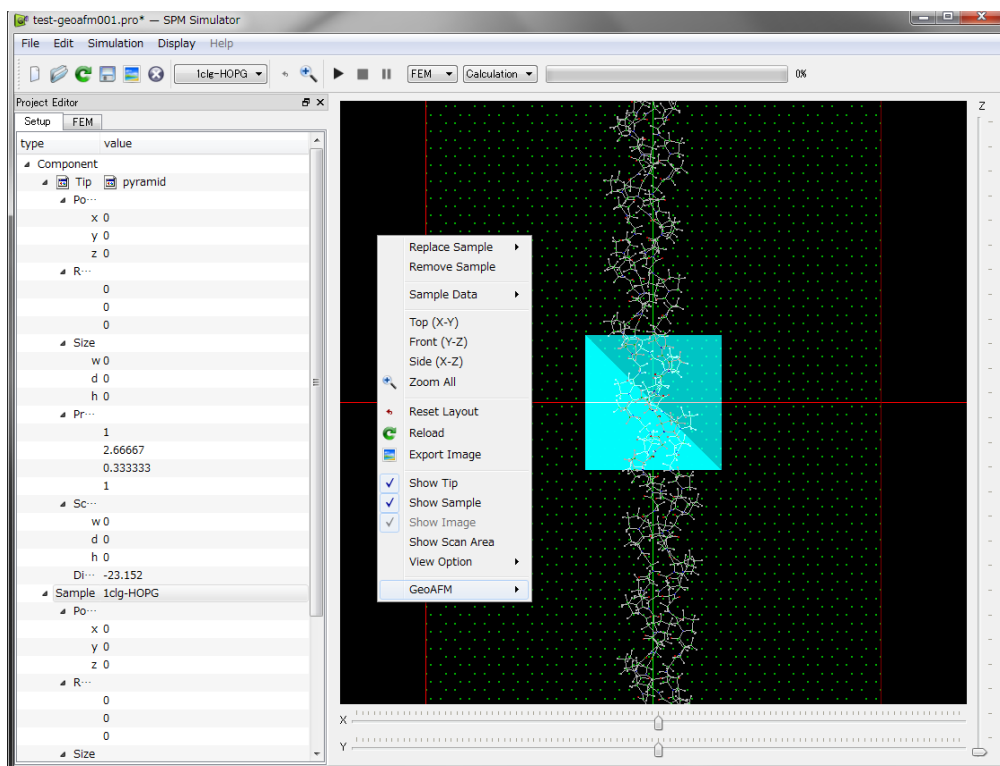
次に、[Project Editor]の、[Setup]タブをクリックして選択します。ページの先頭の、項目[Component]から、探針形状データ、試料表面形状データを、読み込むことにします。まず、項目[Component]を右クリックして、[Add Tip]の[Pyramid]を選択します。すると、ピラミッド形状の探針先端部分の角度 angle (deg)を要求するボックスが現れます。デフォルト値で 32.0 度が与えられていますので、ここでは、そのまま[OK]とします。次に、再び項目[Component]を右クリックして、[Add Sample]の[Database]を選択します。すると、予め用意された試料データの一覧が現れます。ここでは、データベースの先頭に置かれている [1clg-HOPG]を選択します。

この時点で、ウィンドウは、以下のような画像を表示します。図の中央の水色の正方形が、ピラミッド型探針を下から見上げた様子を表しています。縦に連なる鎖上の高分子構造、基盤となるグラファイトの分子も、図に表示されていることが分かります。



念のため、この段階で、プロジェクトファイルを保存することになります。[File]→[Save]で、test-geoafm001.pro ファイルが保存されます。ある程度まとまった作業が完了するたびに、このようにしてプロジェクトファイルの保存を行うことが可能です。

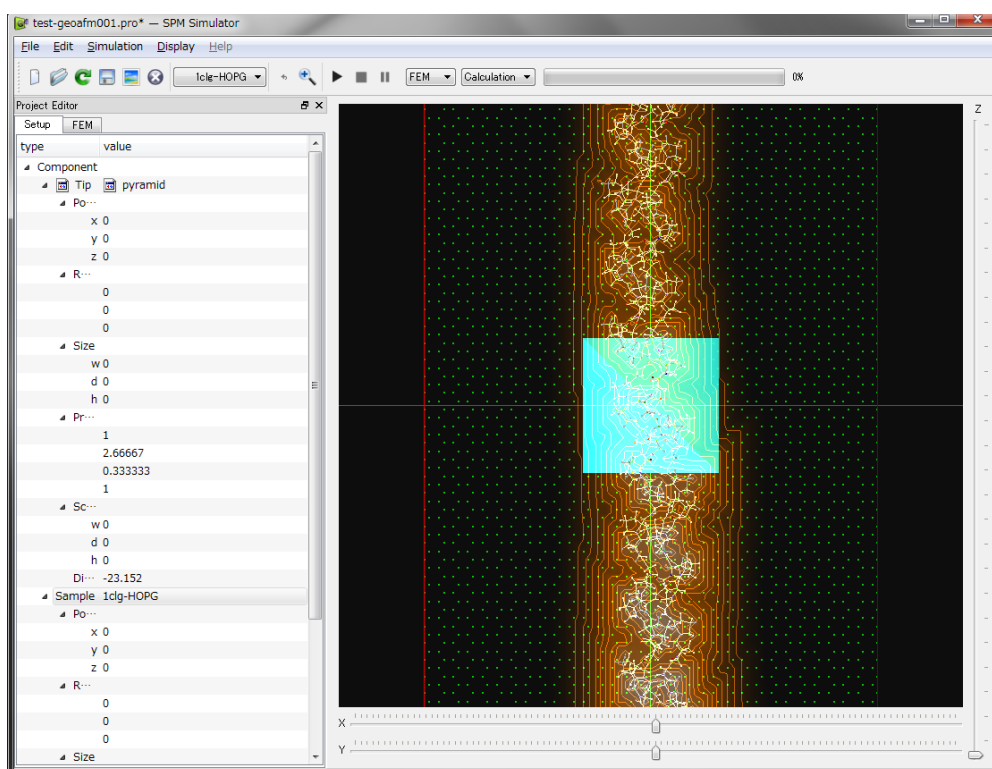
これより、GeoAFM の計算実行に移ります。マウスを操作して、探針及び試料が表示されているウィンドウの適当な場所に、カーソルを配置し、そこで右クリックします。すると、下の図のように、縦長のコンテキストメニューが現れます。



まず、シミュレータの画像解像度を設定します。コンテキストメニューの最も下の項目である[GeoAFM]を選択し、さらに、[Set GeoAFM Resolution]をクリックします。これにより解像度の数値を直接入力することが出来ます。解像度は、シミュレーション計算を行う際の、長さの最小単位を表します。解像度は、Å単位で 0.1 以上の実数値を設定することが可能です。値は、0.1 刻みで変化させることが可能です。また、解像度の最大値は 10 となっています。なお、解像度のデフォルト値は 5[Å]に設定されています。

ここでは、解像度を 1[Å]に設定してみましょう。なお、シミュレータの実際の運用では、解像度の値は、実験で用いる AFM の解像度を参考にした値を、ユーザーが各自で設定するのが良いでしょう。また、本シミュレータを使用する際、サンプル全体の大きさに比べて、非常に小さな値の解像度を取った場合、プログラムの演算処理量が急激に増大してしまい、事実上、プログラムが止まってしまう(freeze してしまう)場合が有ります。従って、解像度の決定は、十分な配慮の上で行って下さい。

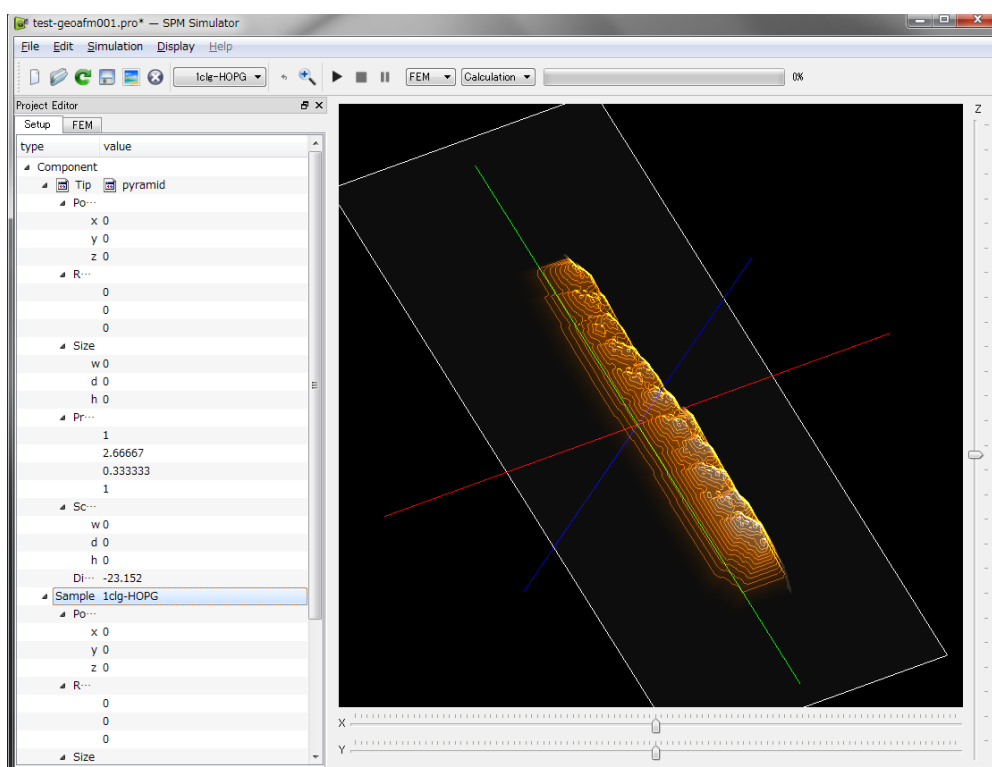
次に、再び、コンテキストメニューの最も下の項目である[GeoAFM]を選択し、さらに、[Show Simulated Image]をクリックします。すると、下図のように、ウィンドウ内に、オレンジ色の等高線を表現した図が現れます。これが、予測される AFM 画像です。



予測 AFM 画像を表示する範囲を変えることができます。[Setup]タブから、探針の始点(x, y) 座標(Å) を[Tip]>[Position]の x, y に入力し、スキャンエリアのサイズを[Tip]>[ScanArea]の w, d に入力しますと、指定した矩形範囲で AFM 画像を出力できます。一方、[Tip]>[ScanArea] の w または d のいずれかをゼロにしますと、スキャンエリアは試料サイズを網羅するように自動的に決められます。ここではスキャンエリアを自動的に決める方法を採用します。

出来上がった予測 AFM 画像を見やすくするために、ウィンドウ内から、探針および試料の画像を取り除くことにします。画像が表示されているウィンドウ内の適当な場所にカーソルを配置し、そこで右クリックします。縦長のコンテキストメニューが現れますので、メニュー内の項目[Show Tip]および[Show Sample]を左クリックして、チェックを外します。

これにより、ウィンドウ内には、予測される AFM 画像のみが表示された状態となります。ウィンドウ画面内でカーソルをドラッグすると、画像は自由に立体的に回転しますので、AFM 画像の凹凸が良く見える角度に視点を定めることが可能です。また、ウィンドウ上部の虫眼鏡マークをクリックすると、画像がウィンドウ内に適切に収まるよう、自動的に画像表示の拡大・縮小が行われます。例えば、以下の図のように、試料である高分子鎖の高さの変化が良く見える角度に設定することが可能です。



上で求められた予測 AFM 画像を、再利用可能なデータとして保存することにします。画像が表示されているウィンドウ内の適当な場所にカーソルを配置し、そこで右クリックします。縦長のコンテキストメニューが現れますので、メニュー内の項目[GeoAFM]→[Export Simulated Data]を選択します。保存ファイル名を要求されますので、ここでは、"test-geoafm001-image"と入力します。この結果、予測 AFM 画像は、test-geoafm001-image.cube というファイルに保存されます。

以上の作業が終わったら、ひとまず、[File]→[Save]および[Close]として、プロジェクトを終了させましょう。

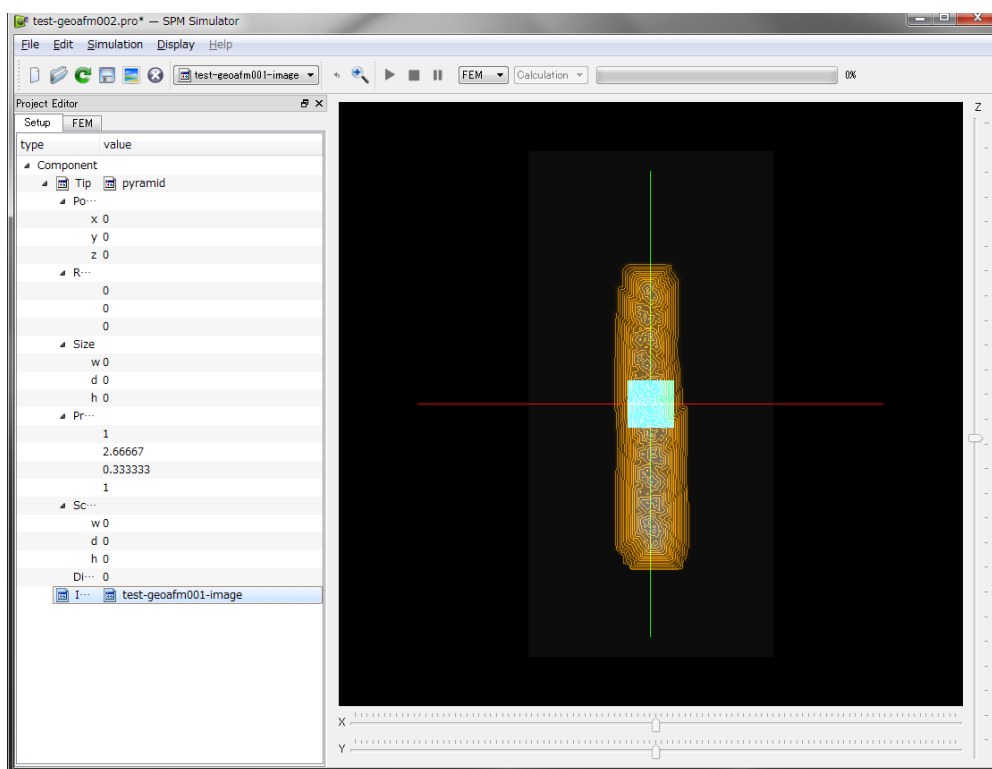
探針形状データおよび測定 AFM 像データから試料表面形状データを求める

ここでは、ピラミッド型の探針形状データと、1clg-HOPG の測定 AFM 像データを元にして、試料表面形状データを求める方法を説明します。測定 AFM 像データは、前の小節において、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite : 高配向熱分解黒鉛) 上に配置された一個の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) について計算して得られた、test-geoafm001-image.cube ファイルを用いることとします。まず、新しいプロジェクトファイルを作成します。[File]→[New]により、[Create new project]ボックスを呼び出します。ここでは、[Project name]の空欄に、"test-geoafm002"という文字列を直接タイプ入力して、この名前のプロジェクトファイルを作成することとします。

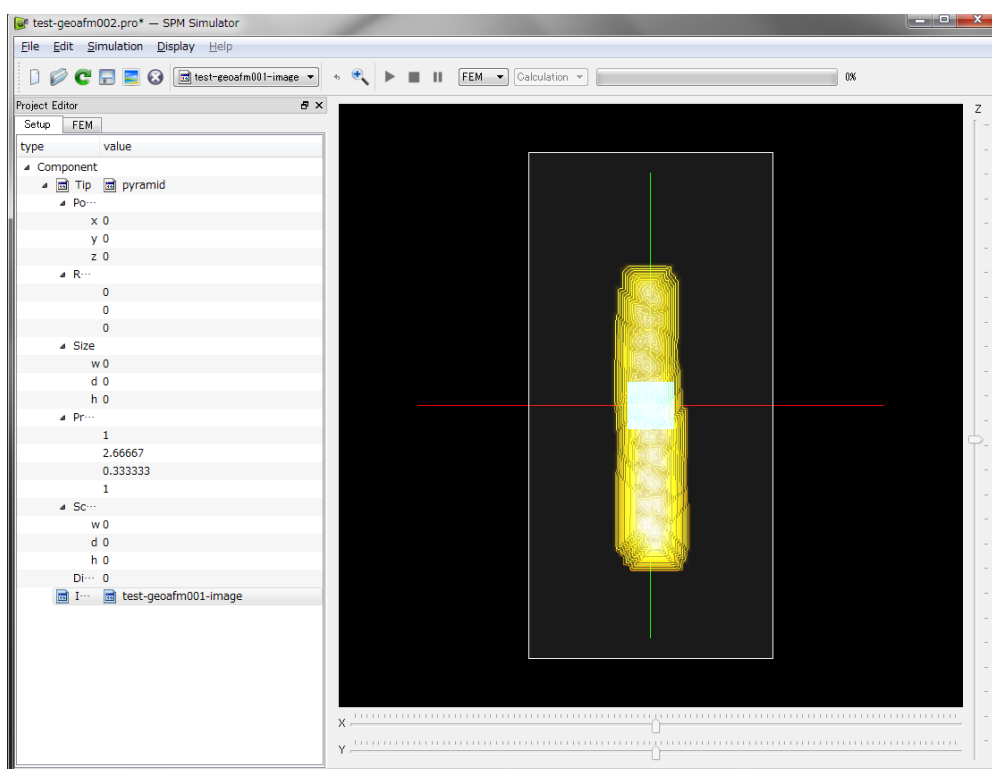
[Project Editor]の、[Setup]タブをクリックして選択します。まず、探針形状データを読み込むことにします。ここでは、前と同じく、ピラミッド形状の探針を選択し、angle (deg)もデフォルト値の 32.0 度とします。

次に、測定 AFM 像データを読み込むことにします。前と同じく、Component という項目を右クリックして、[Add Image]、さらに、[File]を選択します。ここで、前の小節で作成した、ディレクトリ test-geoafm001 内の test-geoafm001-image.cube という名前のファイルを選択します。

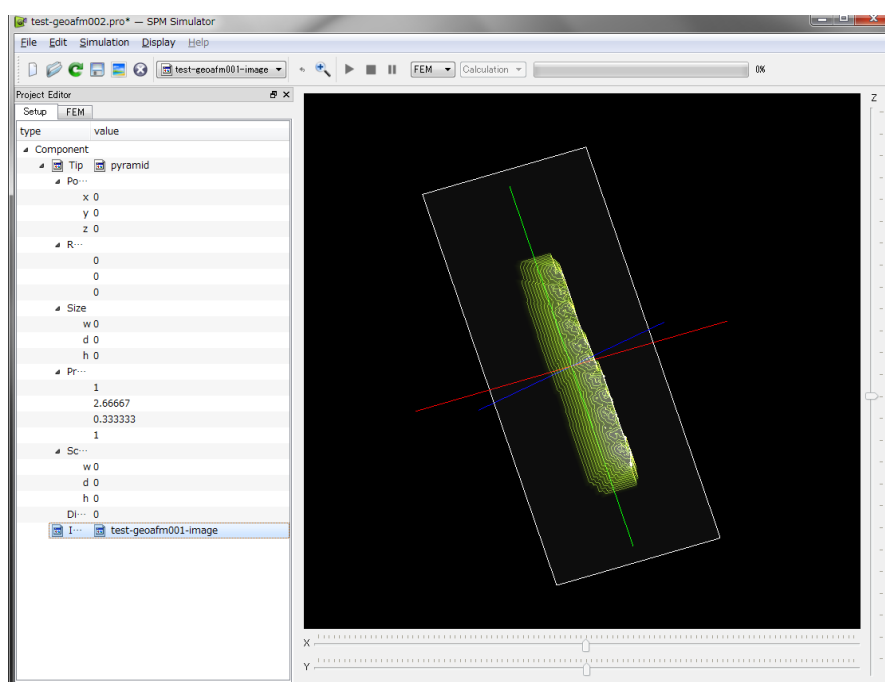
この時点で、ウィンドウは、以下のような画像を表示します。ただし、ここでは、ウィンドウ上部の虫眼鏡マークをクリックして、画像がウィンドウ内に適切に収まるよう、自動的に拡大・縮小しています。



ここで、前に説明したのと同様の手順で、シミュレータの画像解像度を、1[Å]に設定します。さらに、前で説明したときと同様に、[GeoAFM]→[Show Simulated Sample]をクリックします。すると、下図のように、ウィンドウ内に、緑色の等高線を表現した図が現れます。これが、シミュレーションによって得られた、試料表面形状データです。(図では、緑色の試料表面形状データの等高線と、オレンジ色の AFM 像データの等高線が、同時に表示されているため、黄色っぽい画像になっています。)



出来上がった試料表面形状の画像を見やすくするために、項目[Show Tip]および[Show Image]を左クリックしてチェックを外し、ウィンドウ内から、探針および AFM 像の画像を取り除くことにします。これにより、ウィンドウ内には、試料表面形状データ画像のみが表示された状態となります。試料画像を適切に立体回転、拡大・縮小して、以下の図のように、試料である高分子鎖の高さの変化が良く見える角度に設定することが可能です。



上で求められた試料表面形状データ画像を、再利用可能なデータとして保存することになります。画像が表示されているウィンドウ内の適当な場所にカーソルを配置し、そこで右クリックします。縦長のコンテキストメニューが現れますので、メニュー内の項目[GeoAFM]→[Export Simulated Data]を選択します。保存ファイル名を要求されますので、ここでは、"test-geoafm002-sample"と入力します。この結果、試料表面形状データは、test-geoafm002-sample.cube というファイルに保存されます。

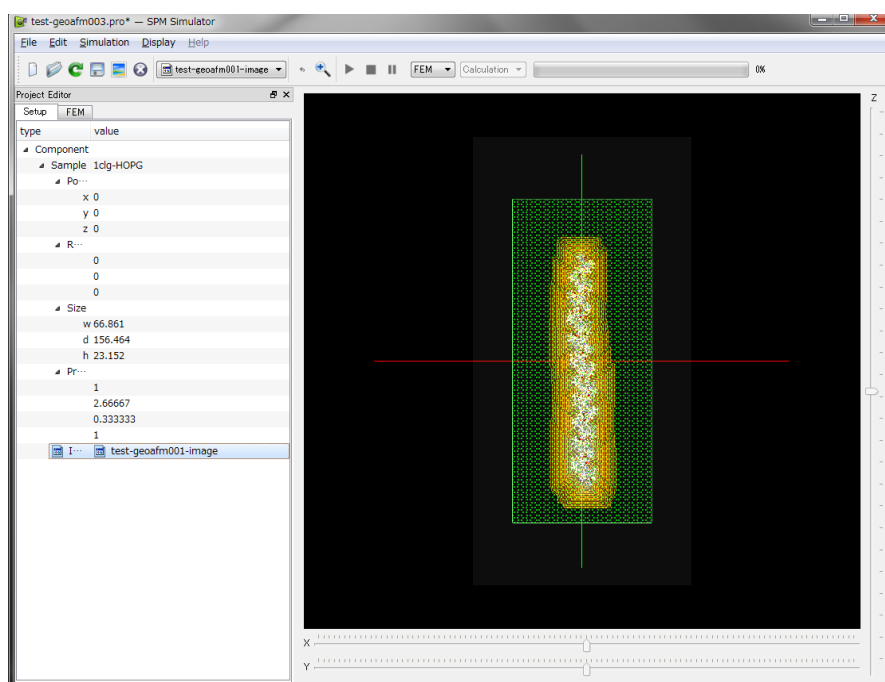
試料表面形状データおよび測定 AFM 像データから探針形状データを求める

ここでは、1clg-HOPG の試料表面形状データ、および、測定 AFM 像データを元にして、探針形状データを求める方法を説明します。測定 AFM 像データは、前の小節において、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite : 高配向熱分解黒鉛) 上に配置された一つの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)について計算して得られた、test-geoafm001-image.cube ファイルを用いることとします。

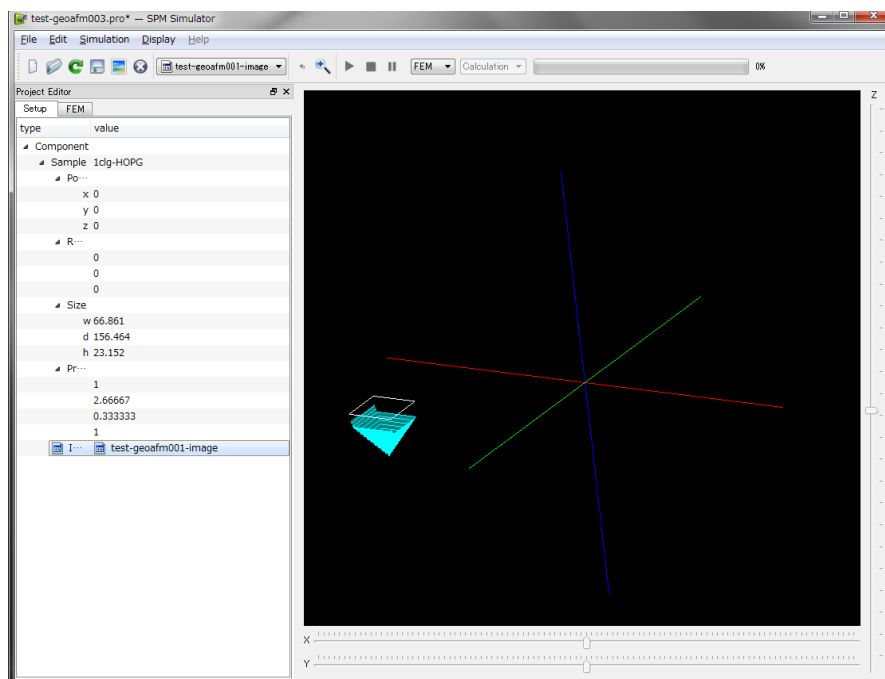
まず、新しいプロジェクトファイルを作成します。[File]→[New]により、[Create new project]ボックスを呼び出します。ここでは、[Project name]の空欄に、"test-geoafm003"という文字列を直接タイプ入力して、この名前のプロジェクトファイルを作成することとします。さらに、試料表面形状データを読み込みます。まず、[Setup]タブ上の項目[Component]を右クリックして、[Add Sample]の[Database]を選択します。すると、予め用意された試料データの一覧が現れます。ここでは、データベースの先頭に置かれている、[1clg-HOPG]を選択します。

次に、測定 AFM 像データを読み込むことにします。前と同じく、[Component]という項目を右クリックして、[Add Image]、さらに、[File]を選択します。ここで、前の小節で作成した、ディレクトリ test-geoafm001 内の test-geoafm001-image.cube という名前のファイルを選択します。

この時点で、ウィンドウは、以下のような画像を表示します。



ここで、前の小節で説明したように、シミュレータの画像解像度を、 $1[\text{\AA}]$ に設定します。さらに、[GeoAFM]→[Show Simulated Tip]をクリックします。出来上がった探針の画像を見やすくするために、ウィンドウ内から、試料および AFM 像の画像を取り除きます。これにより、以下の図のように、ウィンドウ内には、探針形状データ画像のみが表示された状態となります。



上で求められた探針形状データ画像を、再利用可能なデータとして保存することにします。

画像が表示されているウィンドウ内の適当な場所にカーソルを配置し、そこで右クリックします。縦長のコンテキストメニューが現れますので、メニュー内の項目[GeoAFM]→[Export Simulated Data]を選択します。保存ファイル名を要求されますので、ここでは、"test-geoafm003-tip"と入力します。この結果、試料表面形状データは、test-geoafm003-tip.cube というファイルに保存されます。

2 連続弾性体 AFM シミュレータ

はじめに

「連続弾性体 AFM シミュレータ」は、古典力学に基づき、非接触時では探針－試料間でのファンデルワールス力を考慮し、接触時では探針-試料間で JKR(Johnson, Kendall, Roberts) 理論によって引き起こされる凝着力を考慮します。その上で、探針及び試料が弾性方程式に従うと仮定して、測定 AFM 像を予測するシミュレーションを実行します。弾性方程式の解法としては、探針・試料を格子分割した、有限要素法が用いられています。従って、実際のシミュレーション計算においては、探針形状データおよび試料表面形状データを入力として、測定 AFM 像データを予測・出力することになります。なお、探針・試料が電解溶液中にある場合の、電荷イオンのふるまいを考慮した AFM 画像がシミュレーションを行う機能も実装されています。

本シミュレータでは、以下の三つのモードが用意されています。

- [ノンコンタクトモード]: 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。
- [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。
- [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。
- [DLVO 理論解析モード]: 探針・試料が電解溶液中にある場合の AFM 画像シミュレーションを行います。電解溶液中のイオンのふるまいを DLVO (Derjaguin, Landau, Verwey, Overbeek)理論で記述します。

本シミュレータは、あくまで、電荷を帯びていない分子・原子間で働くファンデルワールス力および JKR 理論を基本とした、古典力学で説明可能な現象を再現する、原子間力顕微鏡(AFM: Atomic Force Microscope)のシミュレータです。従って、原子・分子を直接観察する極微なスケールの現象のシミュレーションには、本シミュレータは不向きと言えます。しかし、一方、メソスコピックスケールオーダーの半導体デバイスの AFM 像をシミュレートする、あるいは、高分子有機化合物からなる生体試料の AFM による観察画像をシミュレートする、といった、マクロとミクロの中間的な領域での現象を調べる用途には、本シミュレータは非常に適しています。

前にも述べましたように、本シミュレータでは、純粋な量子力学的な効果は考慮されませ

ん。電子のトンネル現象を画像データに取り込む、いわゆる走査型トンネル顕微鏡 (STM) や、その他、様々な量子現象から物質の画像をとらえる走査型プローブ顕微鏡 (SPM) のシミュレーションは、本シミュレータの適用範囲外となります。これら、量子力学的効果を取り入れた SPM シミュレーションは、同梱されている「量子論的 SPM 像シミュレータ」が適しています。また、量子力学的な取り扱いを行わずに、原子・分子の極微なスケールでの振る舞いを調べるには、同梱されている「原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータ」が適しています。

さらに、注意すべき事項としては、本シミュレータは、常に真空(もしくは室温大気中の)環境下で、AFM 実験が行われていると仮定しています。液体中での AFM 像の再現機能は、本シミュレータには含まれていません。このような事例の解析には、「液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ」が適しています。

高分子量ポリマーの測定 AFM 像データ予測 (ノンコンタクトモード)

以下に、連続弾性体 AFM シミュレータ(以下、FemAFM と略する)の[ノンコンタクトモード]での使用方法を、具体例を元にして説明します。探針の受けるファンデルワールス力の試料表面での分布像が出力されます。

ここでは、探針がピラミッド型のカンチレバーを使って、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite : 高配向熱分解黒鉛) 上に配置された一個の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 像を求めることにします。ただし、カンチレバーの先端の探針は、試料から一定の距離だけ離れていて、ノンコンタクトモードで原子間力を検出するものと仮定します。

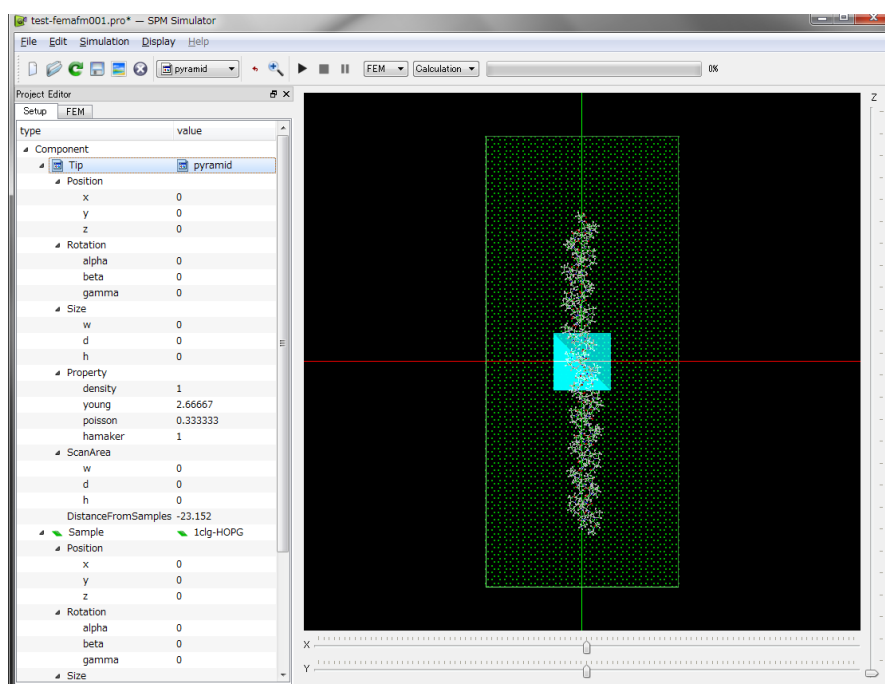
まず、新しいプロジェクトファイルを作成します。[File]→[New]をクリックすることにより、[Create new project]というタイトルのボックスが現れます。[Project name]の欄は空欄になっています。ここでは、“test-femafm100”という文字列を直接タイプ入力して、この名前のプロジェクトファイルを作成することにします。

次に、[Project Editor]の、[Setup]タブをクリックして選択します。ページの先頭の [Component]という項目から、探針形状データ、試料表面形状データを、読み込むことにします。まず、項目[Component]を右クリックして、[Add Tip]の[Pyramid]を選択します。すると、ピラミッド形状の探針先端部分の角度 angle (deg)を要求するボックスが現れます。デフォルト値で 32.0 度が与えられていますので、ここでは、そのまま[OK]とします。次に、再び項目[Component]を右クリックして、[Add Sample]の[Database]を選択します。すると、予め用意された試料データの一覧が現れます。ここでは、データベースの先頭に配置されている[1clg-HOPG]を選択します。

さらに、有限要素法の解像度を設定します。それには、ウィンドウの左側に表示されている[Project Editor]の[FEM]タブを選択します。そのページに設定されている項目のうち、[simulation]下の[resolution]の右隣の数値にカーソルを合わせて、左ダブルクリックして下さい。これにより解像度の数値を直接入力することが出来ます。ここでは、2 [Å]と設定します。

解像度は、シミュレーション計算を行う際の、長さの最小単位を表します。もっと具体的に述べると、試料および探針に対して有限要素法を行う際の、格子間隔を表しています。解像度は、Å単位で0.1以上の実数値を設定することが可能です。値は、0.1刻みで変化させることが可能です。また、解像度の最大値は10となっています。なお、解像度のデフォルト値は2 [Å]に設定されています。シミュレータの実際の運用では、解像度の値は、実験で用いるAFMの解像度を参考にした値を、ユーザーが各自で設定するのが良いでしょう。

この時点で、ウィンドウは、以下のような画像を表示します。



これより、探針先端部の走査(スキャン)する領域を指定します。まず、[Setup]タブを開いて、[Sample]の[Size]の項目に注目します。試料の大きさが、幅 w: 66.861 [Å]、奥行き d: 156.464 [Å]、高さ h: 23.152 [Å]であると、表示されています。

そこで、探針が走査(スキャン)する領域を、幅 w: 72 [Å]、奥行き d: 160 [Å]と定めます。これにより、試料全体が走査領域内に完全に含まれることになります。また、走査領域の縦 w = 72 [Å]、横 d = 160 [Å]の長さが、先ほど指定したシミュレーション解像度 2 [Å]で割り切れる値であることにも注意します。これにより、探針の走査範囲が、有限要素法の

格子に丁度の大きさを分割されることが保証されます。

なお、この例では、走査範囲は、 36×80 の格子に分割されています。通常、格子サイズが 150×150 を超えると、一般的なパソコンの計算能力を超えることになり、計算時間が目立って長くなり始めます。例えば、格子数が 200×200 のシミュレーションを行おうとすると、たいていのパソコンは freeze してしまい、事実上、シミュレーションが不可能となってしまいます。これらの点に注意して、resolution を設定することをお勧めします。

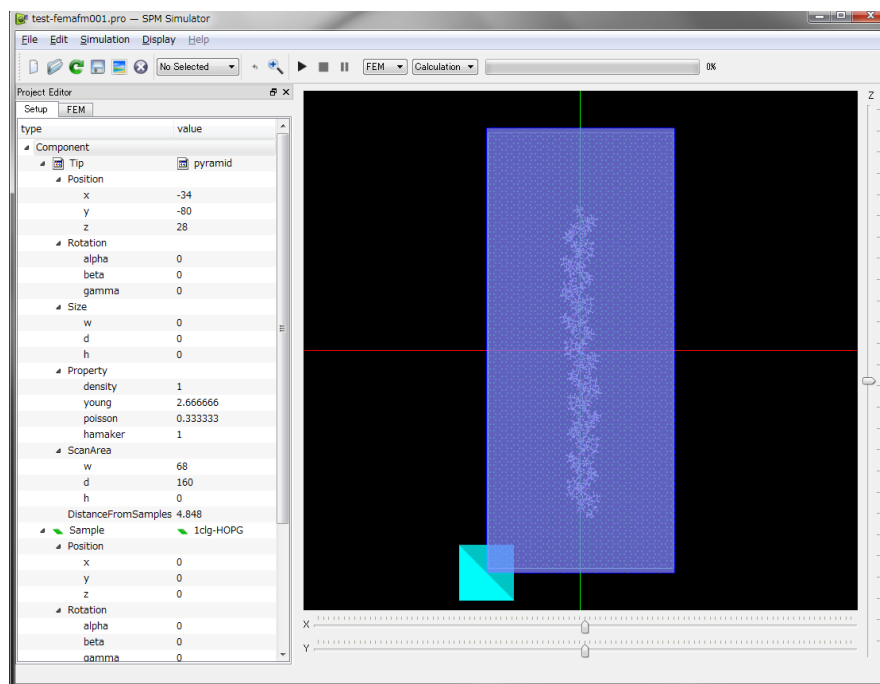
試料の中央付近に、三次元空間の座標系の原点が設定されています。そこで、[Setup]のタブの[Tip]の項目の下、[Position]、[ScanArea]の値を、以下のように直接入力します。

[Position] x = "-36", y = "-80", z = "30"
[ScanArea] w = "72", d = "160", h = "0"

ここで、以下の点に注意します。すなわち、[Tip]>[Position]の z の値は、[Sample]>[Size]の h の値より、十分大きな値を取った方が、有限要素法のシミュレーション計算の実行が容易になります。試料の最大高さより、探針の高さを十分大きく取らないと、原子間力相互作用の影響が大きくなり過ぎて、計算が不安定になってしまう可能性があるからです。

(探針と試料の間で働く原子間相互作用の力は、距離の 7 乗に反比例するため、あまり、探針先端部分と試料とが接近し過ぎると、事実上計算が不可能になる場合が有ります。)

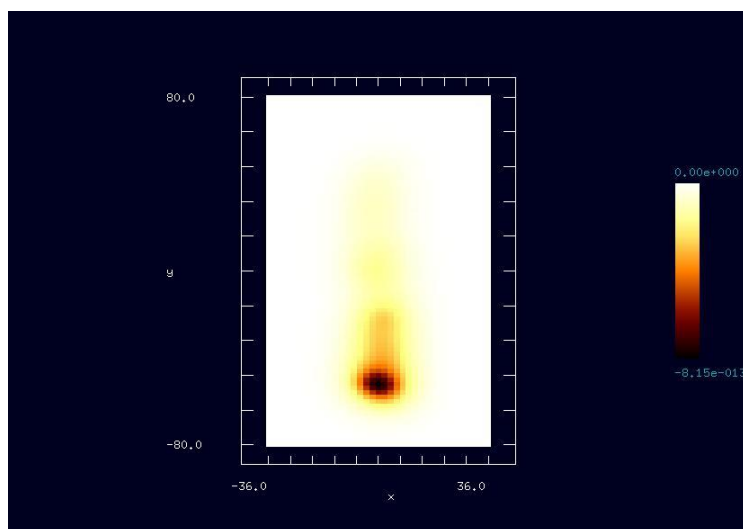
以上の設定の後、マウスを操作して、探針及び試料の画像が表示されているウィンドウの適当な場所に、カーソルを配置し、そこで右クリックします。すると、縦長のコンテキストメニューが現れます。コンテキストメニューの [Show Scan Area]の項目にチェックを入れると、ウィンドウは、以下のような画像を表示します。紫色の領域が、走査範囲となります。



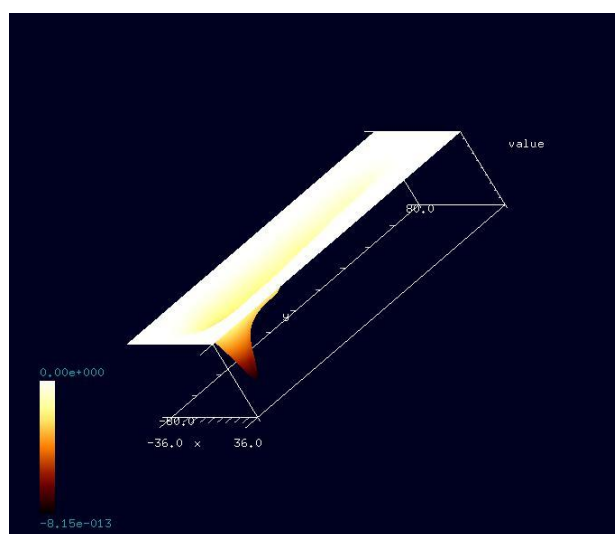
さらに、探針および試料に与えるべき物性値として、ヤング率[GPa]、ポアソン比(無次元量)、ハーメーカー定数[zJ]が用意されています。これらは、[Setup]タブ以下の、[Tip]>[Property]および[Sample]>[Property]で入力することが出来ます。これらはデフォルトで、[young] 76.5 [GPa]、[poisson] 0.22、[hamaker] 50 [zJ]に設定されていますが、適宜変更可能です。ここでは、デフォルトの値をそのまま使うこととします。

最後に、シミュレーション計算を適切に実行するために、以下の設定を行います。[FEM]タブ以下の、[OpenMP_threads]の値を入力します。これは、並列化計算を行う際の、CPUのコア数を表しています。並列化計算を行わない場合は 1 を、例えば四つのコアで並列化計算する場合は 4 を入力します。デフォルトでは 1 に設定されています。また、[FEM]タブの最初の[simulation_mode]から、"femafm_Van_der_Waals_force"を選択します。デフォルトでこれが設定されていますので、今の場合、そのままにしておきます。

上記の準備の後、ウィンドウの上部のツールバーに配置されている項目を、[FEM], [Calculation]として、三角形のボタンをクリックすると、シミュレーション計算が開始されます。最終的に得られる AFM 画像は、メニューバーの[Display]→[Result]で、以下のように表示されます。



さらに、上記 AFM 画像を表示しているウィンドウ内にカーソルを配置して右クリックすると、コンテキストメニューが現れ、そこで、[3D-View]を選択することが可能です。これにより、以下の立体的な画像を得ることが出来ます。



シミュレーションによって得られた AFM 画像について、以下の注意が必要です。それは、試料表面上に与えられた数値が、高さを固定された探針先端の受ける力を表しており、試料表面の立体形状としての高さ(長さの次元を持つ物理量)を表現した値ではないということです。具体的には、AFM 画像の試料表面上の各点に与えられた値の単位は[N](ニュートン)となります。

シリコン結晶表面の AFM 周波数シフト像データ予測(周波数シフト像モード)

以下に、FemAFM シミュレータの[周波数シフト像モード]での使用方法を、具体例を元にし

て説明します。外力によってカンチレバーを一定の周波数で振動させた際の、探針の試料から受ける相互作用によって引き起こされる周波数シフトの分布像が出力されます。

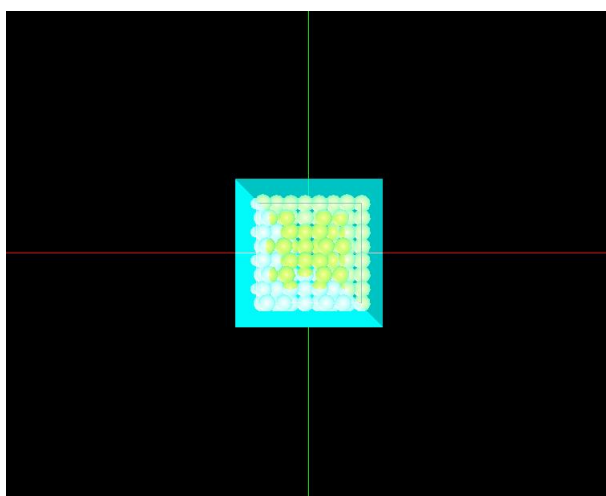
ここでは、探針がピラミッド型のカンチレバーを使って、シリコン結晶 Si(001)表面の AFM 周波数シフト像を求めることにします。ただし、カンチレバーの先端の探針は、試料から離れていて、接触することは無いものと仮定します。

まず、新しいプロジェクトファイルを作成します。[File]→[New]をクリックすることにより、[Create new project]というタイトルのボックスが現れます。[Project name]の欄は空欄になっています。ここでは、“test-femafm200”という文字列を直接タイプ入力して、この名前のプロジェクトファイルを作成することにします。

次に、[Project Editor]の、[Setup]タブをクリックして選択します。ページの先頭の [Component]という項目から、探針形状データ、試料表面形状データを、読み込むことにします。まず、項目[Component]を右クリックして、[Add Tip]の[Pyramid]を選択します。すると、ピラミッド形状の探針先端部分の角度 angle (deg)を要求するボックスが現れます。デフォルト値で 32.0 度が与えられていますので、ここでは、そのまま[OK]とします。次に、再び項目[Component]を右クリックして、[Add Sample]の[Database]を選択します。すると、予め用意された試料データの一覧が現れます。ここでは、 [si001]を選択します。

さらに、有限要素法の解像度を設定します。それには、ウィンドウの左側に表示されている[Project Editor]の[FEM]タブを選択します。そのページに設定されている項目のうち、[simulation]下の[resolution]の右隣の数値にカーソルを合わせて、左ダブルクリックして下さいます。これにより解像度の数値を直接入力することが出来ます。ここでは、2[Å]と設定します。

この時点で、ウィンドウは、以下のような画像を表示します。



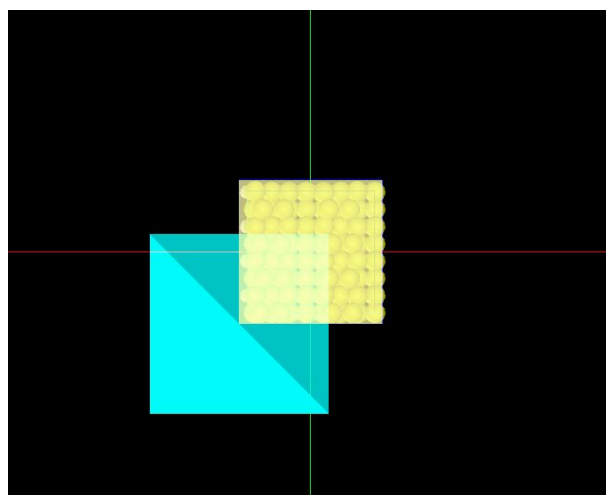
これより、探針先端部の走査(スキャン)する領域を指定します。まず、[Setup]タブを開いて、[Sample]の[Size]の項目に注目します。試料の大きさが、幅 w : 14.28665 [Å]、奥行き d : 13.52978 [Å]、高さ h : 8.16468 [Å]であると、表示されています。

そこで、探針が走査(スキャン)する領域を、幅 w : 16 [Å]、奥行き d : 16 [Å]と定めます。これにより、試料全体が走査領域内に完全に含まれることになります。また、走査領域の縦 $w = 16$ [Å]、横 $d = 16$ [Å]の長さが、先ほど指定したシミュレーション解像度 2 [Å]で割り切れる値であることにも注意します。これにより、探針の走査範囲が、有限要素法の格子に丁度の大きさで分割されることが保証されます。

試料の中央付近に、三次元空間の座標系の原点が設定されています。そこで、[Setup]のタブの[Tip]の項目の下、[Position]、[ScanArea]の値を、以下のように直接入力します。

[Position] $x = "-8"$, $y = "-8"$, $z = "26"$
[ScanArea] $w = "16"$, $d = "16"$, $h = "0"$

以上の設定の後、マウスを操作して、探針及び試料の画像が表示されているウィンドウの適当な場所に、カーソルを配置し、そこで右クリックします。すると、縦長のコンテキストメニューが現れます。コンテキストメニューの [Show Scan Area]の項目にチェックを入れると、ウィンドウは、以下のような画像を表示します。紫色の領域が、走査範囲となります。



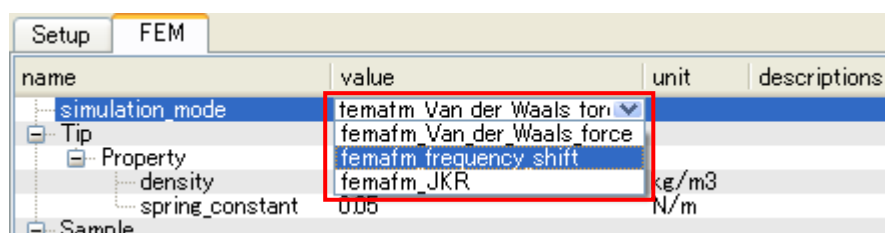
さらに、探針および試料に与えるべき物性値として、ヤング率[GPa]、ポアソン比(無次元量)、ハーマーカー定数[zJ]が用意されています。これらは、[Setup]タブ以下の、[Tip]>[Property]および[Sample]>[Property]で入力することが出来ます。これらはデフォルトで、[young] 76.5 [GPa]、[poisson] 0.22、[hamaker] 50 [zJ]に設定されていますが、適宜変更可能です。ここでは、デフォルトの値をそのまま使うこととします。

これら以外のシミュレーションに必要な物性値は、[FEM]タブ以下で設定します。探針の密

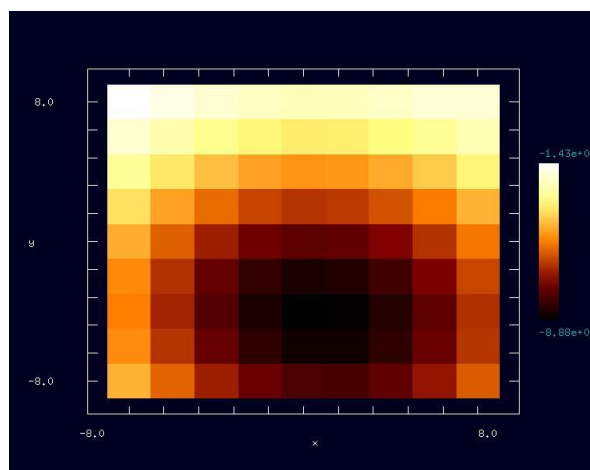
度、および、カンチレバーのばね定数を、[Tip]>[Property]以下の、[density]と[spring_constant]に入力します。これらの値は、デフォルトでは、[density] 2329.0 [kg/m³]および[spring_constant] 0.05 [N/m]と設定されています。試料の表面張力は、[Sample]>[Property]以下の[surface_tension]に入力します。デフォルトでは、[surface_tension] 0.108 [N/m]と設定されています。ここでは、これらの値をそのまま使うこととします。

また、カンチレバーの外力による振動を定めるために、振幅と周波数を指定します。これには、[FEM]タブの、[simulation]以下の[amplitude]と[frequency]で定義します。ここでは、[amplitude] 150 [angstrom]、[frequency] 0.5 [GHz]と入力します。

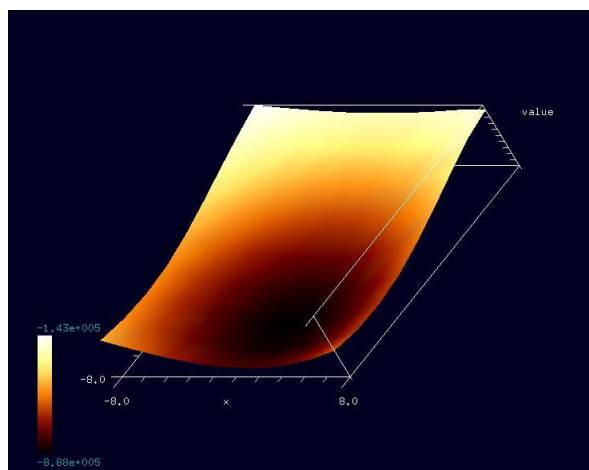
最後に、シミュレーション計算を適切に実行するために、以下の設定を行います。[FEM]タブ以下の、[OpenMP_threads]の値を入力します。これは、並列化計算を行う際の、CPUのコア数を表しています。並列化計算を行わない場合は 1 を、例えば四つのコアで並列化計算する場合は 4 を入力します。デフォルトでは 1 に設定されています。また、[FEM]タブの最初の[simulation_mode]の項目を “femafm_frequency_shift” に切り替えます。Value に対応する入力部をダブルクリックすることで切り替えることができます。



上記の準備の後、ウィンドウの上部のツールバーに配置されている項目を、[FEM], [Calculation]として、三角形のボタンをクリックすると、シミュレーション計算が開始されます。最終的に得られる AFM 周波数シフト画像は、メニューバーの[Display]→[Result]で、以下のように表示されます。なお、このグラフで表示される 2 次元分布画像の高さ方向の物理量の単位は[Hz]となります。



さらに、上記 AFM 周波数シフト画像を表示しているウィンドウ内にカーソルを配置して右クリックすると、コンテキストメニューが現れ、そこで、[3D-View]を選択することが可能です。これにより、以下の立体的な画像を得ることが出来ます。



シリコン結晶表面の AFM 粘弾性接触解析データ予測(粘弾性接触解析モード)

以下に、FemAFM シミュレータの[粘弾性接触解析モード]での使用方法を、具体例を元にして説明します。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、最後は引き戻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します。

ここでは、探針がピラミッド型のカンチレバーを使って、シリコン結晶 Si(001)表面の粘弾性接触力学を調べることにします。ただし、カンチレバーの先端の探針は、外力によって一定の周波数で振動しているものとします。

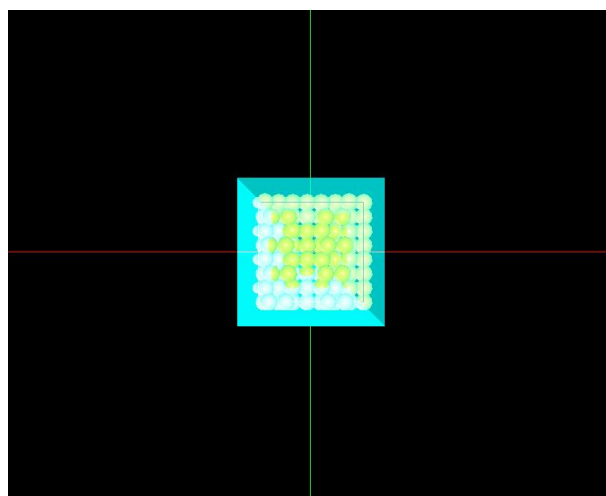
まず、新しいプロジェクトファイルを作成します。[File]→[New]をクリックすることにより、[Create new project]というタイトルのボックスが現れます。[Project name]の欄は空欄になっています。ここでは、“test-femafm300”という文字列を直接タイプ入力して、この名前のプロジェクトファイルを作成することにします。

次に、[Project Editor]の、[Setup]タブをクリックして選択します。ページの先頭の[Component]という項目から、探針形状データ、試料表面形状データを、読み込むことにします。まず、項目[Component]を右クリックして、[Add Tip]の[Pyramid]を選択します。すると、ピラミッド形状の探針先端部分の角度 angle (deg)を要求するボックスが現れます。デフォルト値で 32.0 度を与えられていますので、ここでは、そのまま[OK]とします。次に、再び項目[Component]を右クリックして、[Add Sample]の[Database]を選択します。すると、

予め用意された試料データの一覧が現れます。ここでは、[si001]を選択します。

さらに、有限要素法の解像度を設定します。それには、ウィンドウの左側に表示されている[Project Editor]の[FEM]タブを選択します。そのページに設定されている項目のうち、[simulation]下の[resolution]の右隣の数値にカーソルを合わせて、左ダブルクリックして下さい。これにより解像度の数値を直接入力することが出来ます。ここでは、2[Å]と設定します。

この時点で、ウィンドウは、以下のような画像を表示します。



これより、探針先端部の走査(スキャン)する領域を指定します。[粘弾性接触解析モード]においては、探針を試料表面のある一点に接触させるので、走査領域を指定する必要はないのですが、形式的に設定します。ただし、調べたい試料上の一点は、走査領域内に含まれている必要が有ります。まず、[Setup]タブを開いて、[Sample]の[Size]の項目に注目します。試料の大きさが、幅 w : 14.28665 [Å]、奥行き d : 13.52978 [Å]、高さ h : 8.16468 [Å]であると、表示されています。

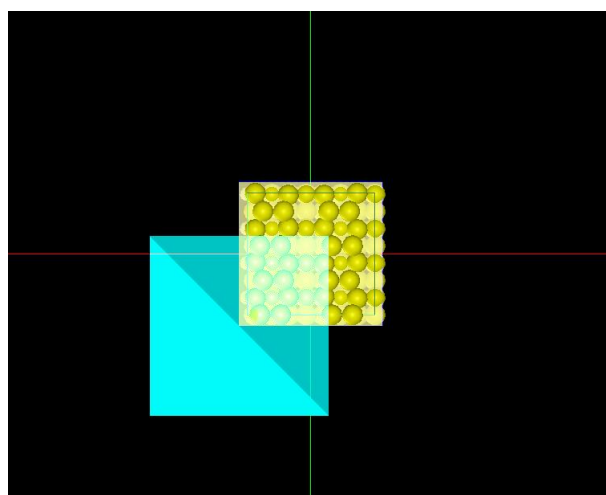
そこで、探針が走査(スキャン)する領域を、幅 w : 16 [Å]、奥行き d : 16 [Å]と定めます。これにより、試料全体が走査領域内に完全に含まれることになります。また、走査領域の縦 w = 16 [Å]、横 d = 16 [Å]の長さが、先ほど指定したシミュレーション解像度 2 [Å]で割り切れる値であることにも注意します。これにより、探針の走査範囲が、有限要素法の格子に丁度の大きさと分割されることが保証されます。

試料の中央付近に、三次元空間の座標系の原点が設定されています。そこで、[Setup]のタブの[Tip]の項目の下の、[Position]、[ScanArea]の値を、以下のように直接入力します。

[Position] x = "-8", y = "-8", z = "6"
[ScanArea] w = "16", d = "16", h = "0"

以上の設定の後、マウスを操作して、探針及び試料の画像が表示されているウィンドウの

適当な場所に、カーソルを配置し、そこで右クリックします。すると、縦長のコンテキストメニューが現れます。コンテキストメニューの [Show Scan Area]の項目にチェックを入れると、ウィンドウは、以下のような画像を表示します。紫色の領域が、走査範囲となります。



さらに、探針および試料に与えるべき物性値として、ヤング率[GPa]、ポアソン比(無次元量)、ハーマーカー定数[zJ]が用意されています。これらは、[Setup]タブ以下の、[Tip]>[Property] および[Sample]>[Property]で入力することが出来ます。これらはデフォルトで、[young] 76.5 [GPa]、[poisson] 0.22、[hamaker] 50 [zJ]に設定されていますが、適宜変更可能です。ここでは、デフォルトの値をそのまま使うこととします。

これら以外のシミュレーションに必要な物性値は、[FEM]タブ以下で設定します。探針の密度、および、カンチレバーのばね定数を、[Tip]>[Property]以下の、[density]と[spring_constant]に入力します。これらの値は、デフォルトでは、[density] 2329.0 [kg/m³] および [spring_constant] 0.05 [N/m]と設定されています。試料の表面張力は、[Sample]>[Property] 以下の[surface_tension]に入力します。デフォルトでは、[surface_tension] 0.108 [N/m]と設定されています。ここでは、これらの値をそのまま使うこととします。

また、カンチレバーの外力による振動を定めるために、振幅と周波数を指定します。これには、[FEM]タブの、[simulation]以下の[amplitude]と[frequency]で定義します。ここでは、[amplitude] 150 [angstrom]、[frequency] 0.5 [GHz]と入力します。さらに、探針を接触させる試料表面上の一点を指定します。これには、[FEM]タブの、[JKR_position]以下の[ix]と[iy]で指定します。この[ix]、[iy]は、前で指定したスキャン(走査)エリアを、resolution で分割した際の格子点を意味します。左下隅から数えて x 方向に[ix]番目、y 方向に[iy]番目というように指定します。ここでは、[ix]として 5、[iy]として 1 を入力します。

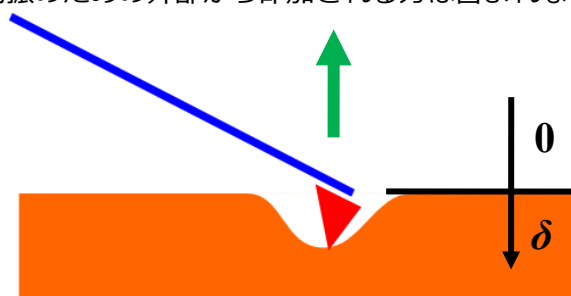
最後に、シミュレーション計算を適切に実行するために、以下の設定を行います。[FEM]

タブ以下の、[OpenMP_threads]の値を入力します。これは、並列化計算を行う際の、CPUのコア数を表しています。並列化計算を行わない場合は 1 を、例えば四つのコアで並列化計算する場合は 4 を入力します。デフォルトでは 1 に設定されています。また、[FEM]タブの最初の[simulation_mode]の項目を“femafm_JKR”に切り替えます。Value に対応する入力部をダブルクリックすることで切り替えることができます。

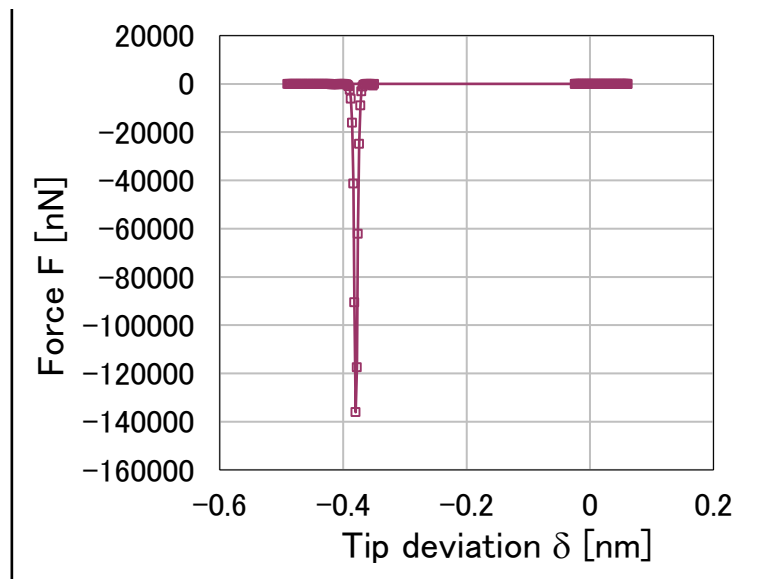
上記の準備の後、ウィンドウの上部のツールバーに配置されている項目を、[FEM], [Calculation]として、三角形のボタンをクリックすると、シミュレーション計算が開始されます。計算結果は、フォルダ test-femafm300 内の、femafm_simulation_tip_delta_force.csv という名前のファイルに収められます。

ファイル femafm_simulation_tip_delta_force.csv は、Excel で開くことが出来ます。数値データは、四つの列にまとめられており、左から順番に、計算時間ステップ数(整数値)、時刻 [sec]、探針の変位[m]、探針が試料から受ける外力[N]となっています。

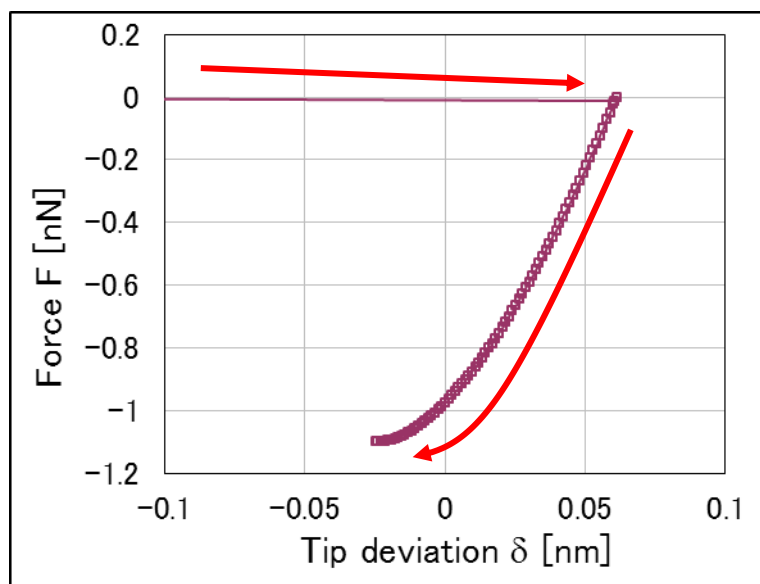
探針の変位及び外力は、以下の図に示すように定義されています。変位 δ は、変形前の試料表面を高さゼロの原点として、探針先端部の深さを表すとしします。探針にかかる外力 F は、上向きを正として、探針-試料間の相互作用を表すとしします。従って、外力 F には、カンチレバーを振動させる励振のための外部から印加される力は含まれないとしています。



このとき、探針の変位-外力のグラフは以下ようになります。



分かりやすくするため、グラフの右上部分 ($-0.1 \leq \delta \leq 0.1$ [nm], $-1.2 \leq F \leq 0.2$ [nN]) を拡大すると、以下のグラフが得られます。



上のグラフの見方は、以下の通りとなります。探針は、赤い矢印に沿って動くものとしします。すなわち、探針は、まず、試料表面から上部に突き出た部分で接触し、そのまま試料の内部に押し込まれます。凝着力がゼロになる位置まで押し込まれると、探針は、今度は、試料から離れる方向に引き戻されることになります。シミュレーションでは、探針が試料から離脱する直前まで計算がなされています。

今の場合、カンチレバーのばね定数が小さいため、ファンデルワールス力の領域から JKR 理論の領域へ slip-in する際の、グラフの直線の傾きは小さく、ほとんど水平に近くなって

います。また、探針が試料から離脱する過程はシミュレーションでは再現されない設定となっています。これは、探針が JKR 理論からファンデルワールス分子間力に slip-out する過程では、カンチレバーのばね定数が小さい場合、無限遠に近い距離に飛ばされてしまうケースが多いからです。

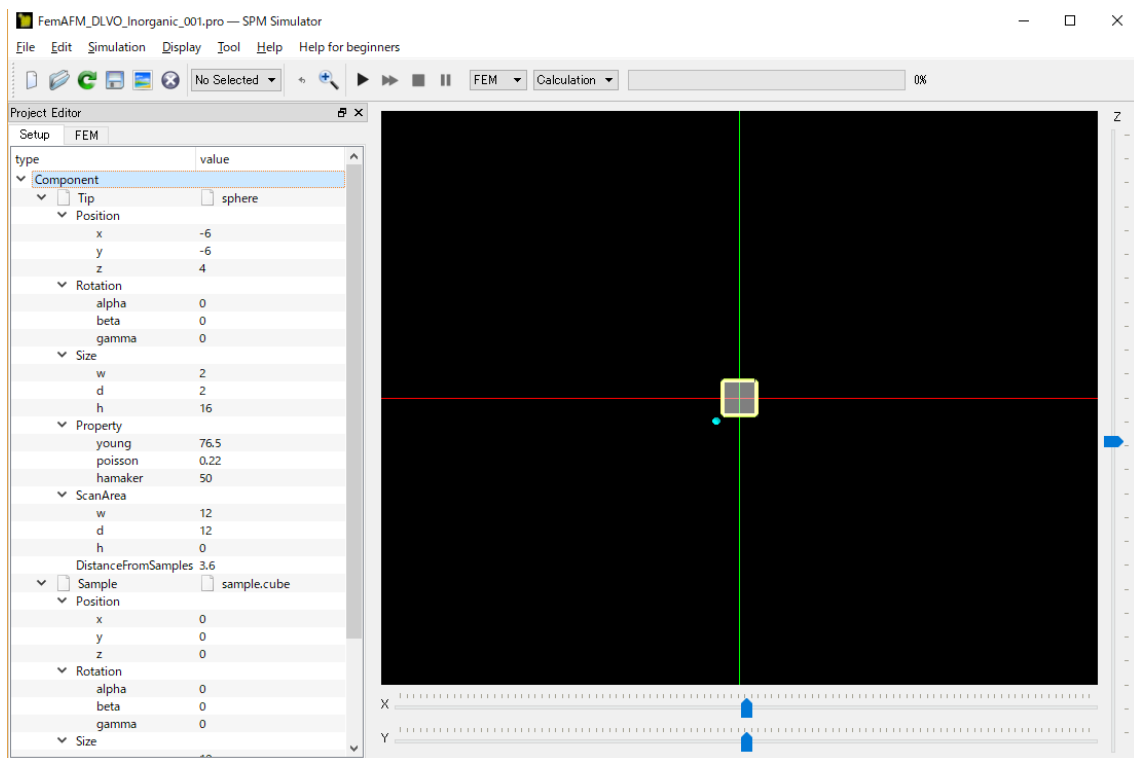
酸化シリコン基板上に付着している分極した水分子の AFM 画像予測(DLVO 理論解析モード)

以下に、FemAFM シミュレータの[DLVO 理論解析モード]での使用方法を、具体例を元にして説明します。DLVO 理論とは、Derjaguin, Landau, Verwey, Overbeek 理論の略で、電解溶液中に形成される電気二重層の相互作用を記述する理論です。DLVO 理論では、探針・試料表面には負イオンが付着し、マイナスに帯電しているとします。探針・試料は、正・負の両方のイオンが溶け込んだ電解溶液中にあるとします。溶液中の正イオンは、探針・試料表面に沿って、電気二重層を形成します。このため、探針・試料間に斥力が生じます。探針・試料表面と電気二重層の間の距離は、デバイ長さと呼ばれる量で特徴付けられます。FemAFM シミュレータの[DLVO 理論解析モード]では、ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二種類の相互作用を考慮して、AFM 像をシミュレートします。

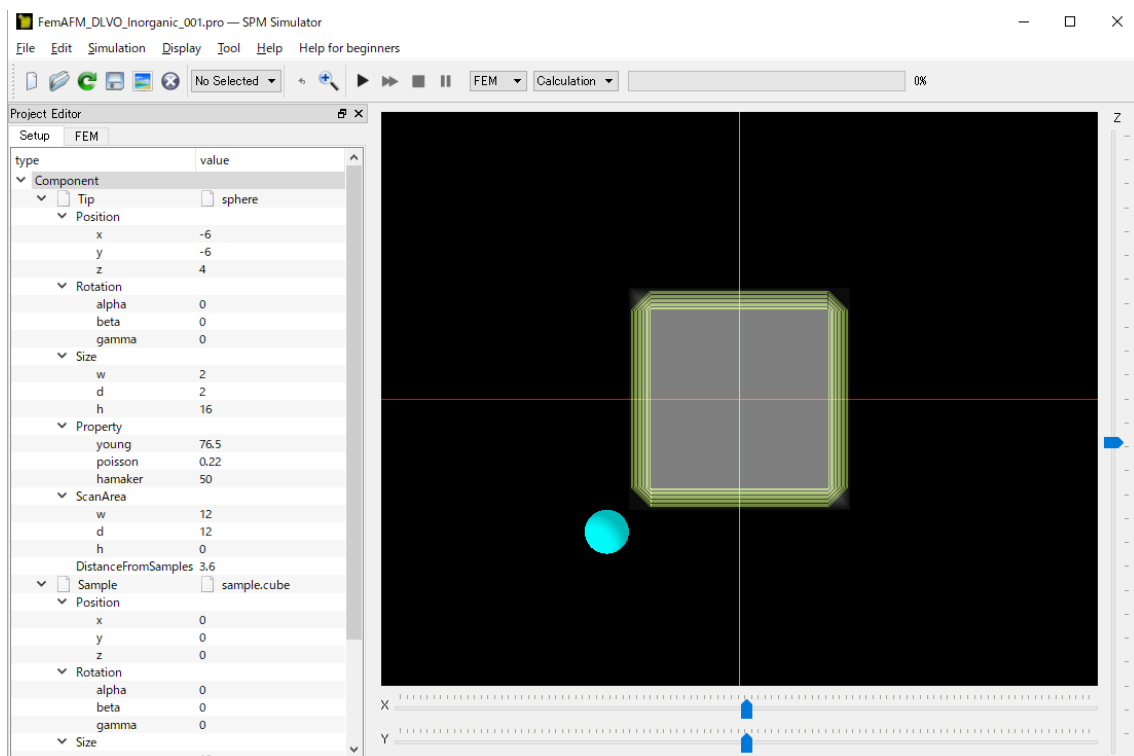
シミュレーションにおいては、探針は、高さ一定モードで試料表面をスキャンするとします。また、試料表面に、電荷を置くことが可能です。例えば、正の電荷と負の電荷を、試料表面上に約 1[Å]の距離だけ離して並べると、分子オーダーの電気双極子を形成することができます。これを、分極した水分子と見なすことができます。

この節で説明するシミュレーションの具体例に関するデータ類は、SPM シミュレータがインストールされているフォルダ内にある、SampleProject という名前のフォルダに全て収められています。その中には、project ファイルも含まれています。ですので、その project ファイルを、SPM シミュレータで開いて見ながら説明を行うこととします。

まず、SPMSimulator.exe という実行ファイルをダブルクリックして、SPM シミュレータを起動します。[File]->[Open]をクリックします。すると、project ファイルを選択する画面が現れます。ここでは、SampleProject/FEM/FemAFM_DLVO/FemAFM_DLVO_Inorganic_001 というフォルダ内の、FemAFM_DLVO_Inorganic_001.pro というん前のファイルを開いてください。すると、以下の画面が現れます。



この画面では、探針と試料が小さく描かれていますので、これを拡大することにします。画面の黒い背景にマウスのカーソルを置いて右クリックします。そこで、[Top (X-Y)]を選択します。すると、画像は以下のように拡大されます。



これより、各項目の設定方法を説明します。まず、探針の設定方法を説明します。
[Component]を右クリックして、[Add Tip]->[Sphere]を選択します。すると、radius(A)を尋ねられますので"1"[angstrom]と設定します。次に、[Position]->[x], [y], [z]を入力します。この段階では、[Position]->[x]は"0"となっているはずですが、そこで、この数字の"0"の部分ダブルクリックすると、数値を入力できるようになります。ここでは、"-6"と入力してください。同様に、[y]として"-6"を、[z]として"4"を入力してください。さらに、さらに、[ScanArea]として、[w]に"12"を、[d]に"12"を、[h]に"0"を入力してください。

次に、試料の設定方法を説明します。[Component]を右クリックして、[Add Sample]->[File]を選択します。すると、試料のデータファイルを選択する画面が現れます。ここでは、SampleProject/FEM/FemAFM_DLVO/FemAFM_DLVO_Inorganic_001 というフォルダ内の、sample.cube という名前のファイルを選択します。これで、試料の設定は終わりです。

探針・試料を設定する際、

Young 76.5[GPa]

Poisson 0.22

Hamaker 50[zJ]

というように、ヤング率、ポアソン比、ハーマーカ一定数が設定される。これらの値は酸化シリコン基板を参考にしたものである。

ここで、いったん、project ファイルを保存することにします。[File]->[SaveAs]をクリックします。すると、Save Project という画面が現れます。Project name は、"test001"とします。Directory は、SampleProject/FEM/FemAFM_DLVO/FemAFM_DLVO_Inorganic_001 とします。Directory を選択するには、右側の[Ref]というボタンをクリックします。[OK]ボタンをクリックして保存してください。ここで、[File]->[Close]として、ファイルを一度閉じます。

この段階で、フォルダ

SampleProject/FEM/FemAFM_DLVO/FemAFM_DLVO_Inorganic_001 内に、test001 という名前の新しいフォルダができています。このフォルダ内を見てみましょう。すると、test001.pro という名前のファイルがあります。これから、このファイルを編集することになります。ファイル test001.pro を適当なテキストエディタで開いてください。編集するのは二か所です。

まず一か所目は、<FEM headers="name,value,unit,descriptions">という記述の下に、次の文を挿入します。

```
<simulation_mode  
options="femafm_Van_der_Waals_force,femafm_frequency_shift,femafm_JKR,femafm_DLVO">femafm_DLVO</simulation_mode>
```

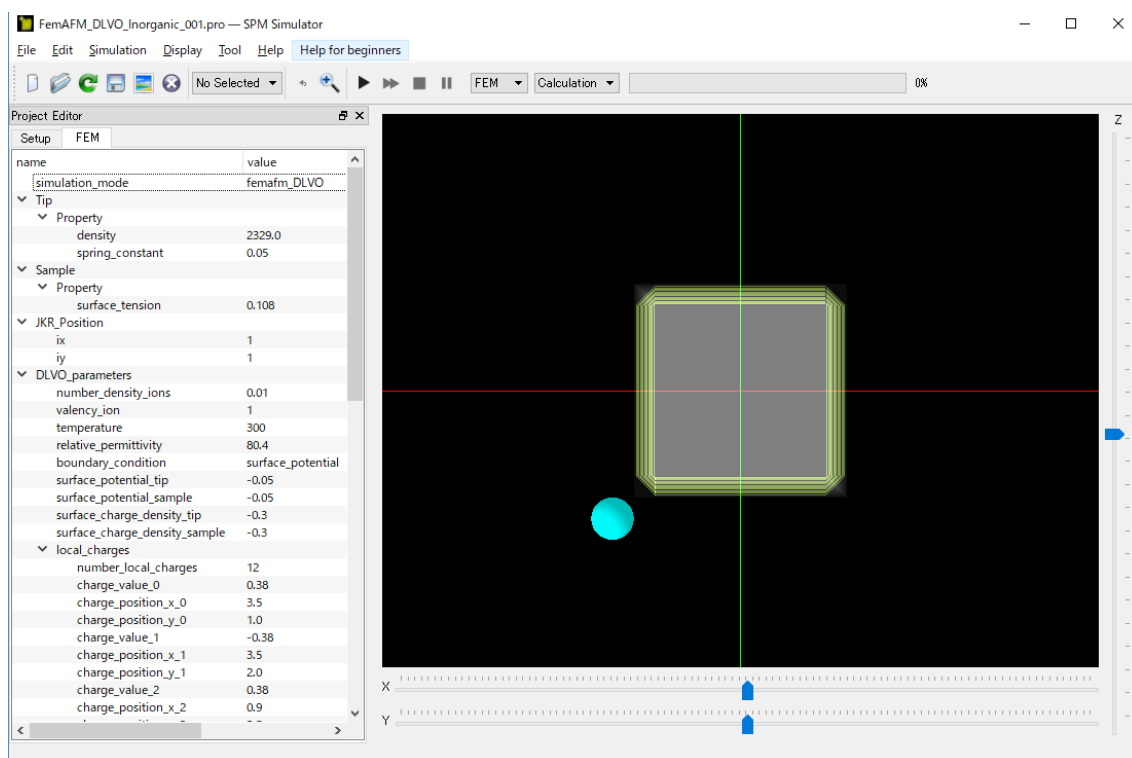
これにより、SPM シミュレータは、FemAFM ソルバーにおいて DLVO 理論解析モードで動作することになります。

次に、二か所目は、</JKR_Position>という記述の下に、DLVO_parameters として、次の文を挿入します。

```
<DLVO_parameters><number_density_ions unit="M">0.01</number_density_ions>
  <valency_ion type="int">1</valency_ion>
  <temperature unit="K">300</temperature>
  <relative_permittivity>80.4</relative_permittivity>
  <boundary_condition
options="surface_potential,surface_charge_density">surface_potential</boundary_conditio
n>
  <surface_potential_tip unit="V">-0.05</surface_potential_tip>
  <surface_potential_sample unit="V">-0.05</surface_potential_sample>
  <surface_charge_density_tip unit="C/m2">-0.3</surface_charge_density_tip>
  <surface_charge_density_sample
unit="C/m2">-0.3</surface_charge_density_sample>
  <local_charges><number_local_charges
type="int">12</number_local_charges>
    <charge_value_0 unit="e">0.38</charge_value_0>
    <charge_position_x_0 unit="angstrom">3.5</charge_position_x_0>
    <charge_position_y_0 unit="angstrom">1.0</charge_position_y_0>
    <charge_value_1 unit="e">-0.38</charge_value_1>
    <charge_position_x_1 unit="angstrom">3.5</charge_position_x_1>
    <charge_position_y_1 unit="angstrom">2.0</charge_position_y_1>
    <charge_value_2 unit="e">0.38</charge_value_2>
    <charge_position_x_2 unit="angstrom">0.9</charge_position_x_2>
    <charge_position_y_2 unit="angstrom">3.5</charge_position_y_2>
    <charge_value_3 unit="e">-0.38</charge_value_3>
    <charge_position_x_3 unit="angstrom">0.0</charge_position_x_3>
    <charge_position_y_3 unit="angstrom">4.0</charge_position_y_3>
    <charge_value_4 unit="e">0.38</charge_value_4>
    <charge_position_x_4 unit="angstrom">-2.6</charge_position_x_4>
    <charge_position_y_4 unit="angstrom">2.5</charge_position_y_4>
    <charge_value_5 unit="e">-0.38</charge_value_5>
    <charge_position_x_5 unit="angstrom">-3.5</charge_position_x_5>
    <charge_position_y_5 unit="angstrom">2.0</charge_position_y_5>
    <charge_value_6 unit="e">0.38</charge_value_6>
    <charge_position_x_6 unit="angstrom">-3.5</charge_position_x_6>
    <charge_position_y_6 unit="angstrom">-1.0</charge_position_y_6>
    <charge_value_7 unit="e">-0.38</charge_value_7>
    <charge_position_x_7 unit="angstrom">-3.5</charge_position_x_7>
    <charge_position_y_7 unit="angstrom">-2.0</charge_position_y_7>
    <charge_value_8 unit="e">0.38</charge_value_8>
    <charge_position_x_8 unit="angstrom">-0.9</charge_position_x_8>
    <charge_position_y_8 unit="angstrom">-3.5</charge_position_y_8>
    <charge_value_9 unit="e">-0.38</charge_value_9>
    <charge_position_x_9 unit="angstrom">0.0</charge_position_x_9>
    <charge_position_y_9 unit="angstrom">-4.0</charge_position_y_9>
    <charge_value_10 unit="e">0.38</charge_value_10>
    <charge_position_x_10 unit="angstrom">2.6</charge_position_x_10>
    <charge_position_y_10 unit="angstrom">-2.5</charge_position_y_10>
    <charge_value_11 unit="e">-0.38</charge_value_11>
    <charge_position_x_11 unit="angstrom">3.5</charge_position_x_11>
    <charge_position_y_11 unit="angstrom">-2.0</charge_position_y_11>
  </local_charges>
</DLVO_parameters>
```

しかし、これらの文章を書きこむのは大変なので、既に用意されている project ファイル FemAFM_DLVO_Inorganic_001.pro をテキストエディタで開いて、コピー＆ペーストするのが良いでしょう。DLVO_parameters の各項目の意味は、以下で説明します。

編集した project ファイル test001.pro、または、既に用意されていた project ファイル FemAFM_DLVO_Inorganic_001.pro を、SPM シミュレータで開いてみてください。シミュレータのウィンドウ画面の上部中央にある、ソルバー選択欄を”FEM”とします。そして、ウィンドウ画面左側上部のタブとして、”FEM”を選択してください。すると、以下の画面になります。



画面の左半分に、DLVO 理論解析モードに必要な情報が表示されています。まず、一番上の行に、simulation_mode として femafm_DLVO が表示されています。これは、FemAFM ソルバーの DLVO 理論解析モードが選択されていることを表しています。

次に、DLVO_parameters を見てみます。各項目の意味は、次の通りです。

(1) [number_density_ions]

電解溶液中の正イオンの濃度を表しています。単位は[M]です。ここでの単位[M]は、モル毎立方デシメートル[mol dm^{-3}]を意味します。

(2) [valency_ion type]

電解溶液中の正イオンの電荷数を表しています。無次元量です。例えば、 Na^+ イオンが溶け込んでいるなら、この値は”1”となります。

(3) [temperature]

温度を表しています。単位は[K]です。

(4) [relative_permittivity]

電解溶液の比誘電率を表しています。無次元量です。

(5) [boundary_condition]

DLVO 理論の境界条件の取り方を指定します。値としては、surface_potential と surface_charge_density の二種類があります。surface_potential を選択すると、探針・試料の表面電位を指定しなくてはなりません。surface_charge_density を選択すると、探針・試料の表面電荷を指定しなくてはなりません。

(6) [surface_potential_tip]

境界条件として指定される、探針表面の電位を表しています。単位は[V]です。boundary_condition が surface_potential に指定されたときだけ有効です。典型的な表面電位の値は-100[mV]から-50[mV]の間です。

(7) [surface_potential_sample]

境界条件として指定される、試料表面の電位を表しています。単位は[V]です。boundary_condition が surface_potential に指定されたときだけ有効です。典型的な表面電位の値は-100[mV]から-50[mV]の間です。

(8) [surface_charge_density_tip]

境界条件として指定される、探針の表面電荷密度を表しています。単位は[C/m^2]です。boundary_condition が surface_charge_density に指定されたときだけ有効です。典型的な表面電荷密度の値は、およそ-0.3[C/m^2]です。

(9) [surface_charge_density_sample]

境界条件として指定される、試料の表面電荷密度を表しています。単位は[C/m^2]です。boundary_condition が surface_charge_density に指定されたときだけ有効です。典型的な表面電荷密度の値は、およそ-0.3[C/m^2]です。

(10) [local_charges]

試料表面に局所的に置かれる電荷を指定します。

(11) [number_local_charges]

試料表面に置かれる電荷の総数を表しています。例えば、2 個の電荷を試料表面に置きたいなら、“2”を指定します。電荷を置かない場合は“0”を指定してください。

(12) [charge_value_0]

1 番目の電荷の電気量を表しています。単位は電気素量[|e|]です。“charge_value_0”という文字列の末尾の番号が、何番目の電荷かを表しています。“0”番から始まることに注意してください。

(13) [charge_position_x_0]

1 番目の電荷の位置の x 座標を表しています。単位は[angstrom]です。

(14) [charge_position_y_0]

1 番目の電荷の位置の y 座標を表しています。単位は[angstrom]です。

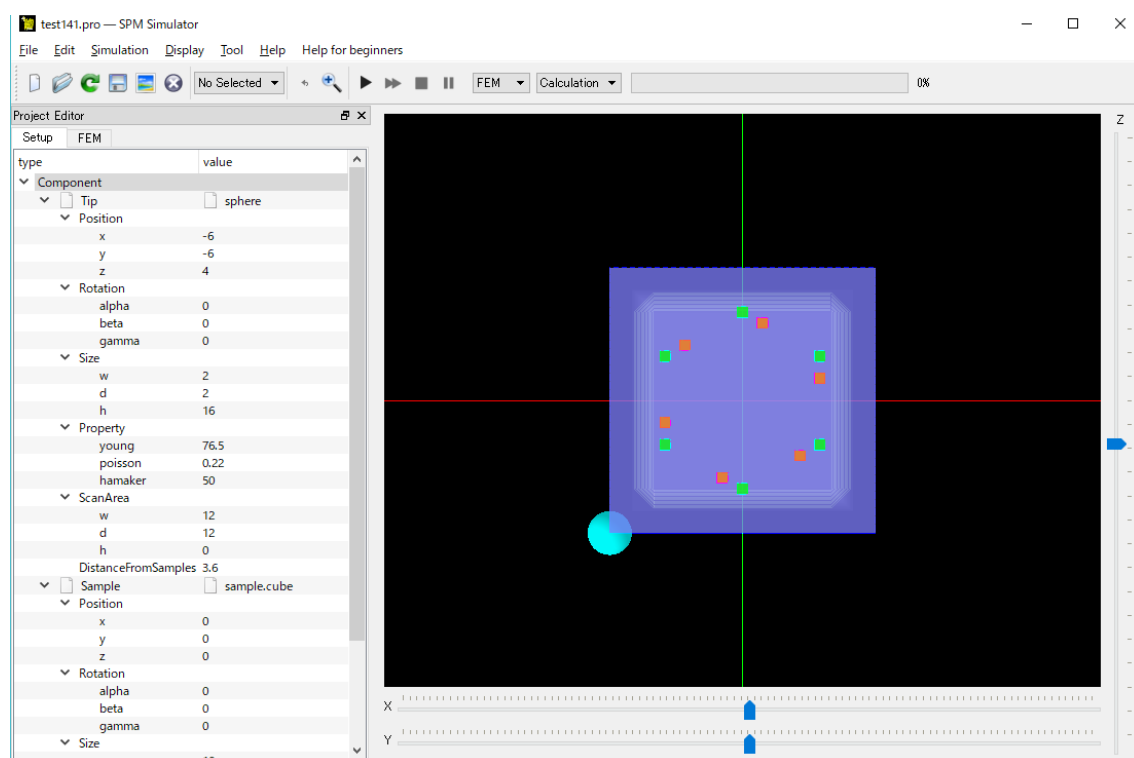
試料表面上に局所的に電荷を置く場合、次の点に注意が必要です。FemAFM ソルバでは、

試料は有限要素法に従って小さなメッシュに分割されます。局所電荷は、指定された(x,y)座標の位置の試料表面に自動的に設置されます。ですから、局所電荷の z 座標は指定しない仕様となっています。そして、もし指定した(x,y)座標の位置に試料のメッシュ要素が存在しない場合は、局所電荷を設置できないこととなり、エラーとなってシミュレーション計算は停止します。この際、以下のエラーメッセージが表示されます。

Error: A local charge is not put on the surface mesh element: charge_No. i=0

これは、“0”番の局所電荷、すなわち、1 番目の局所電荷を設置しようとしたところ、対応する試料のメッシュ要素が存在しなかったことを表しています。

この時点で、SPM シミュレータのウィンドウに表示されている画面の黒い背景にマウスのカーソルを置いて、右クリックして[Show Scan Area]を選択してみてください。以下の画面が表示されるはずです。

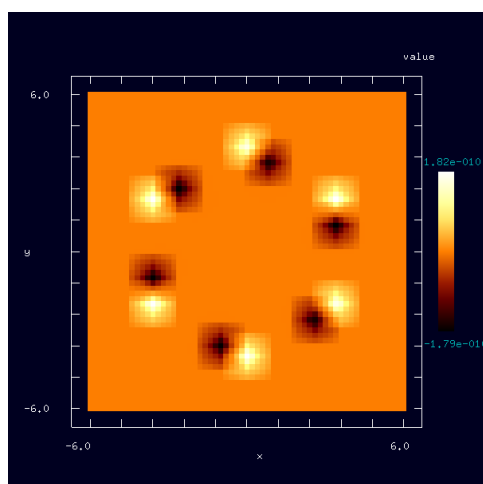


赤い四角形は局所的に置かれた正電荷を、緑の四角形は局所的に置かれた負電荷を表しています。以上の入力作業が終わったら、シミュレーションを開始することができます。ウィンドウ上部の三角形のボタンをクリックすればシミュレーションがスタートします。

なお、並列計算により高速化を行いたい場合は、ウィンドウの左側の FEM のタブで表示される項目の中の、OpenMP_threads を例えば“4”に指定すれば、4 コアで並列計算が行われます。

project ファイルには、<simulation><resolution>という項目が設定されています。これは、有限要素分割する際のメッシュの長さの単位を表しています。Resolution の設定可能な最小長さは 0.1[angstrom]です。この resolution をあまり小さく設定すると、メッシュの数が増大し、計算時間が増大してしまうことがありますので、注意が必要です。

この節で紹介した計算例によって得られる AFM 画像を以下に示します。



正・負に帯電したイオンの双極子が、分極した水分子を表現しています。正の電荷イオンは引力を、負の電荷イオンは斥力を引き起こします。

なお、シミュレーション計算が終了すると、計算を行ったフォルダ内に log.txt という名前のファイルが生成されます。このファイル内には、いくつかの重要な計算データが含まれています。そのことについて、以下で説明します。

まず、log.txt を適当なテキストエディタで開いてください。そして、“Debye_length”というキーワードで検索してください。すると、例えば、以下のような行を見つけることができます。

```
Debye_length =3.088188e-009 [m]
```

これは、今回、シミュレーション計算した系においては、デバイ長さが約 3.09[nm]であることを示しています。

また、“derived_”というキーワードで検索すると、例えば、以下の行を見つけることができます。

```
derived_surface_charge_density_tip=-1.152580e-002 [C/m2]
```

```
derived_surface_charge_density_sample=-1.152580e-002 [C/m2]
```

これらは、boundary_condition を surface_potential とした場合の、その表面電位から導出される、探針・試料表面のバックグラウンドとしての表面電荷密度を表しています。これらの表面電荷密度の値には、局所的に置かれた電荷の影響は考慮されていません。一方、boundary_condition が surface_charge_density の場合には、その表面電荷密度から導出される、探針・試料のバックグラウンドとしての表面電位が、derived_surface_potential_tip および derived_surface_potential_sample として出力

されます。これらの表面電位の値には、局所的に置かれた電荷の影響は考慮されていません。

なお、ファイル log.txt は、シミュレーションをするたびに、追加で上書きされます。ですので、“Debye_length”、“derived_”でキーワード検索する際は、ファイル中の、なるべく後ろの方の、当該行を参照してください。

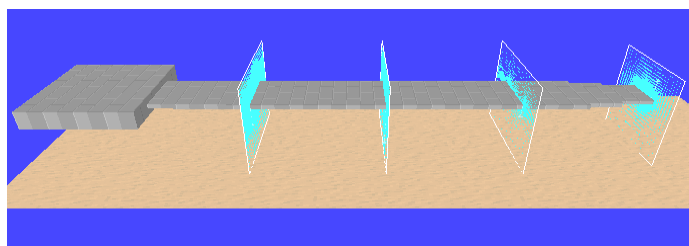
3 液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ

はじめに

ここでは、液中ソフトマテリアル AFM シミュレータで計算することのできる事例を紹介いたします。現在まだ開発段階ですが、本シミュレータとしては以下のような計算を行うことができます。

- ☞ 流体抗力、試料との接触応力を受けて稼動するカンチレバーの振動・変形
- ☞ 探針が試料に接触した際に働く力
- ☞ カンチレバーの共鳴振動スペクトルの特性（開発中）

カンチレバーの根元を強制振動させると、カンチレバー全体が振動し周辺の流体が攪拌され流れの場が生じます。そのため、レバーは流体の圧力や粘性力を受けることになります。



また、レバーの先端に取り付けられた探針が粘弾性試料に接触した際には、その接触力も受けます。これらの力とレバー自身の弾性変形による応力のため、レバーの振動は複雑な動きになります。本シミュレータではゴム表面や細胞表面など比較的マクロスケールの粘弾性ソフトマテリアル試料の AFM 像計測をシミュレーションするのに適しております。

計算を実行するための初期条件として、大きく分けて、カンチレバー、液体、試料の3種類の条件設定があります。各分類には下記のようなパラメータがあります。

➤カンチレバーの設定

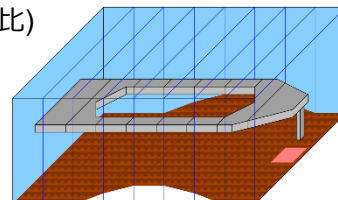
- ・形状（長さ、幅、厚さ、傾き）
- ・密度、縦弾性係数(ヤング率)、横弾性係数(ポアソン比)
- ・振動モード(振幅, 周波数, 多重波, 振れ角度)

➤流体の設定

- ・物性（密度、動粘性率）

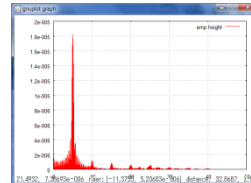
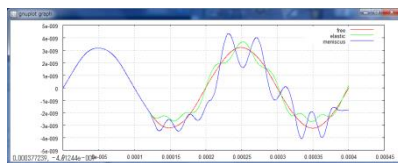
➤ソフトマテリアル試料の設定

- ・形状（高さ）
- ・物性（ヤング率、ダンパー定数、メニスカスの張力）



これらの条件設定を元に計算を実行すると、以下の値が結果として出力されます)。

- カンチレバーの各点での物理量の時間変化
 - ・上下振動：高さ、速度、傾き、流体抗力
 - ・捩れ振動：捩れ角、捩れ角速度、流体抗力モーメント
- 探針に働く力、探針に働くモーメント
- カンチレバーの共鳴曲線



※現在は、カンチレバー先端の高さの時間変化、振幅の時間変化、捩れ角度、探針が受ける力の時間変化のみの出力に対応しております。

今後は、ソフトマテリアル、及びバイオ系材料の SPM 計測での高速スキャンにも対応したシミュレーションを可能にする予定です。

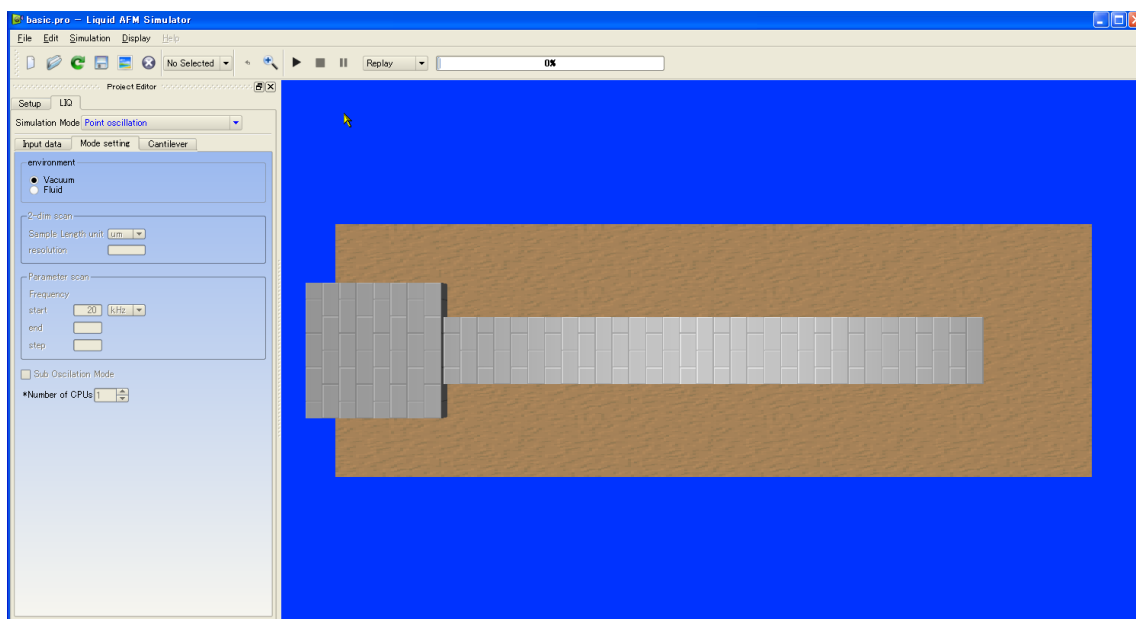
水中でのカンチレバーの動作

※ご注意※

SPM Simulator のインストール先に[SampleProject/LIQ]フォルダが存在する場合は、フォルダごと削除してください。今回のバージョンでは、前回のプロジェクトファイルを読むことはできませんのでご注意ください。

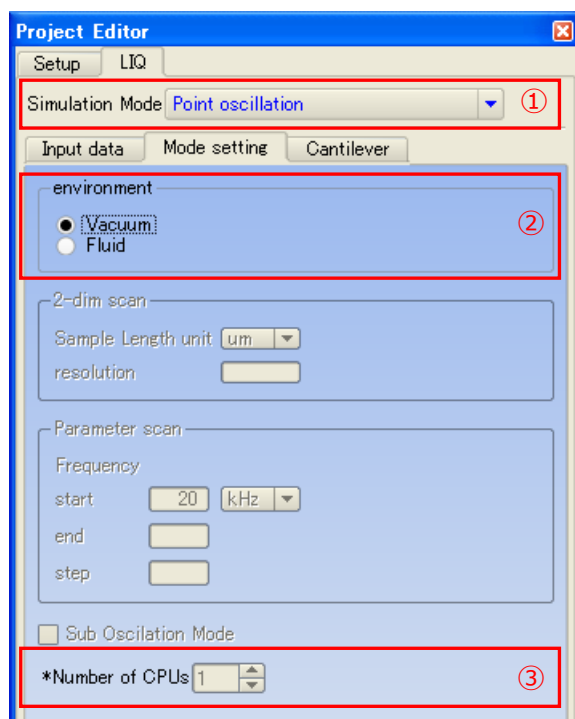
ここでは、水中でカンチレバーを振動させたときのシミュレーション事例をご紹介します。カンチレバーが振動する様子を視覚的に表示することができます。

同梱されております、ソフトウェア **LiqGUI.exe** を起動してください。そして、プロジェクトを新規作成してください。プロジェクトの作成方法に関しましては、他のソフトウェアと同様ですので、p 23 を御覧になり手順に沿っておこなって下さい。すると以下の画面が立ち上がります。



基本的な画面構成は、SPMSimulator.exe と同じです。ただし、右側のメイン画面にはカンチレバーが表示され、画面左側の[Project Editor]には、本ソフトウェア専用の設定画面になっています。

画面左側の[Project Editor]を見てください。



[LIQ]ー[Mode setting]タブが左図のようになっています。

ここでは、赤枠で囲った部分の設定を行いません。

- ① シミュレーションモードの選択
- ② 測定環境の設定
- ③ 並列計算の設定

まず、① Simulation Mode では計算モードを選択します。ここでは、[Point oscillation]になっていることを確認してください。これはカンチレバーを1点のみ、指定した回数振動させるモードです。

これに対して、試料の表面を平面走査する計算モードもあります（開発中）。

次に、② environment を設定します。



ここではカンチレバーを真空中か液体中のどちらで振動させるかを設定します。今回は水中で振動させるので[Fluid]を選択してください。

最後に、③ Number of CPUs で並列計算の設定を行ないます。



計算に使用するスレッドの数を入力してください。▲▼ボタンで数値を上下させることもできます。

この項目は液中計算のみに設定可能となります。従って、①で[vacuum]を選択した場合は設定できません。流体計算には非常に時間がかかるので、並列処理によって時間短縮を図ることができます。お使いのコンピュータに搭載されている CPU コア数（HT テクノロジー搭載であれば、スレッド数=コア数×2など）を上限として、任意の数値を入力することが可能です。

次に、[input data]タブを選んでください。すると以下のような画面になります。

Input data			Mode setting	Cantilever
name	value	unit		
fluid				
material				
kviscosity	0.891e-06	m ² /s		④
density	997.0	kg/m ³		
impulse	0.0e-06	N/ms		
bar				
material				
density	2330.0	kg/m ³		⑤
young	130	GPa		
poisson	0.28			
structure				
length	400	um		⑥
width	50	um		
depth	4	um		
angle	0.0	deg		
twist	0.0	deg		
sections	16			
tip				
position	400	um		
width	0.0	um		
radius	1.0	nm		
spotlight				
position	400	um		
distance	1000.0	um		
angle	0.0	deg		
body				
section	0.0 1.0 1.0			
section	1.0 1.0 1.0			
motion				
frequency	20	kHz		⑦
amplitude	3	nm		
baseheight	50	um		
DistanceFromSamples	1.0	nm		⑧
sample				
material				
point				
young	1.0e+05	GPa		⑨
damper	0.0	Ns/um		
tension	0.0	uN		
touch	1.5	nm		
detach	1.1			
structure				
		um		
		um		
simulation				
time				
steps_per_cycle	1024			⑩
max_cycles	2			
convergence				
criterion	0.01			
Output				
Directory	.%output			
height	height.csv			
height_amplitude	height_amplitude.csv			
tipforce	tipforce.csv			
Movie	movie1.mvc			
bar_motion	barmotion.bar			

ここでは、具体的な初期パラメータの数値入力を行ないます。

重要なものは赤枠で囲った箇所④～⑩で、大まかな意味は以下のとおりです。詳しくは別冊「リファレンスマニュアル」を御覧下さい。

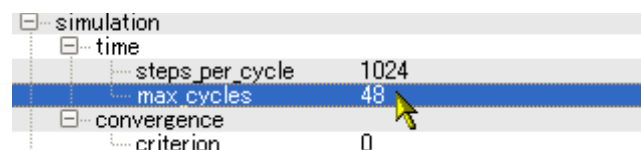
- ④ 流体の設定
- ⑤ カンチレバーの物性に関する設定
- ⑥ カンチレバーの形状に関する設定
- ⑦ カンチレバーの振動に関する設定
- ⑧ 探針—試料間の距離の設定
- ⑨ 試料の物性に関する設定
- ⑩ 時間ステップ、計算の収束判定に関する設定

このサンプルプロジェクトファイルには、④に水の物性値と、⑤にシリコンカンチレバーの物性値を予め入力してあります。液体の物性値とカンチレバーの材料物性値を変更したい場合は、この項目を修正してください。

⑥では、基本となるカンチレバーの形状を入力します。カンチレバーの分割を多くして詳細に計算したい場合は[sections]欄を大きい数にしてください。ただし、計算時間がかかるのでご注意ください。

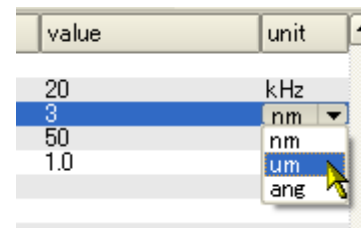
⑧では、探針の最下端と試料の上端との距離を設定しますが、カンチレバーの振幅（⑦の[amplitude] の値）と試料の高さ（⑨の[touch]）を考慮して、探針を試料に近づけすぎないように注意してください。

また、液中の計算は時間がかかるので、この⑩の数値を調節することで計算時間の短縮を図ることができます。真空中のシミュレーションでは比較的短時間で終了するので値を大きく設定しても支障ありません。例えば水中計算の場合は[simulation] > [time] > [max_cycles]を 30 程度に、真空中計算の場合は 300 程度にするといいいでしょう。[convergence] > [criterion]には “0.0” を入力します。



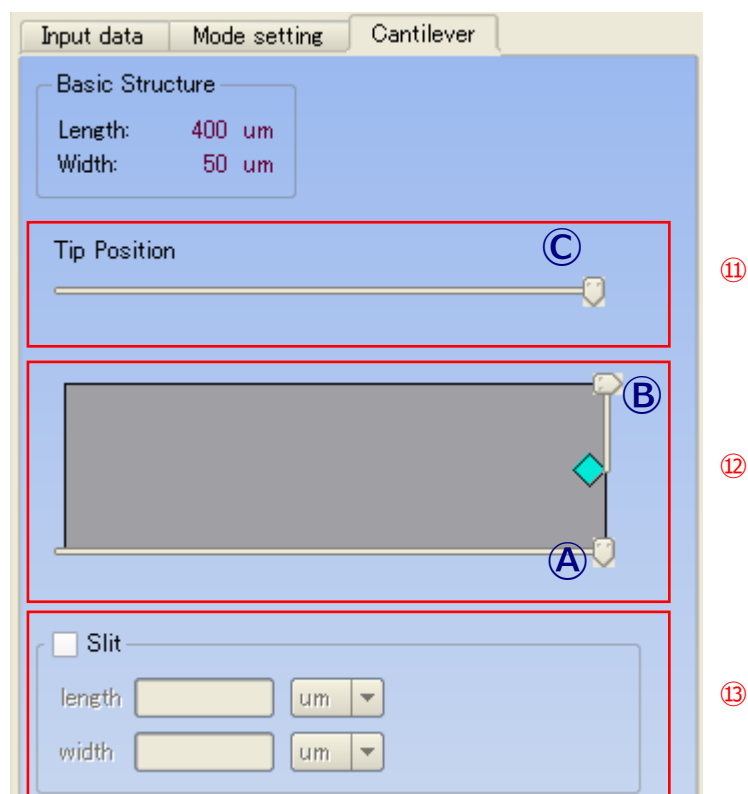
その他のパラメータについての詳細はリファレンスマニュアルを参照して下さい。

各パラメータについて、単位を変更したい場合は、[unit] 欄の単位をダブルクリックしてください。すると、単位の一覧が表示されるので、その中から選んで変更してください。
[um] : μm 、[ang] : $\text{\AA}$ です。



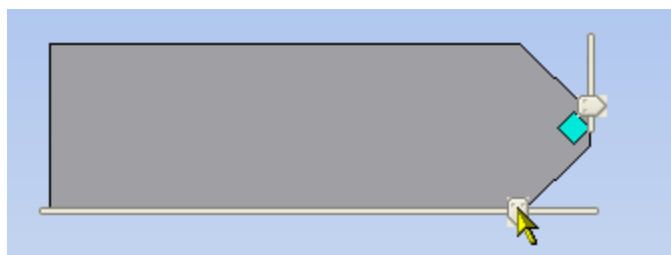
最後にカンチレバーの形状を設定します。[Cantilever]タブをクリックして下さい。

以下のような画面が表示されます。



- ⑪ 探針位置
- ⑫ カンチレバー形状
- ⑬ 穴の形状

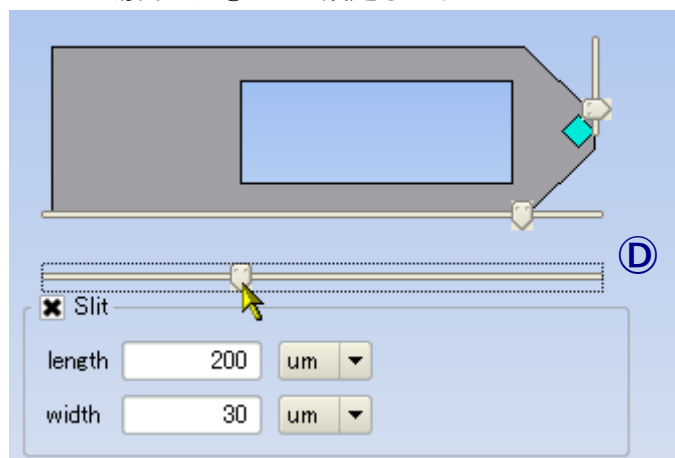
まず、⑫でカンチレバーの形状を設定します。図中の灰色の長方形がカンチレバーを表しており、右側が先端となります。緑のひし形が探針を表します。



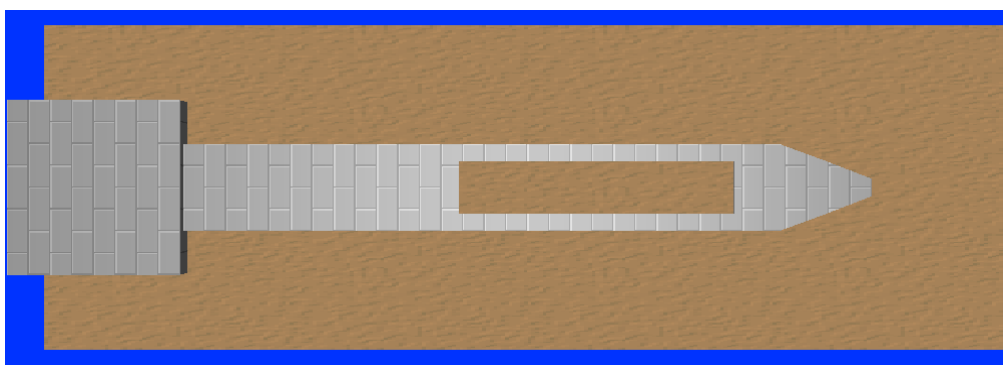
上図のように、①、②のスライダバーでカンチレバーを削っていき、形状を設定してください。同時にメイン画面を見ながらカンチレバーの形状を確認してください。

次に、③Tip Position で探針位置を設定します。スライダバー④を動かして探針位置を決めてください。カンチレバーの先端に探針が付いている場合は、特に動かす必要はありません。

穴の空いたカンチレバーの場合は、⑬Slit を設定します。

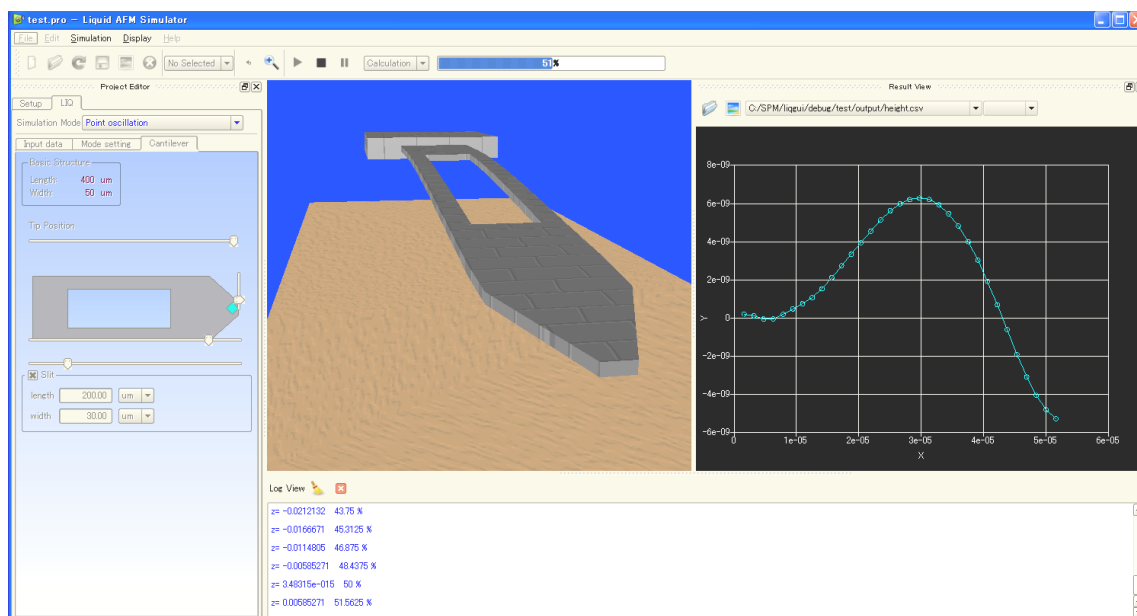


[Slit]にチェックを入れると、スリットの長さと幅を入力できるようになります。[Basic Structure]の項目を見ながら、穴の大きさがカンチレバー全体より大きくならないように注意してください。そして、スライダーバー⑬で穴の位置を移動してください。メイン画面にも形状を修正したカンチレバーが表示されます。

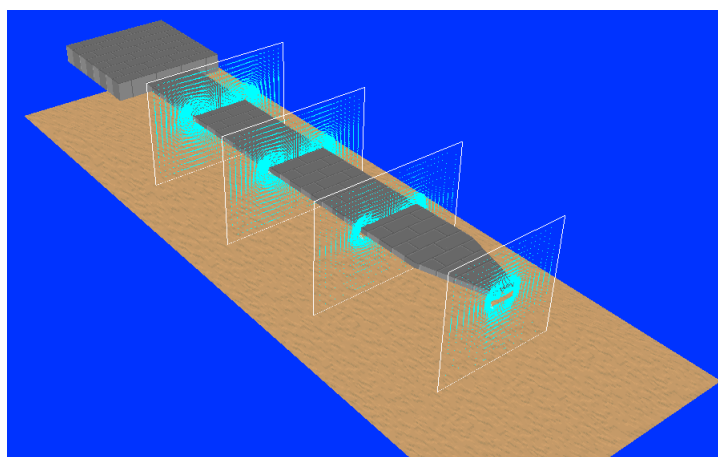


以上で液中シミュレーションをする場合の基本的な設定は終了です。
初期設定が終了したら、シミュレーションを開始する前にメニューバーから[Display]—[Result View]を選択してグラフウィンドウを表示して下さい。

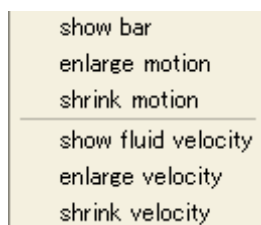
スタートボタンを押して計算を開始すると下図のようにカンチレバーの運動の様子を動画で見ることができます。



液体中のシミュレーションの場合、カンチレバーの周りの流体の速度が表示されます。



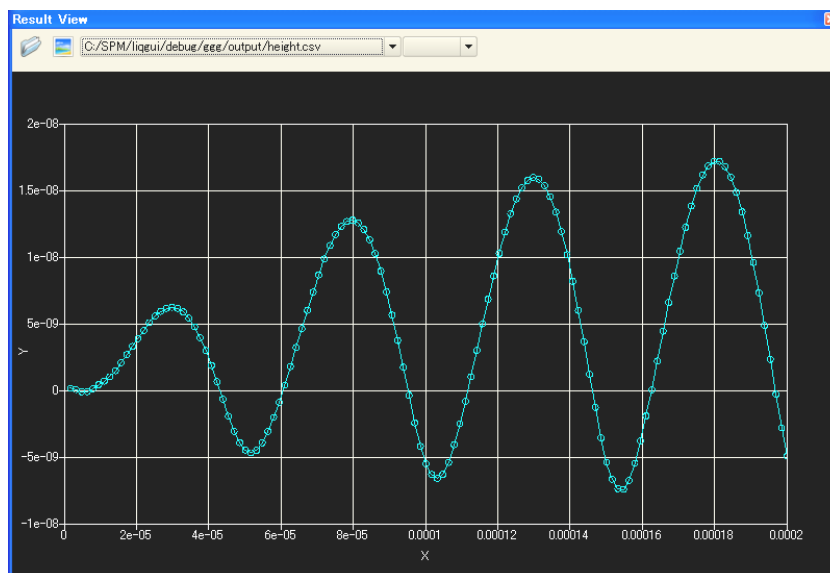
カンチレバーの動きや流体の速度をもっと誇張したい場合は、メイン画面でマウスを右クリックしてください。右クリックをすると以下のようなメニューが表示されます。



- show bar カンチレバーの表示／非表示。
- enlarge motion カンチレバーの動きが大きくなります。
- shrink motion カンチレバーの動きが小さくなります。
- show fluid velocity 流体の速度の表示／非表示。
- enlarge velocity 流体の速度が大きくなります。

shrink velocity ・ ・ ・ ・ 流体の速度が小さくなります。

計算が開始されると、結果がファイルに次々と出力され、グラフに表示されます。

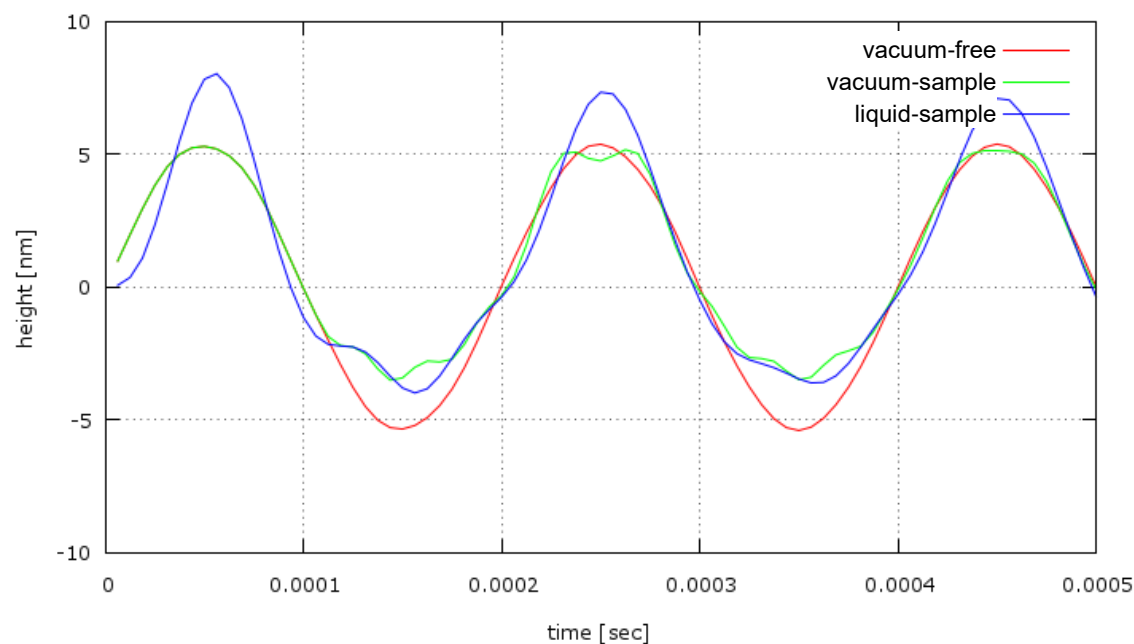


この計算で出力されるものは以下のものです。

出力内容	ファイル名	ファイル形式
カンチレバーの動画	barmotion.bar	バイナリ
流体の速度（液中計算の場合のみ）	fluidmotion	バイナリ
探針の高さの時間変化	height.csv	テキスト（CSV）
カンチレバー各点の振幅の時間変化	height_amplitude.csv	テキスト（CSV）
探針に働く力	tipforce.csv	テキスト（CSV）

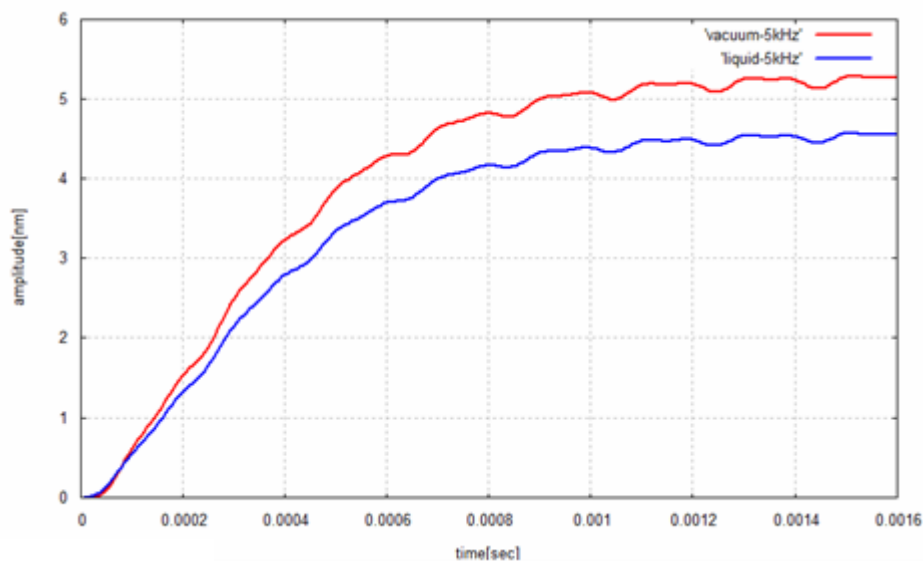
[Result View]ウィンドウの上部に表示されているフォルダに、計算結果ファイルが出力されています。動画以外のファイルは CSV 形式ですので、お使いのテキストエディタ、もしくは Microsoft Office Excel などを使用して開くこともできます。

次のグラフは、計算条件の違いによるカンチレバーの振動の時間変化をまとめた例です。
横軸：時間、縦軸：カンチレバー先端（探針位置）高さです。それぞれの線については、
赤線：真空中（試料なし）、緑線：真空中（弾性体試料あり）、青線：水中（弾性体試料あり）です。



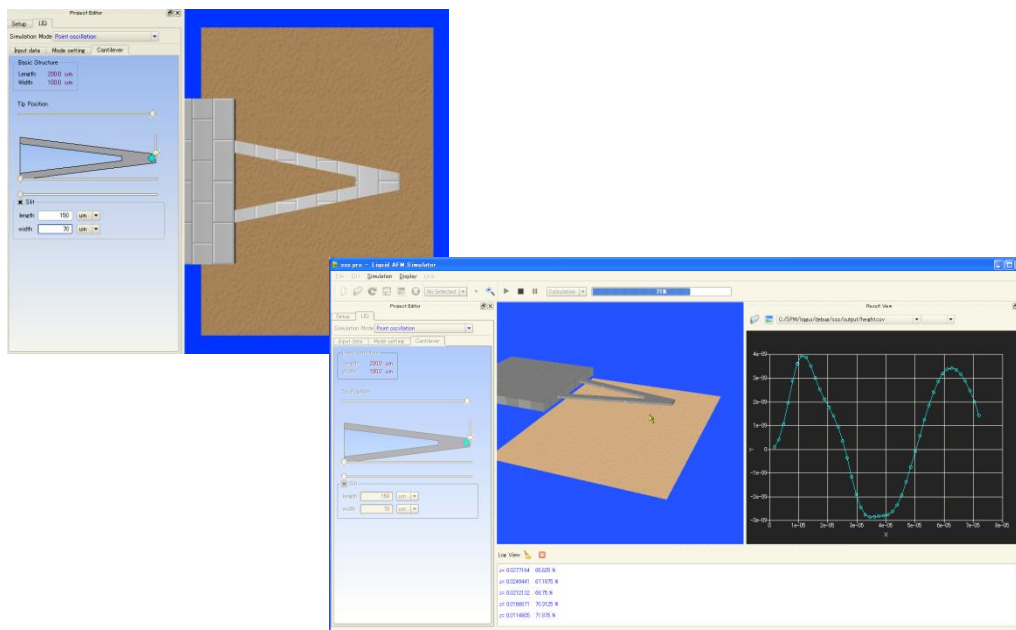
真空中で試料が無い場合は、きれいな正弦波を描いています（赤線）。試料は簡単な弾性体を模擬していますが、探針が試料に接触すると力を受け、カンチレバーの挙動が大きく変化する様子が分かります。

また、次のグラフは、真空中と水中におけるカンチレバーの振幅の違いをまとめました。

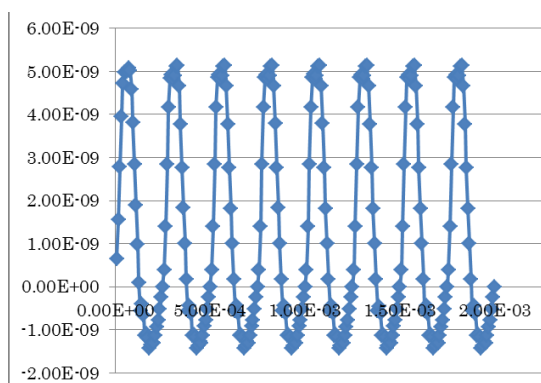


計算が進むにしたがって、カンチレバーの振動の振幅が一定値に収束していく様子が分かります。初期条件設定によっては振幅が収束せず、発散する場合がございますのでご注意ください。

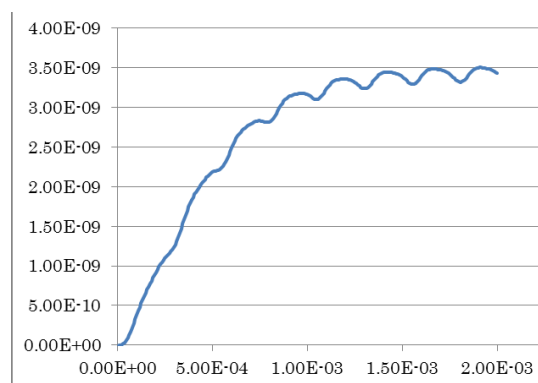
その他、下図のようなトライアングル型のカンチレバーを作成してシミュレーションすることもできます。カンチレバーの種類については、今後増やしていく予定です。



ここで、出力ファイルの height.dat と height_amplitude.dat の違いについて説明します。例として、SampleProject 以下の、フォルダ LIQ/non_viscoelastic/test_nv_001 について考えます。このフォルダ内の project ファイルに従ってシミュレーションを行った場合、出力ファイルとして、次のグラフに示される height.dat と height_amplitude.dat が得られます。



出力ファイル height.dat をグラフ化したもの。縦軸は、カンチレバーの先端の高さ、横軸は時間を表している。



出力ファイル height_amplitude.dat をグラフ化したもの。縦軸は、外力による励振周波数の振幅、横軸は時間を表している。

height.dat は、カンチレバー先端部の高さの時間変化を、そのまま出力しています。一方、height_amplitude.dat は、各時刻での、カンチレバー先端の振動のうち、外力による励振の周波数成分の振幅を抽出して出力したものとになっています。

今の例では、周波数 4.0[kHz]、振幅 5.0[nm]で外力により、カンチレバーの根元を振動させています。グラフ height.dat を見ると、時刻 $t=0$ より、カンチレバー先端部は順調に振動し

ているように見えます。

しかし、実際は、時刻 $t=0$ 付近でのカンチレバーの振動は、主たる振動周波数 4.0[kHz]だけでなく、様々な周波数成分の振動の重ね合わせとなっています。このような、周波数成分の広がりが生じる理由は、カンチレバー自体の固有周波数や、流体の抵抗力から生じる揺らぎが原因と考えられます。(グラフ height.dat では、32 時間ステップ毎にグラフの点をプロットしているので、細かな揺らぎは見えなくなっています。)

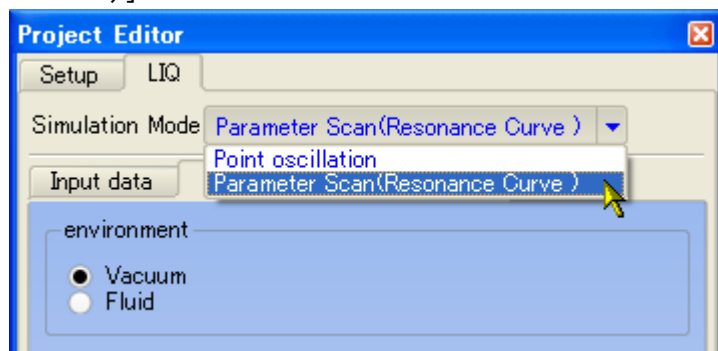
時間が経過するにつれて、カンチレバーの振動の主たる周波数成分は、外力による励振周波数 4.0[kHz]に収束します。系が定常状態に近づくにつれて、雑音となる周波数成分は消えて行くことになります。グラフ height_amplitude.dat は、その様子を再現しています。

カンチレバーの周波数特性 —共鳴曲線—

次に、真空中におけるカンチレバーの周波数特性を計算する事例をご紹介します。

カンチレバーの周波数特性を得るためには、さまざまな周波数で振動させてその振動振幅がどう変化するかを調べます。

まず、前の小節と同じようにプロジェクトの新規作成を行なってください。そして、下図のように [Project Editor] の [LIQ] — [Simulation Mode] から [Parameter Scan(Resonance Curve)]を選択してください。



すると、[Parameter Scan]の項目が入力できる状態になります。

なお、今回は真空中での計算を行ないますので、[environment]の項目は[Vacuum]にチェックが入った状態にしてください。

次に、カンチレバーの周波数特性を調べるために、どの周波数範囲で振動させるかを設定します。 [Parameter Scan]の Frequency—[start]、[end]、[step]をそれぞれ入力してください。

Parameter scan

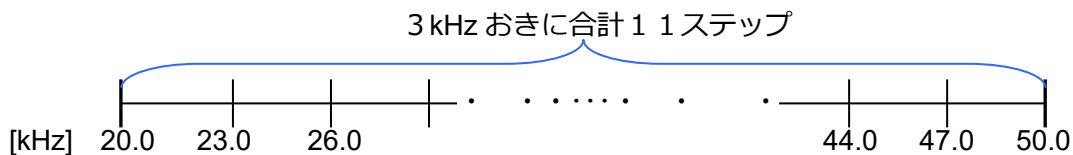
Frequency

start 20 kHz

end 50

step 11

上図のように入力した例だと、20.0kHz~50.0kHz までの範囲を 11 分割して計算することになります。



次に、[Input data]タブの設定を行ないます。

前の小節と同様に設定を行なうのですが、ここで注意点は以下の3点です。

1つめは、⑦[motion]—[frequency]の項目です。前の小節の[Point Oscillation]モードでは、数値の入力が可能でしたが、今回の[Parameter Scan]モードでは先ほどの[mode setting]タブ—[Parameter Scan]で入力した内容が反映されており、この項目を直接編集することはできません。

motion	frequency	20.0 50.0 11	kHz
	amplitude	3	nm
	baseheight	50	um

2つめは、探針と試料間の距離です。前の小節の計算では探針と試料が接触してカンチレバーの振動に及ぼす影響を計算しましたが、今回の計算では探針と試料は接触させません。従って、探針と試料の距離を遠ざけてください。⑧DistanceFromSamples の値を大きくして試料と接触しないように調整してください。

baseheight	50	um
DistanceFromSamples	1.0	mm

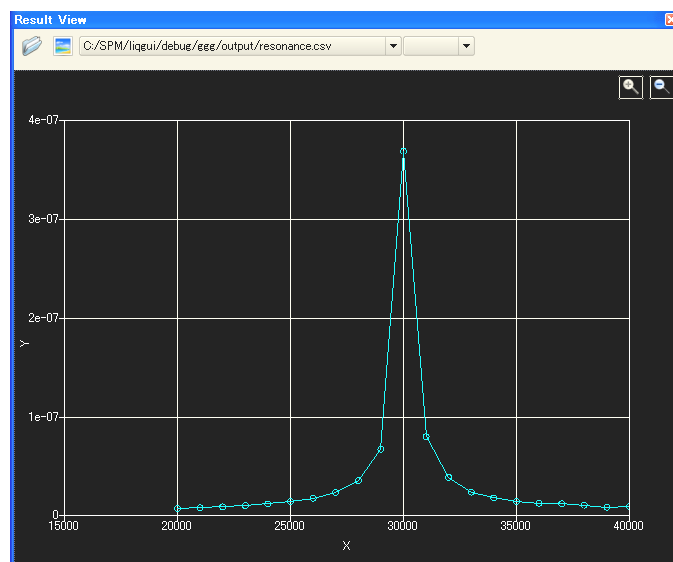
3つめは、⑩simulation の項目です。今回の計算ではカンチレバーの振幅がある程度一定値に収束するまで振動させる必要があるので、[max_cycles]の値は比較的大きくして振動回数を増やしてください。現在のところ、最大値は 100 サイクルまでとなっております。水中での計算を行なう場合は、非常に計算時間を要しますのでご注意ください。

simulation	
time	
steps_per_cycle	1024
max_cycles	48
convergence	
criterion	0

また、[convergence]—[criterion]には「0.0」の値を入力してください。

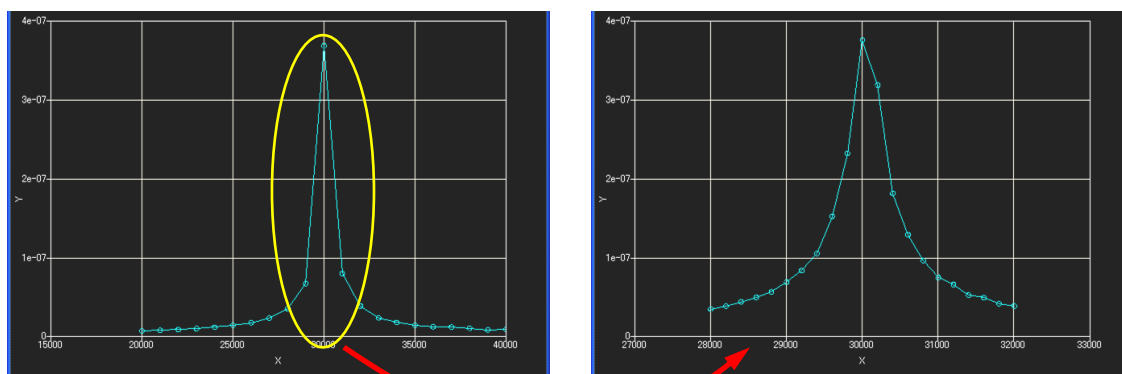
以上の項目に注意して、その他のパラメータやカンチレバーの形状設定に関しては前の小節と同様に行なってください。

全ての設定が終わりましたら、プロジェクトを保存してシミュレーションをスタートしてください。シミュレーションをスタートしてしばらくすると[Result View]には下図のような共鳴曲線が表示されます。



横軸は周波数[Hz]で、縦軸は振幅[m]です。

さらに詳しく共振周波数付近を調べたい場合は、計算したい周波数範囲とステップ数を変更して、再度同じ流れで計算を実行してください。

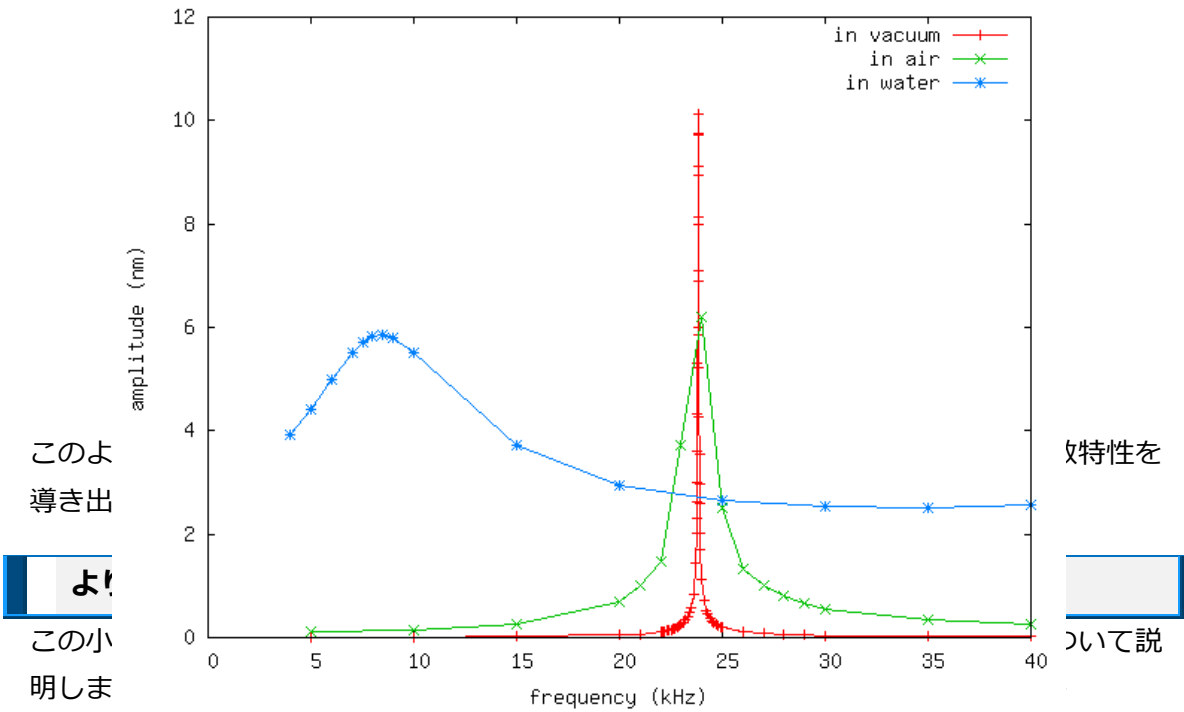


この部分を再計算

以下に、パラメータスキャンモードを利用して、作成した共鳴曲線を作成した例をご紹介します。

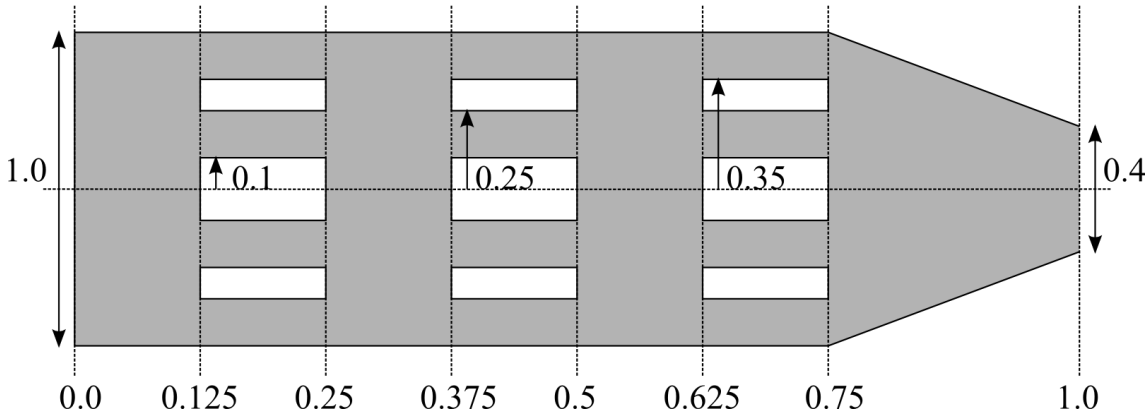
計算するための測定環境は水中／空气中／真空中で、それぞれカンチレバーの根元の振動周波数を変更しながら、レバー先端（探針取付け位置）の振動の時間変化を計算しました。計算結果について、周波数と振動振幅の関係をグラフにまとめることでカンチレバーの動作特性が得られます。その様子を下図に示します。横軸：周波数、縦軸：振幅で、**赤線：真空中**、**緑線：空气中**、**青線：水中**での共鳴曲線を表しています。

水中でシミュレーションした場合の共振周波数が、真空中及び空気中で計算した値より小さくなっている様子が分かります。



¥non_viscoelastic¥test_nv_002¥test_nv_002.pro を使用することとします。

このプロジェクトファイルで指定されているカンチレバーの形状は以下の図のようになります。



このカンチレバー形状は、プロジェクトファイル test_nv_002.pro 内の、<bar><structure> というタグの下にある、以下の記述により指定されます。

```
<body display="false">
  <section display="false">0.0 1.0 1.0</section>
  <section display="false">0.75 1.0 1.0</section>
  <section display="false">1.0 0.4 1.0</section>
</body>
<split display="false">
  <section display="false">0.125 0.0 0.1</section>
  <section display="false">0.25 0.0 0.1</section>
```

```

</split>
<split display="false">
  <section display="false">0.125 0.25 0.35</section>
  <section display="false">0.25 0.25 0.35</section>
</split>
<split display="false">
  <section display="false">0.375 0.0 0.1</section>
  <section display="false">0.5 0.0 0.1</section>
</split>
<split display="false">
  <section display="false">0.375 0.25 0.35</section>
  <section display="false">0.5 0.25 0.35</section>
</split>
<split display="false">
  <section display="false">0.625 0.0 0.1</section>
  <section display="false">0.75 0.0 0.1</section>
</split>
<split display="false">
  <section display="false">0.625 0.25 0.35</section>
  <section display="false">0.75 0.25 0.35</section>
</split>

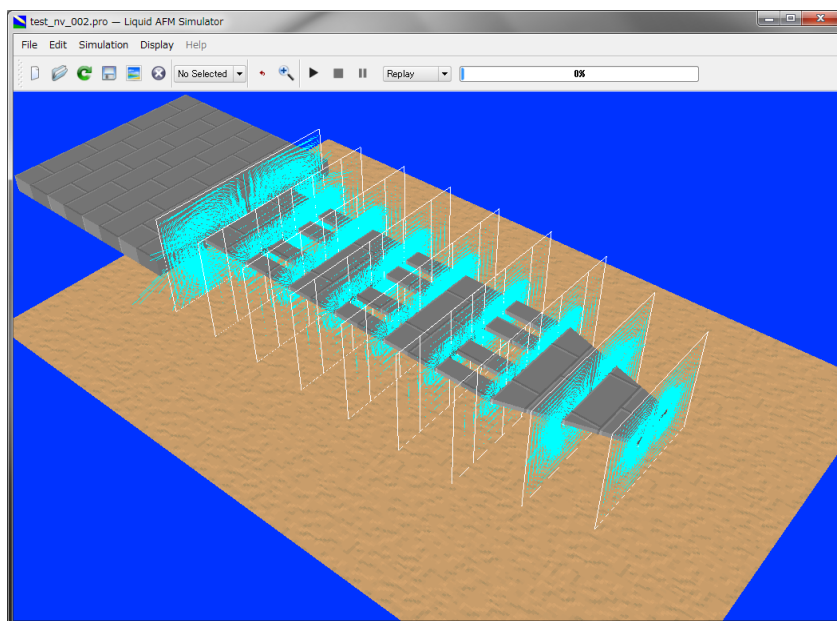
```

複雑な形状のカンチレバーを指定する場合、以下の点に注意します。上で示したカンチレバーの図を見ると分かるように、レバーは長さ方向に 0.125 の割合で 8 個に分割されたブロックを単位として構成されています。そこで、カンチレバーの動きを差分方程式で表現する場合、レバーは長さ方向に 8 の倍数で領域分割されると、数値計算に都合が良いと考えられます。実は、ソルバーの都合上、差分のための要素分割数は、見掛け上のブロック数の 2 倍以上という制限があります。そこで、この場合は、カンチレバーの長さ方向の差分分割数は 16 以上の 8 の倍数にしなければなりません。このような事情から、ここでは、32 分割を指定することとします。

このカンチレバーの長さ方向の差分計算用分割数が 32 という指定は、プロジェクトファイル test_nv_002.pro 内の、<bar><structure>というタグの下にある、<sections>により指定されます。ここでさらに、以下の注意が必要となります。すなわち、タグ<sections>に与える数字は、差分計算用分割数に 1 を加えたものでなくてはならないという規則があります。そこで、最終的には、
`<sections>33</sections>`
と記入します。

最後に、流体の速度ベクトルの表示と、差分計算用分割数との関係について説明します。下図に示されるように、シミュレーション実行時(Calculation)および Replay 時に、カンチレバーの動きと流体の速度ベクトル場が、メイン・ウィンドウ上に表示されます。流体の速度場は、カンチレバーを切断する面について表示されます。この流体速度場を表示する

断面は、4 個の差分用分割領域毎に表示されるように設定されています。従って、カンチレバーの分割数は、4 の倍数だと、メイン・ウィンドウ上に表示される画像が見やすくなります。従って、<bar><structure><sections>で指定する分割数は、4 の倍数に 1 を加えた値を入れると良いでしょう。



粘弾性接触力学を考慮したシミュレーション

この小節では、カンチレバー先端探針と試料間の粘弾性接触力学を考慮したシミュレーションを行う方法について説明します。液中ソフトマテリアルAFMシミュレータには、粘弾性接触力学をシミュレーション計算に含めるオプションが用意されています。このオプションを使用すると、探針先端探針と粘弾性の有る試料が接触した際の動力学が、Johnson-Kendall-Roberts (JKR)理論によって記述されると仮定され、表面張力に由来する凝着現象がシミュレーション計算に取り入れられます。この機能を使えば、例えば、探針が試料表面との相互作用で受ける外力の変化の様子を、手軽にシミュレーション計算することが可能となります。

粘弾性接触力学を考慮したシミュレーション用のサンプル・プロジェクトは、フォルダ `viscoelastic` の下にまとめられています。下の表に示される三種類のサンプル・プロジェクトが用意されています。用途に合わせて参考にして下さい。

testp_v_001	真空中での測定を仮定。カンチレバーの弾性率は小さめに設定。
testp_v_002	真空中での測定を仮定。カンチレバーの弾性率は大きめに設定。
testp_v_003	液体中での測定を仮定。カンチレバーの弾性率は大きめに設定。

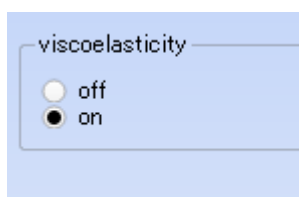
粘弾性接触力学を考慮したシミュレーションを実行する場合、projectファイルに書き込むべき重要な項目がいくつかあります。それらは以下の表にまとめられます。

<LIQ><fluid><material><kviscosity>	流体の動粘性係数(unit="m ² /s")
<LIQ><fluid><material><density>	流体の密度(unit="kg/m ³ ")
<LIQ><fluid><material><impulse>	流体が受ける分子のランダムな撃力 (unit="N/ms")
<LIQ><bar><material><density>	カンチレバー材質の密度(unit="kg/m ³ ")
<LIQ><bar><material><young>	カンチレバー材質のヤング率(unit="GPa")
<LIQ><bar><material><poisson>	カンチレバー材質のポアソン比(無次元量)
<LIQ><bar><material><friction>	カンチレバー材質の摩擦係数(無次元量)
<LIQ><bar><material><hamaker>	カンチレバー材質のハーメーカー定数 (unit="J")
<LIQ><bar><structure><tip><radius>	カンチレバー先端探針半径(unit="nm")
<LIQ><bar><motion><frequency>	カンチレバーを外力で振動させる際の周波数 (unit="kHz")
<LIQ><bar><motion><amplitude>	カンチレバーを外力で振動させる際の振幅 (unit="nm")
<LIQ><bar><motion><baseheight>	試料表面から静止時のカンチレバー中心ま

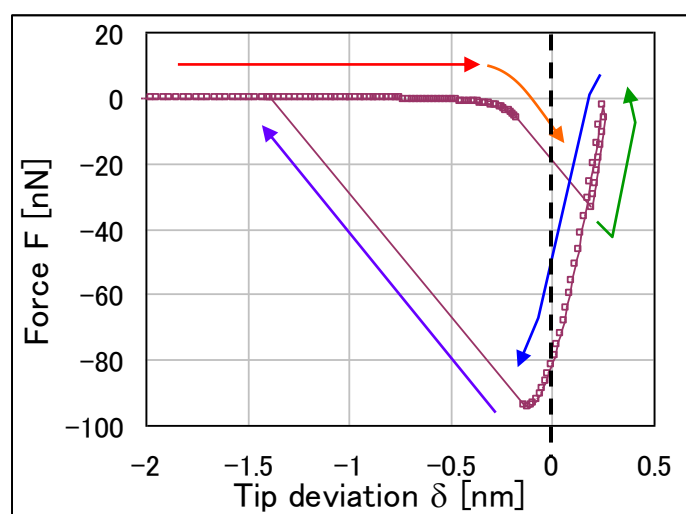
	での高さ(unit="nm")[探針を試料に接触させたいので、この値はカンチレバーの振動の振幅と、ほぼ等しい値が望ましい]
<LIQ><bar><DistanceFromSamples>	baseheightと等しい値を入れる (unit="nm")
<LIQ><sample><material><point> <young>	試料のヤング率(unit="GPa")
<LIQ><sample><material><point> <poisson>	試料のポアソン比(無次元量)
<LIQ><sample><material><point> <damp>	ダンパー定数(unit="Ns/m")[探針の速度に比例した抵抗力を生成させたい場合に使用する]
<LIQ><sample><material><point> <tension>	探針-試料接触時の張力(unit="uN")
<LIQ><sample><material><point> <touch>	静止時の探針から試料表面に接触するまでの距離(負の値となる)[baseheightの反対符号の値を入れる](unit="nm")
<LIQ><sample><material><point> <detach>	静止時の探針と、探針が試料表面から離脱する点までの距離(負の値となる)[touchと等しい値を入れる](unit="nm")
<LIQ><sample><material><point> <hamaker>	試料のハーマーカー定数(unit="J")
<LIQ><sample><material><point> <adhesive>	試料の表面張力(unit="N/m")
<LIQ><simulation><time>	カンチレバーが外力によって振動する際の、

<code><max_cycles step="smooth">1.6</code>	シミュレーションの開始から終了までの周期(無次元量)[1.6程度とすると良い]
<code><LIQ><Output><Directory></code> <code><delta_tipforce where="head"</code> <code>interval="1" displaytype="1D"</code> <code>ctrl="label">delta_tipforce.csv</code>	出力ファイルとしてdelta_tipforceを指定すると、探針-試料間の距離および引力・斥力の時間変化を得る事が出来る

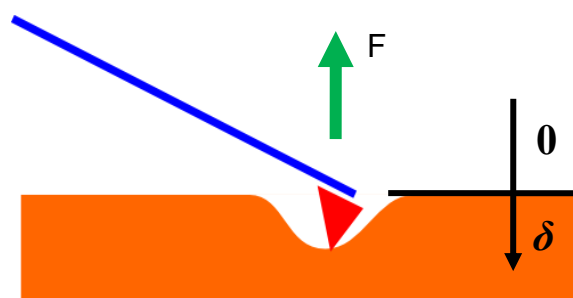
粘弾性接触力学を考慮したシミュレーションは、以下の手順で実行できます。まず、GUI画面左側のProject Editorウィンドウ内に配置されているLIQ→Mode settingタブの、viscoelasticityボタンをonにします。(このボタンは、デフォルトではoffとなっています。)次に、通常のシミュレーション計算と同じく、Calculationをスタートさせます。



例えば、サンプル・プロジェクト・フォルダ/viscoelastic/testp_v_002内の、testp_v_002.proについて、シミュレーション計算を実行した場合、出力ファイルdelta_tipforce.csvより以下のフォースカーブが得られます。(このグラフは、サンプル・プロジェクト・フォルダ/viscoelastic/testp_v_002/output内に収められている、delta_tipforce_ref.xlsxという名前のファイルに保存されています。)



上の図は、真空中において、ばね定数の大きなカンチレバーで探針を試料に接触させたときの、探針先端部の変位と探針先端部にかかる外力との関係をプロットしたグラフです。ただし、上のグラフでは、横軸を探針先端部の変位、縦軸を探針先端部にかかる外力としています。横軸の変位は、試料表面をゼロとして、下向きを正としています。縦軸の外力は、上向きを正としています。



タッピング機能による周波数シフト・位相シフト AFM 像シミュレーション

この小節では、LiqAFMのタッピング機能によって、周波数シフト・位相シフトAFM像シミュレーションを行う方法を説明します。

タッピング機能では、探針の付いたカンチレバーを一定の周期・振幅で振動させ、試料表面を走査します。探針が試料表面から離れているときはファンデルワールス力が働くと仮定します。探針が試料表面に接触しているときは、系はJohnson-Kendall-Roberts (JKR)理論によって記述されると仮定します。一般に、JKR理論では、探針が試料表面に接触・離脱する瞬間は、試料表面は一定の高さだけ盛り上がった状態になります。LiqAFMのタッピング機能では、探針が試料表面に接触する際は、試料表面の接触高さは確率的に変動するものとし、探針が試料表面から離脱する際は、試料表面の接触高さはJKR理論で定められ

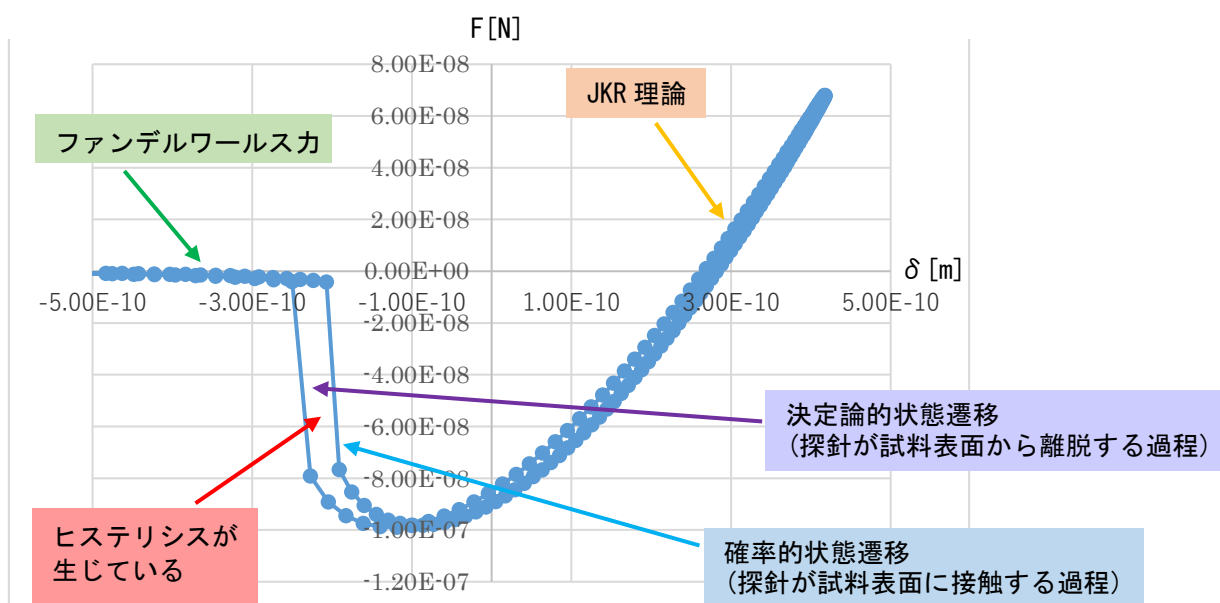
る限界まで高くなると仮定します。ですから、ファンデルワールス力領域からJKR理論領域への遷移は確率的ですが、JKR理論領域からファンデルワールス力領域への遷移は確率的ではなく決定論的です。

探針が試料に接触している間は、系はJKR理論で記述されるので、粘弾性接触力学が考慮されていることになります。従って、表面張力による凝着現象が再現されます。

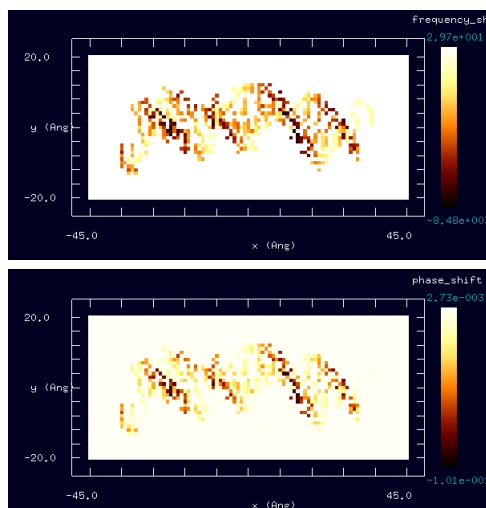
探針が試料表面に接触する際の試料表面の高さが確率的に選ばれる一方、探針が試料表面から離脱する際は試料表面の高さは一定の限界値まで高くなると定めましたので、探針が試料内部に押し込まれる際のフォースカーブと、探針が試料から引き戻される際のフォースカーブは一致しなくなります。これにより、フォースカーブにはヒステリシスが発生します。位相シフトの値は、このフォースカーブのヒステリシスの程度に依存します。

下の図は、フォースカーブを示しています。グラフの横軸は、試料表面と探針の距離を表しています。距離はz軸高さ方向の下向きを正に取っています。ですから、横軸が正の値のときは、探針が試料内部にめり込んでいる様子を表しています。横軸が負の値のときは、探針が試料表面の初期高さよりも高い位置にあることを示しています。グラフの縦軸は、探針の感じる力を表しています。力はz軸高さ方向の上向きを正としています。従って、力の値が正のときは試料から反発力を受け、力の値が負のときは試料から引力を受けていることを表します。(下のグラフは、フォルダ

SampleProject/LIQ¥LiqAFM_Tapping/LiqAFM_Tapping_Polymer_001b/output内の、ファイルdelta_tipforce_dash.xls内に収められています。)



下の図は、液中環境下でのDNA分子の周波数シフトAFM像、位相シフトAFM像を示しています。



最大値 : 0.0297[kHz]

最小値 : -8.48[kHz]

最大値 : 2.73e-3[radian]

最小値 : -1.01e-1[radian]

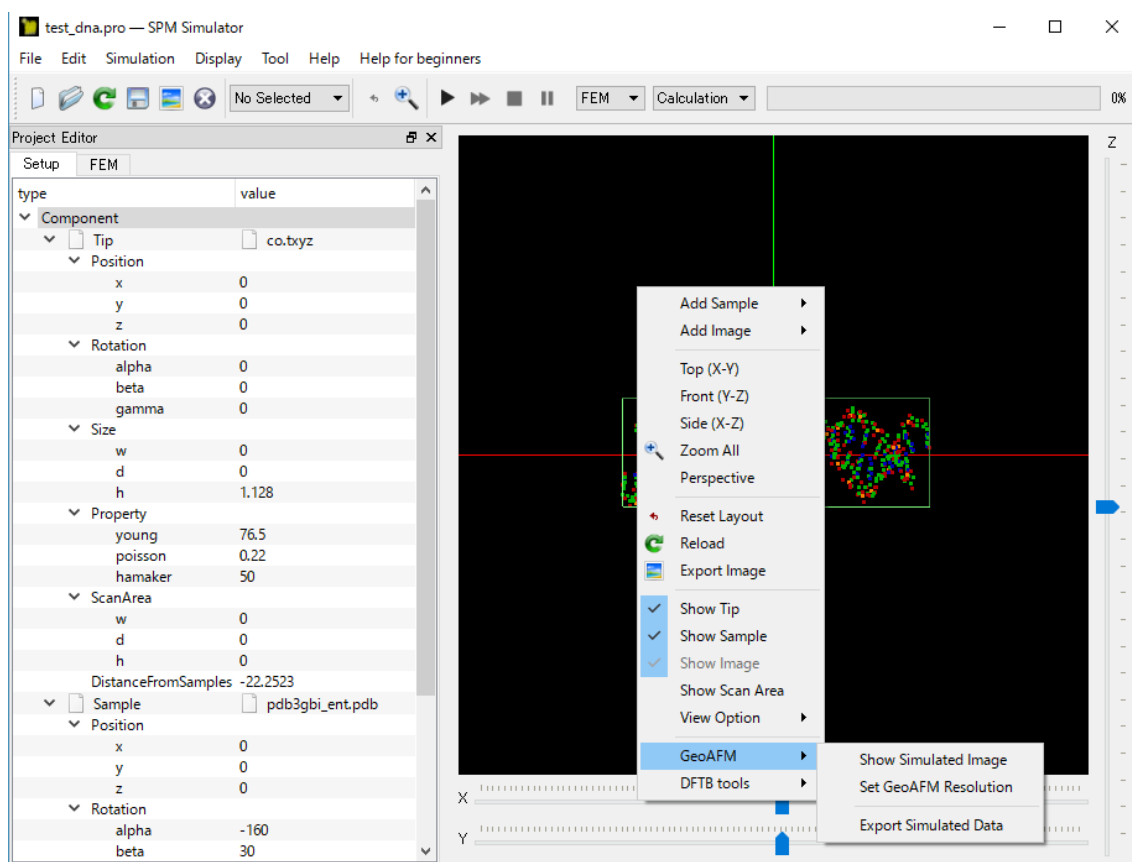
タッピング機能の計算例が、SampleProjectフォルダの下、LIQ/LiqAFM_Tappingフォルダ内に集められています。例えば、上の図で示した液中環境下でのDNA分子のシミュレーションについては、フォルダLiqAFM_Tapping_Polymer_001bに入出力データが集められています。

以下に、LiqAFM_Tapping_Polymer_001bを例にとって、実際のシミュレーションの操作方法を説明します。

LiqAFMによるシミュレーションを行う前に、試料データdna.cubeを用意しなくてはなりません。それには、GeoAFMを使います。

- (1) まず、SPMSimulator.exeをダブルクリックして、SPMシミュレータを立ち上げます。
- (2) [File]→[Open]で、LiqAFM_Tapping_Polymer_001bフォルダ内の、GeoAFM/test_dna/test_dna.proを開きます。
- (3) SetupタブのComponentを見ると、Tipとしてco.xyzが選択されているのが分かります。これは、探針としてCO分子が選ばれていることを意味します。また、Sampleとしてpdb3gbi_ent.pdbが選択されていることが分かります。これは、ProteinDataBank (<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>)からダウンロードされた分子構造データ・ファイルです。SPMシミュレータの画面上には、DNAの分子構造が表示されています。
- (4) DNA分子が表示されているSPMシミュレータの画面上にカーソルを置いて、マウスを右クリックします。[GeoAFM]→[Set GeoAFM Resolution]で、解像度を設定するウィンドウが表示されますので、1.0[Å]とします。次に、[GeoAFM]→[Show Simulated Image]とすると、画面上にAFM像が表示されます。さらに、[GeoAFM]→[Export Simulated Data]で、このAFM像をdna.cubeとして保存します。このdna.cubeファイルを、LiqAFMの入力データとして利用します。

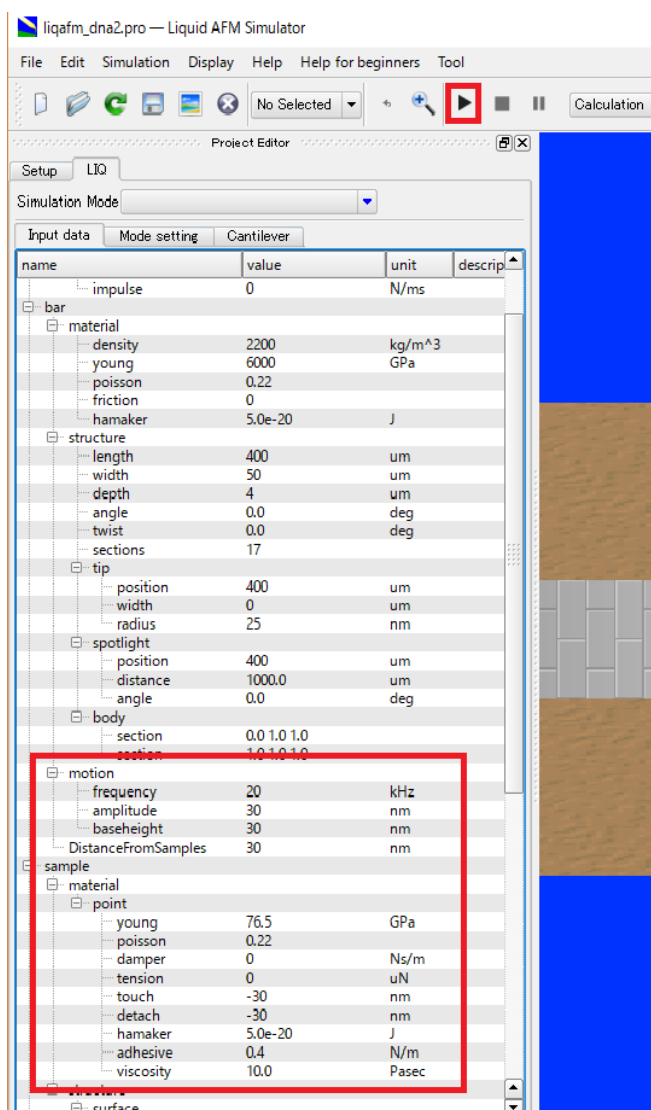
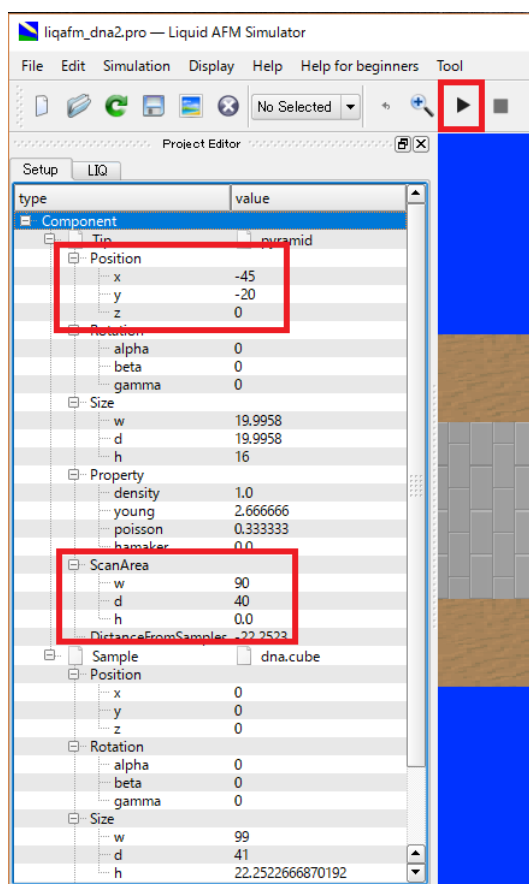
- (5) 上記で作成したファイルdna.cubeを、LiqAFM_Tapping_Polymer_001bフォルダ内に入れてください。

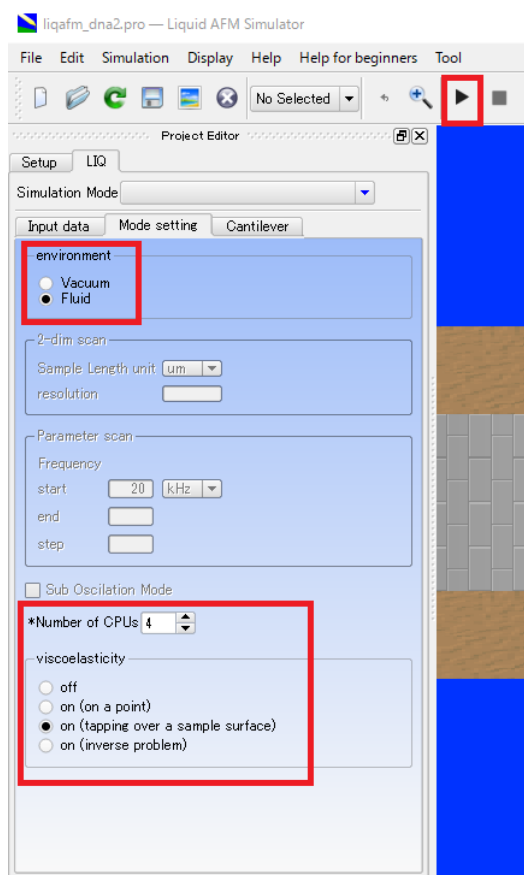


いよいよ、LiqAFMの操作方法を説明します。

- (1) まず、liqgui.exeをダブルクリックして、LiqAFMシミュレータを立ち上げます。
- (2) [File]→[Open]で、LiqAFM_Tapping_Polymer_001bフォルダ内の、liqafm_dna2.proを開きます。
- (3) SetupタブのComponentを見ると、Sampleとしてdna.cubeが選択されていることが分かります。
- (4) SetupタブのComponentにおいて、TipのPositionを、x="-45", y="-20", z="0"としてください。これらの単位はÅです。
- (5) SetupタブのComponentにおいて、TipのScanAreaを、w="90", d="40", h="0"としてください。これらの単位はÅです。
- (6) LIQタブのInput dataを見てください。ここで、様々な物性値が設定されます。項目barのmotionにおいて、frequency="20"[kHz], amplitude="30"[nm], basehight="30"[nm]と設定してください。また、項目barにおいて、DistanceFromSamples="30"[nm]と設定してください。通常、amplitude, basehight, DistanceFromSamplesには、同じ値を入れます。
- (7) 項目sample→material→pointにおいて、touch="-30"[nm], detach="-30"[nm]と設定してください。通常、touch, detachには、barのamplitudeの反対符号の値が入ります。

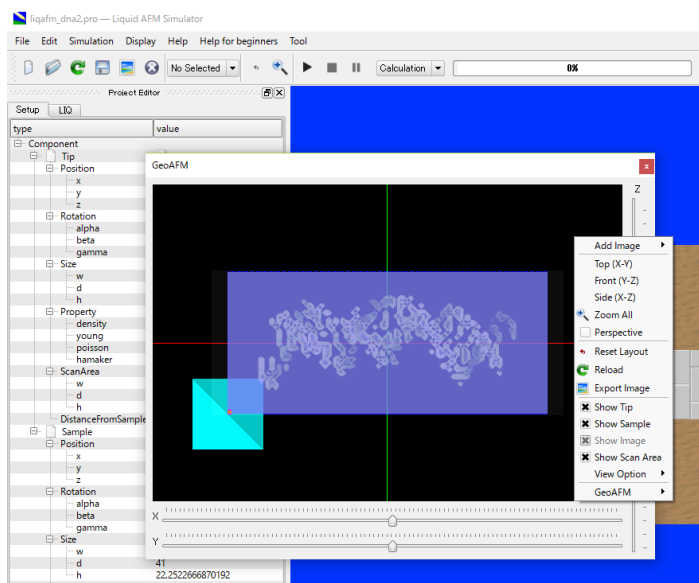
- (8) 項目sample→material→pointにおいて、試料の物性値として、ヤング率(young)、ポアソン比(poisson)、ハーメーカー定数(hamaker)、表面張力(adhesive)、粘性抵抗(viscosity)が設定できます。
- (9) LIQタブの、Mode settingを見てください。項目environmentがFluidになっていることが分かります。このように液中環境では、並列計算が可能です。項目Number of CPUsで、並列化で使用するCPUの個数を指定できます。
- (10) 項目viscoelasticityはデフォルトでoffになっています。これを、on (tapping over a sample surface)にマークしてください。
- (11) LqAFMシミュレータのウィンドウの上部にある三角形のボタンをクリックしてください。これで、シミュレーションが開始されます。



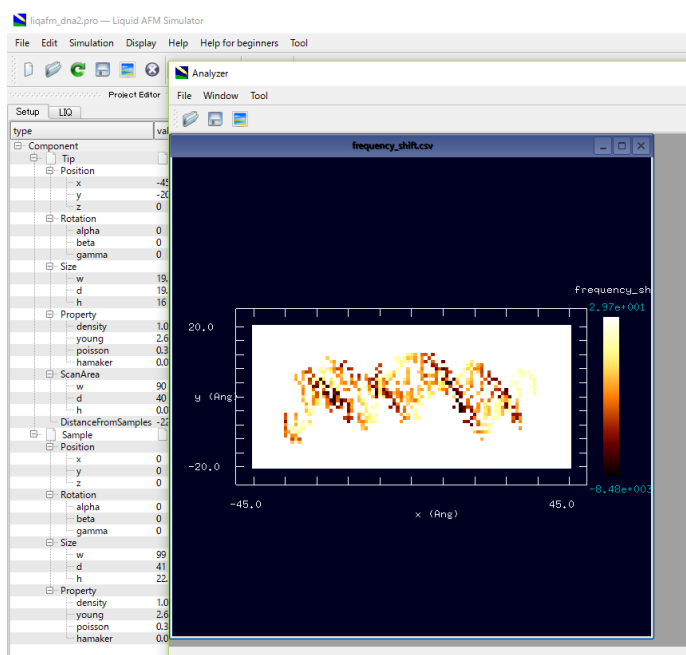


LiqAFMには、Toolとして、GeoAFMとAnalyzerが用意されています。これらの使い方を説明します。

GeoAFMは、[Tool]→[GeoAFM]で起動します。今の場合、GeoAFM画面上には、DNA分子が表示されているはずですが、GeoAFM画面上を右クリックし、Show Scan Areaを選択すれば、走査範囲が表示されます。



Analyzerは、[Tool]→[Analyzer]で起動します。Analyzerのウィンドウ上で、[File]→[Open]により、フォルダLiqAFM_Tapping_Polymer_001b/output内の、ファイルfrequency_shift.csvおよびphase_shift.csvを選択すると、それぞれ、周波数シフトAFM像、位相シフトAFM像が表示されます。



タッピング機能による逆問題シミュレーション

この小節では、LiqAFMのタッピング機能によって、周波数シフト・位相シフトの観測値を元にして、試料表面のヤング率、表面張力、基板からの高さを求めるシミュレーションの実行方法を説明します。

前節では、試料表面の物性値として、ヤング率、ポアソン比、ハーマーカー定数、表面張力、粘性抵抗、それに試料表面の基板からの高さを与えて、それらの値から、周波数シフト、位相シフトを求めました。この節では、その逆問題を考えます。すなわち、周波数シフト、位相シフトの値が観測値として既に与えられていると仮定して、それより、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めます。

例えば、周波数シフト、位相シフトの値が観測値として与えられているとして、それらの値を再現するヤング率、表面張力を求める問題を考えます。これは、以下に説明する最適化問題と見なすことができます。まず、周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義します。

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

ただし、

$\Delta\nu$: シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\text{obs}}$: 観測値として得られた周波数シフト

ω_0 : カンチレバーの共鳴振動周波数

Φ : シミュレーション計算で得た位相シフト

Φ_{obs} : 観測値として得られた位相シフト

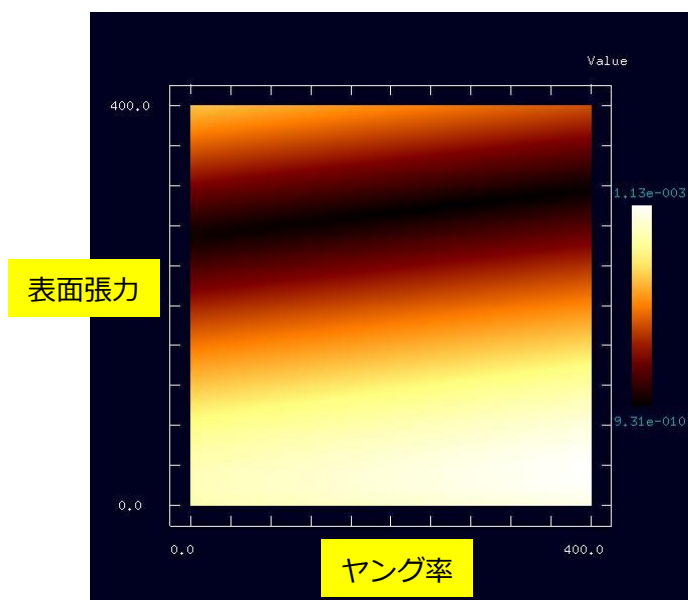
としています。上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力を求めれば良いことになります。これは一種の最適化問題です。

ずれ関数を最小にする、最適なヤング率、表面張力を求める方法として、ここでは二通りの考え方を採用します。一つ目は大局的に最適値を探索する方法で、この方法を `global_mode` と呼びます。二つ目は局所的に最適値を探索する方法で、この方法を `local_mode` と呼びます。

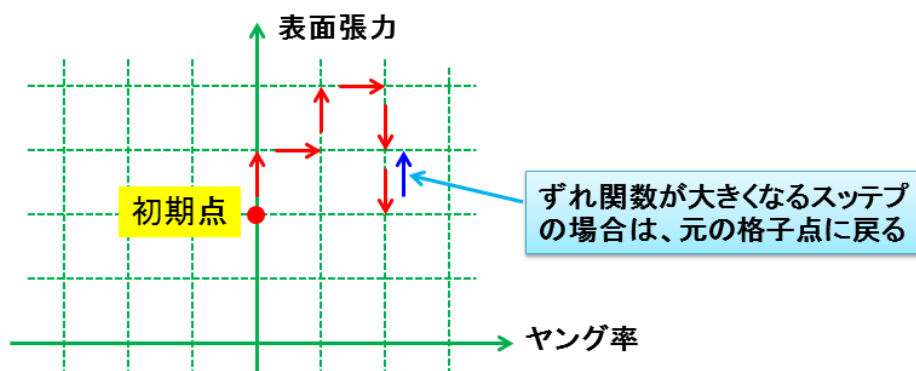
一つ目の計算方法である `global_mode` は、ある一定の範囲内のヤング率、ある一定の範囲内の表面張力を考え、それによって定められる2次元パラメータ平面上での、ずれ関数値の分布を調べます。2次元パラメータ平面上で、ずれ関数の値が最小になる点が、最適解であると見なします。

下の図は、`global_mode` で求めたヤング率と表面張力から成る2次元パラメータ平面上での

ずれ関数値の分布です。ヤング率は70.0～80.0[GPa]、表面張力は0.1～0.5[N/m]の範囲とし、パラメータ値の範囲を400分割して、合計160000個の点上でずれ関数の値を求めています。この場合、ずれ関数を最小にするパラメータの組は、ヤング率が76.5[Gpa]、表面張力が0.4[N/m]でした。



二つ目の計算方法であるlocal_modeは、ヤング率、表面張力の初期値を考え、そこから、ヤング率、表面張力を少しずつランダムに変化させて、ずれ関数の値が小さくなる方向に進んで行く方法です。ヤング率、表面張力の2次元パラメータ空間で考えると、初期値の点から、ランダム・ウォークの要領で1ステップずつ進んで行くことに相当します。1ステップ進んで、ずれ関数の値が小さくなる場合は、その点にとどまります。1ステップ進んで、ずれ関数の値が大きくなる場合は、元の位置に戻って、新たにランダムなステップを選び直します。下の図を見ると、分かり易いでしょう。



計算方法local_modeの場合、ずれ関数の収束値をあらかじめ定めておきます。そして、ステップを進んで行くうちに、ずれ関数が収束値以下になったら、計算を終了させ、そのと

きのヤング率、表面張力の値を最適値と見なします。

以下に、global_mode、local_modeのシミュレーション操作方法を説明します。具体的な計算例が、SampleProjectフォルダの下、LIQ/LiqAFM_TappingInverseフォルダ内に集められています。

まず、global_modeについて説明します。例えば、最適解を求めるパラメータとしてヤング率と表面張力を選んだ場合のシミュレーションについては、フォルダLiqAFM_TappingInverse_Polymer_002に入出力データが集められています。

以下に、LiqAFM_TappingInverse_Polymer_002を例にとって、実際のシミュレーションの操作方法を説明します。

まず、liogui.exeをダブルクリックして、LiqAFMシミュレータを起動します。[File]→[Open]により、フォルダLiqAFM_TappingInverse_Polymer_002内の、liqafm_dna1.proファイルを開きます。

LIQタブのInput dataを見てください。計算モードglobal_modeで大切な設定は、以下の通りです。

項目名(<sample><material><point>以下)	内容
<young_initial_min>	ヤング率の最小値を入れます。今の場合、70.0[GPa]とします。
<young_initial_max>	ヤング率の最大値を入れます。今の場合、80.0[GPa]とします。
<young_division_number>	ヤング率の範囲の分割数を入れます。今の場合、400とします。
<poisson_initial_min>	ポアソン比の最小値を入れます。今の場合、0.22とします。
<poisson_initial_max>	ポアソン比の最大値を入れます。今の場合、0.22とします。
<poisson_division_number>	ポアソン比の範囲の分割数を入れます。今の場合、ポアソン比は変化させないので、0とします。
<adhesive_initial_min>	表面張力の最小値を入れます。今の場合、

	0.1[N/m]とします。
<adhesive_initial_max>	表面張力の最大値を入れます。今の場合、0.5[N/m]とします。
<adhesive_division_number>	表面張力の範囲の分割数を入れます。今の場合、400とします。
<viscosity_initial_min>	粘性抵抗の最小値を入れます。今の場合、10.0[N/m]とします。
<viscosity_initial_max>	粘性抵抗の最大値を入れます。今の場合、10.0[N/m]とします。
<viscosity_division_number>	粘性抵抗の範囲の分割数を入れます。今の場合、粘性抵抗は変化させないので、0とします。
<height_sample_initial_min>	試料表面の基板からの高さの最小値を入れます。今の場合、0.0[nm]とします。
<height_sample_initial_max>	試料表面の基板からの高さの最大値を入れます。今の場合、0.0[nm]とします。
<height_sample_division_number>	試料表面の基板からの高さの範囲の分割数を入れます。今の場合、試料表面の基板からの高さは変化させないので、0とします。

項目名	内容
<frequency_shift_observed>	周波数シフトの観測値を入れます。今の場合、24.888[Hz]とします。
<phase_shift_observed>	位相シフトの観測値を入れます。今の場合、-0.00123181[radian]とします。

項目名(<simulation>以下)	内容
<parameter_search_mode>	シミュレーション計算モードを指定しま

	す。今の場合、global_modeとします。
<global_two_dimensional_parameter_plot>	変化させる二つのパラメータを指定します。三種類の選択肢であるyoung-height, adhesive-height, young-adhesiveのうち、一つを選びます。今の場合、young-adhesiveとします。

項目viscoelasticityはデフォルトでoffになっています。これを、on (inverse problem)にマークしてください。これらの設定の後、LiqAFMシミュレータのウィンドウの上部にある三角形のボタンをクリックしてください。これで、シミュレーションが開始されます。

計算結果は、フォルダoutput内に、ファイルとして出力されます。まず、ヤング率と表面張力の2次元パラメータ平面上での、ずれ関数値の分布は、two_dimensional_parameter_plot.cubeという名前のファイルに出力されます。このファイルは、[Tool]→[Analyzer]としてAnalyzerを起動して、[File]→[Open]で開くことができます。また、two_dimensional_parameter_plot.csvという名前のファイルにも、全く同じデータが格納されており、これもAnalyzerで開くことができます。

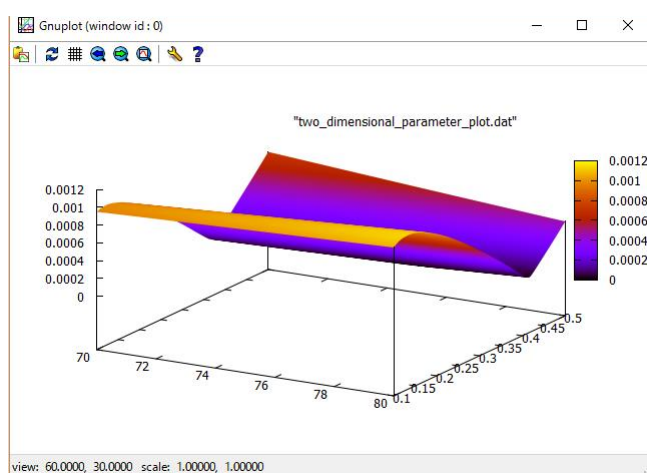
ファイルtwo_dimensional_parameter_plot.cubeをAnalyzerで開いた場合、パラメータの分割点数を単位として横軸、縦軸が表示されます。ファイルtwo_dimensional_parameter_plot.csvをAnalyzerで開いた場合は、横軸、縦軸は、その物理量の単位を元に表示されます。

ファイルtwo_dimensional_parameter_plot.datにも、2次元パラメータ平面上での、ずれ関数値の分布のデータが格納されています。このファイルは、フリーのグラフ表示ソフトgnuplotで開くことを想定しています。フリーソフトgnuplotでのグラフ表示方法は、以下の通りです。まず、gnuplotを起動します。次に、[File]→[Change Directory ...]で、フォルダSampleProject/LIQ/LiqAFM_TappingInverse/LiqAFM_TappingInverse_Polymer_002/outputを指定します。(なお、gnuplotは、日本語のフォルダ名を受け付けません。開こうとするフォルダの絶対path全体にわたって、日本語の文字列が含まれていない状態にしてください。)次に、gnuplotに下記のコマンドを入力します。

```
gnuplot> set pm3d
```

```
gnuplot> splot "two_dimensional_parameter_plot.dat" with pm3d
```

すると、グラフが下図のように示されます。



ヤング率と表面張力の2次元パラメータ平面上で、ずれ関数値が最小となる点は、outputフォルダ内のファイルinverse_problem_parameters.datに出力されます。このファイルは、テキスト形式で書かれていますので、一般的なエディター・ソフトで開けます。

次に、local_modeについて説明します。例えば、最適解を求めるパラメータとしてヤング率と表面張力を選んだ場合のシミュレーションについては、フォルダLiqAFM_TappingInverse_Polymer_005に入出力データが集められています。

以下に、LiqAFM_TappingInverse_Polymer_005を例にとって、実際のシミュレーションの操作方法を説明します。

まず、liqgui.exeをダブルクリックして、LiqAFMシミュレータを起動します。[File]→[Open]により、フォルダLiqAFM_TappingInverse_Polymer_005内の、liqafm_dna1.proファイルを開きます。

LIQタブのInput dataを見てください。計算モードlocal_modeで大切な設定は、以下の通りです。

項目名(<sample><material><point>以下)	内容
<young_initial>	ヤング率の初期値を入れます。今の場合、78.2[GPa]とします。
<poisson_initial>	ポアソン比の初期値を入れます。今の場合、0.22とします。
<adhesive_initial>	表面張力の初期値を入れます。今の場合、0.52[N/m]とします。
<viscosity_initial>	粘性抵抗の初期値を入れます。今の場合、

	10.0[N/m]とします。
<height_sample_initial>	試料表面の基板からの高さの初期値を入れます。今の場合、0.0[nm]とします。

項目名	内容
<frequency_shift_observed>	周波数シフトの観測値を入れます。今の場合、24.888[Hz]とします。
<phase_shift_observed>	位相シフトの観測値を入れます。今の場合、-0.00123181[radian]とします。

項目名(<simulation>以下)	内容
<parameter_search_mode>	シミュレーション計算モードを指定します。今の場合、local_modeとします。
<local_search_parameters>	変化させるパラメータを指定します。六種類の選択肢であるyoung_height, adhesive_height, young_adhesive, young_only, adhesive_only, height_onlyのうち、一つを選びます。今の場合、young_adhesiveとします。
<number_trials_frequency_phase_shift>	ランダムにパラメータを変化させる総ステップ数の最大値を入れます。今の場合、8000とします。
<frequency_phase_shift_convergence>	周波数シフト、位相シフトのずれ関数の収束値を入れます。ずれ関数の値が、ここで指定される値以下になると計算ステップを終了します。今の場合、2.0e-6とします。
<local_parameter_delta>	1ステップ当たりの、ヤング率、表面張力の変化の幅を、初期値に、ここで指定される値を掛け合わせたものに設定します。ちなみに、試料表面の基板からの高さの、1ステッ

ブ当たりの変化の幅は $0.1[\text{\AA}]$ に定められています。今の場合、 $2.0\text{e-}3$ とします。

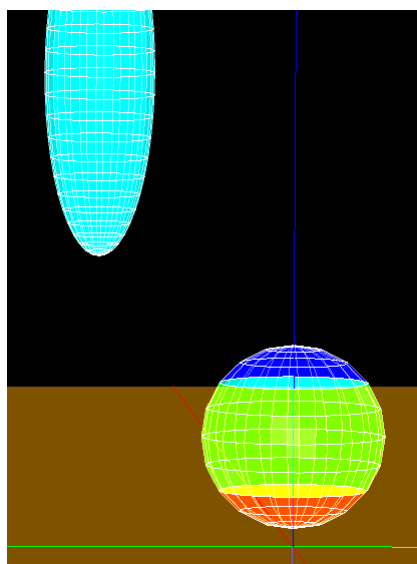
項目viscoelasticityはデフォルトでoffになっています。これを、on (inverse problem)にマークしてください。これらの設定の後、LiqAFMシミュレータのウィンドウの上部にある三角形のボタンをクリックしてください。これで、シミュレーションが開始されます。

計算結果は、フォルダoutput内の、ファイルinverse_problem_parameters.datとして出力されます。このファイルは、テキスト形式で書かれていますので、一般的なエディター・ソフトで開くことができます。ファイルinverse_problem_parameters.datの末尾に、"convergence!"という文字列が書かれていれば、計算は無事収束したことになります。文字列"convergence!"の直前に書かれているパラメータ値が、ずれ関数値を局所的に最小とします。一方、ファイルinverse_problem_parameters.datの末尾に、"temporal minimum"という文字列と、young, poisson, adhesive, viscosity height_sample, minimumFunctionの六つのパラメータ値が書かれている場合は、計算が収束しなかったことを意味します。これは、ずれ関数が収束値以下になるパラメータの組が見つからなかったことを示しています。

4 macroKPFM シミュレータ

帯電した球体の LCPD 像シミュレーション

この節では、帯電した球体の LCPD(Local Contact Potential Difference、局所接触電位差) 像を macroKPFM シミュレータで求める方法を説明します。この計算例は、SampleProject 内に収められている計算実施例 macroKPFM_LCPD_Inorganic_005 に相当します。必要な project ファイルは、SPMsimulator がインストールされているフォルダ内の、ディレクトリ SampleProject/macroKPFM/macroKPFM_LCPD/ macroKPFM_LCPD_Inorganic_005 内で 見つけることができます。



左の図のような状況を考えます。半径が5[nm]の球体を考えます。球体の材質は二酸化ケイ素(SiO_2)とします。球体の北極付近の表面には、負の電荷が均一に分布しているとします。球体の南極付近の表面には、正の電荷が均一に分布しているとします。この球体を試料として、探針を近づけKPFM観察したとき、どのようなLCPD像が得られるかを調べます。なお、左の図では、電荷がゼロの表面は緑色、負に帯電した表面は青色、正に帯電した表面は赤色で表示されています。

シミュレーションの手順としては、まず第一に、試料の形状および表面電荷を記述するデータファイルを用意しなくてはなりません。いきなり、試料の形状と表面電荷を同時に指定するのは難しいので、最初に、球体の形状データを作成し、次に、表面電荷分布を指定することにします。

球体の形状データの作成方法は以下の通りです。まず、KPFMSimulator.exeを起動します。[File]→[New]をクリックすると、“Create new project”というウィンドウが表示されますので、そのウィンドウ内の“Project name”の欄に、“sphere”と入力し“OK”ボタンをクリックします。すると、“Setup”というタブが表示されます。“Setup”タブ内の“Component”という項目を右

クリックして、[Add Tip]→[Spheroid]を選択します。すると、radius_c、radius_a、division_levelの値を入力するようにウィンドウが現れますが、デフォルトで設定されている値のまま"OK"ボタンをクリックします。再び、項目"Component"を右クリックして、今度は[Add Sample]→[Spheroid]を選択します。さらに、radius_cとし5.0[nm]、radius_aとして5.0[nm]、division_levelとして5を入力します。

この段階で、"Setup"タブ内の項目"Component"以下に、TipおよびSampleのデータが表示されます。そこで、項目"Component"→"Sample"→"Position"→"z"の値を"0"から"1"に変更します。そして、KPFM Simulatorウィンドウ内の上側のバーにある、三角形のボタンをクリックします。すると、シミュレーションが開始されますが、計算はすぐに途中でストップしてしまいます。今の場合、球体の形状データを作成するだけなので、計算が途中で止まってしまっても構いません。

"sphere"という名前のフォルダ内に、"sampleTemp.bem"という名前のファイルがあるはずです。これが、球体の形状データになります。ここまでの作業は、ディレクトリ SampleProject/macroKPFM/macroKPFM_LCPD/ macroKPFM_LCPD_Inorganic_005/ uniform_charge内の、sphere.proというファイルとして保存されています。

次に、形状データに、表面電荷分布の情報を加える作業に移ります。SampleTemp.bemというファイルをコピーして複製を作り、その名前をsphere.bemに変えます。KPFM Simulatorの上部のツールバーにある[Tool]をクリックして、[uniform_surface_charge_density]を選択します。"Open bem file"というウィンドウが現れますので、ここで、sphere.bemを選択します。すると、"Set uniform charge density"というウィンドウが現れます。ここでは、" $1.0\text{E}-5$ "と入力して"OK"ボタンをクリックしてください。以上の作業の結果、"sphere_uniform_charge.bem"という名前のファイルができています。このファイル内のデータは、球体の表面に、 $1.0\text{E}-5[\text{C}/\text{m}^2]$ の表面電荷を均一に分布させたものを表現しています。

しかし、このままでは、球面全体に均一な正の電荷を分布させた状態なので、北極付近と南極付近に、負と正の電荷を分布させたことにはなりません。そこで、ファイル

sphere_uniform_charge.bemを編集することになります。ファイル

sphere_uniform_charge.bemをコピーして複製を作り、sphere_pm_charge.bemという名前にします。ファイルsphere_pm_charge.bemは、試料である球体の境界要素の情報と、各境界要素上に配置される電荷量の情報を含んでいます。

ファイルsphere_pm_charge.bemをテキストエディタで開きます。ファイルの1行目は、境界要素を構成する点の総数が"182"と表示されています。その後、2行目から183行目までは、各点の位置座標が書かれています。ファイルの184行目には、境界要素の総数が"200"として表示されています。その後、185行目から384行目までは、各境界要素を構成する点の番号が順に並べられています。3個の番号が並んでいれば、その境界要素は三角形ということになります。4個の番号が並んでいれば、その境界要素は四角形ということになります。

ファイルの385行目以降は、各境界要素上に配置される電荷量を表しています。単位は[C/m²]です。ファイルの445行目から524行目までを"0"とします。また、525行目から584行目までは、絶対値はそのまま、符号を反転させるマイナスの記号を付与します。これで、試料の形状および表面電荷分布を表したデータが完成したことになります。なお、完成したファイルsphere_pm_charge.bemは、ディレクトリ

SampleProject/macroKPFM/macroKPFM_LCPD/ macroKPFM_LCPD_Inorganic_005内にも保存されています。

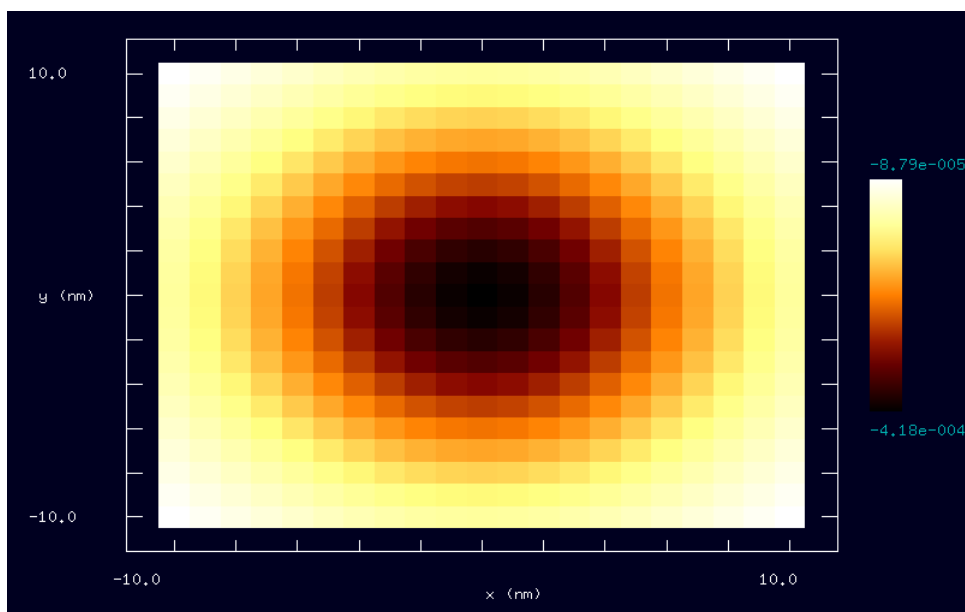
次に、シミュレーションを実行する方法の説明に移ります。今の時点で、KPFM Simulatorは、計算が途中でストップしているはずです。そこで、いったん計算を終了させるために、ツールバー内の四角いボタンを押します。そして、[File]→[Close]としてください。そして、改めて、[File]→[New]として、"Create new project"ウィンドウで、今度は、"Project name"を、"sphere_pm_charge_vertical_2"と入力してください。

すると、作業ディレクトリとしてsphere_pm_charge_vertical_2という名前のフォルダが作られます。そのフォルダ内に、先ほど編集作成したsphere_pm_charge.bemという名前のファイルを入れます。

KPFM Simulatorの"Setup"タブ内の、"Component"という項目を右クリックします。[Add Tip]→[Spheroid]を選択します。すると、radius_c、radius_a、division_levelの値を入力するようにウィンドウが現れますが、デフォルトで設定されている値のまま"OK"ボタンをクリックします。再び、項目"Component"を右クリックして、今度は[Add Sample]→[File]を選択します。すると、"Import file"というウィンドウが現れますので、ここで、sphere_pm_charge.bemを選択します。

以下に、シミュレーションを行うための細かな設定をします。まず、"Setup"タブ内から始めます。[Component]→[Tip]→[Position]で、x=-10[nm], y=-10[nm], z=15[nm]とします。[Component]→[Tip]→[ScanArea]で、w=20, d=20, h=0とします。[Component]→[Sample]→[Position]で、x=0[nm], y=0[nm], z=1[nm]とします。[Component]→[Sample]→[Property]で、relative_permittivity=3.8とします。これは、二酸化シリコン(SiO₂)の比誘電率に相当します。次に、"KPFM"タブに移ります。[tip]→[Ndiv]で、x=20, y=20, z=0とします。[tip]→[Voltage]で、maximum=1.0, Ndiv=5とします。これら以外の設定は、デフォルトのままで構いません。なお、これらの設定は、ディレクトリ SampleProject/macroKPFM/macroKPFM_LCPD/ macroKPFM_LCPD_Inorganic_005内の、sphere_pm_charge_vertical_2.proに保存されています。

以上の設定が終わったら、シミュレーションを開始します。ツールバー上の三角形のボタンをクリックします。すると、シミュレーションが開始されます。なお、計算を行う作業ディレクトリの絶対パスに、日本語の文字が含まれているとシミュレーションは途中で中断します。計算作業を行うフォルダ名は、英数字のみとします。計算結果を表示させたい場合は、ツールバーの[Display]→[Result View]で、lcpd.csvを選択します。計算が無事終了すれば、以下の図が表示されるはずです。



帯電したミオシン分子の LCPD 像シミュレーション

この節では、均一な表面電荷分布によって帯電したミオシン分子の LCPD(Local Contact Potential Difference、局所接触電位差)像を macroKPFM シミュレータで求める方法を説明します。この計算例は、SampleProject 内に収められている計算実施例 macroKPFM_LCPD_Polymer_002 に相当します。必要な project ファイルは、SPMsimulator がインストールされているフォルダ内の、ディレクトリ SampleProject/macroKPFM/macroKPFM_LCPD/ macroKPFM_LCPD_Polymer_002 内で見つけることができます。

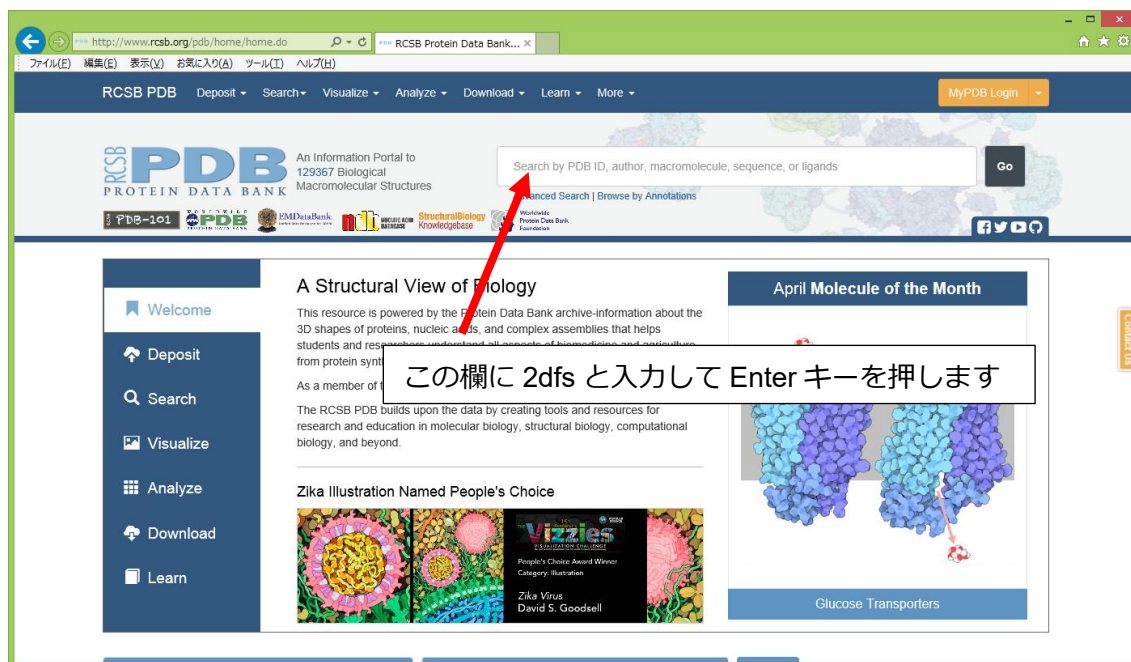
シミュレーションのおおまかな手順は以下の通りとなります。まずProtein Data Bankから、ミオシン分子の分子構造データをダウンロードします。この分子構造データをもとに、GeoAFMシミュレータで[nm]オーダーのAFM画像データを作成します。このAFM画像データを、境界要素法用データに変換します。次に、このミオシン分子の境界要素法データに、表面電荷分布情報を付け加えます。こうしてできあがったミオシン分子形状データを入力として、macroKPFMシミュレータを実行します。これにより、LCPD像が得られます。

まず、Protein Data Bankから、ミオシン分子の分子構造データをダウンロードします。イ

インターネット上の以下のURLにアクセスします。

<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

このProtein Data Bankのホームページ上において、PDB IDで検索するための入力用空欄が設けられています。ここでは、PDB IDとして2dfsを入力して検索します。以下の図を参考にしてください。



すると、以下の図のような、ミオシン分子のデータが保管されているホームページに移動します。Download Filesの項目をクリックして、PDB Formatを選択します。すると、2dfs.pdbという名前のファイルが自動的にダウンロードされます。



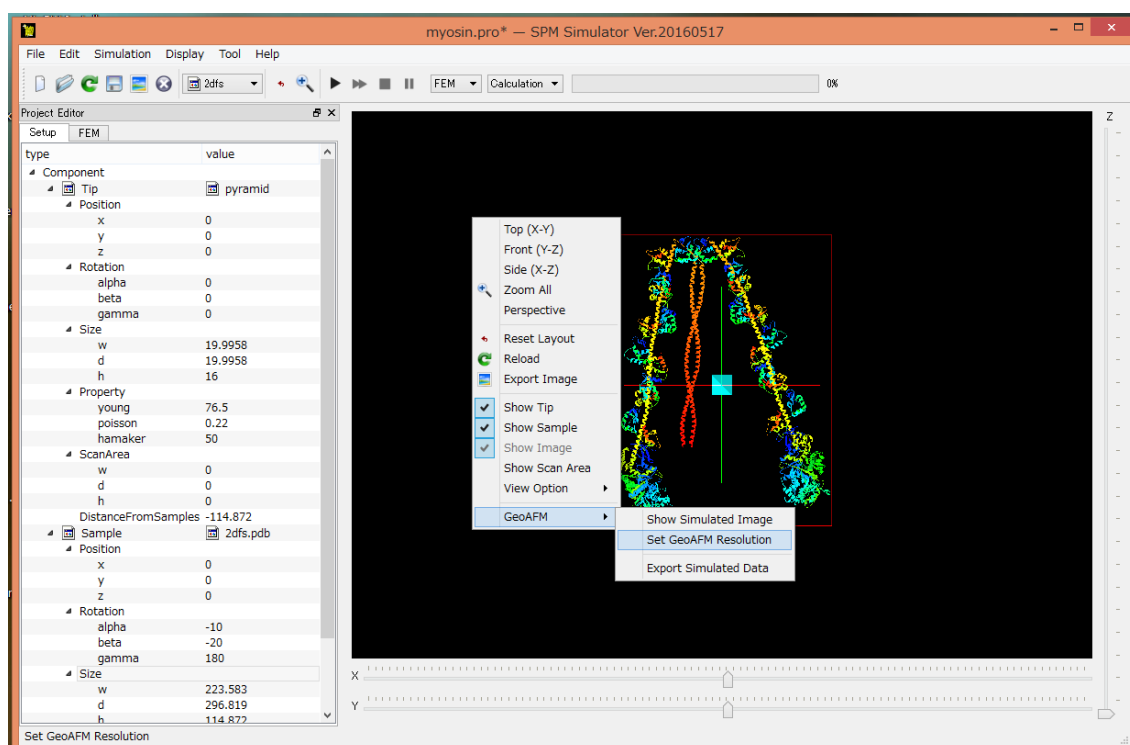
次に、ミオシン分子構造データファイル2dfs.pdbをGeoAFMシミュレータで読み込むことにします。まず、適当な作業ディレクトリを用意して、そこにmyosin_GeoAFMというフォルダを作ります。SPMSimulator.exeをダブルクリックして起動します。[File]→[New]とクリックすると、“Create new project”というウィンドウが表示されます。そのウィンドウの“Directory”という項目に、先ほど作成した作業ディレクトリ内のフォルダmyosin_GeoAFMを指定します。指定するには、“Directory”という項目の右端にある“Ref”というボタンをクリックして、「フォルダの選択」というウィンドウで作業ディレクトリ内のフォルダmyosin_GeoAFMを選択します。次に、Project nameとして“myosin”という文字列を入力します。

すると、作業ディレクトリ内のフォルダmyosin_GeoAFMの中に、myosinという名前のフォルダが作成されます。フォルダmyosinの中には、myosin.proというファイルがあるはずで、ここで、さきほどProtein Data Bankからダウンロードした2dfs.pdbという名前の分子構造ファイルを、フォルダmyosinの中に入れます。

この段階で、SPM Simulatorのウィンドウ上には、“Setup”タブが表示されているはずです。この“Setup”タブ内の“Component”という項目を右クリックして、[Add Tip]→[Pyramid]を選択します。パラメータとして、angleの値を入力するようにこのウィンドウが現れますが、

デフォルト値の32度で”OK”ボタンをクリックします。次に、再び”Setup”タブ内の”Component”という項目を右クリックして、今度は、[Add Sample]→[File]を選択します。すると、”Import file”というウィンドウが現れますので、ここで、先ほどの分子構造ファイル2dfs.pdbを選択します。

SPM Simulatorウィンドウ内の画面を右クリックして”Top(X-Y)”を選択すると、分子の全体像が表示されます。ここで、”Setup”タブ内のComponent→Sample→Rotationという項目内において、alphaを-10度、betaを-20度、gammaを180度に設定します。次に、再び、SPM Simulatorウィンドウ内の画面を右クリックして、[GeoAFM]→[Set GeoAFM Resolution]を選択します。すると、分解能を入力するウィンドウが現れます。ここでは、10[Ang]を入力します。このあたりの作業については、以下の図を参考にしてください。



ここで、GeoAFMの分解能を10オングストロームと設定しました。この分解能の値の設定の仕方には、以下の注意が必要です。実は、macroKPFMシミュレータは、数値計算方法として境界要素法を採用しています。ですので、ミオシンの分子のAFM像の表面を、三角形や四角形の境界要素に分解しなくてはなりません。この際、あまり、試料表面の凹凸が激

しいと、その境界要素上での物理量の積分地が発散する場合があります。ですので、GeoAFMシミュレータの分解能を、ある程度大きな値に設定して、試料表面の凹凸を緩やかにする必要があります。ここでは、分解能として10オングストロームという値を選びました。GeoAFMの分解能は、試料表面の形状に応じて試行錯誤で調整する必要があります。

次に、SPM Simulatorウィンドウ内の画面を右クリックして、[GeoAFM]→[Show Simulated Image]を選択します。すると、AFM画像がオレンジ色の等高線で表示されます。再び、SPM Simulatorウィンドウ内の画面を右クリックして、今度は[GeoAFM]→[Export Simulated Data]を選択します。すると、“Save File”というウインドウが表示されますので、myosinV_GeoAFM_10.cubeというファイル名で保存します。そして、SPM Simulatorを終了します。

ここまでの作業内容は、フォルダSampleProject/macroKPFM/macroKPFM_LCPD/macroKPFM_LCPD_Polymer_002/GeoAFM内に、ファイルとして保存されています。プロジェクトファイルmyosin.proを参考にすると良いでしょう。

次に、AFM画像データを、境界要素法データに変換します。KPFMSimulator.exeをダブルクリックして起動します。ツールバー上の[Tool]→[cube_to_bem]をクリックします。“Open cube file”というウインドウが表示されますので、ここで、先ほど作成したAFM画像データファイルmyosinV_GeoAFM_10.cubeを選択します。すると、myosinV_GeoAFM_10.bemというファイルが自動的に作成されます。これが、境界要素法データです。

次に、この境界要素法データに、均一電荷分布のデータを付け加えます。これには、KPFMSimulatorウィンドウ内のツールバー上の、[Tool]→[uniform_surface_charge_density]をクリックします。“Open bem file”というウインドウが表示されますので、ここで、先ほど作成した境界要素法データファイルmyosinV_GeoAFM_10.bemを選択します。すると均一分布電荷の値を入力するためのウインドウが表示されます。単位は[C/m²]です。ここでは、1.0E-6と入力します。すると、myosinV_GeoAFM_10_uniform_charge.bemという名前のファイルが自動的に作成されます。これで、試料の入力データが完成したことになります。

いよいよ、macroKPFMによるシミュレーション計算を行います。まず、作業ディレクトリ内に、myosin_KPFMという名前のフォルダを作成します。KPFM Simulatorのウィンドウのツールバー上で、[File]→[New]をクリックします。すると、“Create new project”というウィンドウが表示されます。まず、“Directoy”という項目を、先ほど作成したフォルダmyosin_KPFMに指定します。それには、“Directoy”という項目の欄の右端の“Ref”というボタンをクリックして、フォルダmyosin_KPFMを選択します。次に、“Project name”として、myosinV_GeoAFM_10_uniform_charge_2という文字列を入力します。

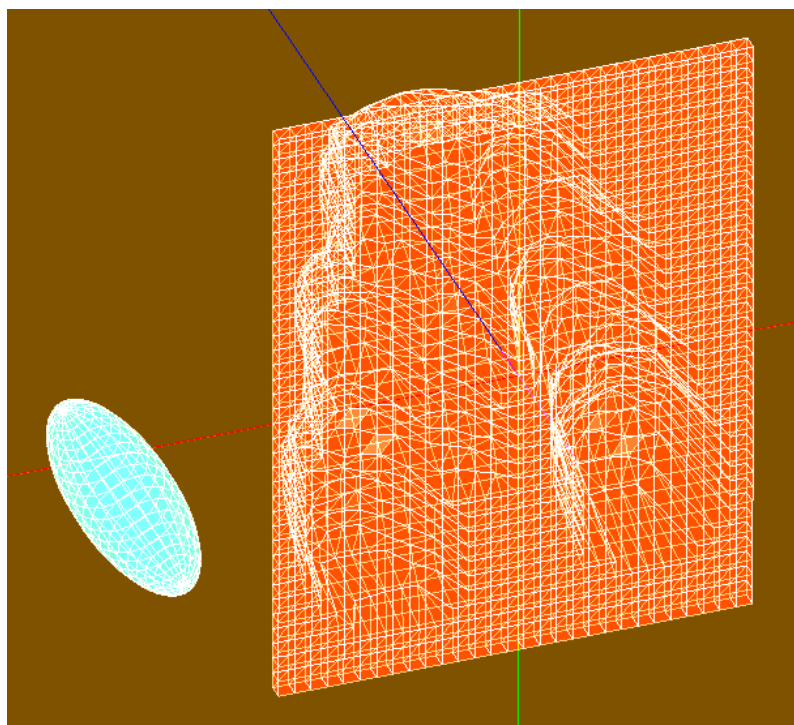
この時点で、KPFM Simulatorのウィンドウには、“Setup”タブが表示されているはずです。“Setup”タブ内の“Component”という項目を右クリックして、[Add Tip]→[Spheroid]を選択します。パラメータであるradius_c、radius_a、division_levelを入力するためのウィンドウが表示されますが、ここではデフォルト値の、10.0[nm]、3.0[nm]、5を選択します。これで、探針を設定できたことになります。

次に、試料データを入力します。そこで、すでに作成した試料データファイルmyosinV_GeoAFM_10_uniform_charge.bemを、作業ディレクトリ内のフォルダmyosin_KPFM/myosinV_GeoAFM_10_uniform_charge_2に入れます。試料データファイルmyosinV_GeoAFM_10_uniform_charge.bemは、作業ディレクトリ内のフォルダmyosin_GeoAFM/myosin_test内にあるはずです。“Setup”タブ内の“Component”という項目を右クリックして、[Add Sample]→[File]を選択します。“Import file”というウィンドウが表示されますので、フォルダmyosin_KPFM/myosinV_GeoAFM_10_uniform_charge_2内のファイルmyosinV_GeoAFM_10_uniform_charge.bemを選択します。

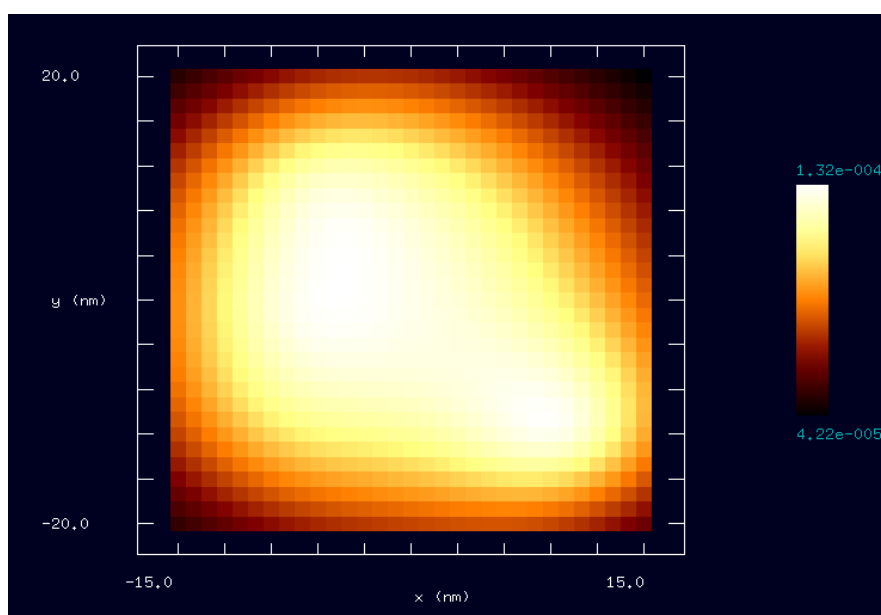
以下に、シミュレーションを行うための細かな設定をします。まず、“Setup”タブ内から始めます。[Component]→[Tip]→[Position]で、x=-15[nm]、y=-20[nm]、z=15[nm]とします。[Component]→[Tip]→[ScanArea]で、w=30、d=40、h=0とします。[Component]→[Sample]→[Position]で、x=0[nm]、y=0[nm]、z=0.5[nm]とします。[Component]→[Sample]→[Property]で、relative_permittivity=80.4とします。これは、水の比誘電率に相当します。次に、“KPFM”タブに移ります。[tip]→[Ndiv]で、x=30、y=30、z=0とします。[tip]→[Voltage]で、maximum=1.0、

Ndiv=5とします。これら以外の設定は、デフォルトのままで構いません。なお、これらの設定は、ディレクトリSampleProject/macroKPFM/macroKPFM_LCPD/macroKPFM_LCPD_Polymer_002内の、myosinV_GeoAFM_10_uniform_charge_2.proに保存されています。

KPFM Simulator上での探針、試料の位置関係は、以下の図の通りとなります。

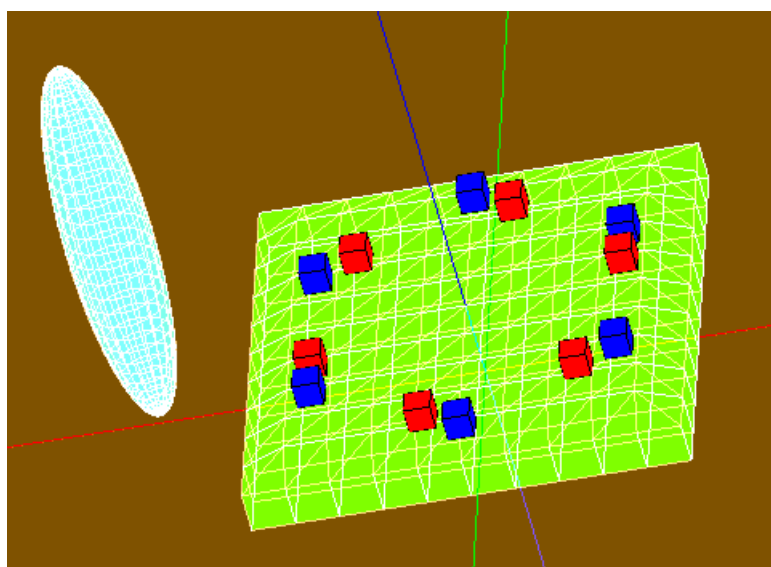


以上の設定が終わったら、シミュレーションを開始します。ツールバー上の三角形のボタンをクリックします。すると、シミュレーションが開始されます。なお、計算を行う作業ディレクトリの絶対パスに、日本語の文字が含まれているとシミュレーションは途中で中断します。計算作業を行うフォルダ名は、英数字のみとします。計算結果を表示させたい場合は、ツールバーの[Display]→[Result View]で、lcpd.csvを選択します。計算が無事終了すれば、以下の図が表示されるはずです。



DLVO 理論に基づいた、有機材料基板の上に 12 個の電荷を置いた場合の LCPD 像シミュレーション

この節では、下図のように、有機材料の基板の上に 12 個の正負の電荷を六角形状に並べたときの、LCPD 像をシミュレーションする方法を解説します。基板は電解質溶液中にあるとします。ここで紹介される計算事例のデータは、SampleProject フォルダ内の macroKPFM_DLVO_LCPD_Polymer_001 にまとめられています。



試料が電解質溶液中にある場合、溶液中のイオンが電気二重層を形成し、デバイ遮蔽と呼ばれる現象が生じます。デバイ遮蔽では、電荷間で働くクーロン力は、デバイ長さの範囲を超えると急激に弱まります。この状況を記述するには、DLVO(デリヤーギン・ランダウ・フェルウェー・オーバービーク、Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek)理論が有効とされています。ソルバーmacroKPFMには、DLVO理論の効果を考慮したモードとして、macroKPFM_DLVOというオプションが用意されています。本節で紹介される計算例は、このオプションを使ったシミュレーション方法の説明となります。

まず、試料の形状データを用意します。縦10[nm]、横10[nm]、高さ1.4[nm]の基板の立体構造データを作成します。基板は、縦、横方向には、幅1[nm]のメッシュで分割されるようにします。高さ方向には、メッシュ分割しないことにします。

基板の立体構造は、cube形式と呼ばれるファイルで準備します。SampleProjectフォルダ内の、macroKPFM_DLVO_LCPD_Polymer_001という名前のフォルダ内を見てください。そこに、cube_to_bemというフォルダが置かれています。そのフォルダ内部に、sample.cubeというファイルが置かれています。このファイルが、基板の立体構造形状データとなります。

Cube形式ファイルの書式は、以下の通りとなります。Cube形式ファイルは、通常のテキスト形式のファイルです。1行目、2行目は、「#」という記号だけを書き込みます。先頭の「#」以降に書かれた文字列は、コメントと解釈され、数値データにはなりません。

3行目に、以下の数値データを記入します。

```
0 -5.000000000000000e+001 -5.000000000000000e+001 +0.000000000000000e+000
```

3行目は、1個の整数値と3個の実数値が記入されています。先頭の整数値は、「0」を書き込みます。続く3個の実数値は、基板の隅の座標値を表しています。上の例では、 $x=-50[\text{\AA}]$ 、 $y=-50[\text{\AA}]$ 、 $z=0[\text{\AA}]$ を、基板の隅の座標値とする、という意味になります。実数値の単位は $\text{\AA}$ になります。この座標値が、基板形状の、x座標の最小値、y座標の最小値、z座標の最小値となります。

今の場合、基板の縦、横、高さは、 $100[\text{\AA}]$ 、 $100[\text{\AA}]$ 、 $14[\text{\AA}]$ です。ですから、基板の正方形の中心の、最も下の点の座標が、原点 $(x, y, z)=(0, 0, 0)$ になります。

4行目には、以下の数値データを記入します。

11 +1.0000000000000000e+001 +0.0000000000000000e+000 +0.0000000000000000e+000

先頭の「11」という整数値は、x方向のメッシュの点が11個であることを表しています。また、次に続く三つの実数値は、 $10[\text{\AA}]$ 、 $0[\text{\AA}]$ 、 $0[\text{\AA}]$ となっていますが、これは、x方向のメッシュの1格子分の差分が $10[\text{\AA}]$ であることを意味します。基板のx方向の幅は、 $100[\text{\AA}]$ です。これを、幅 $10[\text{\AA}]$ で分割すると、両端の点を含めて、合計11個の点が得られます。4行目の数値データは、これらのことを表現しています。

5行目には、以下の数値データを記入します。

11 +0.0000000000000000e+000 +1.0000000000000000e+001 +0.0000000000000000e+000

先頭の「11」という整数値は、y方向のメッシュの点が11個であることを表しています。また、次に続く三つの実数値は、 $0[\text{\AA}]$ 、 $10[\text{\AA}]$ 、 $0[\text{\AA}]$ となっていますが、これは、y方向のメッシュの1格子分の差分が $10[\text{\AA}]$ であることを意味します。基板のy方向の幅は、 $100[\text{\AA}]$ です。これを、幅 $10[\text{\AA}]$ で分割すると、両端の点を含めて、合計11個の点が得られます。5行目の数値データは、これらのことを表現しています。

6行目には、以下の数値データを記入します。

1 +0.0000000000000000e+000 +0.0000000000000000e+000 +0.0000000000000000e+000

先頭の「1」という整数値は、z方向のメッシュの点が1個であることを表しています。すなわち、この場合、z方向にはメッシュ分割しないことになります。メッシュ分割しないので、1格子分の幅は指定する必要がありません。したがって、続く三つの実数値は、0[Å]、0[Å]、0[Å]となります。

7行目は空行として、それ以下の行に、各格子点でのz軸方向の高さ情報を入力します。まず、3行目で指定した基板の隅の座標から数えて、x方向の1番目の格子の高さ情報を記入します。X方向に1番目の格子においては、y方向に11個のメッシュ上の点が存在します。そこで、3行目で指定した基板の隅の座標から数えて、y方向に合計11個の点上の、z方向の高さ情報を順番に記入します。今の場合、x方向に1番目の格子点上の、y方向に合計11個の点では、すべて高さを0[Å]と設定します。ですから、「0」という数値が11行続くことになります。

この後、空行を一つ入れて、x方向に2番目の格子の高さ情報を入力します。今の場合、「0」を1行書き込んで、それから、「4」を9行続けて書き込んで、最後に、再び、「0」の行を1行付け加えます。これは、x方向に2番目で、y方向に伸びる格子の列は、両端の高さが0[Å]で、その間の9個の点の高さは4[Å]であることを表します。

以下に、「0」が1行、「4」が9行、再び、「0」が1行の、合計11行の段落を、合計9個続けて書きます。各段落は、1行の空行で分離します。そして、最後に、「0」が11行続く段落を一つ書き加えます。

なお、参考のため、sample.cubeファイルの最初の30行を以下に書き出します。

```

# Gaussian Cube file
#
0 -5.000000000000000e+001 -5.000000000000000e+001 +0.000000000000000e+000
11 +1.000000000000000e+001 +0.000000000000000e+000 +0.000000000000000e+000
11 +0.000000000000000e+000 +1.000000000000000e+001 +0.000000000000000e+000
1 +0.000000000000000e+000 +0.000000000000000e+000 +0.000000000000000e+000

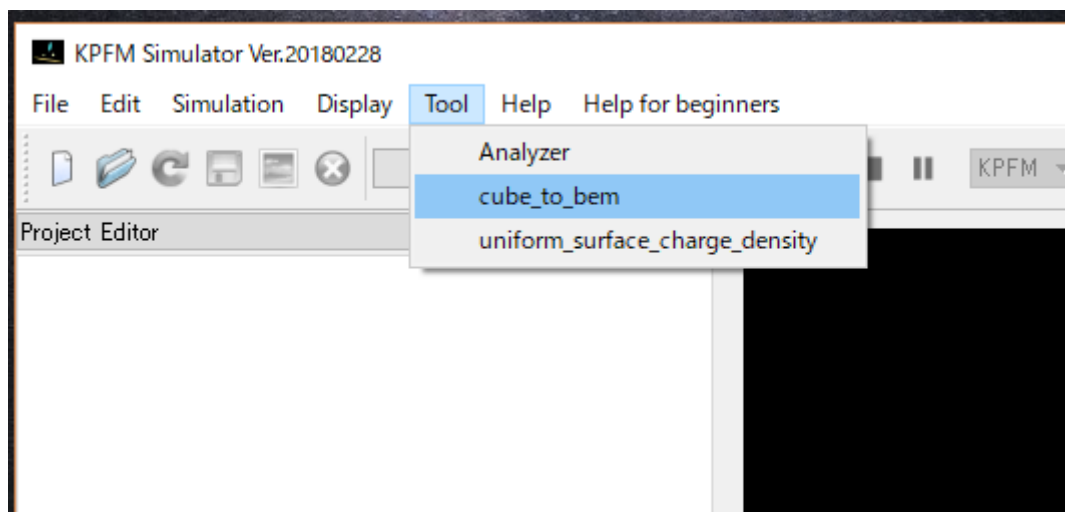
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000

+0.000000000000000e+000
+4.000000000000000e+000
+4.000000000000000e+000
+4.000000000000000e+000
+4.000000000000000e+000
+4.000000000000000e+000
+4.000000000000000e+000
+4.000000000000000e+000
+4.000000000000000e+000
+4.000000000000000e+000
+4.000000000000000e+000
+0.000000000000000e+000

```

これで、cube形式の基板形状データファイルが出来上がりました。このcubeファイルは、3次元の格子のデータです。一方、macroKPFMは、境界要素法シミュレータなので、2次元の境界要素の形状データを用意してはなりません。境界要素形状データは、bem形式というファイルで定義されます。そこで、macroKPFMに用意されているcube_to_bemというツールで、cube形式ファイルをbem形式ファイルに変換します。

それには、まず、SPMSimulatorフォルダ内にインストールされている実行ファイルKPFMSimulator.exeをダブルクリックして立ち上げます。すると、下の図のようなグラフィック・ユーザー・インターフェースが起動しますので、「Tool」をクリックします。続いて、プルダウンメニューが表示されますので、その中から、「cube_to_bem」をクリックして選択してください。すると、ファイルを指定する画面が現れますので、さきほど作った、sample.cubeファイルを選択します。すると、sample.bemというファイルが生成されます。



ここで、次の点に注意します。Sample.cubeで作成した基板のサイズは、縦、横10[nm]、高さ0.4[nm]でした。一方、sample.bemで指定される基板のサイズは、縦、横10[nm]、高さ1.4[nm]となります。これは、cube_to_bemというツールで3次元格子構造を、2次元の境界

要素に変換する際、高さ方向は、メッシュのxy方向の1格子長さだけ、かさ上げされる仕組みになっているからです。今の場合、xy方向のメッシュの単位長さは1[nm]でした。そこで、もともとの基板高さ0.4[nm]に、1[nm]分だけかさ上げされたことになります。

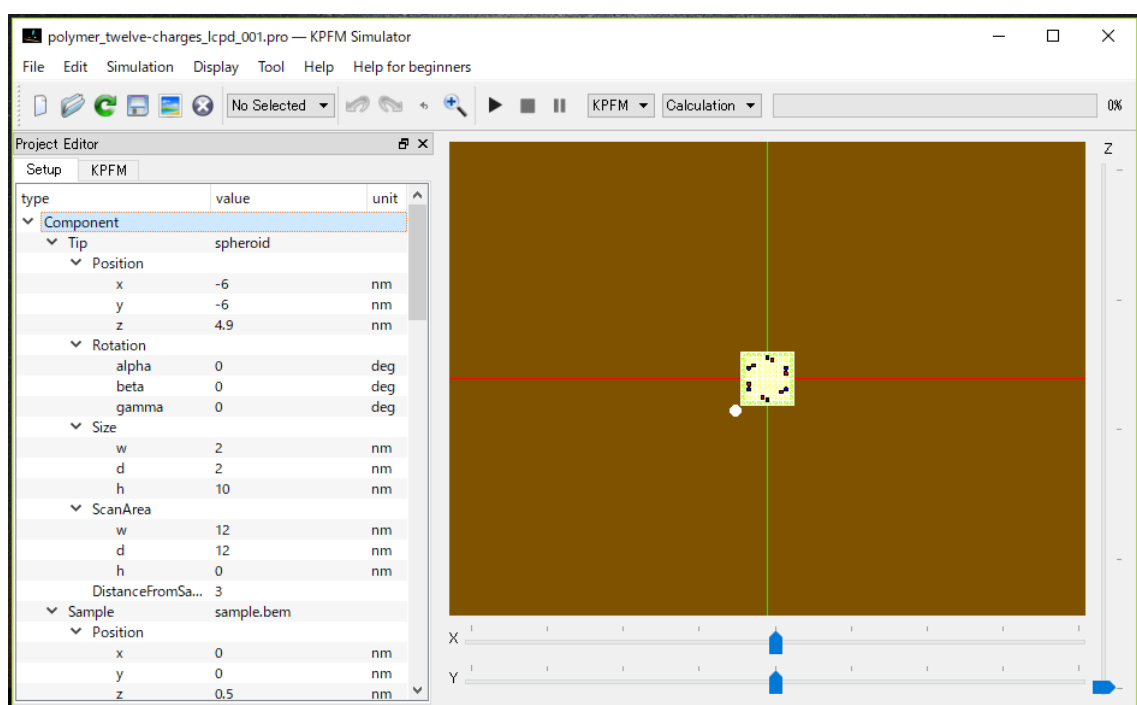
なお、cube形式ファイルでの長さの単位は[Å]でしたが、macroKPFMソルバーでの長さの単位は[nm]に統一されています。

次に、いよいよシミュレーションデータを入力します。シミュレーションに必要な物性値データは、全て、projectファイルに集約されています。今回の例のprojectファイルは、以下のフォルダ内に収められています。

SampleProject/macroKPFM/macroKPFM_DLVO_LCPD/macroKPFM_DLVO_LCPD_Polymer_001

このフォルダ内のpolymer_twelve-charges_lcpd_001.proというファイルが、それにあたります。

このprojectファイルは、テキスト形式で、一般的なテキスト・エディターで編集できます。しかし、ここでは、KPFMSimulator上から、このprojectファイルを見ることにします。それには、SPMSimulatorフォルダ内にインストールされている実行ファイルKPFMSimulator.exeをダブルクリックして立ち上げます。[File]→[Open]で、polymer_twelve-charges_lcpd_001.proを開きます。すると、以下の画面が現れます。



[Setup]というタブをクリックします。まず探針の情報を確かめます。[Tip]として、spheroidが選択されています。これは、探針形状が回転楕円体であるという意味です。[Position]として、 $x=-6$, $y=-6$, $z=4.9$ が設定されています。この[Position]の座標は、探針先端部分の初期時刻での位置を表しています。回転角度を表す[Rotation]では、 $\alpha=0$, $\beta=0$, $\gamma=0$ と設定されています。これらの角度は、それぞれ、 x 軸、 y 軸、 z 軸を中心とした回転角度を表しています。[ScanArea]では、探針が走査する範囲を指定します。今の場合、 $w=12$, $d=12$, $h=0$ で、これは、探針の初期位置から、縦横12[nm]の正方形の範囲でスキャンを行うという意味になります。

[Tip]のspheroidという項目をマウスで右クリックすれば、プルダウンメニューが現れて、探針形状を変えることができます。例えば、[Replace]→[Spheroid]と選択すれば、回転楕円体が再定義できて、回転楕円体の半径を変えることができます。[Position]、[Rotation]、[ScanArea]の各項目の数値は、マウスでダブルクリックすれば、その値を変えることができます。

次に、[Sample]のデータについて見てみます。今の例では、[Sample]として、sample.bemが指定されています。この項目をマウスで右クリックすれば、例えば、別のbem形式ファイルを指定することができます。[Position]や[Rotation]の項目は、[Tip]の場合と同じです。

ここで、一つ注意があります。[Sample]の[Position]のz座標は、0でなく、0.5[nm]とします。これは、z=0に、自動的に、電位が0の電極が置かれるためです。

項目[Property]で、relative_permittivityを指定します。これは、試料の比誘電率です。ここでは、80.4という値が与えられています。

その下の、[Point_Charge]は、点電荷を指定する項目です。点電荷の位置座標、x、y、zを指定します。また、chargeでは、素電荷を単位として電荷の値を指定します。この例では、12個の点電荷が指定されています。

次に、[KPFM]というタブをクリックしてください。まず先頭に、[simulation_mode]という項目があります。ここでは、macroKPFM_DLVOを指定します。

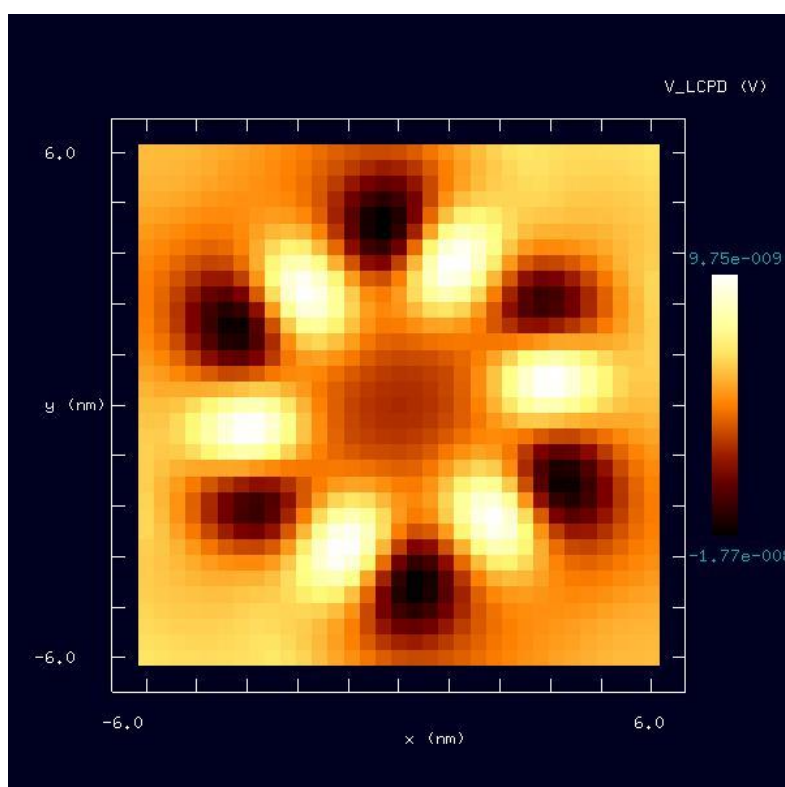
次に、[tip]という項目が続きます。[Ndiv]として、x=32、y=32、z=0を指定しています。これにより、探針をスキャンする場合、走査範囲をx、y方向に32分割して計算を行うことになります。[voltage]はmaximumを0.5[V]として、Ndivを5と指定しています。これは、LCPD像を求める際の印加電圧に関する情報です。

次の[environment]という項目で、relative_permittivityを80.4としています。これは、電解質溶液の比誘電率のことです。

次の[DLVO_parameters]で、電解質溶液の物性値を指定します。number_density_ionは、電解質溶液のイオン濃度で、単位は[M]=[mol/dm³]です。Valency_ionは、イオン電荷を表します。ここには、正の整数の値が入ります。例えば、溶液中に溶け込んでいるイオンが正のナトリウムイオンなら、そのイオン電荷は+1なので、valency_ionは+1となります。Temperatureは温度のことです。室温なら、300[K]を入力します。

これで、入力パラメーターの準備は完了です。あとは、ツールバーの上の三角形のボタンをクリックして、シミュレーションを開始してください。シミュレーションの実行が終了しますと、log.txtというファイルが生成されます。Log.txtファイルはテキスト形式で、通常のテキスト・エディターで読むことができます。Log.txt内で、「Debye_length」というキーワードを検索してください。そこに、デバイ長さが[nm]単位で表示されています。

計算結果を表示させたい場合は、ツールバーの[Display]→[Result View]で、lcpd.csvを選択します。シミュレーション結果として得られるLCPD像は、以下のようになります。



DLVO 理論およびファンデルワールス力を考慮した、無機材料基板上に 12 個の電荷を置いた場合の、探針が感じる力の像

本節では、電解質溶液中に置かれた無機材料基板の上に、12個の正負の電荷が置かれた場合の、探針が感じる力の像をシミュレーションします。シミュレーション計算では、溶液中のイオンのふるまいを記述するDLVO理論と、ファンデルワールス力の効果を考慮することにします。この計算例は、SampleProjectフォルダ内の、macroKPFM_DLVO_vdW_Force_Inorganic_002としてまとめられています。

DLVO理論とファンデルワールス力の両方の効果を考慮する計算は、simulation_modeとして、macroKPFM_DLVO_vanderWaalsを選択します。この、macroKPFM_DLVO_vanderWaalsというオプションを使用する際は、以下の注意が必要です。

(1) 試料形状データは、GeoAFMから作られたcube形式ファイルを、cube_to_bemでbem形式に変換したファイルしか使用できません。

(2) macroKPFMソルバー上においては、試料形状データを、x軸およびy軸を中心として回転させることはできません。Z軸を中心とする回転は可能です。試料を、x軸またはy軸を中心として回転させたい場合は、GeoAFMでcube形式の形状データを生成する前に、回転操作を行ってください。

(3) 探針形状は、回転楕円体に限ります。

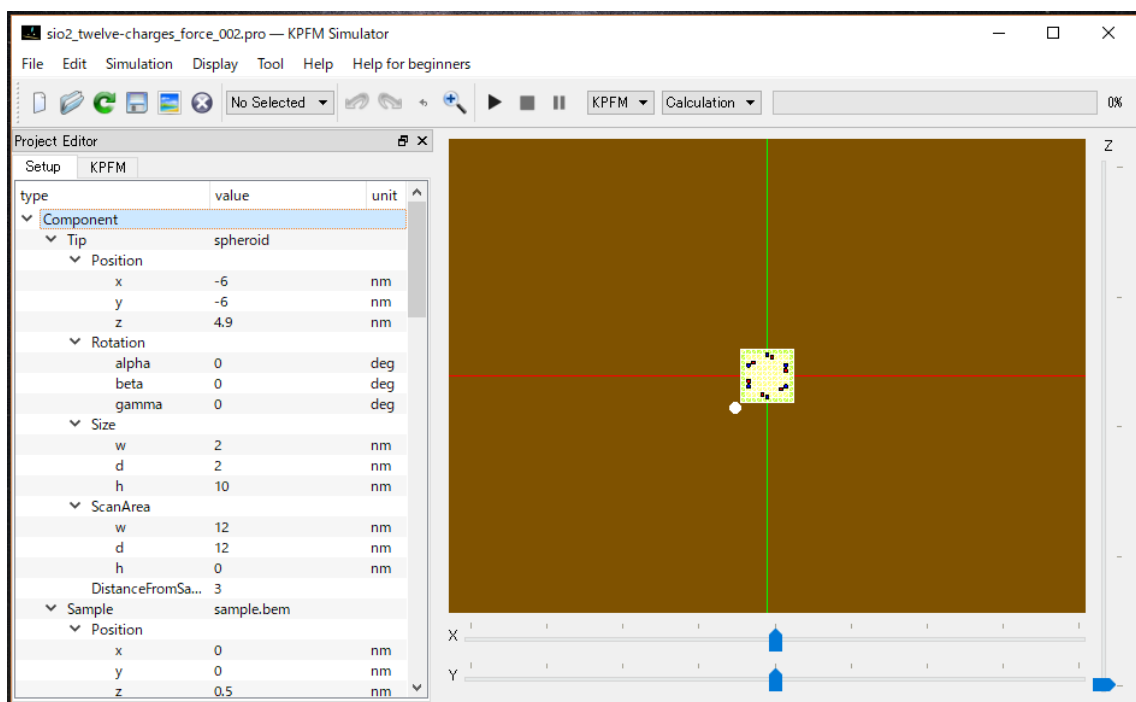
では、シミュレーション方法を、順を追って説明します。

まず、無機材料基板の形状データを用意します。これは、前の節で説明した、sample.cubeおよびsample.bemの作り方に、そのまま従ってください。

SPMSimulatorがインストールされているフォルダ内の実行ファイルKPFMSimulator.exeをダブルクリックして、macroKPFMソルバーを立ち上げてください。[File]→[Open]で、以下のフォルダ内のprojectファイルを開いてください。

SampleProject/macroKPFM¥macroKPFM_DLVO_vdW_Force/macroKPFM_DLVO_vdW_Force_Inorganic_002

Projectファイルの名前は、sio2_twelve-charges_force_002.proです。すると、以下の画面が現れます。



Projectファイルに入力する物性値は、前の節と基本的に変わりありません。違いは以下の通りです。まず、KPFMタブをクリックしてください。以下の項目に注意してください。

(1) simulation_modeは、macroKPFM_DLVO_vanderWaalsを選択します。

(2) voltageは、maximumを-0.25[V]とします。また、Ndivを0とします。この、Ndivを0とすると、探針の感じる力が計算結果として得られます。Ndivを0以外の正の整数とすると、LCPD像が計算されます。

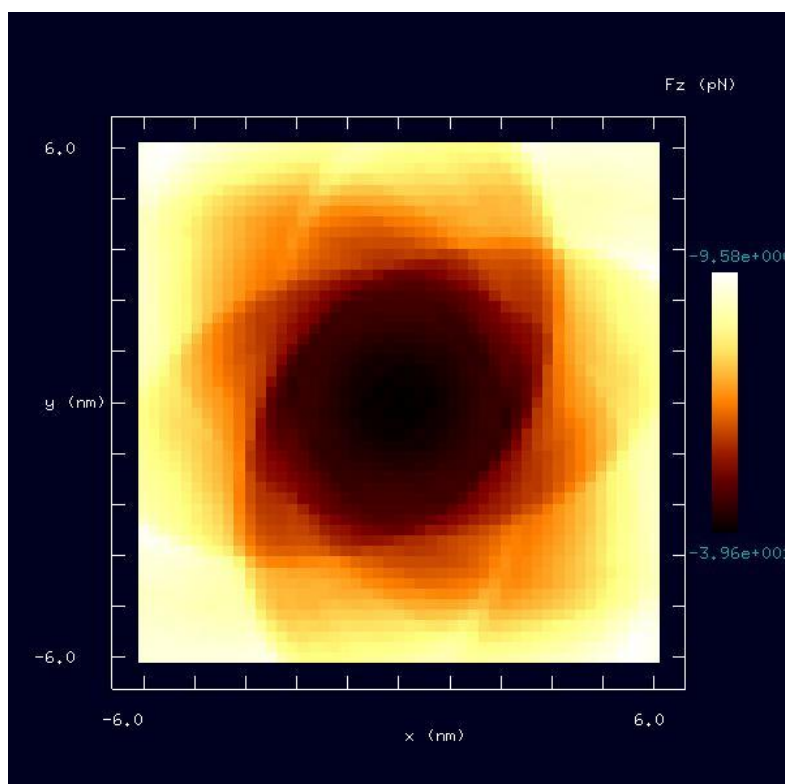
(3) van_der_Waals_parametersという項目があります。ここで、探針と試料ののハーマーカー一定数を、hamaker_tipおよびhamaker_sampleとして与えます。単位は[zJ]です。また、z_divという値も入力します。このz_divは、試料の体積要素の高さ方向の分割数です。Z_div=10くらいでいいでしょう。

なお、次の点にも注意してください。Setupタブをクリックして、[Sample]のrelative_permittivityを見てください。比誘電率は、3.8になっているはずです。これは酸化シ

リコンの比誘電率に相当します。この値を代入することで、試料基板が酸化シリコンと見なせるのです。

ツールバーの上の三角形のボタンをクリックして、シミュレーションを開始してください。シミュレーションの実行が終了しますと、log.txtというファイルが生成されます。Log.txt ファイルはテキスト形式で、通常のテキスト・エディターで読むことができます。Log.txt 内で、「Debye_length」というキーワードを検索してください。そこに、デバイ長さが[nm] 単位で表示されています。

計算結果を表示させたい場合は、ツールバーの[Display]→[Result View]で、force_z.csvを選択します。シミュレーション結果として得られる、探針が感じる力の像は、以下のようになります。



5 原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータ

はじめに

この節では「原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータ」で計算することのできる事例を、ソフトウェアに同梱しているプロジェクトファイルから選んで、紹介いたします。このシミュレータでは探針を試料に近づけることによる試料分子の変形を考慮したシミュレーションが可能です。試料分子の変形は、計算手法の違いによって、次の二種の計算モードを選択することができます。

1. 構造最適化 AFM 像シミュレータ・・・分子内部のエネルギーが最小になるような原子配置を探索することにより、安定な分子構造を求める方法
2. 分子動力学 AFM 像シミュレータ・・・原子一つ一つについてニュートンの運動方程式を解くことにより、分子構造の時間変化を求める方法

このシミュレータでの計算手順は大まかには以下のような流れになっています。

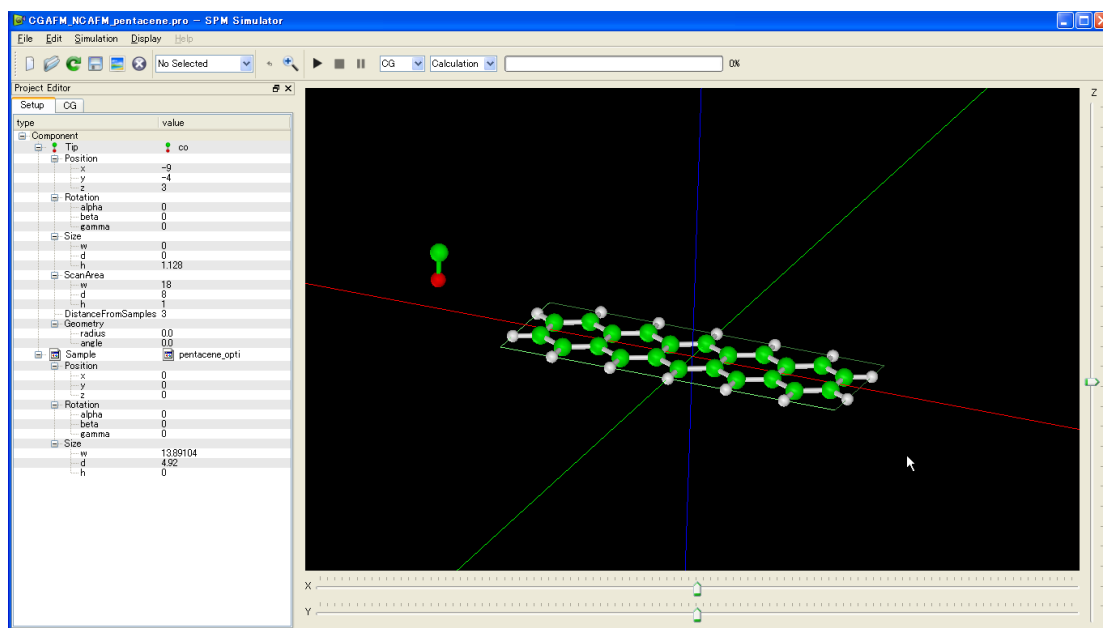
- i. 探針モデルと試料モデルを配置する(Setup タブでの設定)
- ii. その他の入力パラメータを設定する(各シミュレータのタブでの設定)
- iii. 計算を実行する
- iv. 計算終了後、結果を見る

なお、計算に必要な入力パラメータの詳細な説明につきましては、「リファレンスマニュアル」を参照してください。

真空中にあるペンタセンの周波数シフト像計算の例

構造最適化 AFM 像シミュレータによる、有機分子試料を対象とした真空中の原子分解能 AFM 計算の例を紹介します。(ここで紹介している例はプロジェクトファイル `SampleProject¥CG¥NC_pentacene¥NC_pentacene.pro` に対応しています。)

探針には、先を CO で修飾したものを想定し CO 分子を用い、試料はペンタセン分子です。ここでは、ペンタセン分子は構造が変化しないとして、各原子の座標は固定するように設定します。



入力パラメータの設定は画面左の"Project Editor"で行います。主なパラメータ設定項目は次の通りです。(詳細は「リファレンスマニュアル」を参照ください)

探針の走査開始位置

探針の走査範囲(Setup → Tip → ScanArea)

系の環境(CG → AFMMode)

スキャンモード(CG → Tip_Control → scanmode)

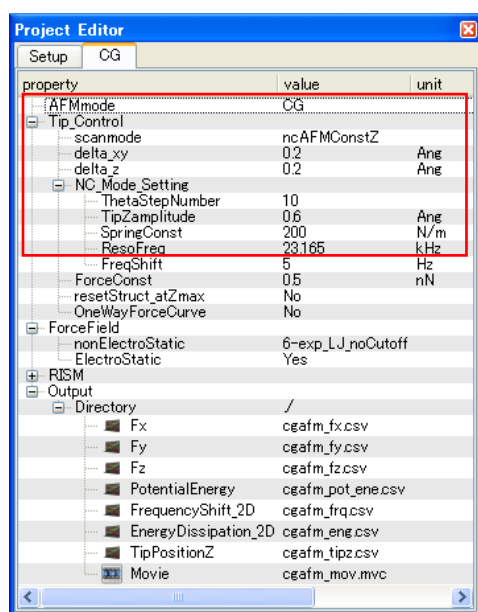
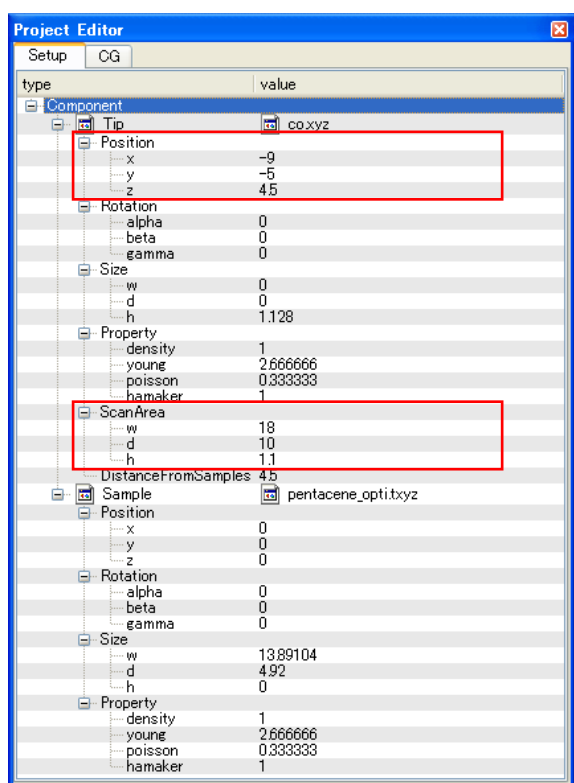
解像度(CG → Tip_Control → delta_xy)

探針の鉛直方向移動数(CG → Tip_Control → NC_Mode_Setting → ThetaStepNumber)

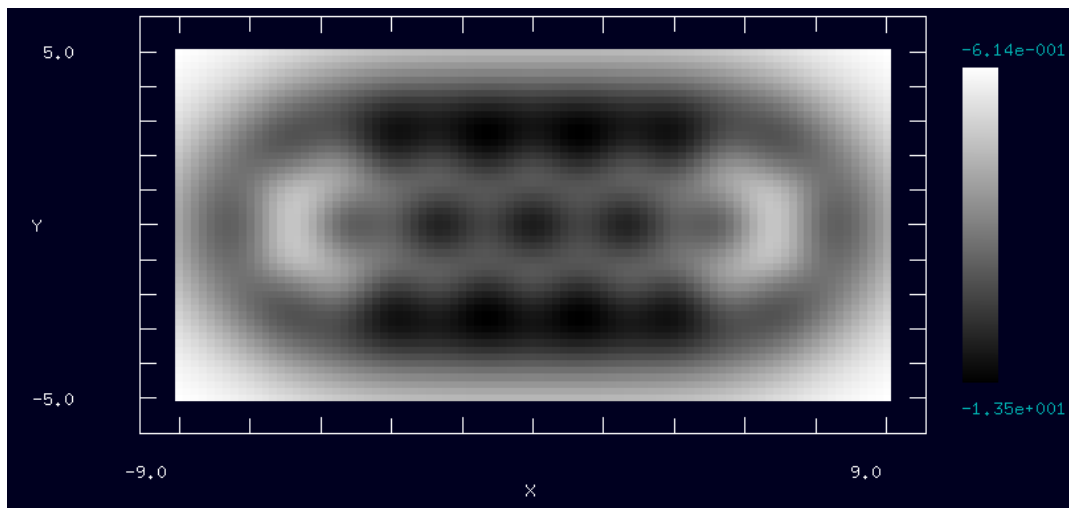
探針の振幅(CG → Tip_Control → NC_Mode_Setting → TipZamplitude)

カンチレバーのバネ定数(CG → Tip_Control → NC_Mode_Setting → SpringConst)

共鳴周波数(CG → Tip_Control → NC_Mode_Setting → ResoFreq)



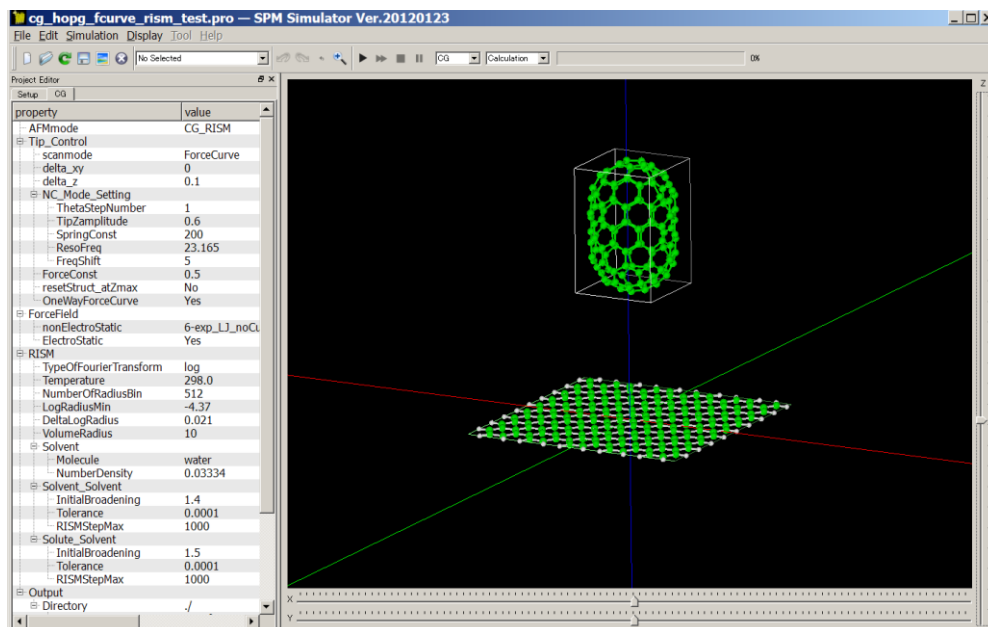
この計算設定条件による周波数シフト像のシミュレーション結果は、Result ビューで参照することができます。(メニュー → Display → Result を選択し、表示された Result ビュー画面上部のボックスから"test_frq.csv"を選択)



水中フォースカーブ計算の例

同じく、構造最適化 AFM 像シミュレータを用いた例として、ここでは水中 AFM 計算の例を紹介します。(ここで紹介している例はプロジェクトファイル SampleProject¥CG¥HOPG_RISM¥HOPG_RISM.pro に対応しています。) 探針にはカーボ

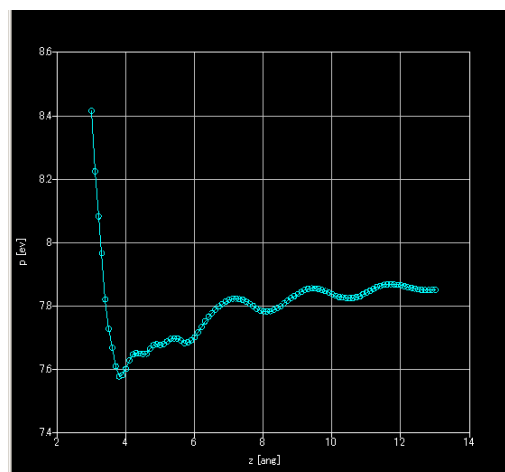
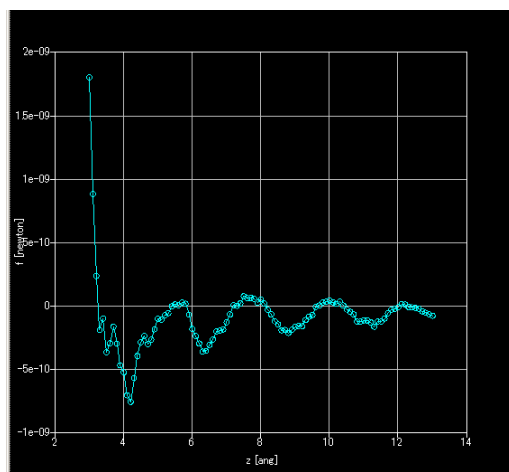
ンナノチューブを想定し、試料はグラフェンシート(HOPG)です。ここでは、構造が変化しないとして、各原子の座標は固定するように設定します。



入力パラメータの設定は画面左の"Project Editor"で行います。水中計算を行うためには系の環境(CG → AFMMode)

の値を CG_RISM に設定する必要があります。水中計算ではほぼ全てのパラメータが計算に影響しますので、「リファレンスマニュアル」を参照の上、ご設定ください。ここではサンプルプロジェクトにあるように、探針を鉛直方向に下げていったときのフォースカーブ計算の結果を掲載します。下左図が探針に働く力の鉛直方向成分、下右図が系の全自由エネルギーの値です。水中測定の特徴である振動的な振舞いが再現されています。

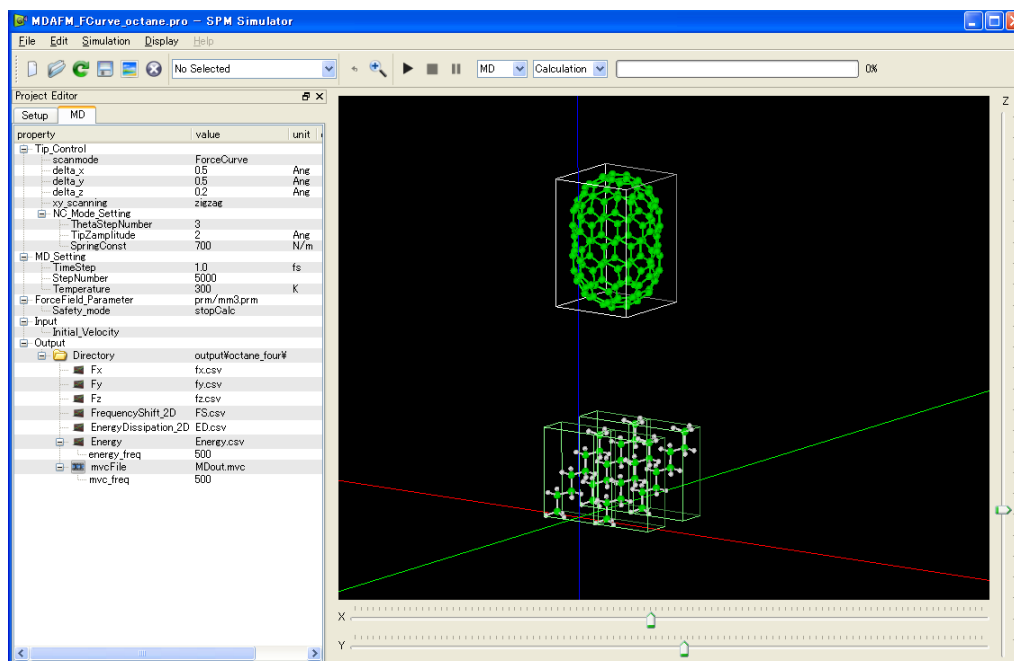
なお、参考データとして水分子に対する相関関数の計算結果が結果の出力されるディレクトリに CG_RISM_Corr_VV.csv という名前で出力されます。(ただし、このファイルのデータは GUI で表示できません。)



アルカン分子のフォースカーブ計算の例

分子動力学 AFM 像シミュレータによる、有機分子試料を対象とした試料分子の変形とフォースカーブを予測する計算例を紹介します。(ここで紹介する例はプロジェクトファイル SampleProject¥MD¥FCurve_octane4¥FCurve_octane4.pro に対応しています。)

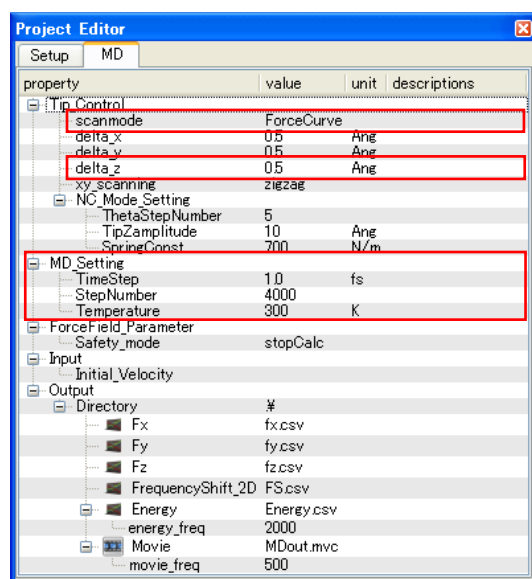
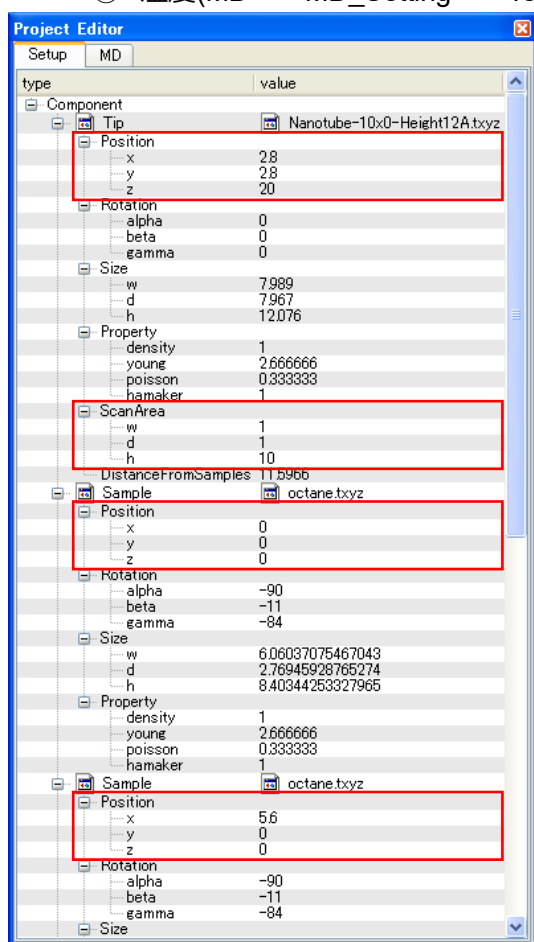
探針にはカーボンナノチューブを想定し、試料にはオクタン4分子を用います。ここでは、オクタン分子の一方の端が基盤に固定されていると考え、端の原子を固定するように設定し、4つの分子を並べて配置します。固定した原子とは反対の方向からカーボンナノチューブ探針を近づけ、探針に作用する力を計算します。



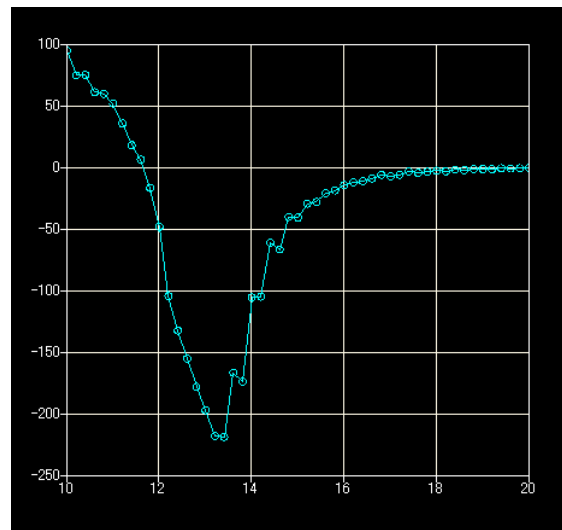
入力パラメータの設定は画面左の"Project Editor"で行います。主なパラメータ設定項目は

次の通りです。(詳細は「リファレンスマニュアル」を参照ください)

- ① 探針の移動開始位置(Setup → Tip → Position)
- ② 探針の移動範囲(Setup → Tip → ScanArea -> h)
- ③ 各試料の位置(Setup → Sample → Position)
- ④ スキャンモード(MD → Tip_Control → scanmode)
- ⑤ 解像度(MD → Tip_Control → delta_z)
- ⑥ 時間刻み幅(MD → MD_Setting → TimeStep)
- ⑦ 探針位置あたりの計算ステップ数(MD → MD_Setting → StepNumber)
- ⑧ 温度(MD → MD_Setting → Temperature)



この計算設定条件によるフォースカーブのシミュレーション結果は、Result ビューで参照することができます。(メニュー → Display → Result を選択し、表示された Result ビュー画面上部のボックスから”test_fz.csv”を選択))



フォースカーブ計算中の探針と試料の動きは、Replay を選択し再生することにより見ることができます。

6 量子論的 SPM 像シミュレータ

はじめに

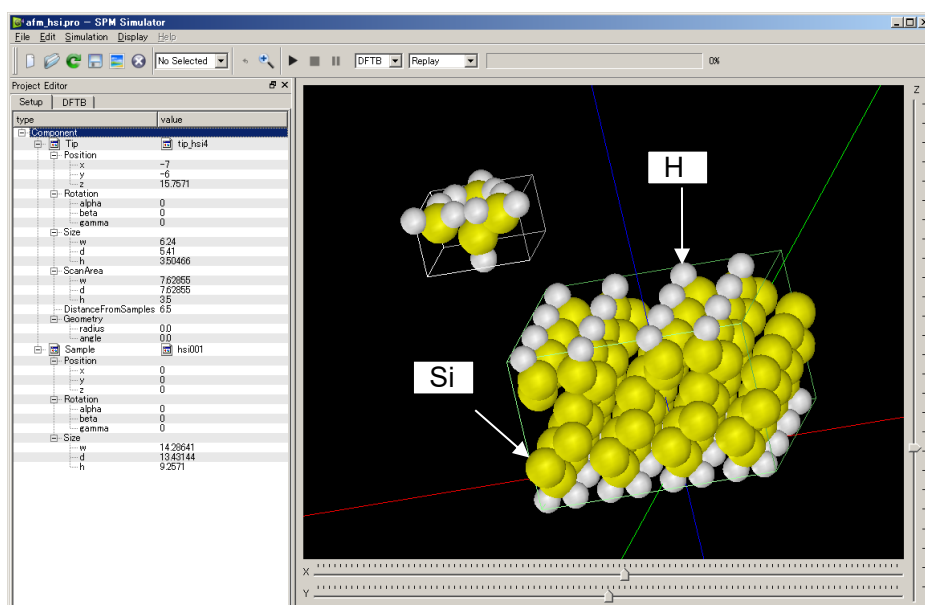
この節では「量子論的 SPM 像シミュレータ」で計算することのできる事例を、ソフトウェアに同梱しているプロジェクトファイルから選んで、紹介いたします。「量子論的 SPM 像シミュレータ」での計算手順は大まかには以下のような流れになっています。

- i. 探針モデルと試料モデルを配置する(Setup タブでの設定)
- ii. その他の入力パラメータを設定する(DFTB タブでの設定)
- iii. 実行を開始する
- iv. 計算終了後、結果を見る

グラフィカルユーザーインターフェースの具体的な操作方法は前節で紹介しています。なお、計算に必要な入力パラメータの詳細な説明につきましては、「リファレンスマニュアル」を参照してください。

AFM (周波数シフト像) 計算の例

はじめに、本ソフトウェアの他のシミュレータにも備わっている AFM 計算(周波数シフト像の予測)の例を紹介します。(この例は同梱されているプロジェクトファイル



SampleProject¥DFTB¥afm_hsi¥afm_hsi.pro によるものです。) 他のシミュレータでは行うことのできない精密な AFM シミュレーションを必要とする場合にご利用ください。

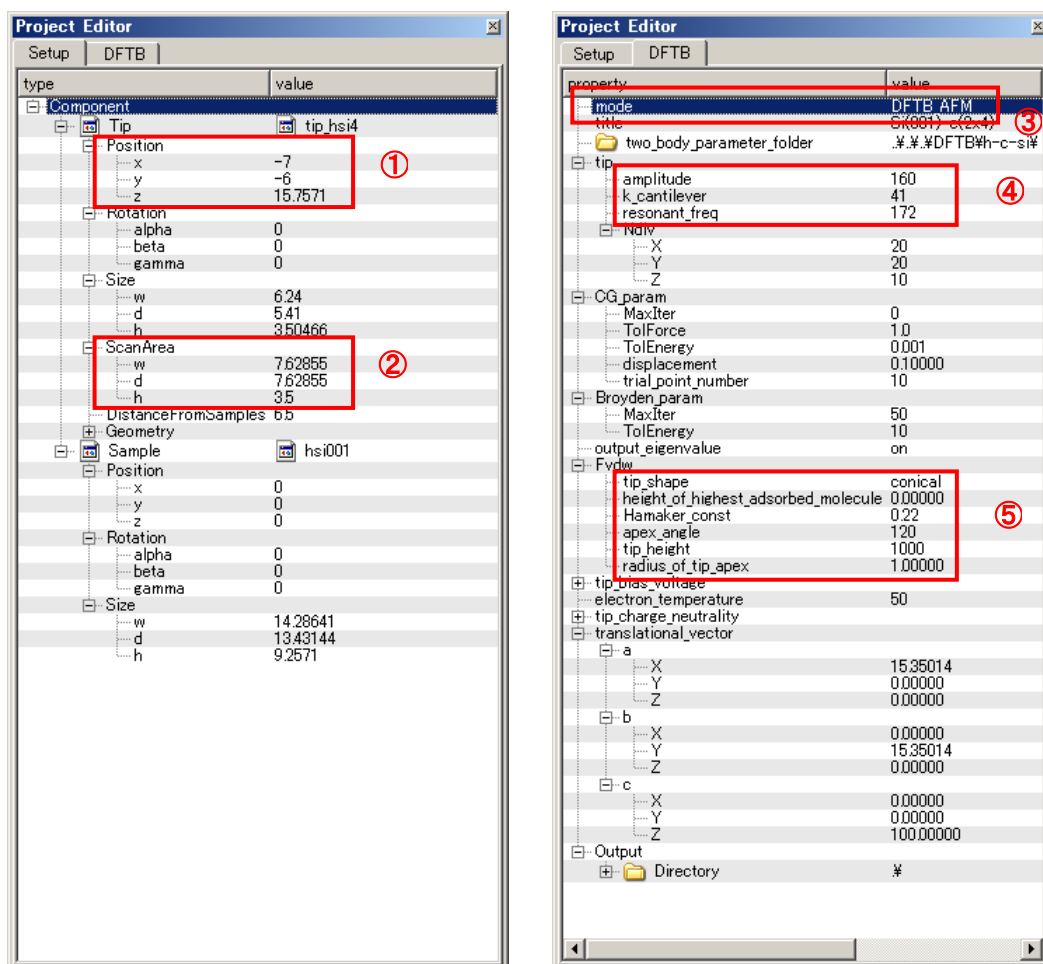
探針は、水素が吸着したシリコン探針の先端をモデル化したものであり、試料は水素終

端されたシリコン(001)表面です。

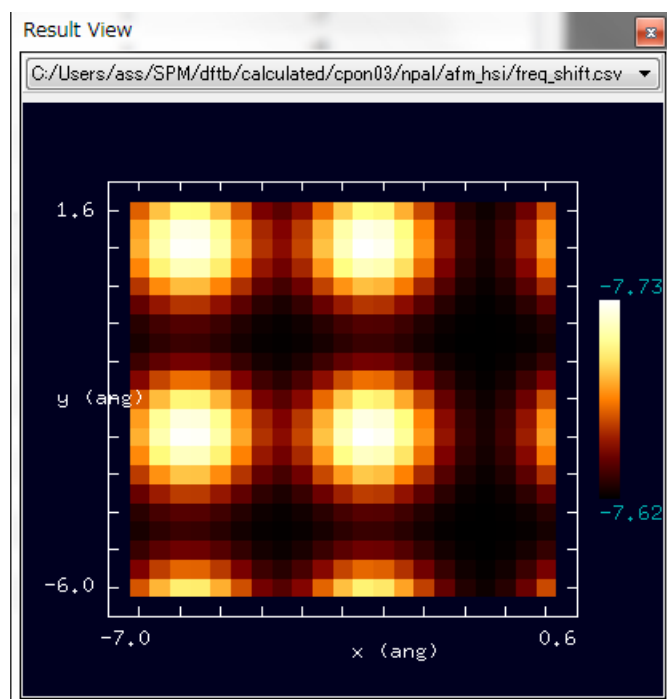
この計算例で注意すべきパラメータは以下の図の通りです。特に重要なものは赤枠で囲った箇所で、大まかな意味は以下のとおりです。(別の系の計算を行う場合、囲っていない箇所のパラメータも注意する必要があります。詳しくは「リファレンスマニュアル」を参照してください。)

- ① 探針走査範囲の始点
- ② 探針走査範囲のサイズ。周波数シフト像を計算する際にはタグ h の値を 0 より大きくしてください。
- ③ 計算モード。DFTB_AFM を選択してください。
- ④ カンチレバーの物理パラメータ
- ⑤ 探針のマクロ形状に関するパラメータ

(注) 現時点では構造緩和計算を取り入れることはできません。



この設定による周波数シフト像のシミュレーション結果は Result ビューでみることができ、以下ようになります。(カラーバーを逆転させています)。設定した探針試料間距離の場合、水素が置かれている位置では引力が強くなり周波数シフトの絶対量が大きくなることが分かります。

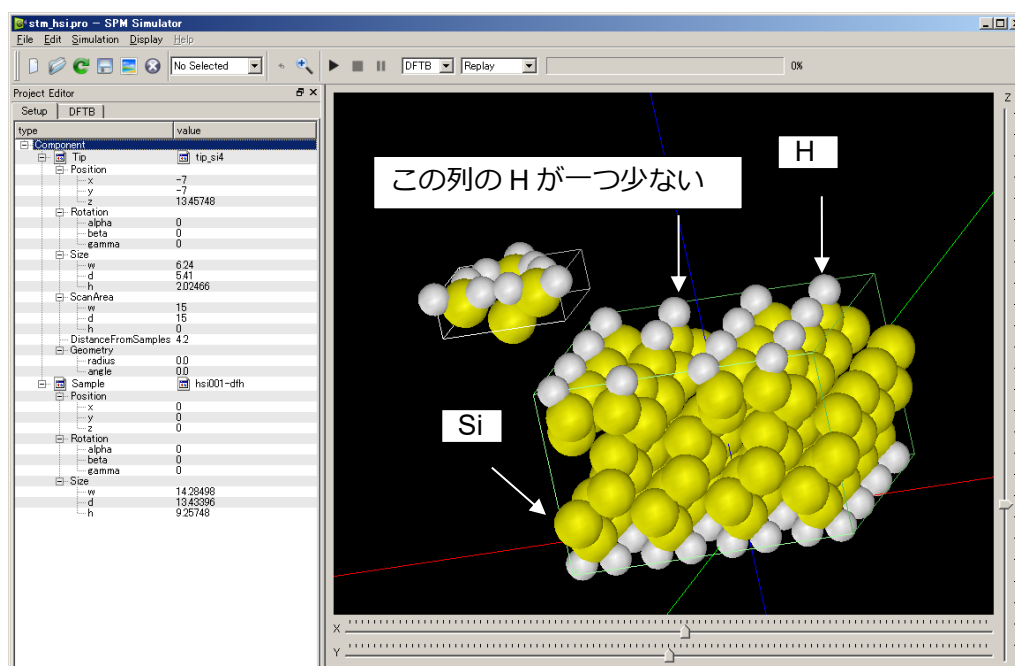


STM 計算の例

(1) トンネル電流像の計算

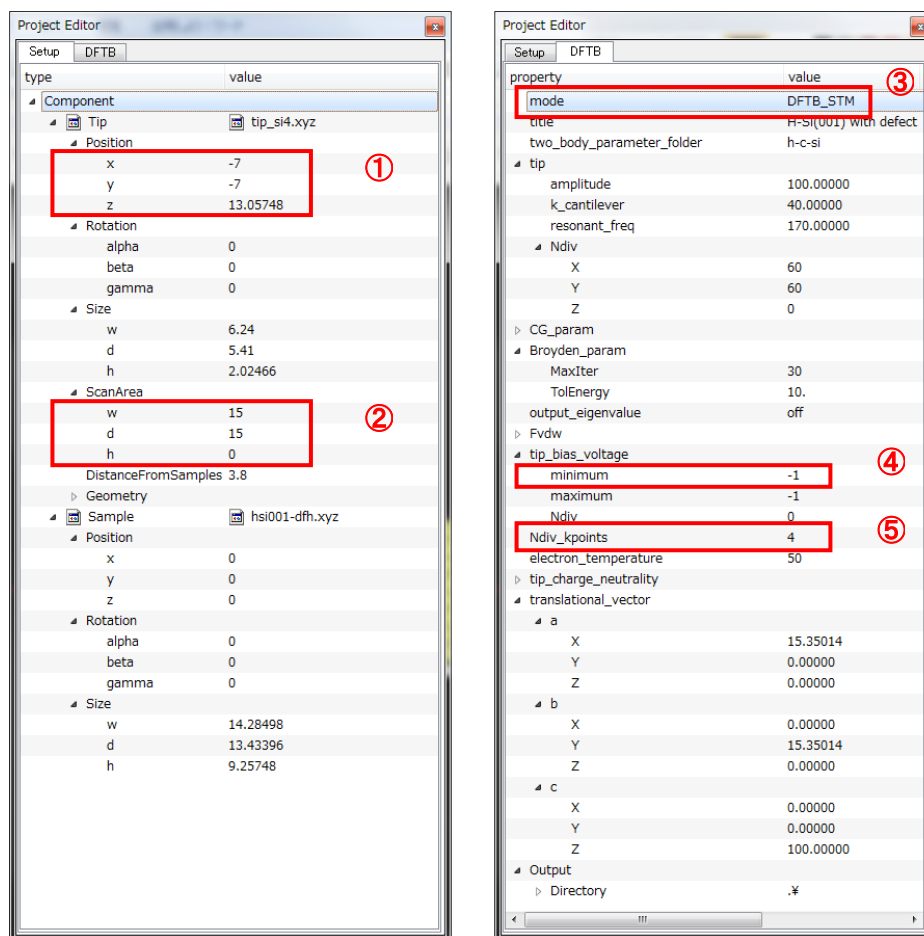
次に、本ソフトウェアの他のシミュレータには備わっていない STM 計算の例を二つ紹介します。一つ目はトンネル電流像の予測例を紹介します。(この例は同梱されているプロジェクトファイル SampleProject¥DFTB¥stm_hsi¥stm_hsi.pro によるものです。)

探針はシリコン探針の先端をモデル化したものであり、試料は水素終端されたシリコン (001) 表面から水素を一つ取り除いたものです。

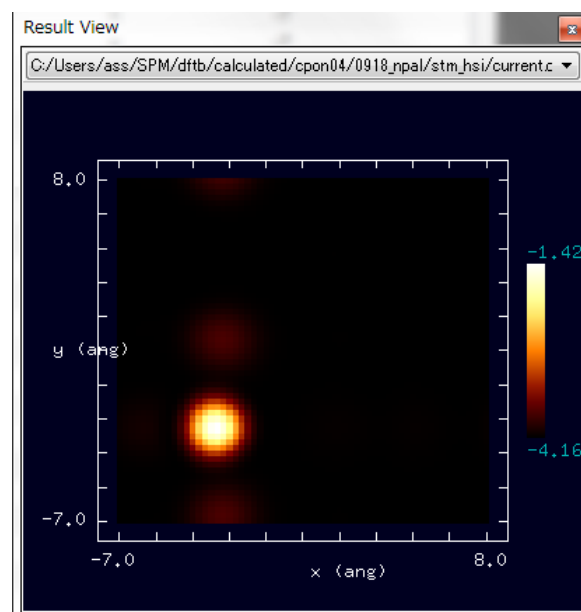


この計算例で注意すべきパラメータは以下の図の通りです。特に重要なものは赤枠で囲った箇所で、大まかな意味は以下のとおりです。(別の系の計算を行う場合、囲っていない箇所のパラメータも注意する必要があります。詳しくは「リファレンスマニュアル」を参照してください。)

- ① 探針走査範囲の始点
- ② 探針走査範囲のサイズ。タグ h の値は 0 として扱われます。
- ③ 計算モード。DFTB_STM を選択してください。
- ④ 探針の電位(STM モードでは minimum に指定した値のみで計算されます。)
- ⑤ 試料の電子状態を計算する際の k 点の分割数。



この設定によるトンネル電流像のシミュレーション結果は Result ビューでみることができ、以下ようになります。(カラーバーを逆転させています)。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ことが分かります。



この他に 4 通りのトンネル電流像の計算事例を同梱しております。

シリコン探針先端とシリコン(111) DAS 7x7 表面：

SampleProject¥DFTB¥stm_das7¥stm_das7.pro

フラーレン探針とシリコン(111) DAS 7x7 表面：

SampleProject¥DFTB¥stm_das7_c60¥stm_das7_c60.pro

シリコン(001)-2x1:H 表面とシリコン探針：

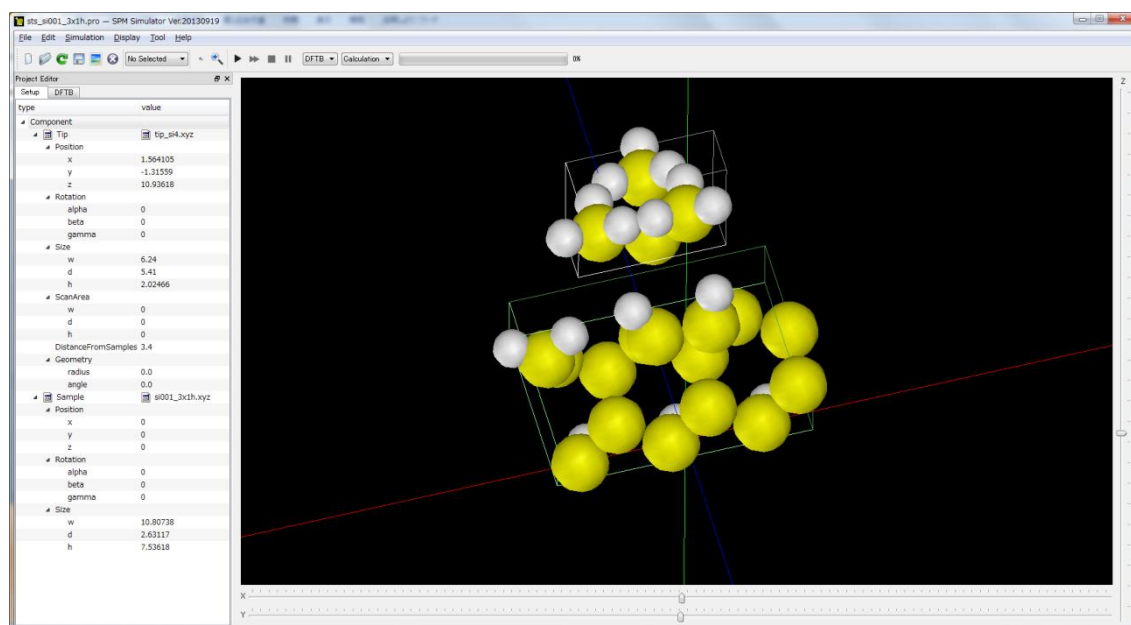
SampleProject¥DFTB¥stm_si001_2x1h¥stm_si001_2x1h.pro

シリコン(001)-3x1:H 表面とシリコン探針：

SampleProject¥DFTB¥stm_si001_3x1h¥stm_si001_3x1h.pro

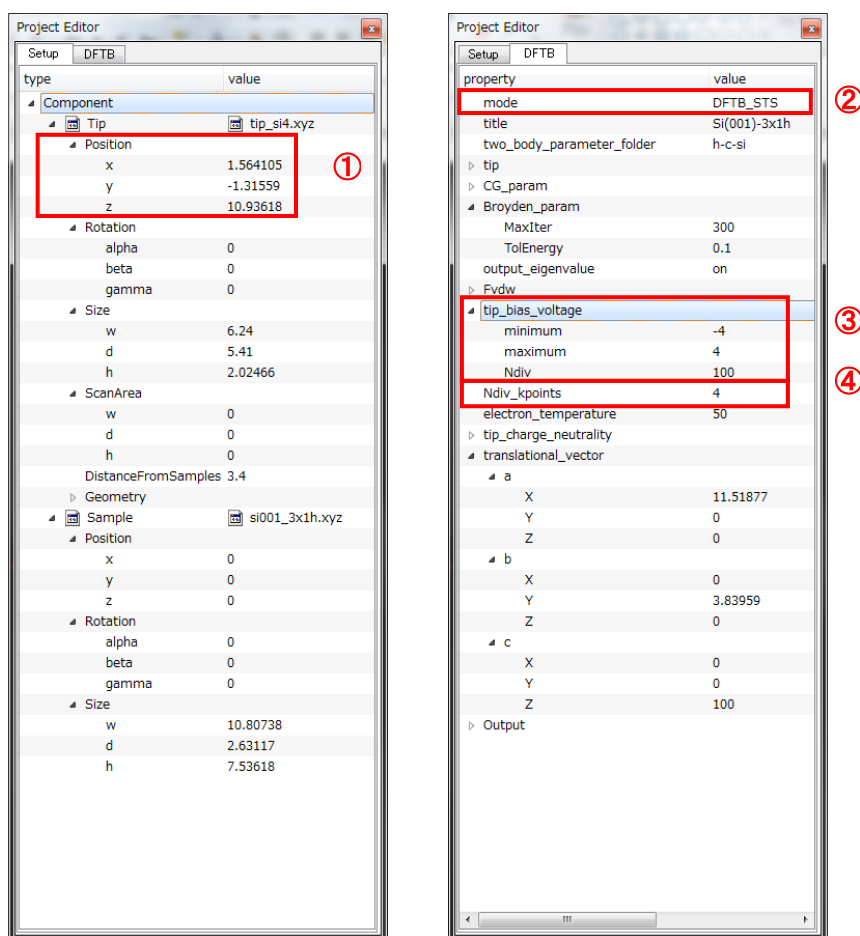
(2) STS の計算

STM 計算の例の二つ目としてトンネル電流分光の計算例を紹介します。(この例は同梱されているプロジェクトファイル SampleProject¥DFTB¥sts_si001_3x1h¥sts_si001_3x1h.pro によるものです。) 探針はシリコン探針先端をモデル化したものであり、試料はシリコン(001)-3x1:H 表面です。

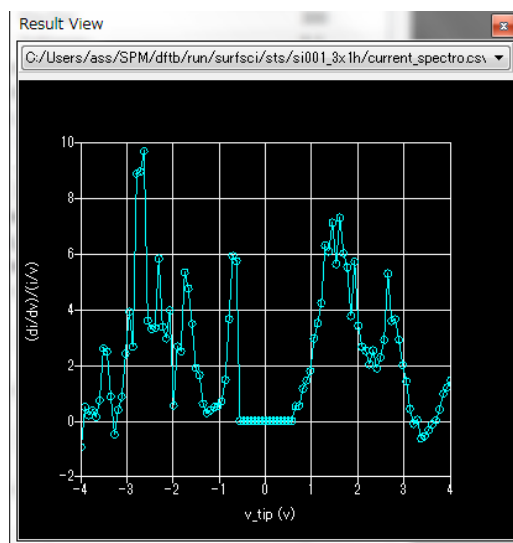
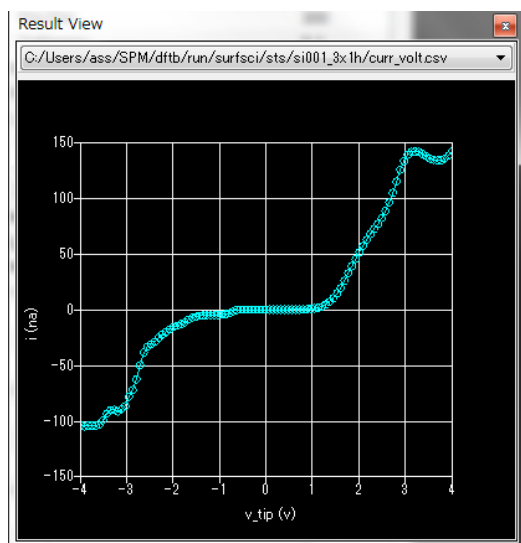


この計算例で注意すべきパラメータは以下の図の通りです。特に重要なものは赤枠で囲った箇所です、大まかな意味は以下のとおりです。(別の系の計算を行う場合、囲っていない箇所のパラメータも注意する必要があります。詳しくは「リファレンスマニュアル」を参照してください。)

- ① 探針の位置(STS モードではこの位置でのみ計算が行われます。)
- ② 計算モード。DFTB_STS を選択してください。
- ③ 探針の電位(最小値、最大値、分割数)
- ④ 試料の電子状態を計算する際の k 点の分割数。



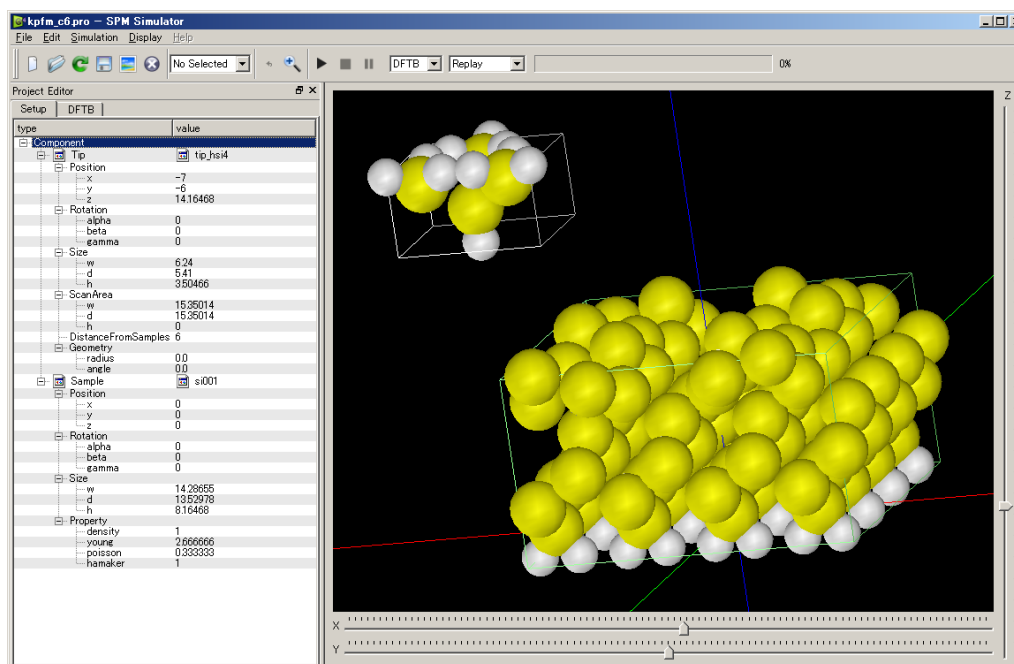
この設定によるトンネル電流スペクトルの計算結果は Result ビューでみることができ、以下ようになります。左図が電流電圧カーブ、右図がスペクトル $[(dI/dV)/(IV)]$ の値です。横軸の電圧は試料に対する探針での値です。



KPFM 計算の例

KPFM 計算(接触電位差像の予測)の例を紹介します。(この例は同梱されているプロジェクトファイル SampleProject¥DFTB¥kpfm_c6¥kpfm_c6.pro によるものです。)

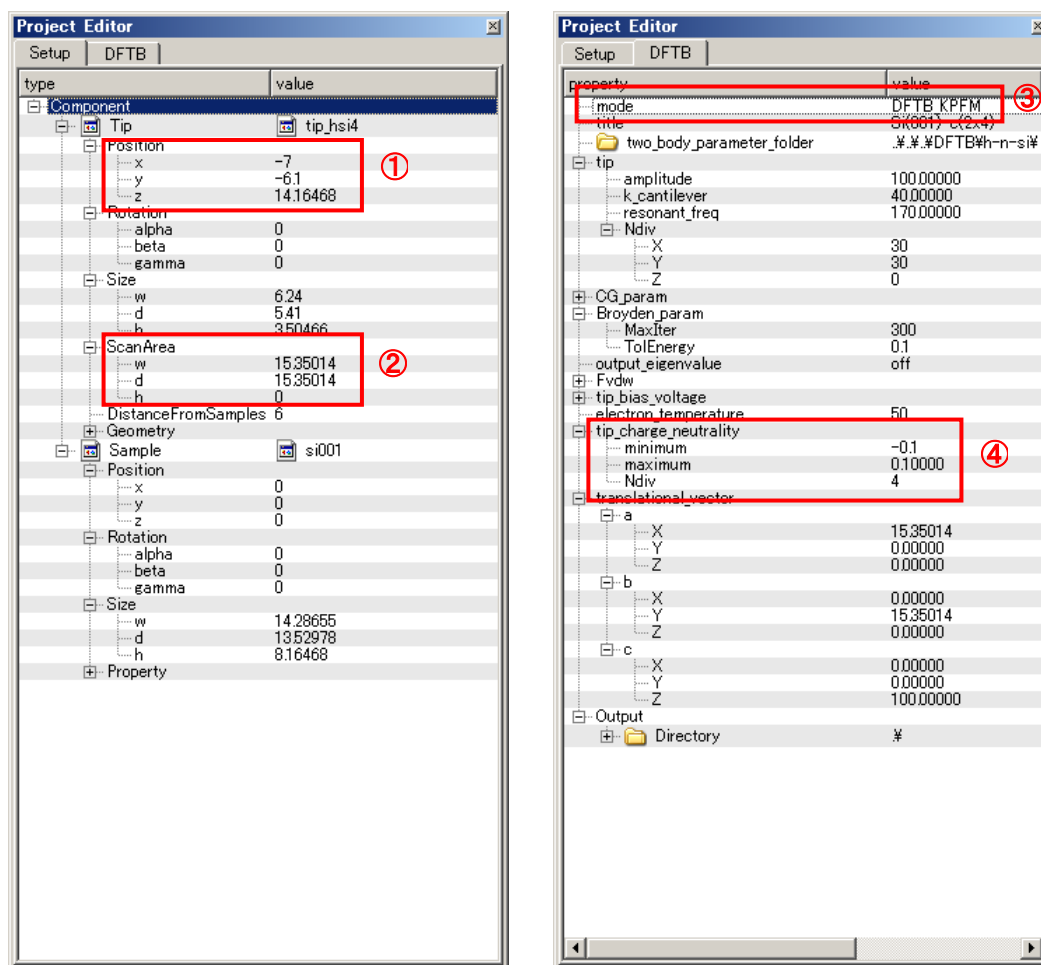
探針は、水素が吸着したシリコン探針の先端をモデル化したものであり、試料はシリコン(001)-c(4x2)表面です。



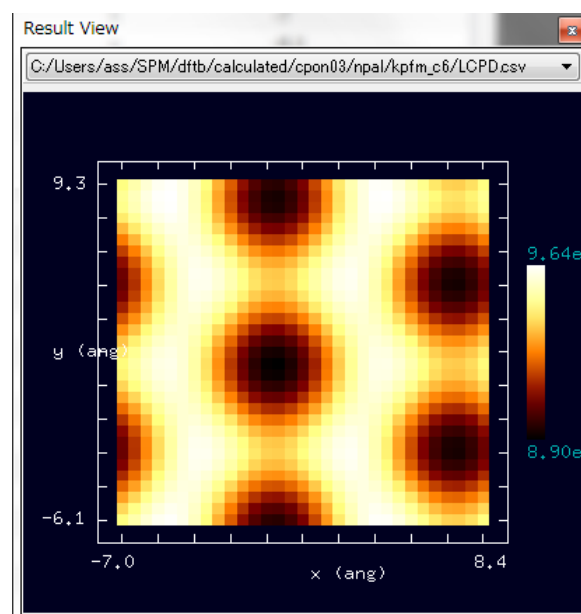
この計算例で注意すべきパラメータは以下の図の通りです。特に重要なものは赤枠で囲った箇所で、大まかな意味は以下のとおりです。(別の系の計算を行う場合、囲っていない箇所のパラメータも注意する必要があります。詳しくはリファレンスマニュアルを参照してください。)

- ① 探針走査範囲の始点
- ② 探針走査範囲のサイズ。タグ h の値は 0 として扱われます。
- ③ 計算モード。DFTB_KPFM を選択してください。
- ④ 探針の電荷中性度の探索範囲(最小値、最大値、分割数)

注) 採用している計算モデルの都合上、電位差での指定は行えません。



この設定による接触電位差像のシミュレーション結果は Result ビューでみることができ、以下のようになります。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ます。



この他に 3 通りの接触電位差像の計算事例を同梱しております。

Si 探針および Si(001)-c(4x2)試料表面、ただし探針試料間距離を短くしたもの：

SampleProject¥DFTB¥kpfm_c4¥kpfm_c4.pro

Si 探針および不純物を含む Si(001)-c(4x2)試料表面：

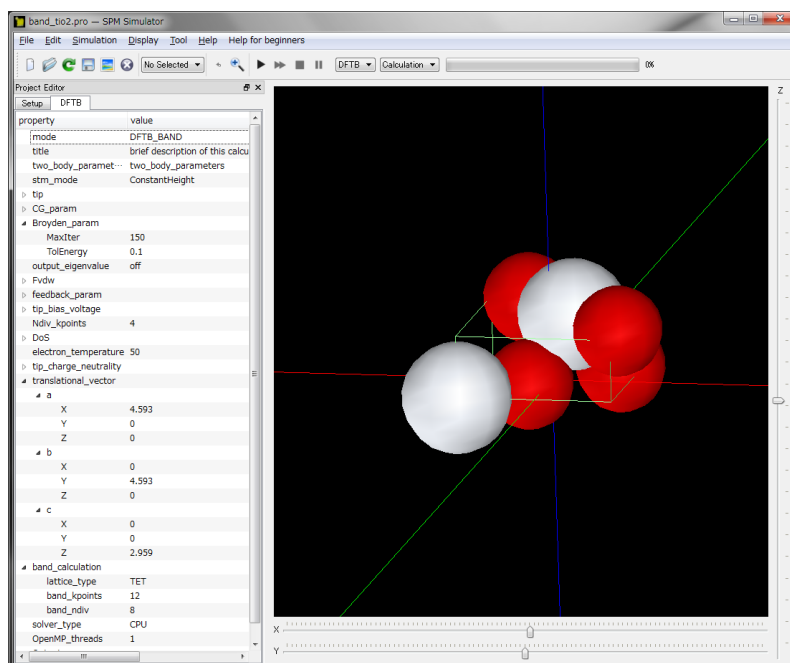
SampleProject¥DFTB¥kpfm_n6¥kpfm_n6.pro

SampleProject¥DFTB¥kpfm_n4¥kpfm_n4.pro

バンド計算の例 (1)

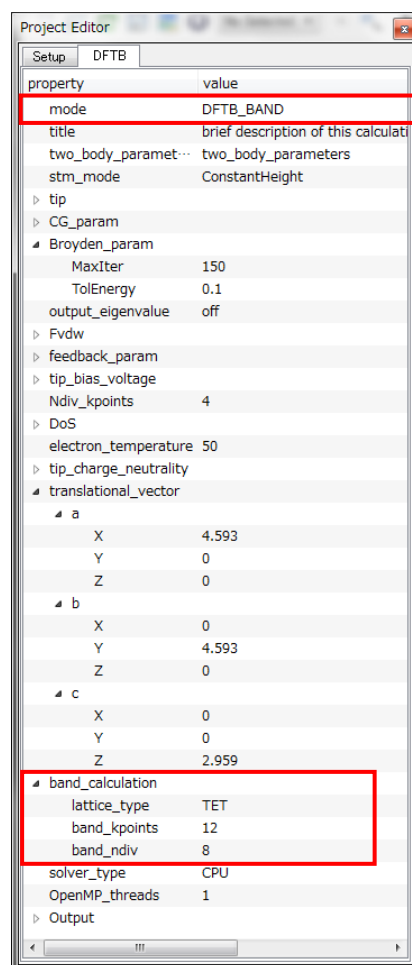
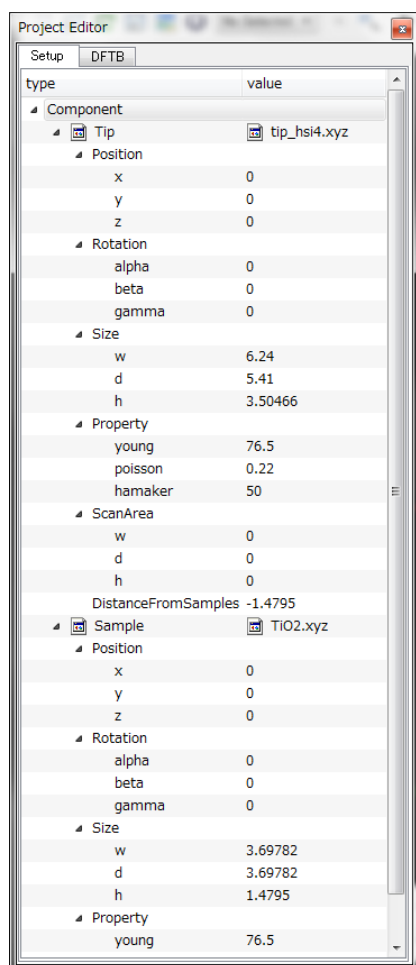
最後にバンド計算の例を紹介します。

試料として酸化チタン(IV)を用います。

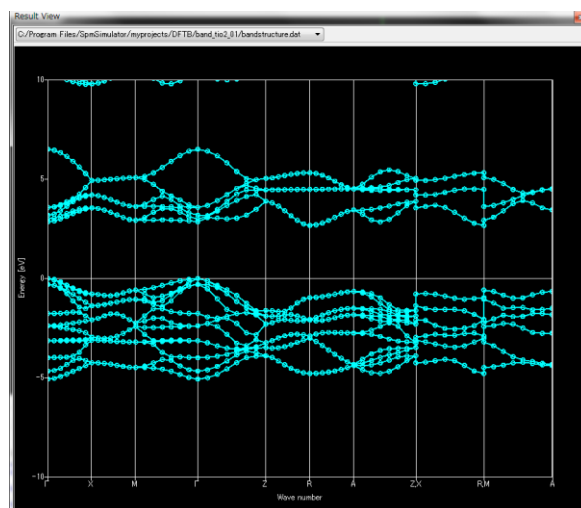


この計算例で注意すべきパラメータは以下の図の通りです。特に重要なものは赤枠で囲った箇所で、大まかな意味は以下のとおりです。(別の系の計算を行う場合、囲っていない箇所のパラメータも注意する必要があります。詳しくはリファレンスマニュアルを参照してください。)

- ① 計算モード。DFTB_BAND を選択してください。
- ② バンド計算パラメータ(格子タイプ、k 点分割数、プロットする線の分割数)



この設定によるバンド計算の結果は Result ビューでみることができ、以下のようになります。



バンド計算の例 (2)

この節では、バンド構造の計算の具体例を詳しく説明します。計算対象となる化合物として、CdS を取り上げます。

DFTB ソルバーで、化合物のバンド構造を計算する場合、以下の四つの情報が必要になります。

- (1) 化合物の結晶格子の空間群番号
- (2) 結晶格子の格子定数
- (3) 単位結晶格子内の原子の相対的な位置座標
- (4) 結晶格子のタイプ

これらの情報を手軽に入手する方法として、以下の Web サイトが便利です。

AFLOW Automatic-FLOW for Materials Discovery

<http://aflowlib.org/>

このサイトで、所望の化合物を検索してください。

例えば、CdS の情報は、以下のホームページにまとめられています。

<http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:9ce2472f0e485f6d>

The screenshot shows the AFLOW website interface. The main content area displays the material **Cd1S1_ICSD_600365**. Below the title, it shows the permanent URL and the AFLOW ORG web entry generator version. The space group is listed as **P6₃/mc (#186)**. A section titled "Relaxed Structure:" contains buttons for "As calculated", "Standard conventional", and "Standard primitive". Below this, a "Supercell:" section has buttons for "2x2x2", "20Å box", and "2x2x2" with "X" buttons. At the bottom, there are "Build" and "RESET" buttons. A "Visualization:" section is partially visible at the bottom.

上記のホームページで、まず、Space Group という項目に注目します。ここでは、(#186) という番号が書かれています。この「186」が空間群の番号です。次に、CIF FILE という項目をクリックして Save してください。これにより、「jmol.file.txt」というファイルが保存されます。

ファイル jmol.file.txt の内容は、以下の通りとなります。

data_NO_RECURSION	[HEX,HEX,hP4]	(STD_PRIM
doi:10.1016/j.commat.2010.05.010)		

```

_pd_phase_name      NO RECURSION          [HEX,HEX,hP4]      (STD_PRIM
doi:10.1016/j.commat.2010.05.010)
_cell_length_a      4.1899541410
_cell_length_b      4.1899541410
_cell_length_c      6.8067065783
_cell_angle_alpha    90.0000000000
_cell_angle_beta     90.0000000000
_cell_angle_gamma    120.0000000000
_symmetry_space_group_name_H-M 'P1'
_symmetry_Int_Tables_Number 1
loop_
_symmetry_equiv_pos_site_id
_symmetry_equiv_pos_as_xyz_
1 x,y,z
loop_
_atom_site_label
_atom_site_occupancy
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_thermal_displace_type
_atom_site_B_iso_or_equiv
_atom_site_type_symbol
Cd1 1.0 0.6666876437 0.3333123563 0.0000000000 Biso 1.0 Cd
Cd2 1.0 0.3333123563 0.6666876437 0.5000001605 Biso 1.0 Cd
S3 1.0 0.6666864455 0.3333135545 0.3769998395 Biso 1.0 S
S4 1.0 0.3333135545 0.6666864455 0.8769998395 Biso 1.0 S

```

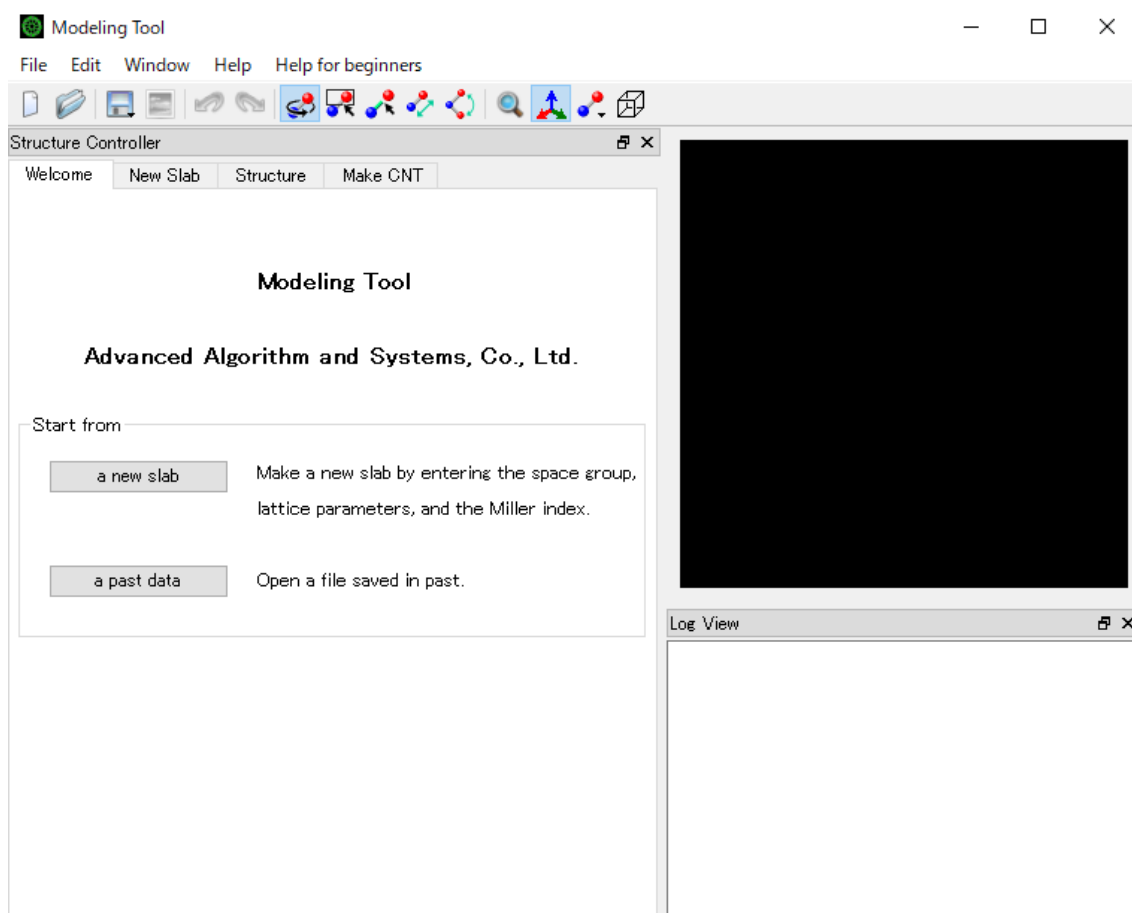
まず、ファイル jmol.file.txt の 3 行目から 5 行目に、「cell length」という文字列が書かれています。ここで指定されている、a、b、c が、結晶格子の格子定数です。今の場合、a=4.1899541410[Å]、b=4.1899541410[Å]、c=6.8067065783[Å]となります。

また、ファイル jmol.file.txt の 24 行目に、Cd1 という項目があり、1.0、0.6666876437、0.3333123563、0.0000000000 の四つの実数値が並んでいます。このうちの、2 番目、3 番目、4 番目の数値が、Cd 原子の単位結晶格子内の相対的な位置座標となります。今の場合、x=0.6666876437、y=0.3333123563、z=0.0000000000 となります。次に、ファイル jmol.file.txt の 26 行目に、S3 という項目があり、1.0、0.6666864455、0.3333135545、0.3769998395 の四つの実数値が並んでいます。このうちの、2 番目、3 番目、4 番目の数値が、S 原子の単位結晶格子内の相対的な位置座標となります。今の場合、x=0.6666864455、y=0.3333135545、z=0.3769998395 となります。

なお、Cd2 および S4 の相対的な位置座標は、必要ありません。Modeling Tool で結晶格子を再現する際、Cd1 と S3 の相対的な位置座標を入力するだけで、Cd 原子が 2 個、S 原子が 2 個、単位結晶内に生成されるからです。

次に、CdS の情報が集められた AFLOW のホームページに戻ります。ホームページの下の方に、「Bravais Lattice of the Lattice」という項目があります。その下の、「Bravais Lattice Primitive」という項目に、「HEX」という文字列が並んでいます。この「HEX」が、結晶格子のタイプとなります。

これで、バンド構造計算に必要なデータはそろいました。そこで、これらの値をソルバーに入力することにします。まず、Modeling Tool で結晶格子のデータを作成します。それには、SPM シミュレータがインストールされているフォルダ内の、mkatmmain.exe という実行ファイルをダブルクリックします。すると、以下の画面が現れます。



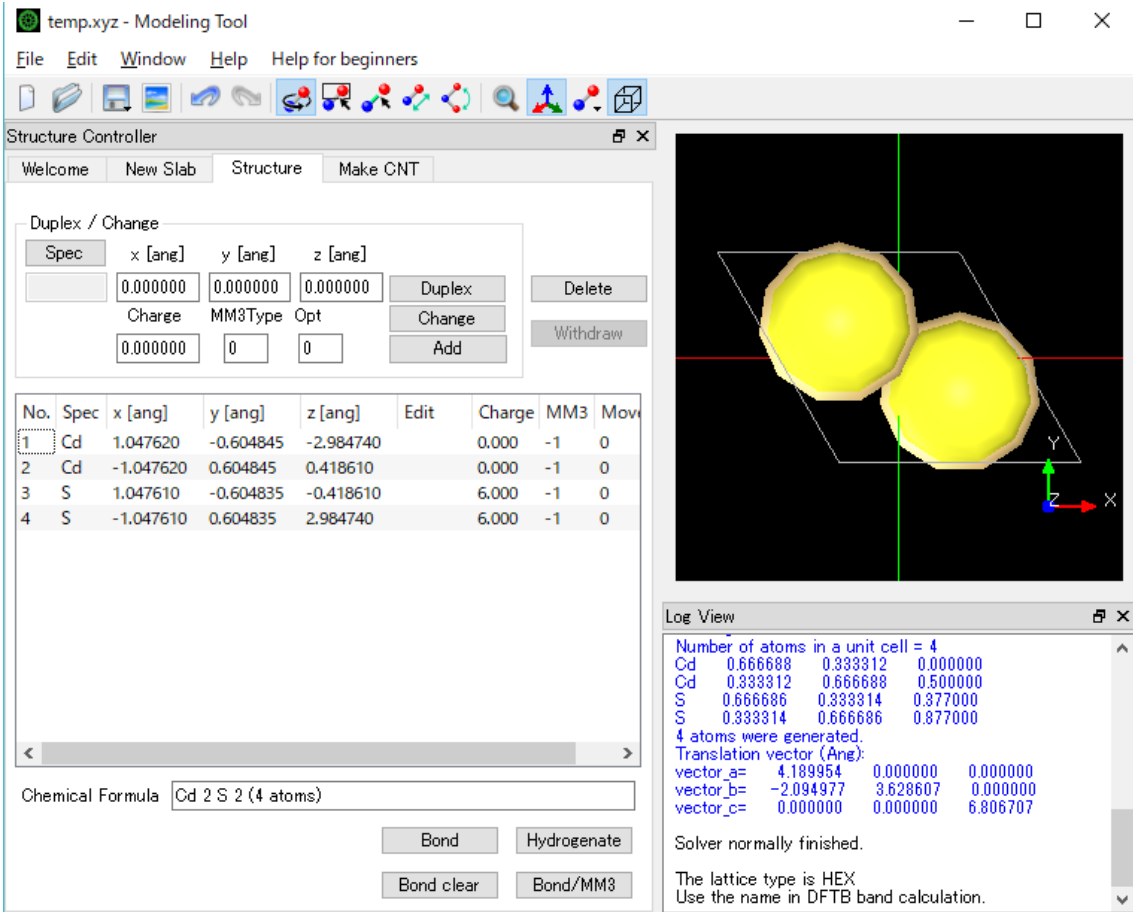
[New Slab]というタブをクリックします。[Spg. No.]というボタンをクリックして、空間群番号「186」を指定します。[Lattice Parameters]として、a[ang]に 4.1899541410、c[ang]に 6.8067065783 を指定します。

次に、原子の単位結晶格子内の相対的な位置座標を入力します。[Atom Positions]という項目の、[Spec]というボタンをクリックします。すると周期律表が現れますので、原子番号 48 番の Cd を選択します。そして、x/a、y/b、z/c に、それぞれ、相対的な位置座標である x=0.6666876437、y=0.3333123563、z=0.00000000000 を入力します。最後に、[Add]ボタンをクリックすると、Cd 原子が登録されます。

同様に、S 原子を登録します。[Atom Positions]という項目の、[Spec]というボタンをクリックします。すると周期律表が現れますので、原子番号 16 番の S を選択します。そして、

x/a、y/b、z/c に、それぞれ、相対的な位置座標である $x=0.6666864455$ 、 $y=0.3333135545$ 、 $z=0.376998395$ を入力します。最後に、[Add]ボタンをクリックします。

[Miller Index]は、 $x=0$ 、 $y=0$ 、 $z=1$ とします。[Number of Cell]は、 $x=1$ 、 $y=1$ 、 $z=1$ とします。[Hydrogenation]は none を選択します。[Make primitive]をクリックして、チェックを入れます。最後に、[Make Surface]ボタンをクリックします。すると、以下の画面が現れます。



temp.xyz - Modeling Tool

File Edit Window Help Help for beginners

Structure Controller

Welcome New Slab Structure Make CNT

Duplex / Change

Spec x [ang] y [ang] z [ang]

0.000000 0.000000 0.000000 Duplex Delete

Charge MM3Type Opt Change Withdraw

0.000000 0 0 Add

No.	Spec	x [ang]	y [ang]	z [ang]	Edit	Charge	MM3	Mov
1	Cd	1.047620	-0.604845	-2.984740		0.000	-1	0
2	Cd	-1.047620	0.604845	0.418610		0.000	-1	0
3	S	1.047610	-0.604835	-0.418610		6.000	-1	0
4	S	-1.047610	0.604835	2.984740		6.000	-1	0

Chemical Formula Cd 2 S 2 (4 atoms)

Bond Hydrogenate

Bond clear Bond/MM3

Log View

Number of atoms in a unit cell = 4

Cd 0.666688 0.333312 0.000000

Cd 0.333312 0.666688 0.500000

S 0.666686 0.333314 0.377000

S 0.333314 0.666686 0.877000

4 atoms were generated.

Translation vector (Ang):

vector_a= 4.189954 0.000000 0.000000

vector_b= -2.094977 3.628607 0.000000

vector_c= 0.000000 0.000000 6.806707

Solver normally finished.

The lattice type is HEX

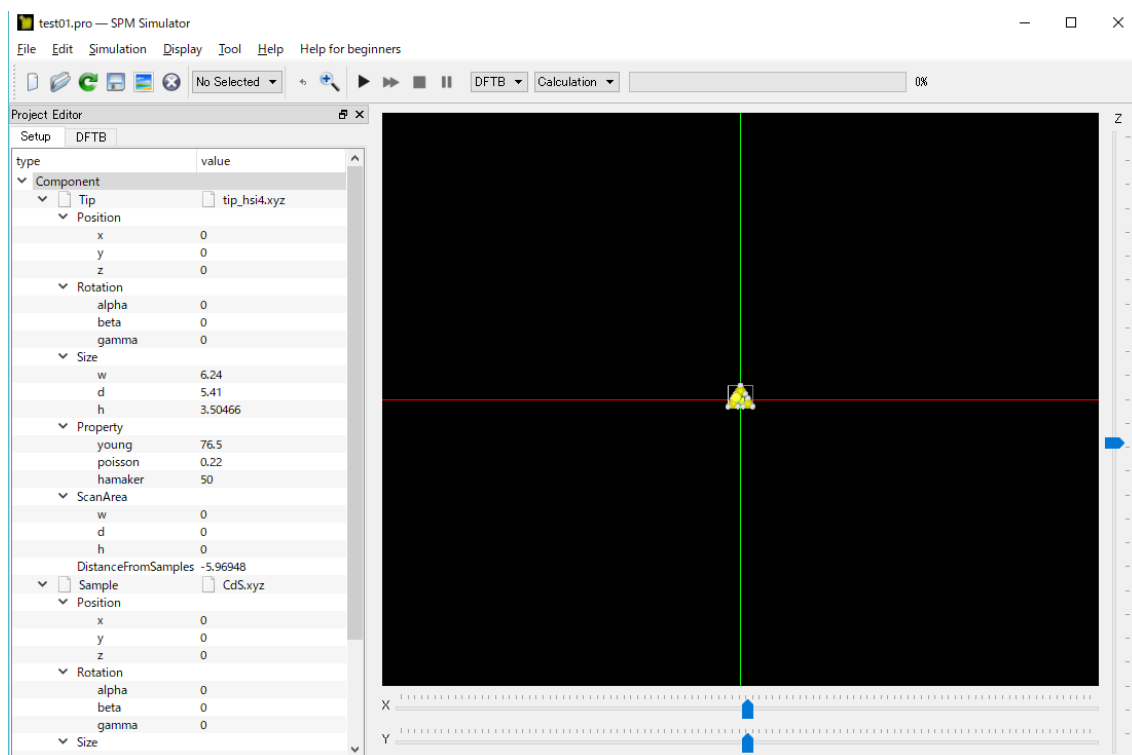
Use the name in DFTB band calculation.

これで、結晶格子が生成されました。そこで、データとして保存します。[File]→[Save as]として、[in XYZ format]を選択します。「CdS.xyz」という名前のファイルとして保存します。さらに、再び、[File]→[Save as]として、[in Modeling Project]を選択します。「CdS.mpro」という名前のファイルとして保存します。

これで、Modeling Tool の作業は終わりましたので、[File]→[Quit]で終了してください。

次に、いよいよ、DFTB ソルバーの操作に移ります。SPM シミュレータがインストールされているフォルダ内の、実行ファイル SPMSimulator.exe をダブルクリックしてください。CdS のバンド構造の計算例は、SmpleProject の DFTB_BAND_Inorganic_001 に保存されています。そこで、以下のフォルダ内の、project ファイルを開いてみてください。SampleProject/DFTB_BAND_Inorganic_001/CdS/test01

なお、project ファイルの名前は、test01.pro です。すると、以下の画面が現れます。



[Setup]タブから見ていきます。[Tip]は、tip_hsi4.xyz を指定します。[Position]、[Rotation]の全ての値は「0」にします。[Property]は、[young]を 76.5、[poisson]を 0.22、[hamaker]を 50 に設定します。[ScanArea]は、[w]、[d]、[h]の全てを「0」にします。

[Sample]は CdS.xyz を指定します。これは、さきほど、Modeling Tool で生成したファイルです。[Position]、[Rotation]の全ての値は「0」にします。[Property]は、[young]を 76.5、[poisson]を 0.22、[hamaker]を 50 に設定します。

次に、[DFTB]タブをクリックしてください。[property]は、次のように設定します。[mode]は、[DFTB_BAND]を選択します。[title]は、特に何も書かなくても構いません。[two_body_parameter_folder] は、two_body_parameters とします。[stm_mode] は、ConstantHeight を指定します。

[tip]は、次のように設定します。[amplitude]は、160.0[Å]とします。[k_cantilever]は、41.0[N/m]とします。[resonant_freq]は、172.0[kHz]とします。[Ndiv]は、X=30、Y=30、Z=15 とします。

[CG_param]は、次のように設定します。[MaxIter]は 0 とします。[TolForce]は、1.0[nN]とします。[TolEnergy]は、0.001[eV]とします。[displacement]は、0.1[Å]とします。[trial_point_number]は、10 とします。

[Broyden_param]は、次のように設定します。[MaxIter]は、150 とします。[TolEnergy]は、 $0.1[10^{(-6)}\text{eV}]$ とします。[output_eigenvalue]は、off とします。

[Fvdw] は、次のように設定します。[tip_shape] は、conical とします。[height_of_highest_adsorbed_molecule] は、 $0.0[\text{\AA}]$ とします。[Hamaker_const] は、 $0.22[\text{aJ/mol}]$ とします。[apex_angle]は、 $120.0[\text{degree}]$ とします。[tip_height]は、 $1000.0[\text{\AA}]$ とします。[radius_of_tip_apex]は、 $1.0[\text{\AA}]$ とします。

[feedback_param]は、次のように設定します。[delta_z]は、 $0.2[\text{\AA}]$ とします。[set_point]は、 $1000[\text{nA}]$ とします。[TolCurr]は、 $0.1[\text{nA}]$ とします。[MaxIter]は、150 とします。

[tip_bias_voltage]は、次のように設定します。[minimum]は、 $-1.0[\text{V}]$ とします。[maximum]は、 $1.0[\text{V}]$ とします。[Ndiv]は、100 とします。

[Ndiv_kpoints]は、4 とします。

[DoS]は、次のように設定します。[output_dos]は、on にします。[minimum]は、 $-5.0[\text{eV}]$ とします。[maximum]は、 $+5.0[\text{eV}]$ とします。[Ndiv]は 1024 とします。

[electron_temperature]は、 $50[\text{K}]$ とします。

[tip_charge_neutrality]は、次のように設定します。[minimum]は、 $-0.1|e|$ とします。[maximum]は、 $0.1|e|$ とします。[Ndiv]は、4 とします。

[translational_vector]は、CdS.xyz を読み込んで自動的に設定されるので、そのまま何も設定しなくて構いません。

[band_calculation]は、次のように設定します。[lattice_type]は、結晶格子のタイプであり、ここでは、HEX を選びます。[band_kpoints]は、24 とします。[band_ndiv]は、16 とします。

[solver_type]では、CPU と GPU のどちらかを選びます。[OpenMP_threads]で、並列化を指定することが可能です。

これで、パラメータ設定は完了です。ツールバーの三角形のボタンをクリックすれば、計算が開始されます。

念のため、以下に、これまで設定したパラメータの値を表にまとめます。参考にしてください。

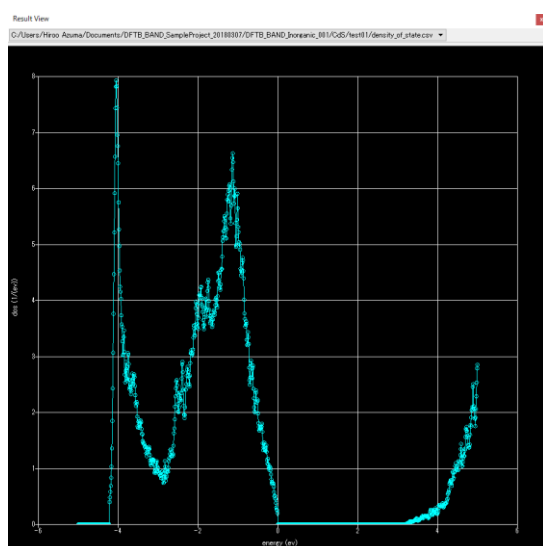
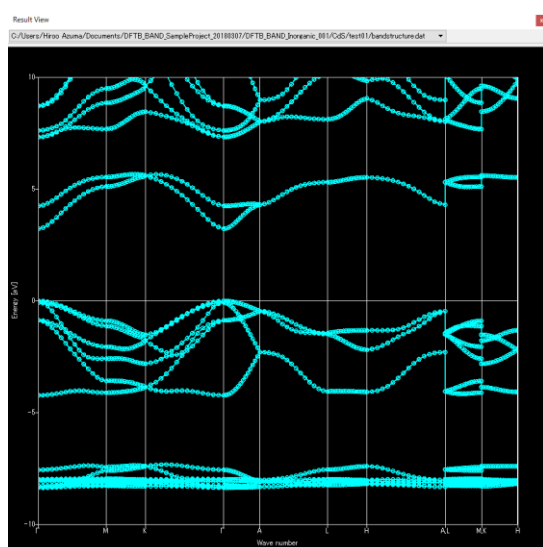
Setup のパラメータ名	設定値
Tip	tip_hsi4.xyz
Tip, Position, x	0

Tip, Position, y	0
Tip, Position, z	0
Tip, Rotation, alpha	0
Tip, Rotation, beta	0
Tip, Rotation, gamma	0
Tip, Property, young	76.5
Tip, Property, poisson	0.22
Tip, Property, hamaker	50
Tip, ScanArea, w	0
Tip, ScanArea, d	0
Tip, ScanArea, h	0
Sample	CdS.xyz
Sample, Position, x	0
Sample, Position, y	0
Sample, Position, z	0
Sample, Rotation, alpha	0
Sample, Rotation, beta	0
Sample, Rotation, gamma	0
Sample, Property, young	76.5
Sample, Property, poisson	0.22
Sample, Property, hamaker	50

DFTBのパラメータ名	設定値
Property, mode	DFTB BAND
Property, two_body_parameter_folder	two_body_parameters
Property, stm_mode	ConstantHeight
Tip, amplitude	160.0 Ang
Tip, k_cantilever	41.0 N/m
Tip, resonant_freq	172.0 kHz
Tip, Ndiv, X	30
Tip, Ndiv, Y	30
Tip, Ndiv, Z	15
CG_param, MaxIter	0
CG_param, TolForce	1.0 nN
CG_param, TolEnergy	0.001 eV
CG_param, displacement	0.1 Ang
CG_param, trial_point_number	10
Broyden_param, MaxIter	150
Broyden_param, TolEnergy	0.1 10 ⁻⁶ eV
output_eigenvalue	off
Fvdw, tip_shape	conical
Fvdw, height_of_highest_adsorbed_molecule	0.0 Ang
Fvdw, Hamaker_const	0.22 aJ/mol
Fvdw, apex_angle	120.0 degree
Fvdw, tip_height	1000.0 Ang
Fvdw, radius_of_tip_apex	1.0 Ang
feedback_param, delta_z	0.2 Ang
feedback_param, set_point	1000 nA
feedback_param, TolCurr	0.1 nA
feedback_param, MaxIter	150
tip_bias_voltage, minimum	-1.0 V
tip_bias_voltage, maximum	1.0 V
tip_bias_voltage, Ndiv	100
Ndiv_kpoints	4
DoS, output_dos	on
DoS, minimum	-5.0 eV
DoS, maximum	+5.0 eV
DoS, Ndiv	1024

electron_temperature	50 K
tip_charge_neutrality, minimum	-0.1 e
tip_charge_neutrality, maximum	0.1 e
tip_charge_neutrality, Ndiv	4
band_calculation, lattice_type	HEX
band_calculation, band_kpoints	24
band_calculation, band_ndiv	16
solver_type	CPU
OpenMP_threads	1

計算結果は、[Display]→[Result View]で表示できます。「bandstructure.dat」は、バンド構造の計算結果です。「density_of_state.csv」は、状態密度の計算結果です。今の例の場合、以下の計算結果が得られます。



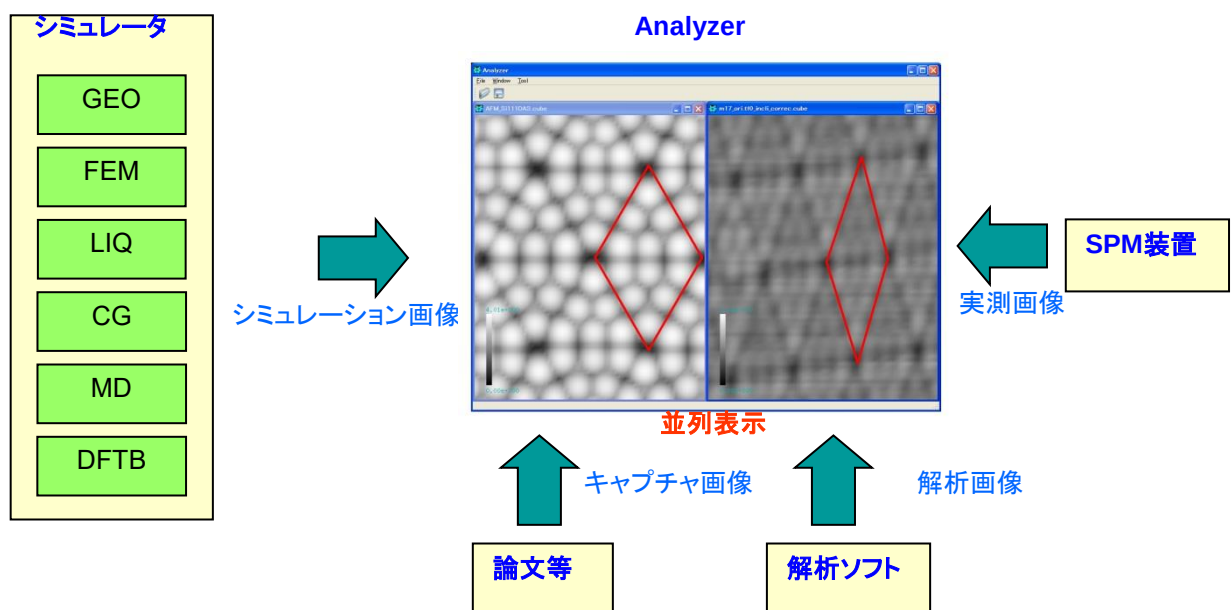
なお、テキスト形式のファイル log.txt の中の最後の方に、以下の文が出力されています。
band gap is 0.32261467E+01[eV]
これにより、バンドギャップは、約 0.32[eV]であることが分かります。

第4章

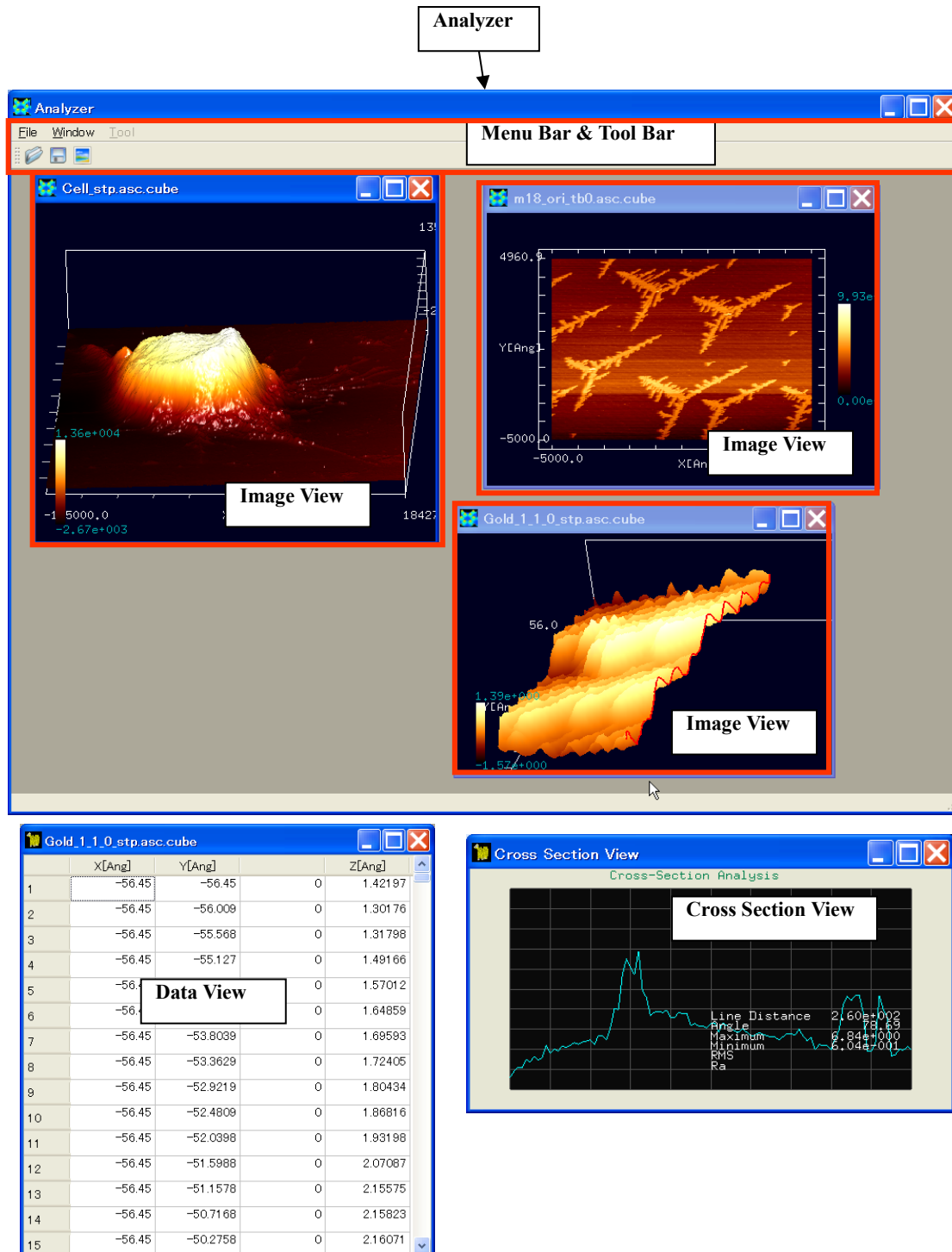
実測画像—シミュレーション画像比較機能

1 概要

実測画像—シミュレーション画像比較機能 GUI（以下 Analyzer）では、SPM の測定画像や各種解析ソフトの出力データ、本シミュレータの計算結果、論文からのキャプチャ画像など、様々な形式のデータを読み込み、2次元、3次元画像として可視化することができます。これらの画像を並列表示することで、各画像を容易に比較することができます。また読み込んだデータを様々な形式で保存できるため、データ形式変換ソフトとしてもご利用いただけます。また測定の際に生じる傾斜を自動補正する機能や画像からの探針推定機能、測定画像から探針の影響を取り除く機能なども備えています。さらに、画像のフーリエ解析や高解像度化機能、ニューラルネットを用いた探針影響除去機能なども備えています。その他、デジタル画像処理ツールとして、閾値による画像の二値化機能、コントラスト調整(ガンマ補正)機能、エッジ抽出(Sobel フィルタ処理)機能、ノイズ除去(メディアンフィルタ処理)機能が用意されています。



2 画面説明



以下では画面ごとの主な機能について説明します。

【Analyzer】

ウィンドウ画面全体を表します。

【Menu Bar & Tool Bar】

データファイル読み込みや保存などのファイル操作、Image View の整列やクローズなどのウィンドウ操作を行います。

【Image View】

読み込まれたデータファイルの内容を2次元および3次元画像として可視化します。マウスやキーボードの操作によって、視点の変更や拡大縮小を自由に行うことができます。またマウス操作によって、対象を任意の位置で切断することができ、その断面図は Cross Section View で見ることができます。なお、このウィンドウは同時に複数表示することが可能であり、並列表示などが行えます。

【Cross Section View】

Image View で切り取られた断面をグラフ表示します。

【Data View】

読み込んだデータファイルの内容を表形式でテキスト表示します。

3 Analyzer の起動と終了

【起動】





1. シミュレータ本体 GUI “Menu Bar” → [Tool] → [Analyzer]

以上の操作によって、実測画像－シミュレーション画像比較機能用の GUI である Analyzer が起動します。

【終了】



1. Analyzer“Manu Bar”→ [File] → [Exit]

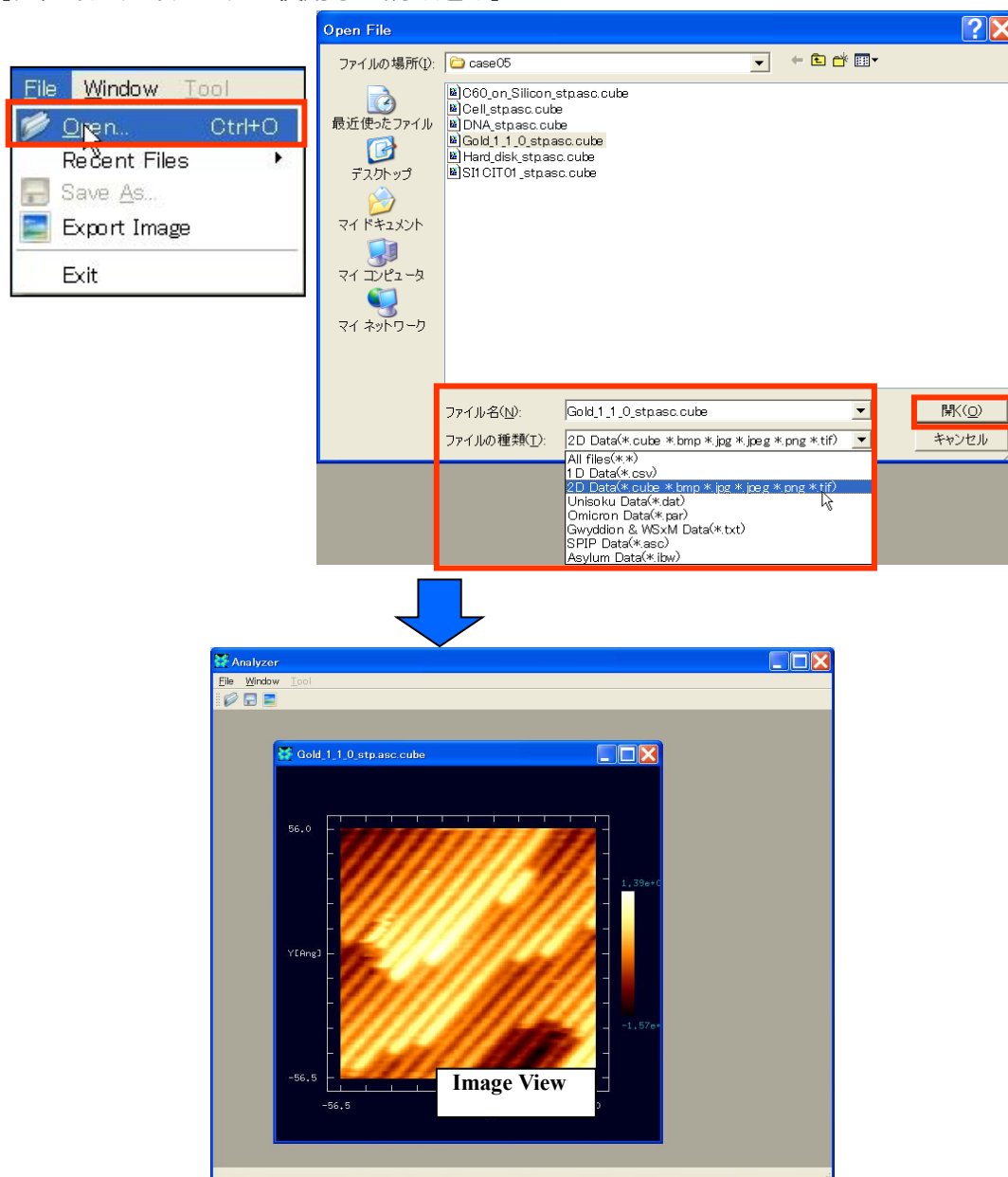
以上の操作で Analyzer は終了しますが、シミュレータ本体の GUI は終了しません。

4 ファイル操作

Analyzer では、様々なメーカーの SPM 測定画像の他、本シミュレータの計算結果や論文からのキャプチャ画像などのデータファイルを読み込むことができます。また読み込んだデータは別の形式に変換して保存できます。さらに Image View の描画を、そのまま画像として保存するキャプチャ機能も備えています。ここでは、データファイルの読み込みと保存、描画のキャプチャ方法について説明します。

データファイルの読み込み

【ファイルダイアログを使用した読み込み】



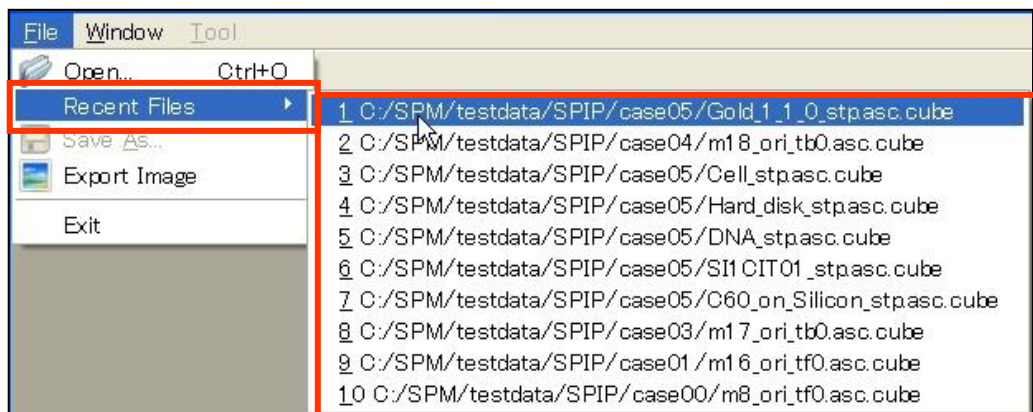
1. “Menu Bar” → [File] → [Open]⁴¹ → “Open File”ダイアログ
2. データファイル指定 → [開く]

Analyzer では、一般の画像形式 (jpeg,bmp,png,tif)、Cube (本シミュレータ出力形式)、各種装置メーカー・解析ソフト出力形式 (Unisoku、Omicron、Gwyddion、WSxM、SPIP、Asylum、Surf) に対応しています。指定されたデータファイルが読み込まれると、Image View

⁴¹ この操作は、“Tool Bar” → Open アイコンをクリックすることでも行えます。

が表示され、その中に2次元画像⁴²が描画されます。

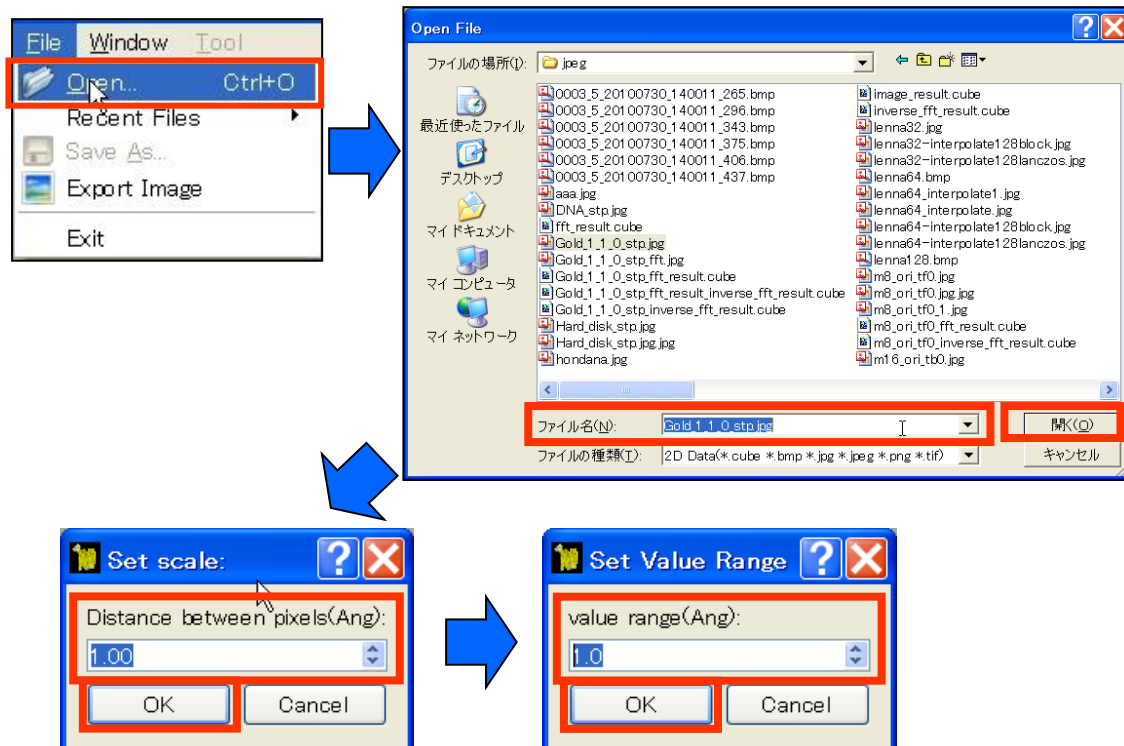
【最近使用したデータファイルの読み込み】



1. “Menu Bar” → [File] → [Recent Files] → データファイル一覧⁴³→データファイル指定

【一般の画像形式のデータファイルの読み込み】

bmp や jpg などの画像ファイルは、明るさの情報はもちますが、例えば高さ情報はもっていません。したがって、データを読み込む際には、明度を実際の高さ情報に変換する処理が必要となります。また、画像の大きさ（縦横サイズ）が現実には何々かということ指定する必要があります。以下では画像ファイルの読み込みについて説明します。



⁴² 3次元表示など、描画法の変更については後述します。

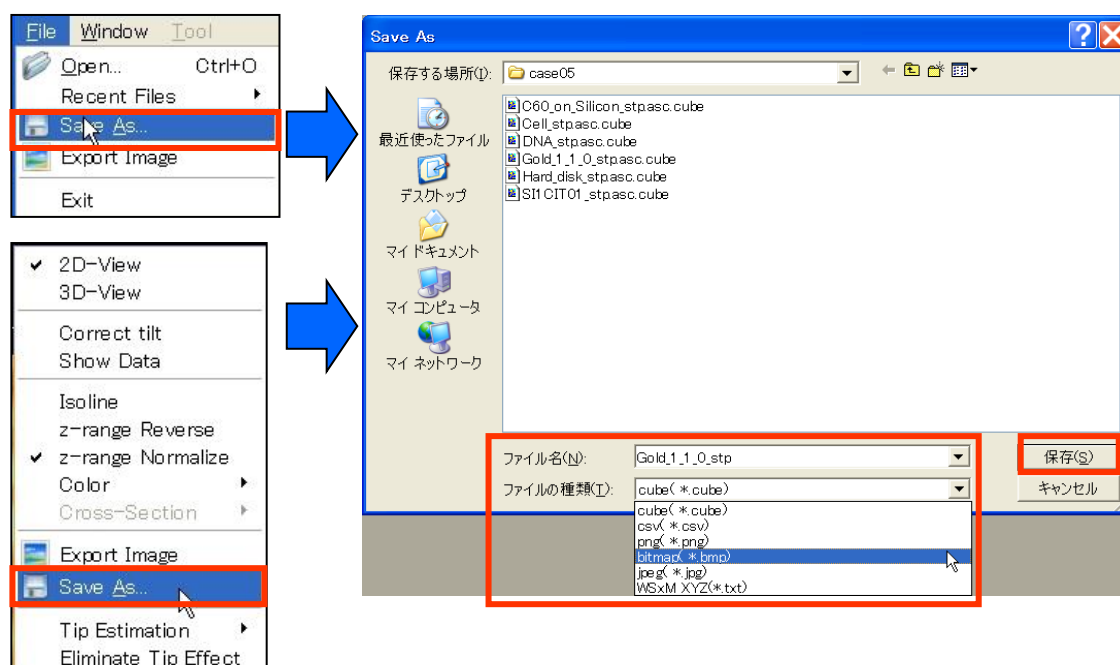
⁴³ 最近使ったプロジェクトファイルは最大10個まで表示されます。

1. "Menu Bar" → [File] → [Open]⁴⁴ → "Open File"ダイアログ
2. データファイル指定 → [開く]
3. "Set scale"ダイアログ → "Distance between pixels"入力 → [OK]
4. "Set Value Range"ダイアログ → "value range"入力 → [OK]

"Set scale"ダイアログで、画像ファイルのピクセル間の距離が実際には何Åに対応するのかを指定します。さらに"Set Value Range"ダイアログで、画像の明度[0.0,1.0](黒=0.0、白=1.0で表現)がどれくらいの高低差(Å)に相当するのかを指定します。

データファイルの保存

読み込んだ様々な形式のデータファイルを別名および別形式で保存することができます。



- 1a. "Menu Bar" → [File]
- 1b. "Image View"右クリック⁴⁵ → コンテキストメニュー
2. [Save As]⁴⁶ → "Save As"ダイアログ → ファイル名指定 → [保存]

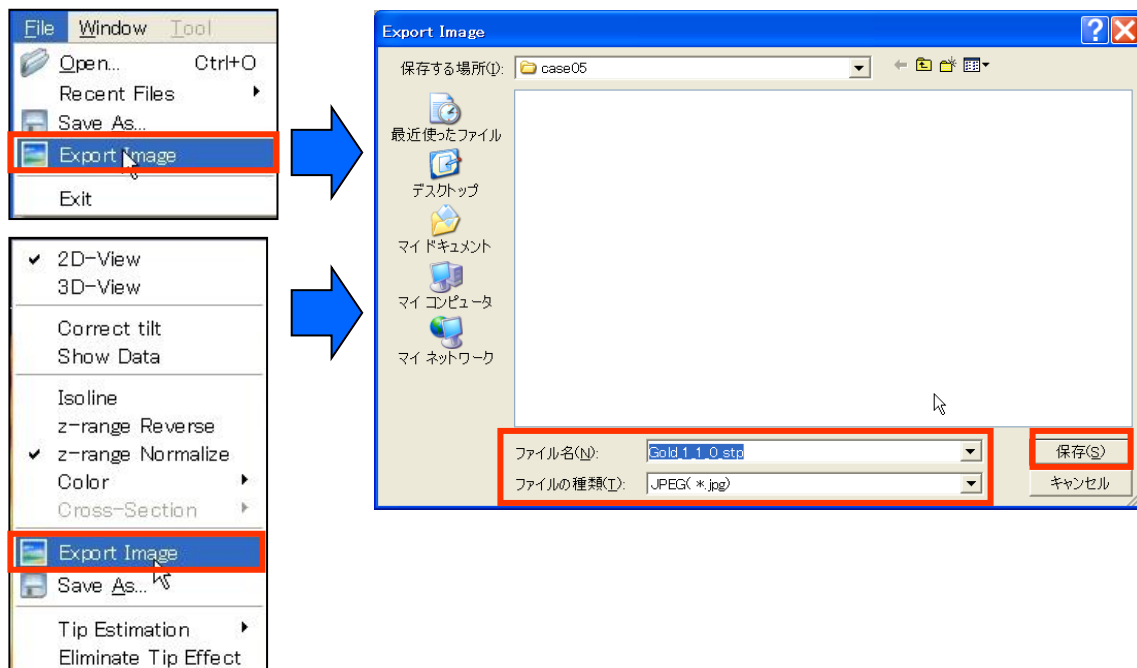
イメージの保存

⁴⁴ この操作は、"Tool Bar" → Open アイコンをクリックすることでも行えます。

⁴⁵ 複数の Image View が立ち上がっている場合は、保存したいデータが表示されている Image View 上で右クリックしてください。

⁴⁶ この操作は、"Tool Bar" → Save アイコンをクリックすることでも行えます。

数値データそのものだけではなく、Image View に表示されている画面自体を画像として保存することができます。



- 1a. “Manu Bar”→ [File]
- 1b. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー
2. [Export Image]⁴⁷ → “Export Image ”ダイアログ → ファイル名指定 → [保存]

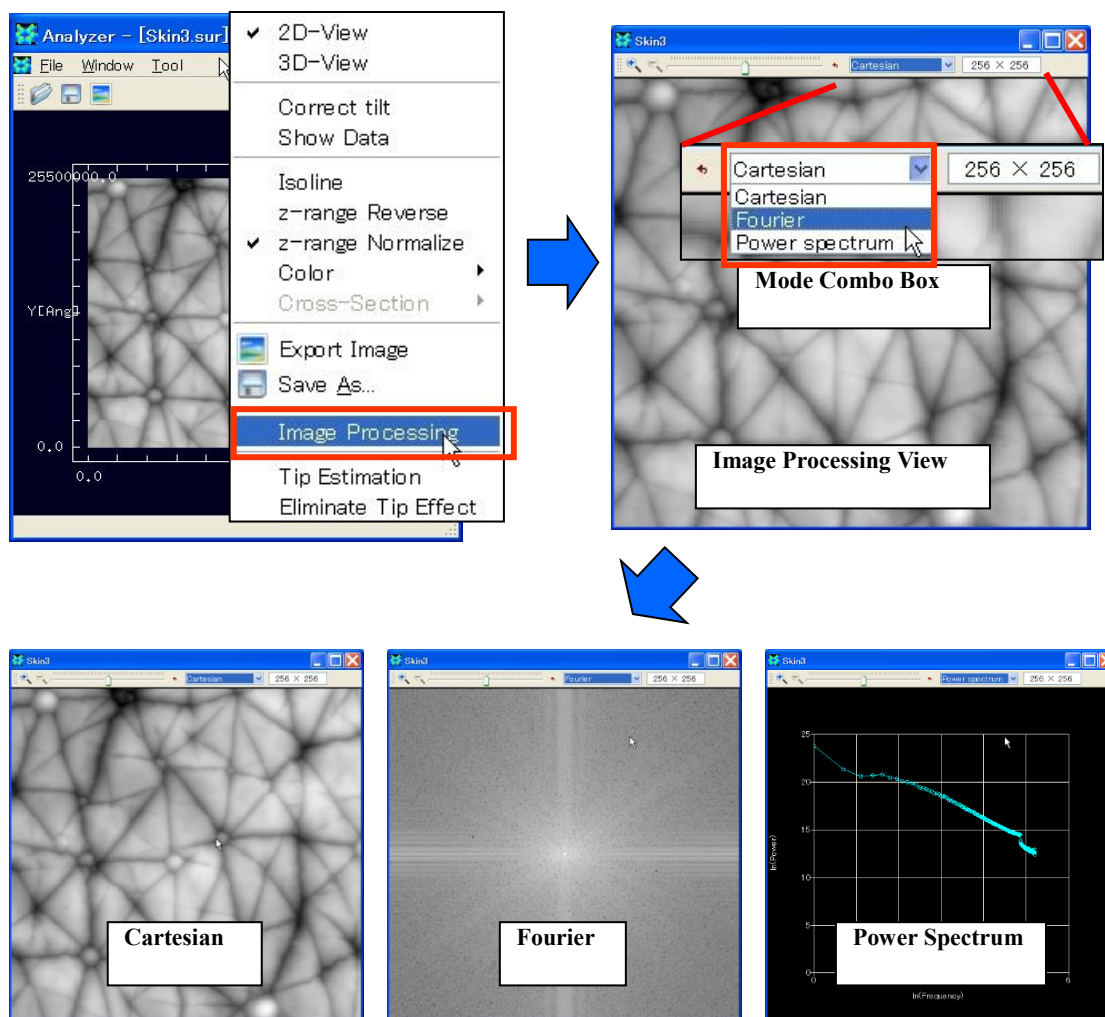
5 画像のフーリエ解析・高解像度化

本機能を用いることで、FFT 解析を用いた画像処理、Lanczos 補間を用いた画像の高解像度化処理を行うことができます。

画像のフーリエ解析

【データ描画】

⁴⁷ この操作は、“ Tool Bar ” → Export Image アイコンをクリックすることでも行えます。



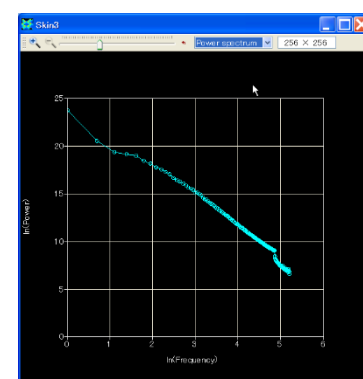
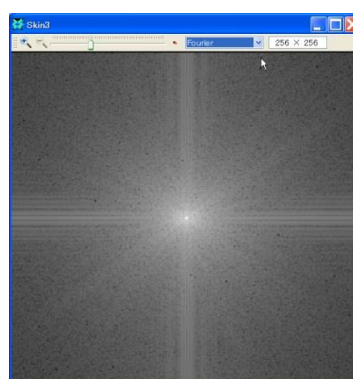
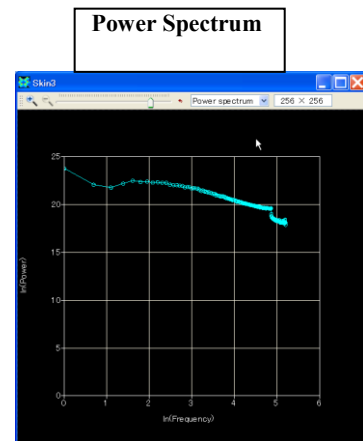
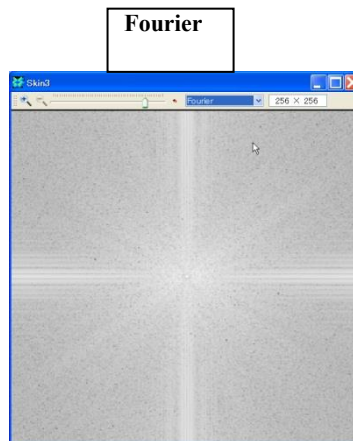
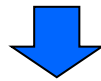
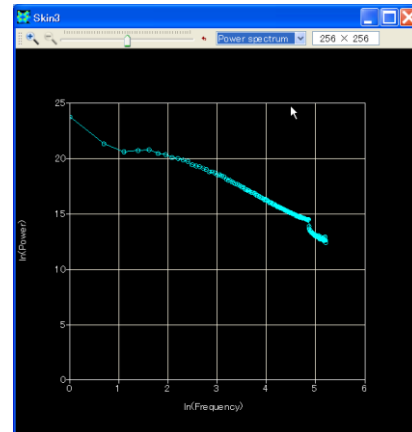
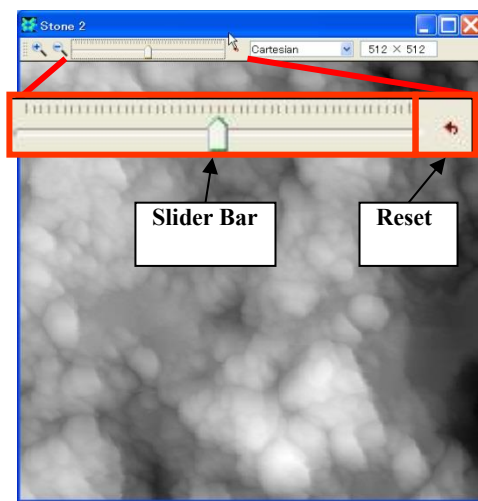
1. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー → [Image Processing] → “Image Processing View”
2. “Tool Bar” → “Mode Combo Box” → [Cartesian/Fourier/Power Spectrum]

“Mode Combo Box”において、Cartesian（通常画像）、Fourier（フーリエ画像）⁴⁸、Power Spectrum（パワースペクトルグラフ）⁴⁹の表示を切り替えることができます。

【画像処理】

⁴⁸ Fourier 画像の値は Log Scale で表示しています。

⁴⁹ Power Spectrum は両対数グラフとして表示しています。

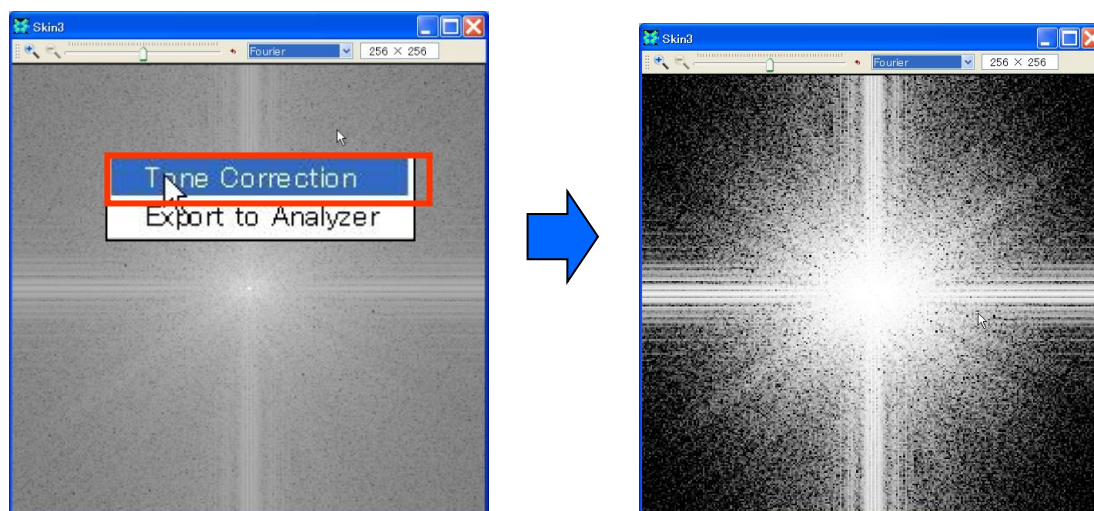


1. “Tool Bar” → “Slider Bar” 移動
2. “Tool Bar” → [Reset] クリック

“Slider Bar”のつまみを移動させることで、パワースペクトルグラフの傾きを連続的に変化

させることができます⁵⁰。それに伴って、Cartesian（通常画像）、Fourier（フーリエ画像）も変化します。つまみを左（右）に移動させると低周波（高周波）を強調した画像になります。また[Reset]ボタンをクリックすることで、スライダーバーのつまみの位置を、ゼロ位置に戻すことができます。

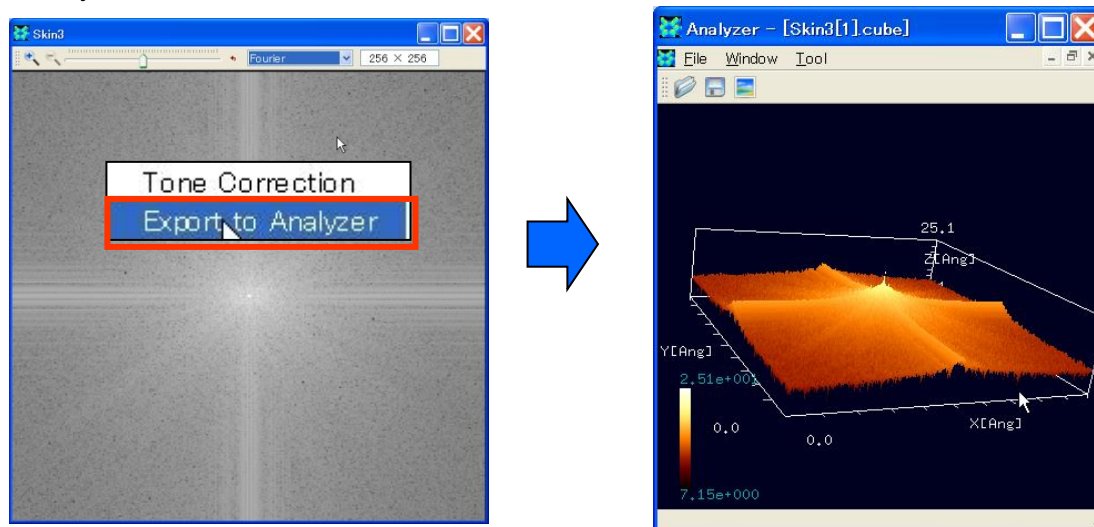
【階調補正】



1. "Image Processing View"右クリック → コンテキストメニュー → [Tone Correction]

[Tone Correction]はトグルボタンであり、この操作によって階調補正のオンオフを切り替えることができます。

【Analyzer へのエクスポート】

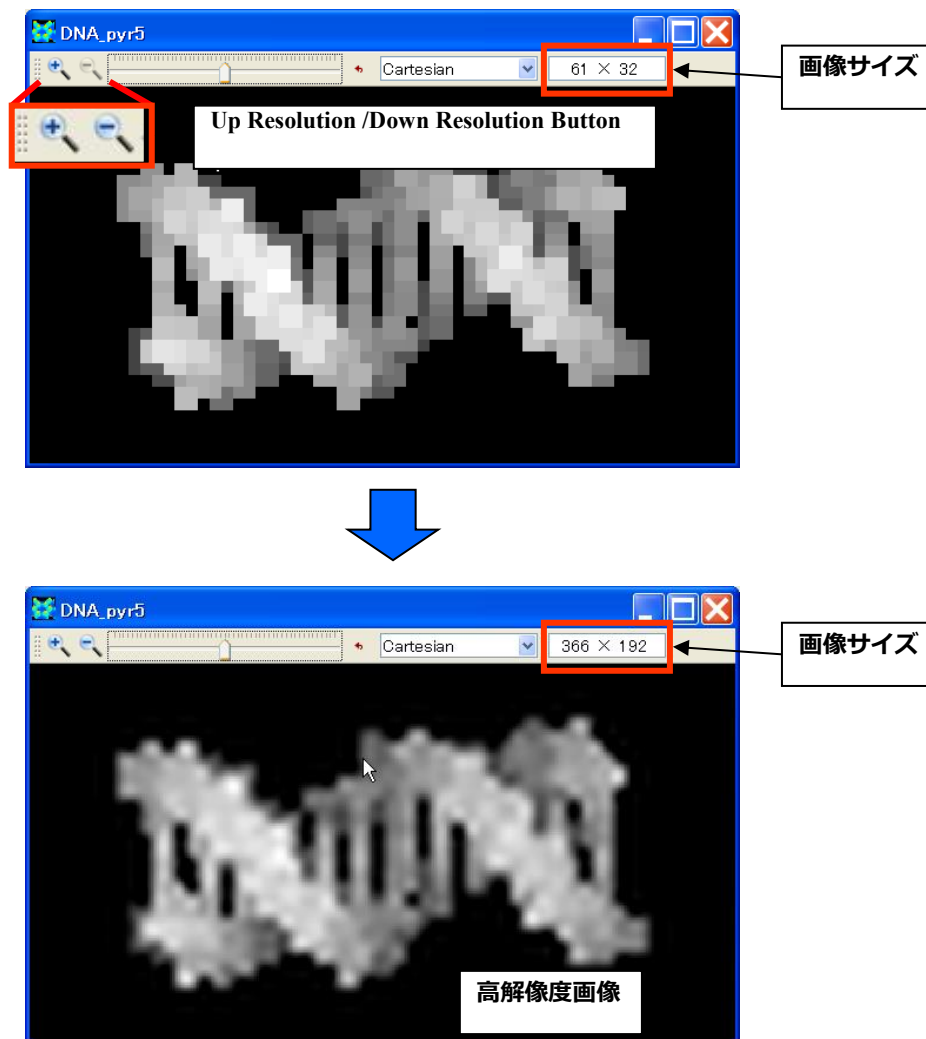


⁵⁰ グラフを、べき分布、つまり両対数グラフで直線として近似し、その傾きを連続的に変化させていきます。

1. "Image Processing View"右クリック → コンテキストメニュー → [Export to Analyzer]

この操作によって、"Image Processing View"上の画像を、Analyzer 上の"Image View"にエクスポートすることができます。その際、データは、"ファイル名[1].cube"という Cube 形式のファイルに自動保存されます。

画像高解像度化



1. "Tool Bar" → [Up Resolution / Down Resolution]

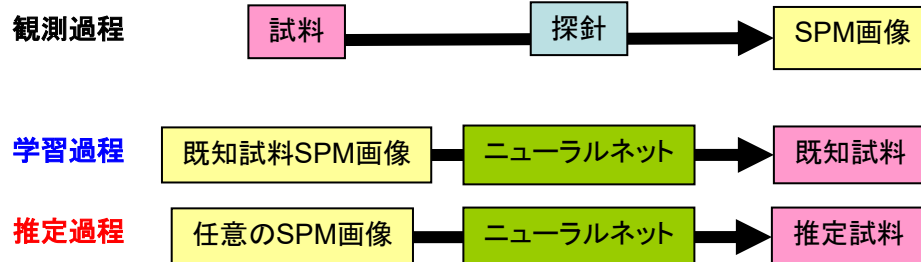
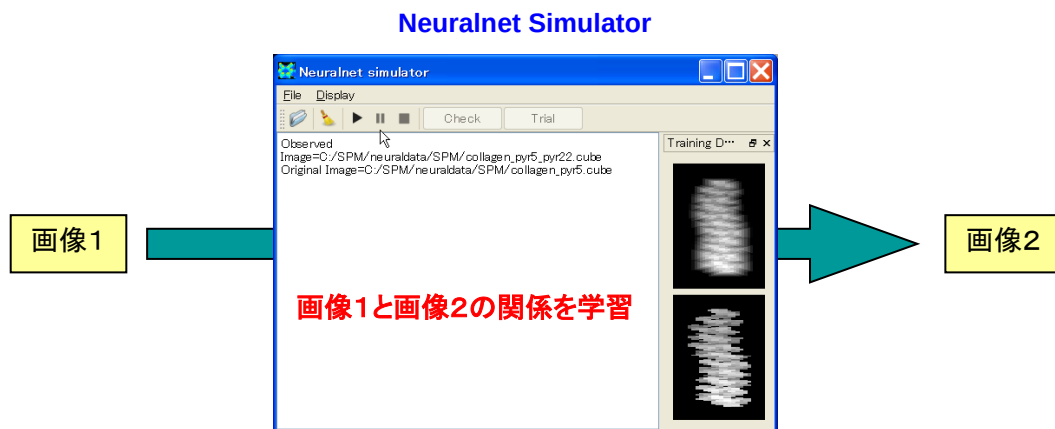
[Up Resolution / Down Resolution]ボタンを押すことによって、画像の解像度を上げたり下げたり⁵¹することができます。画像サイズは"Tool Bar"右端のテキストボックスに表示されます。

⁵¹ 解像度を変える際、Lanczos フィルターを用いた補間処理を行っています。

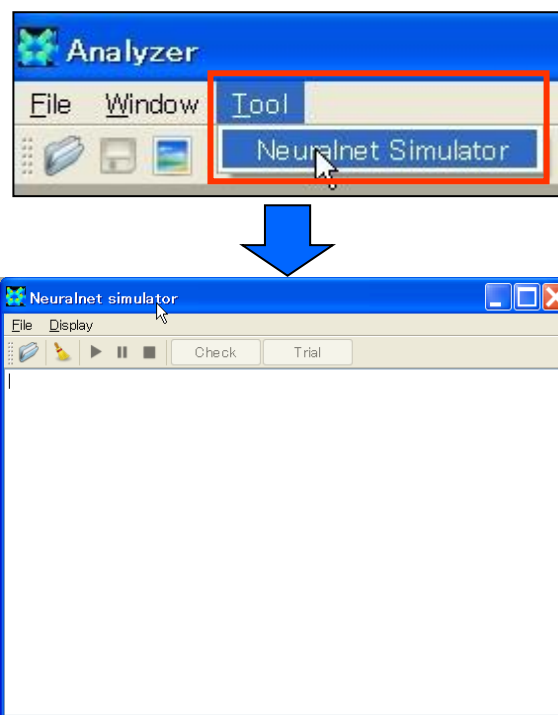
6 ニューラルネットシミュレータ

6 ニューラルネットシミュレータ

ニューラルネットシミュレータは、「原画像と観測画像」、「低解像度画像と高解像度画像」といった何らかの関係のある2種類の画像間の関係を学習することができます。例えば形状が既知の標準試料をトレーナー画像（正解画像）とし、そのSPM画像を入力画像として両者の関係を学習させるとします。この場合ネットワークは、探針がSPM画像に及ぼす影響を学習していると考えられます。学習終了後、このネットワークに、同じ探針で走査したある試料のSPM画像を入力すると、探針の影響を取り除いた画像が出力されると期待できます。

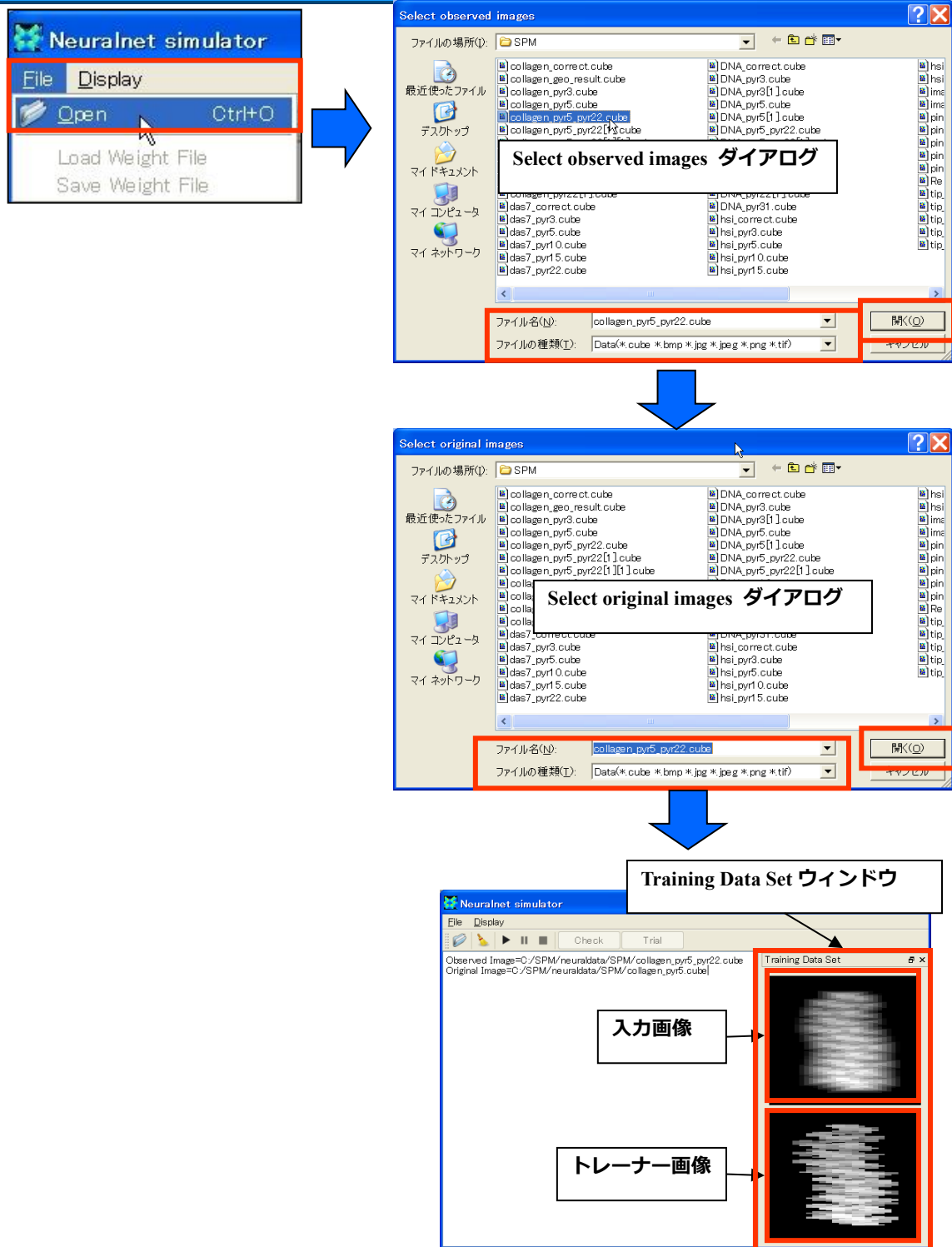


ニューラルネットシミュレータの起動



1. Analyser“Menu Bar” → [Tool] → [Neuralnet Simulator]

学習データの設定



1. Neuralnet Simulator "Menu Bar" → [File] → [Open]⁵² → "Select observed images" ダイアログ

⁵² この操作は、"Tool Bar" → Open アイコンをクリックすることでも行えます。

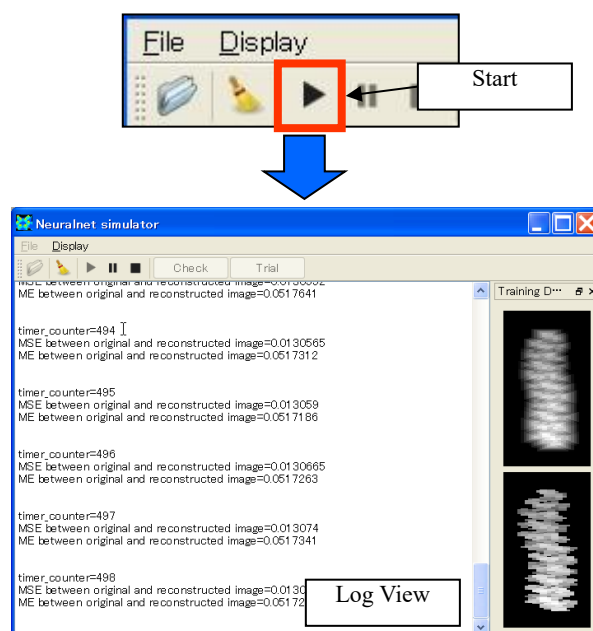
イアログ → 入力画像指定 → [開く]

2. "Select original images"ダイアログ → トレーナー画像指定 → [開く]

以上の操作でニューラルネットシミュレータに学習データ設定されます。学習データは入力画像、トレーナー画像ともに複数枚指定することができますが、両者は同じ枚数でなければなりません。設定された画像は、シミュレータの右側（右上：入力画像、右下：トレーナー画像）に表示されます。ただし複数枚指定した場合は、それらの内1セット分だけ表示されます。

学習の実行・停止・一時停止

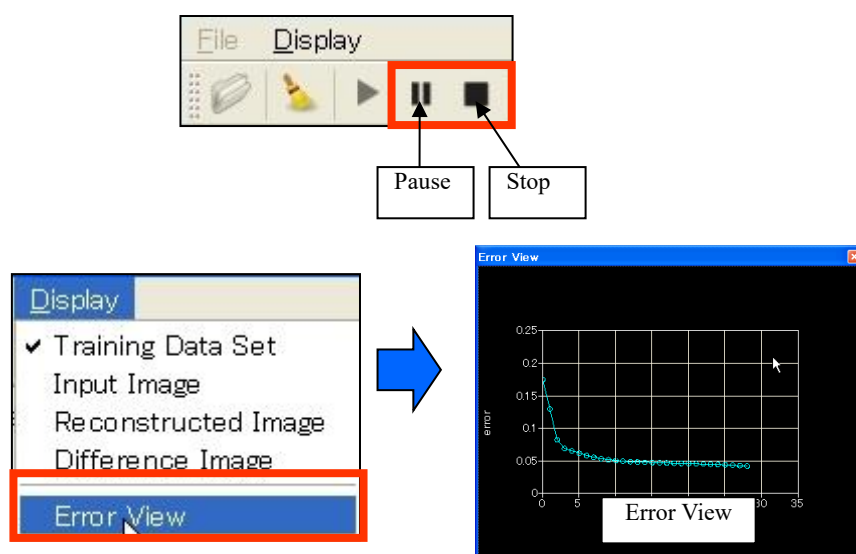
【実行】



1. "Tool Bar" → [Start]

[Start]ボタンを押すと、学習が開始されます。ニューラルネットからのメッセージは、Log View 上に表示されます。

【停止・一時停止】



1. “Tool Bar” → [Stop/ Pause]
2. “Menu Bar” → [Display] → [Error View]

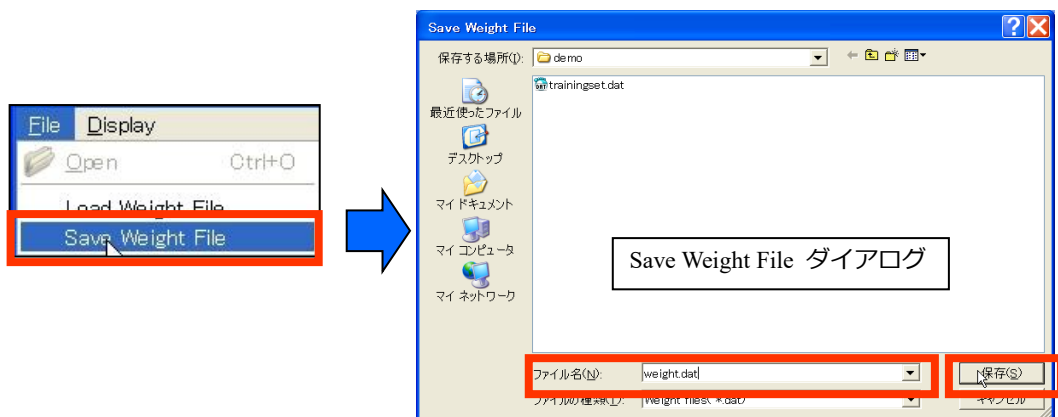
学習開始後、[Start]ボタンが使用不可となり、[Stop]ボタンと[Pause]ボタンが使用可能となります。[Stop]ボタンを押せば実行を停止し、ネットワークの状態は初期化されます。[Pause]ボタンを押すことで、学習を一時停止できます。再開するには、再び[Start]ボタンを押します。学習を一時停止し、Error View を立ち上げることで、各時点でのネットワークの出力画像とトレーナー画像（正解画像）との平均二乗誤差（Mean Square Error:MSE）の時間発展を見ることができます。なお、各時点での MSE は、“Log View”上にも表示されます。

学習結果の保存と読み込み

【保存】

一時停止、あるいは学習が完了し、ニューラルネットが停止状態にある時には、その時点での学習状態（ユニット間の重み）を保存することができます⁵³。以下では保存方法について説明します。

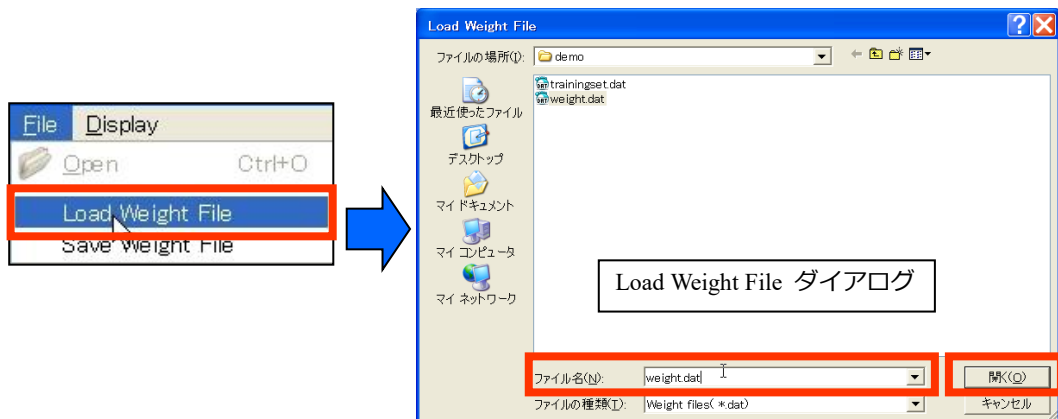
⁵³ [Stop]ボタンを押すと、ネットワークの状態が初期化されてしまいます。保存は[Stop]ボタンを押す前に行ってください。



1. “Menu Bar” → [File] → [Save Weight File] → ”Save Weight File”ダイアログ
2. 保存ファイル名指定 → [保存]

【読み込み】

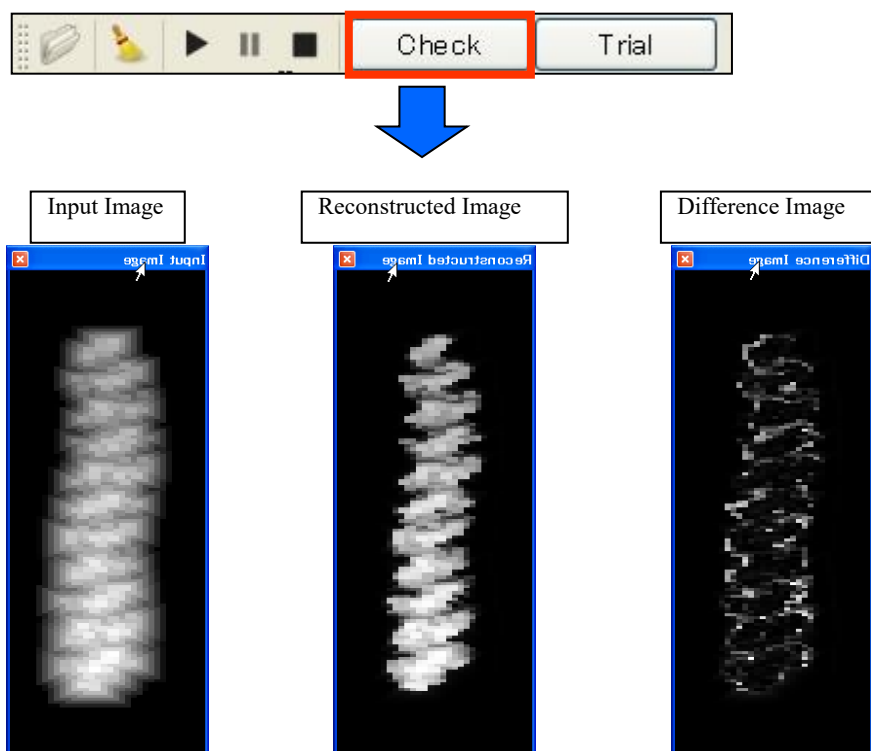
保存された学習結果ファイルは、ニューラルネットワークに読み込むことができます。これによって、ファイルが保存された時点の学習状態を再現することができます。



1. “Menu Bar” → [File] → [Load Weight File] → ”Load Weight File”ダイアログ
2. 読み込みファイル名指定 → [開く]

学習結果のチェックと新規入力画像に対する試行

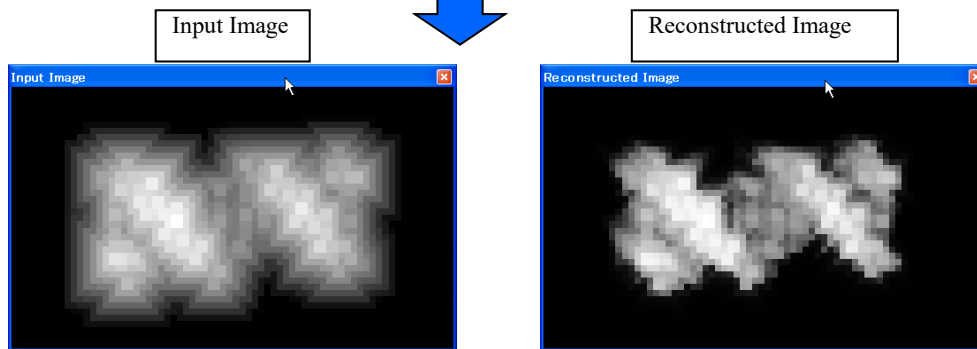
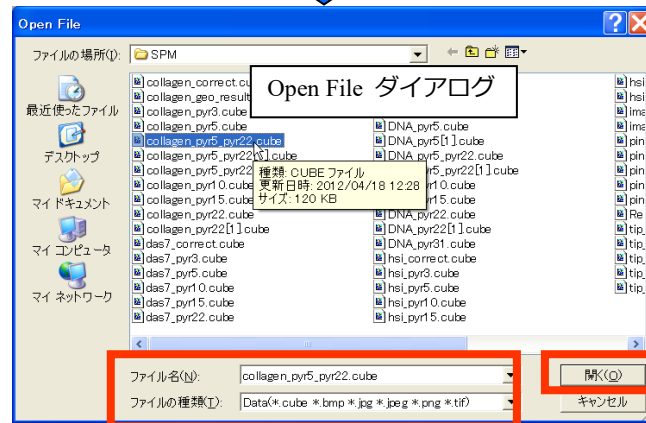
【学習結果のチェック】



1. “Tool Bar” → [Check] → “Input Image/Reconstructed Image/Difference Image”

一時停止、あるいは学習が完了し、ニューラルネットが停止状態にある時には、その時点での学習状態を視覚的にチェックすることができます。ツールバーの[Check]ボタンを押すと、その時点のネットワークに学習データセット時に指定した入力画像(Input Image)が入力され、出力結果画像(Reconstructed Image)が表示されます。またこの結果画像と、はじめに学習データとしてセットされたトレーナー画像との差分画像(Difference Image)も表示されます。

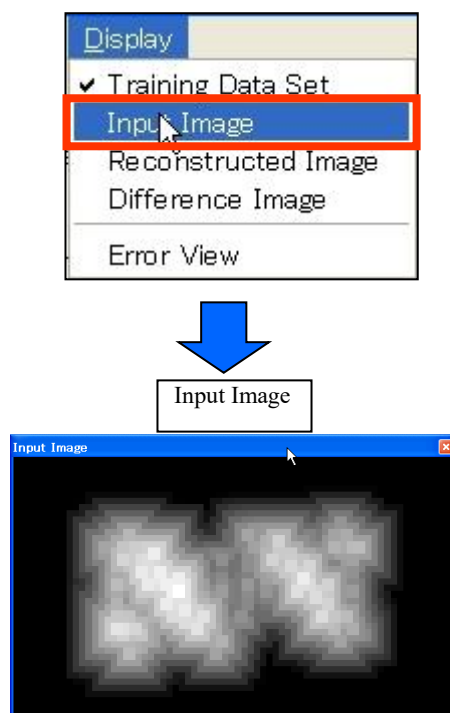
【新規入力画像に対する試行】



1. “Tool Bar” → [Trial] → “Open File”ダイアログ
2. 画像ファイル指定 → [開く] → “Input Image/Reconstructed Image/Difference Image”

学習終了後、学習データセット時に用いられた入力画像とは別の画像を使って、そのニューラルネットワークをテストすることができます。ツールバーの[Trial]ボタンをクリックし、“Open File”ダイアログで入力画像を指定すると、その時点のネットワークに指定画像 (Input Image)が入力され、計算結果画像(Reconstructed Image)が表示されます。

ウィンドウの表示／非表示・LogView のクリア

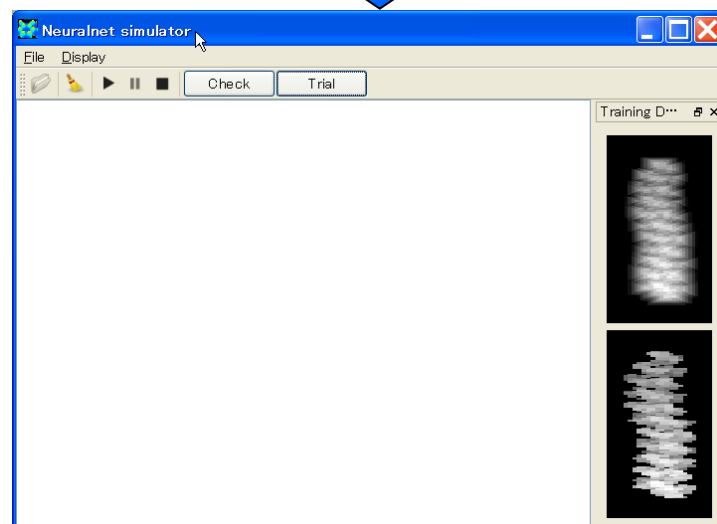
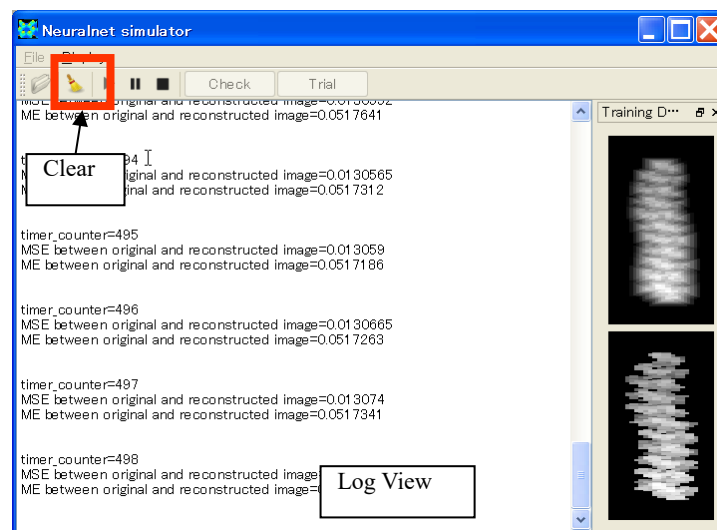


【ウィンドウの表示／非表示】

1. “Menu Bar” → [Display] → [Training Data Set / Input Image / Reconstructed Image / Difference Image / Error View]

[Display]メニューから表示／非表示したい Window をクリックします。 [Training Data Set / Input Image / Reconstructed Image / Difference Image / Error View]は各々トグルボタンであり、クリックを繰り返すことによって、対応するウィンドウの表示／非表示を切り替えられます。

【Log View のクリア】



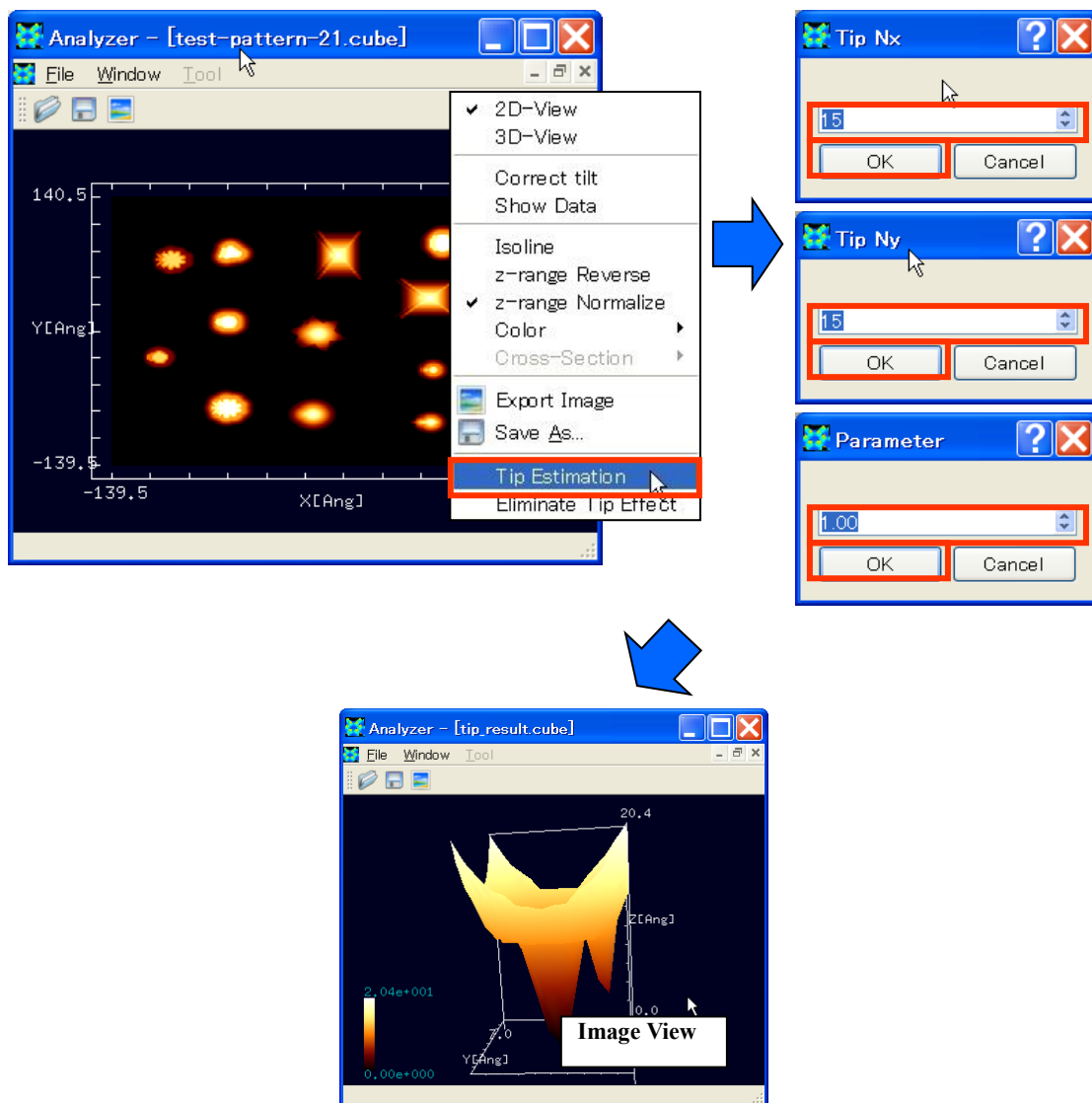
1. “Tool Bar” → [Clear]

ツールバーの[Clear]ボタンを押すことで、“Log View”に表示されている文字列が全て消去されます。

7 探針形状推定・探針影響除去

本機能を用いることで、測定データのみから、探針形状を自動推定することができます。また、測定データからその推定探針の影響を取り除いた画像を作成することができます。

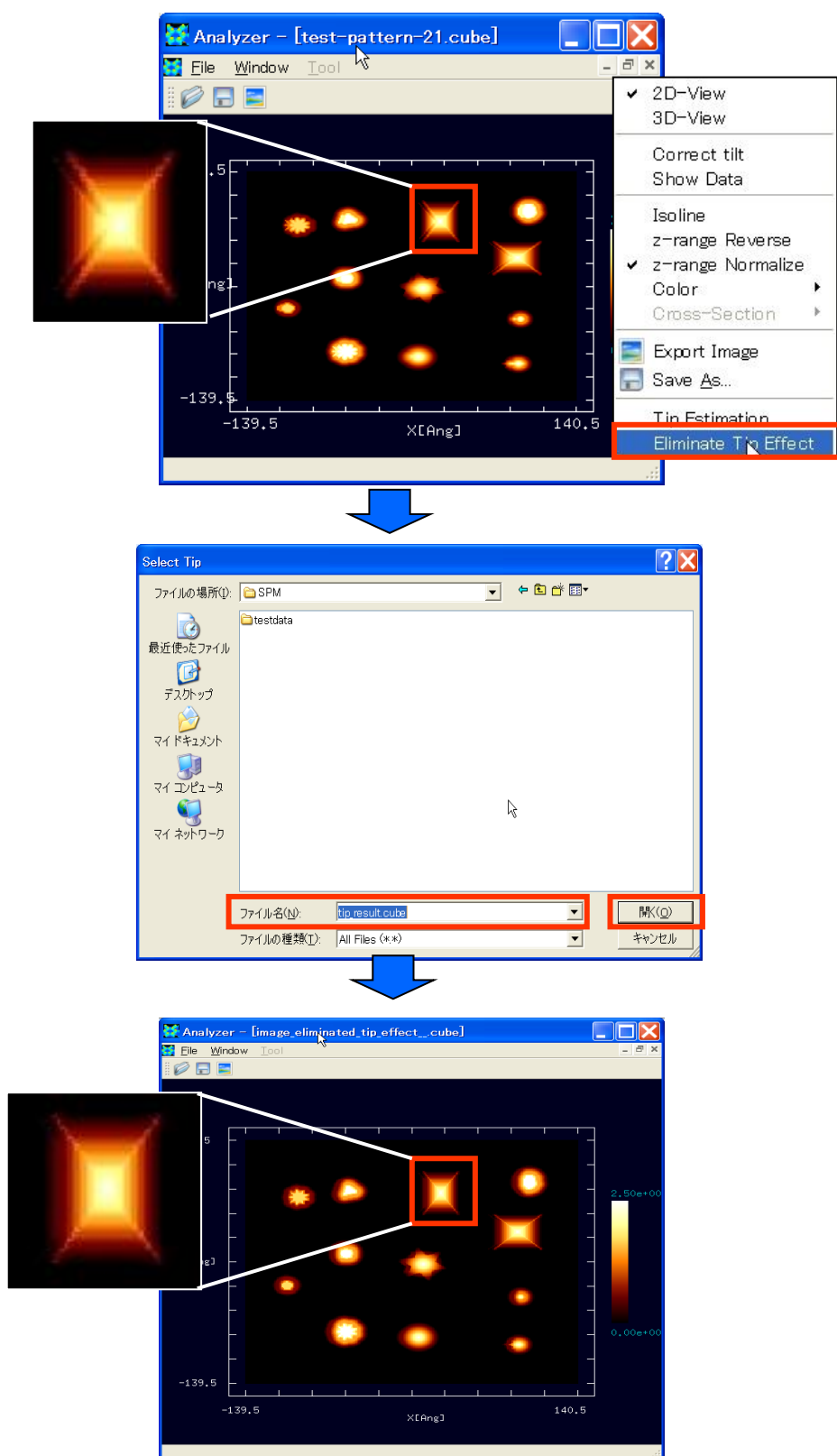
探針形状推定



1. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー → [Tip Estimation]
2. “Tip Nx”ダイアログ → 数値入力 → [OK]
3. “Tip Ny”ダイアログ → 数値入力 → [OK]
4. “Parameter”ダイアログ → 数値入力 → [OK]

はじめに Image View に測定データを読み込み、コンテキストメニューから[Tip Estimation]を選択します。次に Tip Nx と Tip Ny ダイアログで、各々推定する探針の横と縦のサイズ（ピクセル単位）を指定します。最後に Parameter（[0.0,1.0]区間の実数）を指定します。この指定によって、無数にある探針の候補のうち、最大探針（Parameter=0.0）から、最小探針（Parameter=1.0）まで推定することができます。推定された探針は、データファイルと同じフォルダに tip_result.cube というファイル名で自動保存されると同時に、新たな Image View が立ち上がり、その形状が描画されます。

探針影響除去



1. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー → [Eliminate Tip Effect]

2. "Select Tip"ダイアログ → ファイル名指定 → [OK]

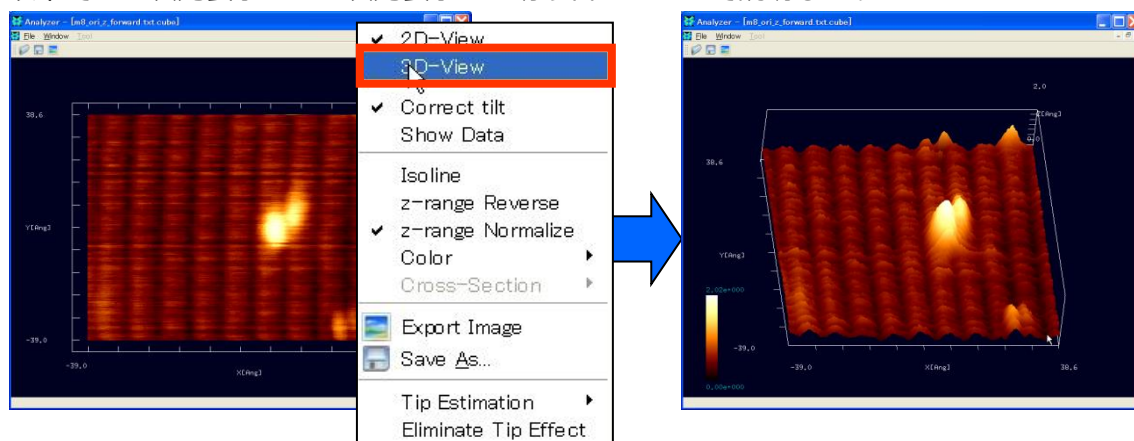
測定データが表示されている Image View 上のコンテキストメニューから[Eliminate Tip Effect]を選択します。次に探針を指定し、測定データから探針の影響を取り除いた画像データを出力します。探針影響除去画像は、データファイルと同じフォルダに image_eliminated_tip_effect.cube というファイル名で保存されると同時に、新たな Image View が立ち上がり、形状が描画されます。

8 可視化設定

描画法の変更

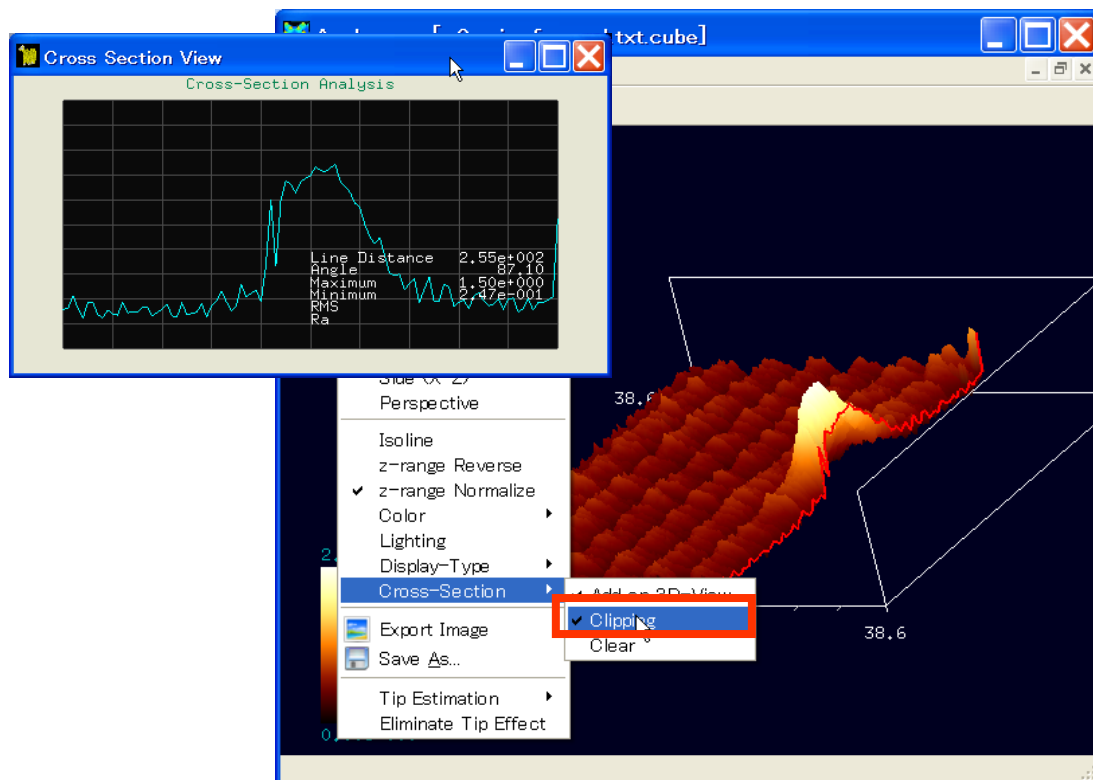
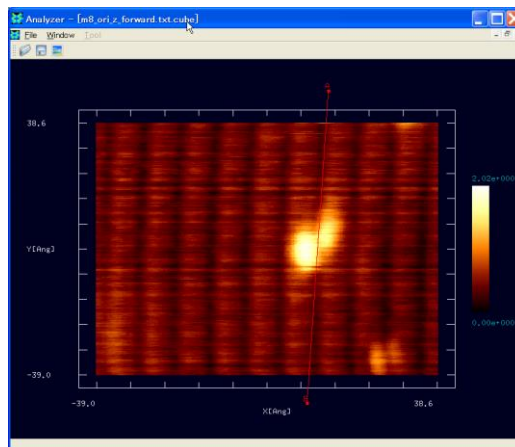
【2D／3D 表示切り替え】

以下では 2 次元表示から 3 次元表示への切り替えについて説明します。



1. "Image View"右クリック → コンテキストメニュー → [3D-View]

【断面図の表示】

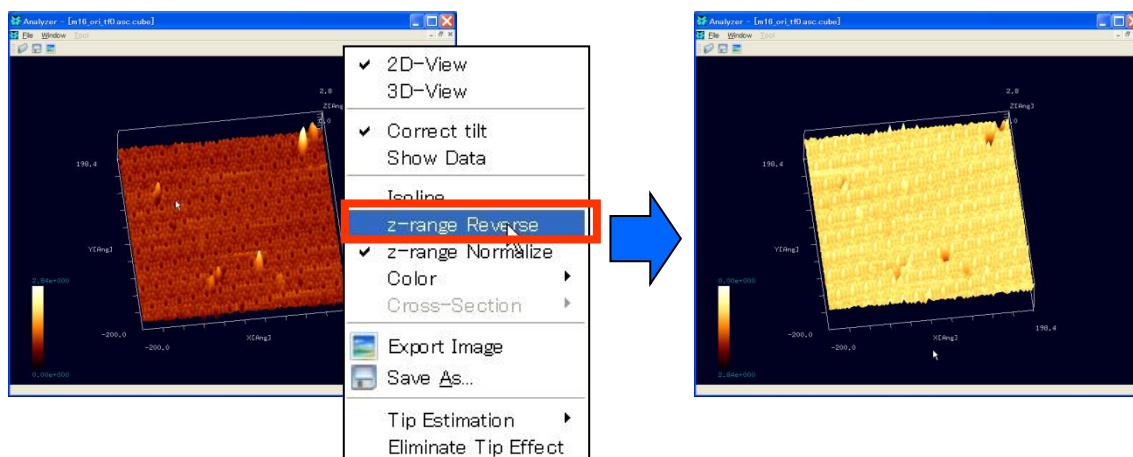


1. “Image View”上ダブルクリック → 始点決定
2. “Image View”上ダブルクリック → 終点決定
3. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー → [3D-View]
4. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー → [Cross-Section] → [Clipping]

始点と終点の指定は、2D表示にして行います。終点の指定が終了すると、自動的に Cross

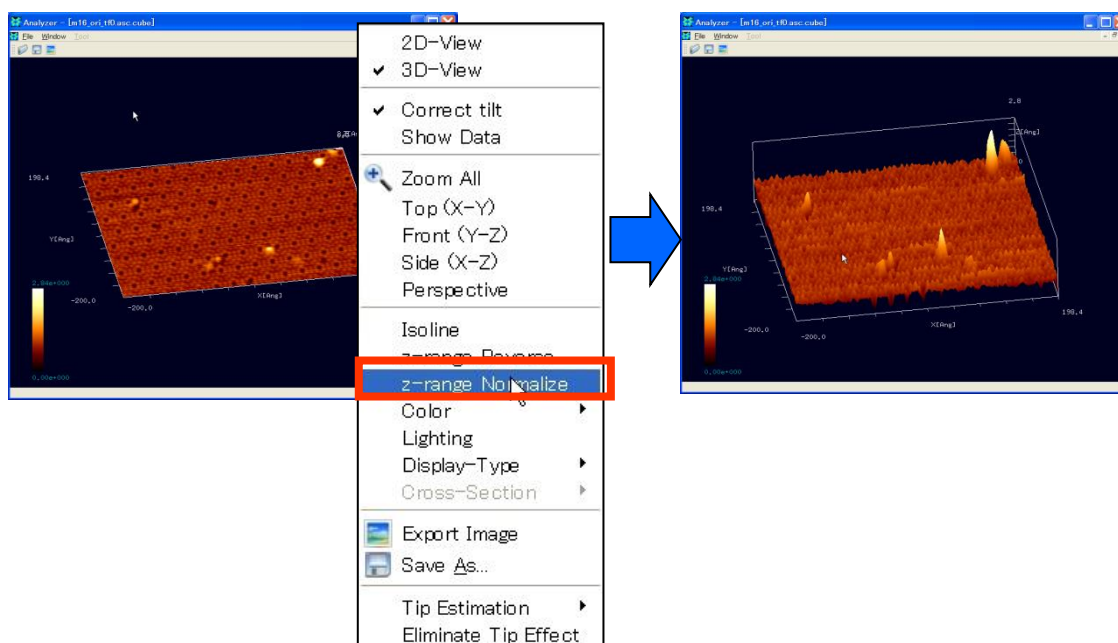
Section View が立ち上がり、断面図がグラフ表示されます。3D 表示に切り替えてコンテキストメニューから[Clipping]を選択することで、3D 画像を切り取ることができます。元に戻すには、再度[Clipping]を選択します。また[Clear]を選択すると、始点終点位置などの切断情報がクリアされます。

【Z 軸の反転】



1. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー → [z-range Reverse]⁵⁴

【Z 軸の正規化】

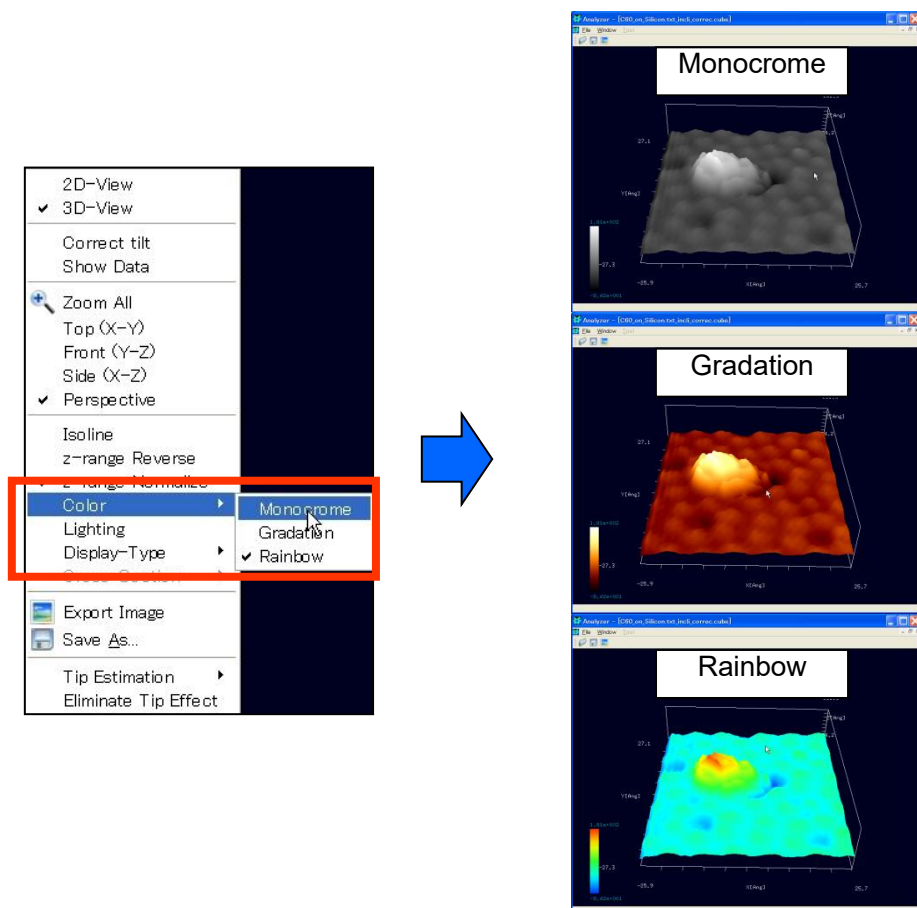


⁵⁴ [z-range Reverse]はトグルボタンであり、繰り返しクリックすることで Z 軸反転の有無を交互に切り替えられます。

1. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー → [z-range Normalize] ⁵⁵

縦横サイズに比して高低差が非常に小さい場合、3D 表示しても見た目は平面とほとんど変わりません。そのような場合、Z 軸を正規化することで、高低差を強調して表示することができます。

【描画色の設定】



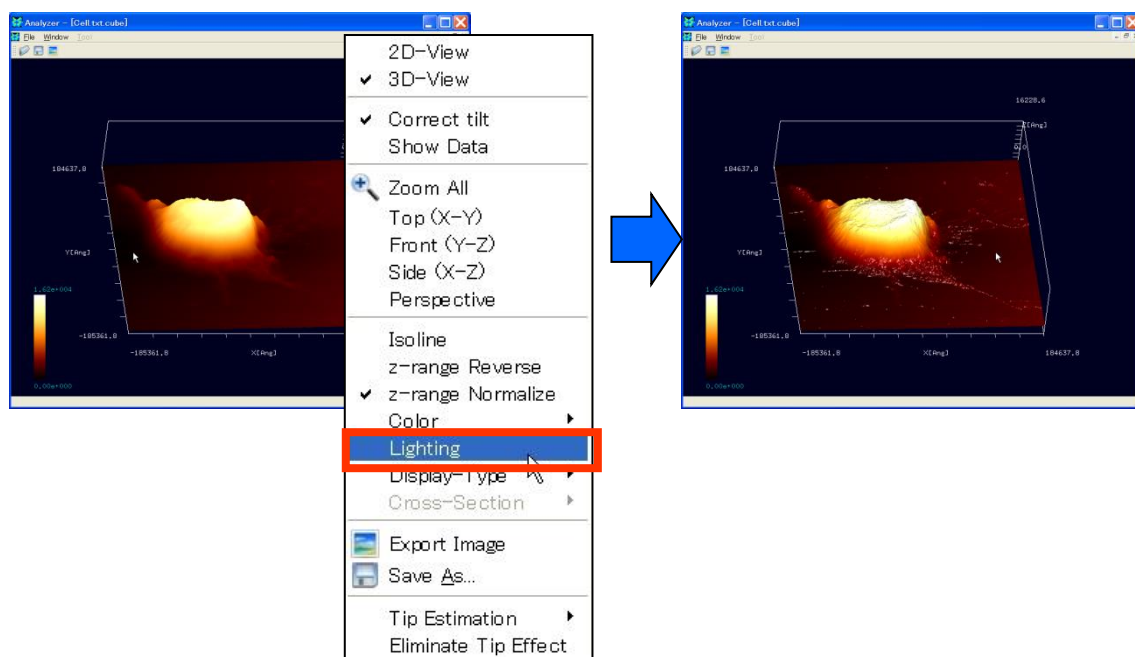
1. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー

2. [Color] → [Monochrome / Gradation / Rainbow]

以上の操作で、描画色の設定を変更することができます。

【ライティング】

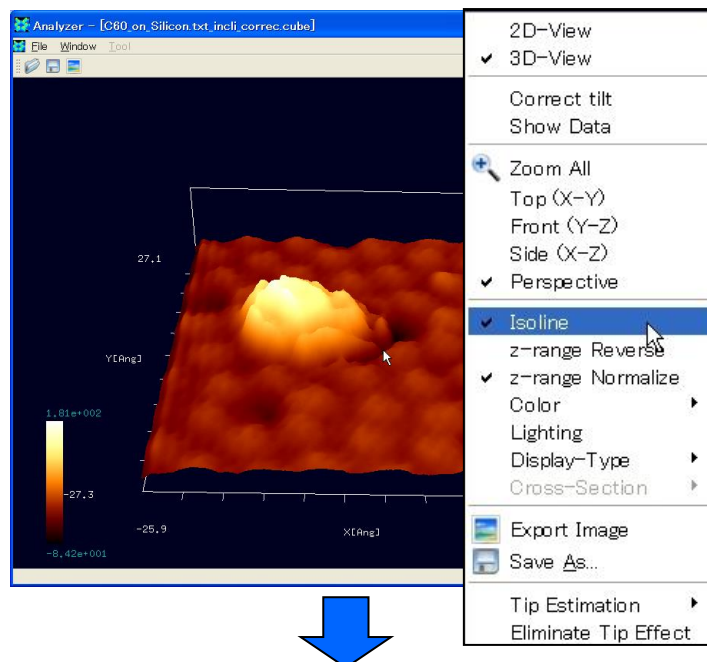
⁵⁵ [z-range Normalize]はトグルボタンであり、繰り返しクリックすることで正規化の有無を交互に切り替えられます。



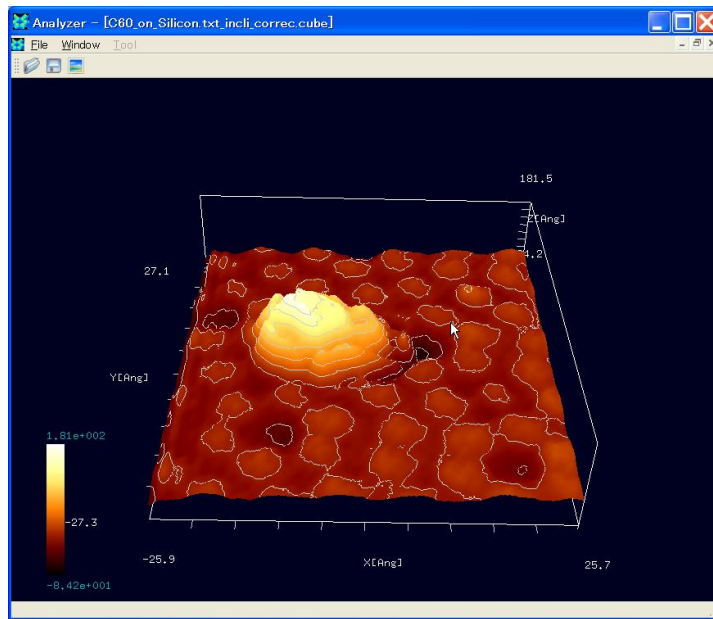
1. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー → [Lighting] ⁵⁶

この処理は、3D表示の場合のみ有効です。

【等高線表示／非表示切り替え】

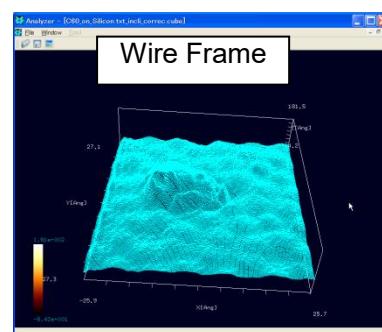
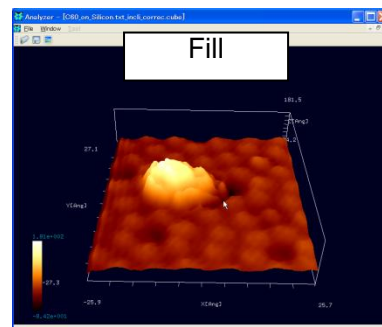
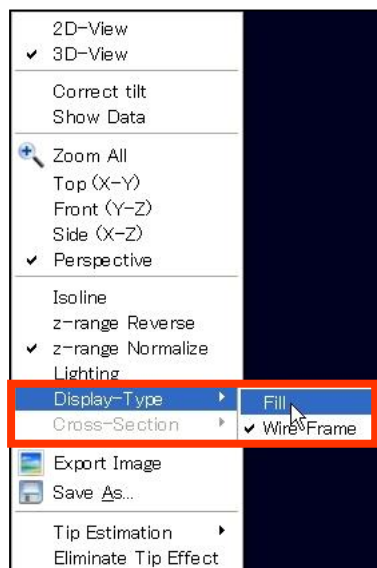


⁵⁶ [Lighting]はトグルボタンであり、繰り返しクリックすることでライティングの有無を交互に切り替えられます。



1. "Image View"右クリック → コンテキストメニュー → [Isoline]⁵⁷

【表示タイプの切り替え】



1. "Image View"右クリック → コンテキストメニュー

2. [Display-Type] → [Fill / Wire Frame]

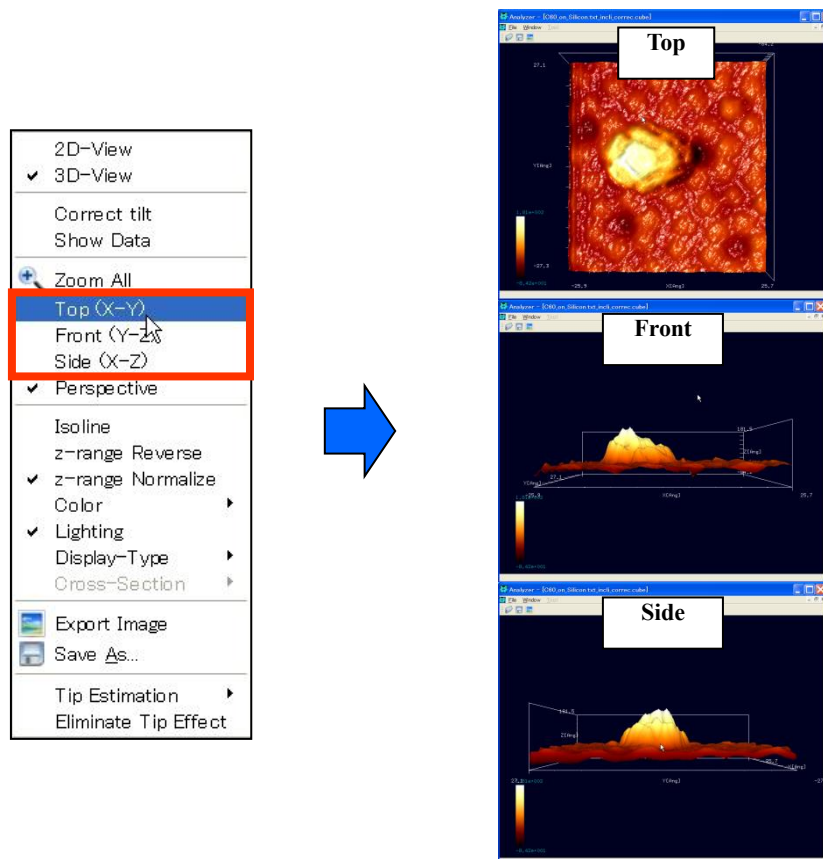
この処理は、3D表示の場合のみ有効です。

⁵⁷ [Isoline]はトグルボタンであり、繰り返しクリックすることで等高線の表示／非表示を交互に切り替えられます。

視点の変更・Zoom All・拡大縮小・遠近法表示

以下の処理は、3D表示の場合のみ有効です。

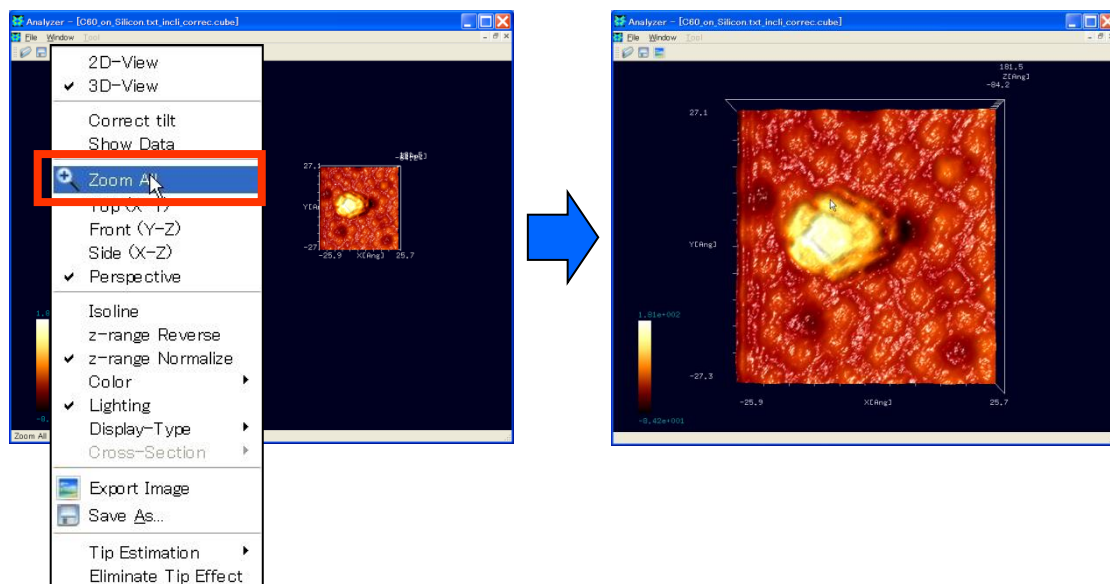
【視点の変更】



1. "Image View"右クリック → コンテキストメニュー
2. [Top/Front/Side]

この操作を行うことで、真上（Top）、正面（Front）、真横（Side）に視点を変更されます。
また、Image View 上をドラッグすることにより視角を自由に変更することもできます。
[Shift]+ドラッグすることにより、視点を平行移動させることができます。

【Zoom All】



1. "Image View"右クリック → コンテキストメニュー → [Zoom All]

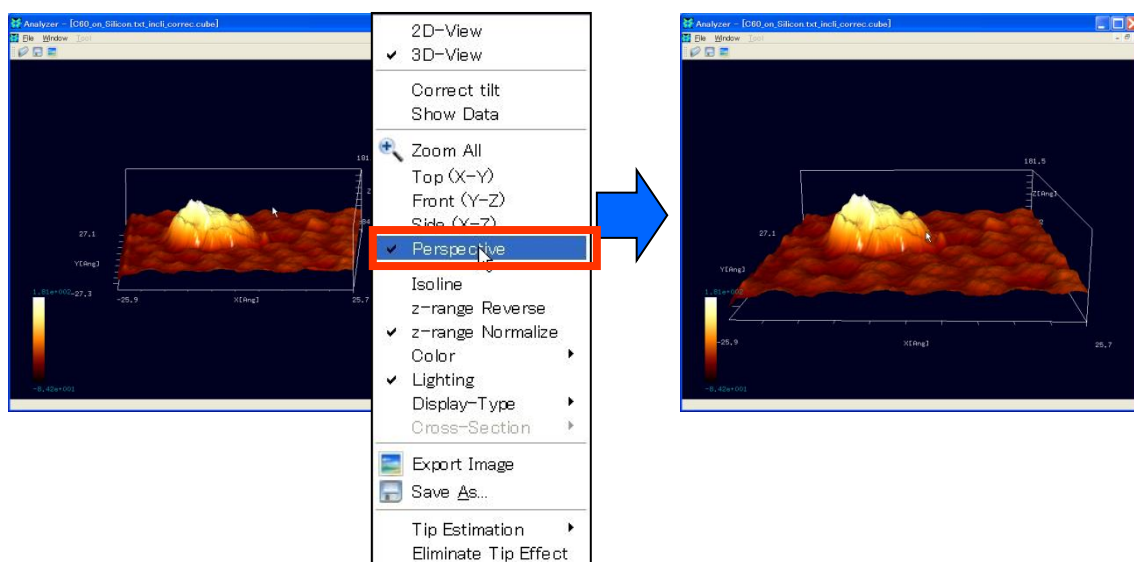
この操作によって、描画が"Image View"画面全体に収まるように、自動的に拡大縮小および平行移動が行われます。

【拡大縮小】

1. マウスホイール→回転

マウスホイールを回転させることで、任意の倍率にスケーリングすることができます。

【遠近法表示】



1. "Image View"右クリック → コンテキストメニュー → [Perspective]⁵⁸

⁵⁸ [Perspective]はトグルボタンであり、この操作によって遠近法表示のオンオフを切り替えることができます。

9 デジタル画像処理機能

Analyzer には、デジタル画像処理ツールとして、以下の四つの機能が用意されています。

- 閾値による画像の二値化機能
- コントラスト調整(ガンマ補正)機能
- エッジ抽出(Sobel フィルタ処理)機能
- ノイズ除去(メディアンフィルタ処理)機能

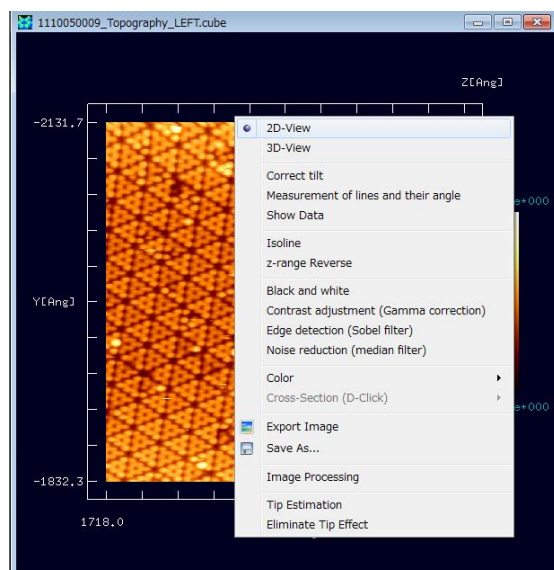
これら四つの機能は、一つの画像データに対して、複数の機能で処理できない仕組みになっています。これは、例えば、ある一つの Cube 形式ファイルで与えられる画像データに対して、エッジ抽出を行った後、コントラスト調整を行うことは出来ないことを意味します。もし、ある一つの Cube 形式画像データに対して、エッジ抽出、コントラスト調整といった複数の処理を続けて行う場合は、いったんエッジ抽出を行った後で、その結果を Cube 形式ファイルとして保存し、そのファイルを開き直して、コントラスト調整を行う、という手順を踏む必要が有ります。

このように、上記の四つのデジタル処理機能が、単一の Cube 形式ファイルに対して連続して行えないようになっていているのは、以下の理由からです。一般に、上記 4 種類のデジタル処理機能は、処理を行う順番によって、結果が異なります。例えば、ある Cube 形式画像データに対して、エッジ抽出を行ってからコントラスト調整した場合と、逆にコントラスト調整してからエッジ抽出を行った場合とでは、得られる画像は異なったものになります。従って、ユーザーは、上記 4 種類の画像処理を行う場合、処理の順序や、処理で使用したパラメータを、ノートなどに記録して残しておく必要が有ります。

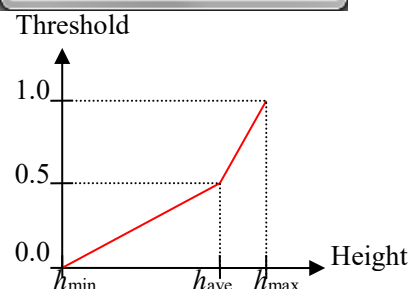
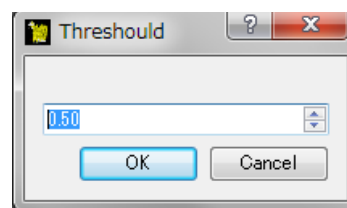
閾値による画像の二値化機能

Cube 形式の画像データに対して、以下のようにして、データの二値化、すなわち、白黒画像への変換が行えます。

画像が表示されているウィンドウ上を、マウスで右クリックすると、コンテキストメニューが現れます。メニューから、[Black and white]を選択すると、[Threshold]というウィンドウが現れます。ここで、白黒二値化の閾値を入力します。

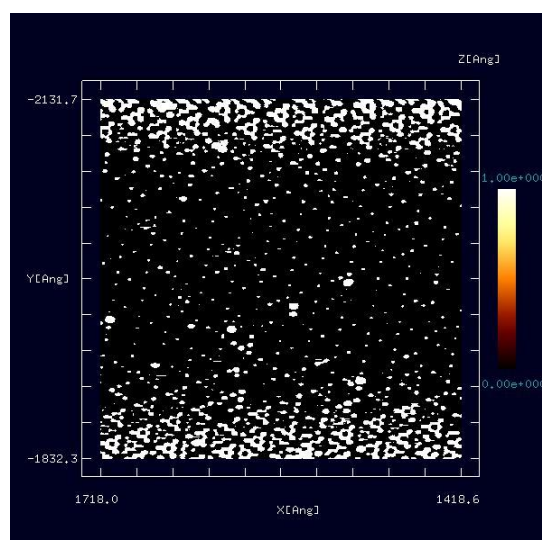
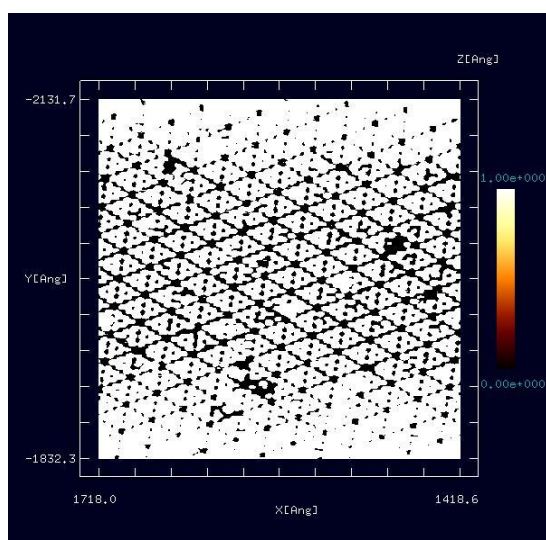
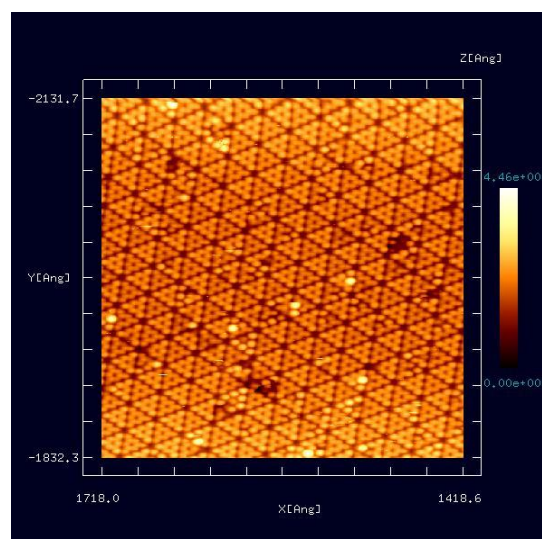


ここで、白黒二値化の閾値を 0.0 から 1.0 までの範囲で入力します。なお、閾値はデフォルトで 0.5 が設定されています。[OK]ボタンを押すと二値化画像が得られます。



Cube 形式の画像データには(x, y, z)の値が含まれ、そのうち z は高さ方向の値を意味します。オリジナル画像全体に対する z 値の最小値を 0.0、平均値を 0.5、最大値を 1.0 として、それらを繋ぐ折れ線を考えます。それに基づいて全体の z 値を 0.0~1.0 に変換したとき、指定した閾値より大きければ白、小さければ黒に、それぞれ色を定めます。これが二値化という名前の由来になります。

この図は、白黒画像変換前のオリジナル画像データを表しています。(左図の画像データは、東京工業大学・大学院総合理工学研究科、材料物理科学専攻、量子表面講座、平山博之教授から提供して頂いたものです。)



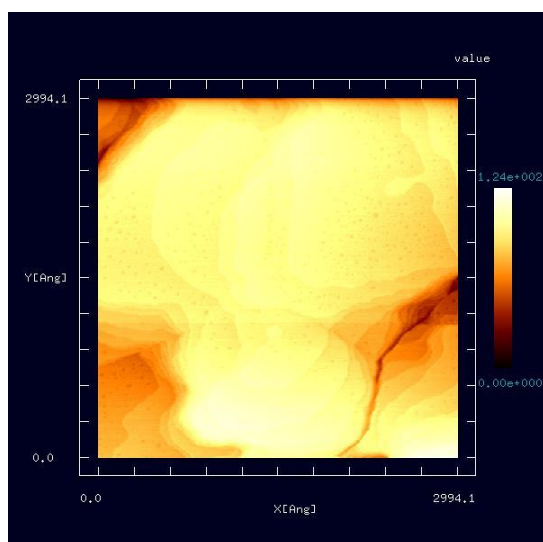
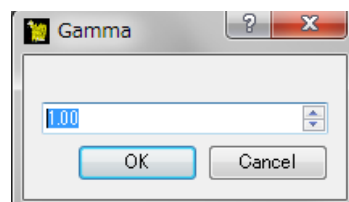
オリジナル画像に対して、閾値を 0.4 として 白黒画像変換を施した結果です。

オリジナル画像に対して、閾値を 0.6 として 白黒画像変換を施した結果です。

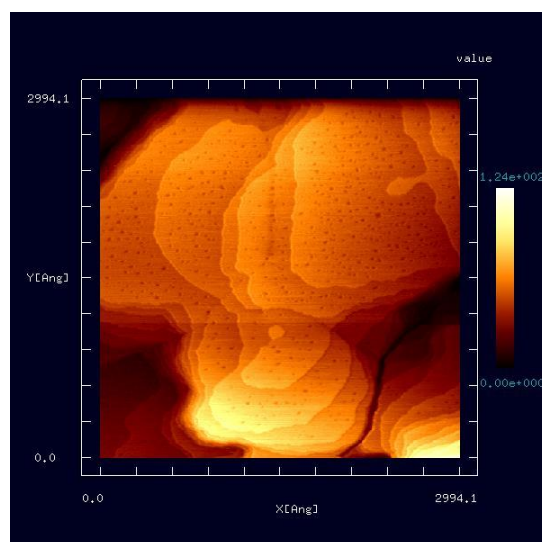
コントラスト調整 (ガンマ補正) 機能

Cube 形式の画像データに対して、以下のようにしてコントラスト調整が行えます。画像が表示されているウィンドウ上を、マウスで右クリックすると、コンテキストメニューが現れます。メニューから、[Contrast adjustment (Gamma correction)]を選択すると、[Gamma] というウィンドウが現れます。

ここで、コントラスト調整パラメータ γ を 0.25 から 4.0 までの範囲で入力します。 γ はデフォルトで 1.0 が設定されています。[OK]ボタンを押すとコントラスト調整した画像が得られます。



この図は、コントラスト調整前のオリジナルデータを表しています。画像が全体的に明るく、そのため、細かな高低差が分かりにくくなっています。(左図の画像データは、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、福井賢一教授から提供して頂いたものです。)



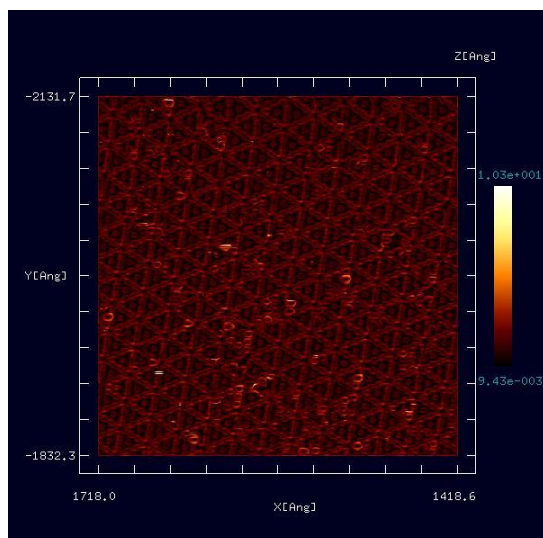
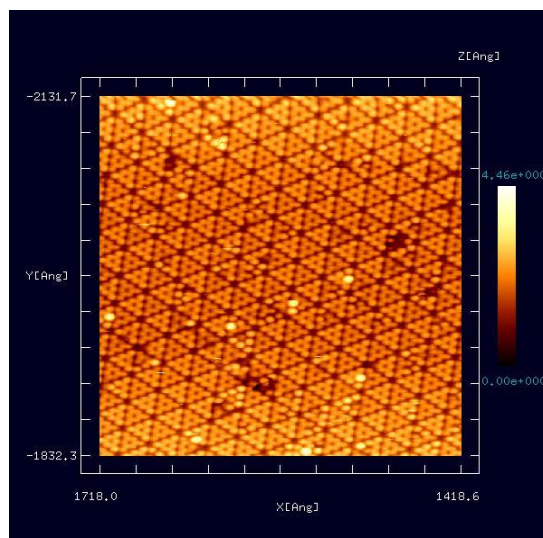
この図は、左のオリジナル画像に対して、 $\gamma = 0.33$ でコントラスト変換を施したものです。対象物の細かな高低差の構造が良く分かるように、画像が改善されています。

エッジ抽出 (Sobel フィルタ処理) 機能

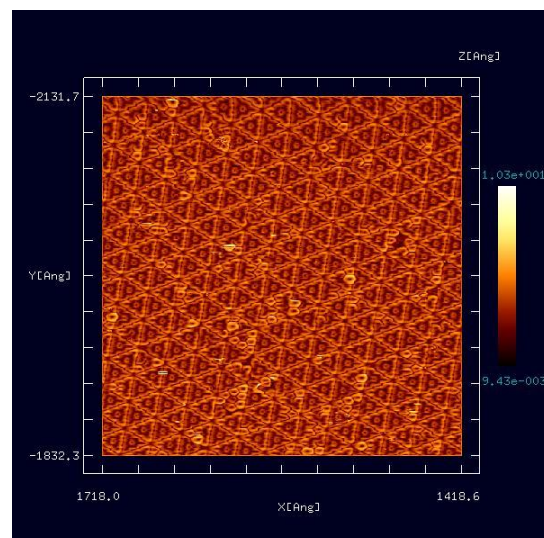
Cube 形式の画像データに対して、以下のようにしてエッジ抽出が行えます。画像が表示されているウィンドウ上を、マウスで右クリックすると、コンテキストメニューが現れます。メニューから、[Edge detection (Sobel filter)]を選択します。すると、エッジ抽出が行われま

す。

この図は、エッジ抽出前のオリジナル画像データを表しています。(左図の画像データは、東京工業大学・大学院総合理工学研究科、材料物理科学専攻、量子表面講座、平山博之教授から提供して頂いたものです。)



この図は、上のオリジナルデータ画像に対してエッジ抽出を行ったものです。画像が全体的に暗くなってしまったので、コントラスト調整することになります。それには、左の図の画像データを、一度、Cube 形式で保存して閉じます。

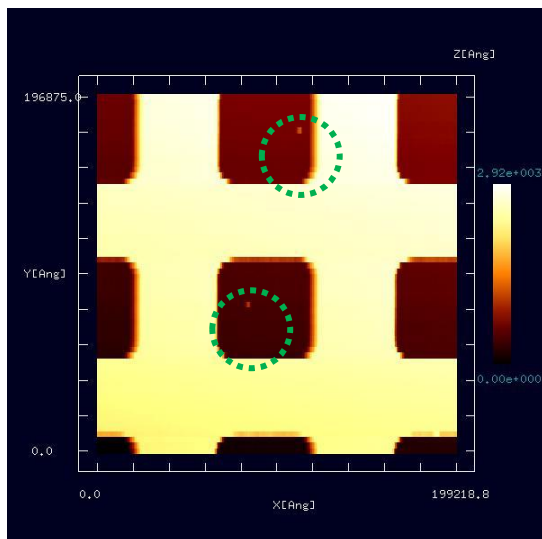


先ほど保存した Cube 形式ファイルを開いて、 $\gamma=2.0$ でコントラスト調整を施した図です。エッジがより見易くなっています。

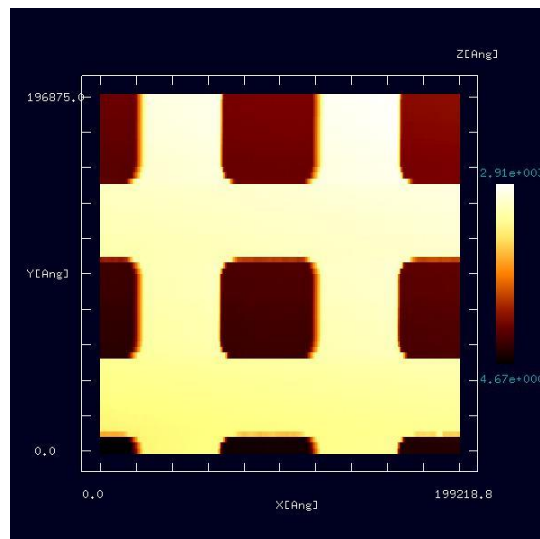
ノイズ除去(メディアンフィルタ処理)機能

Cube 形式の画像データに対して、以下のようにしてノイズ除去を行うことができます。画像が表示されているウィンドウ上を、マウスで右クリックすると、コンテキストメニューが現れます。メニューから、[Noise reduction (median filter)]を選択します。すると、ノイズ

除去が行われます。



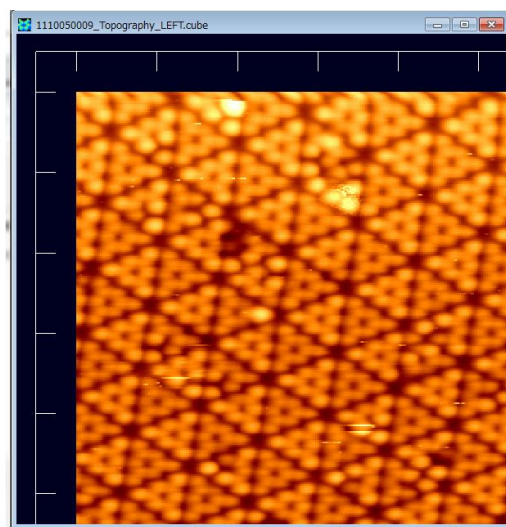
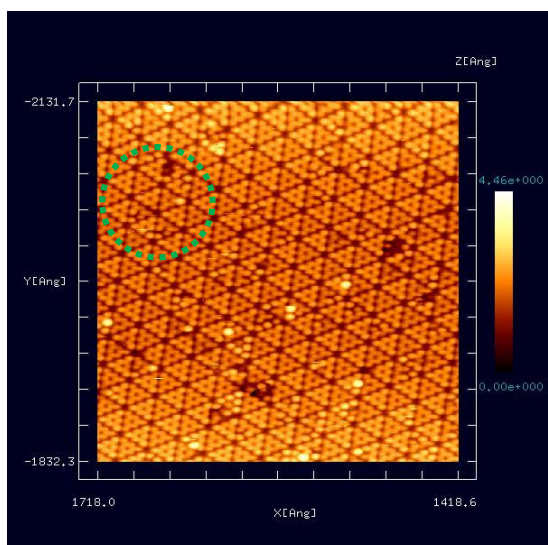
この図は、ノイズ除去前のオリジナルデータを表しています。緑の丸印で示した個所に、小さなノイズが有ることが分かります。(この画像データは、東北大学大学院理学研究科物理学専攻、量子物性物理学講座、量子伝導物性分野、橋本克之助教から提供して頂いたものです。)



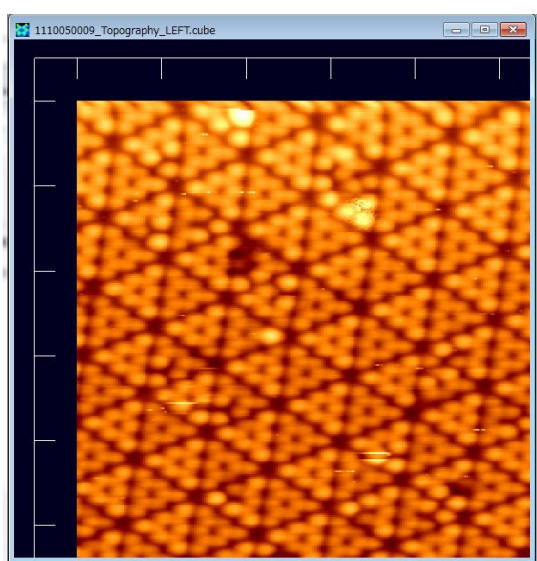
オリジナル画像データに対してノイズ除去を行ったものです。緑の丸印で表された箇所のノイズが取り除かれていることが分かります。

10 3点で指定される角度の計測

“Image View”上で表示されたデータ画像に対して、3つの点A, B, Cを指定して、線分AB, BCの長さ、および、 $\angle ABC$ の角度を測定することが出来ます。

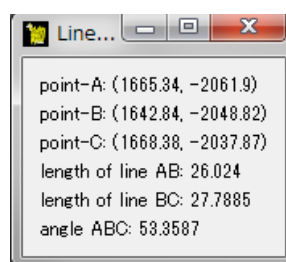


(1) この図の、緑の楕円の枠で囲まれた菱形格子の、辺の長さや角度を調べたいとします。(左図の画像データは、東京工業大学・大学院総合理工学研究科、材料物理科学専攻、量子表面講座、平山博之教授から提供して頂いたものです。)



(3) 次に、画像が表示されているウィンドウ上を、マウスで右クリックすると、コンテキストメニューが現れます。メニューから、[Measurement of lines and their angle]を選択します。そして、マウスをダブルクリックすることにより、データ画像上に三点 A, B, C を指定します。

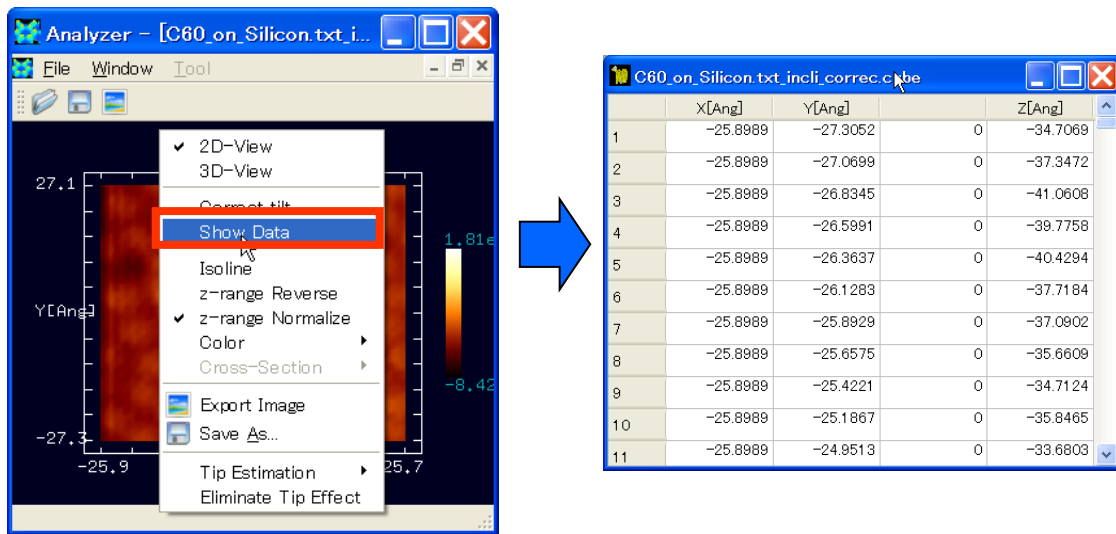
(2) まず、“View Image”上のデータ画像の緑の楕円の枠で囲まれた部分を拡大します。画像の上にカーソルを置いて、マウスのホイールを使えば、画像を拡大・縮小することができます。また、マウスを左クリックして画像上でドラッグすれば、画像は移動します。これらの操作により、データ画像の測定したい部分を、ウィンドウ内で拡大表示します。



(4) すると、左の図に示されるウィンドウが現れ、線分 AB, BC の長さ、および、 $\angle ABC$ の角度が表示されます。

11 その他

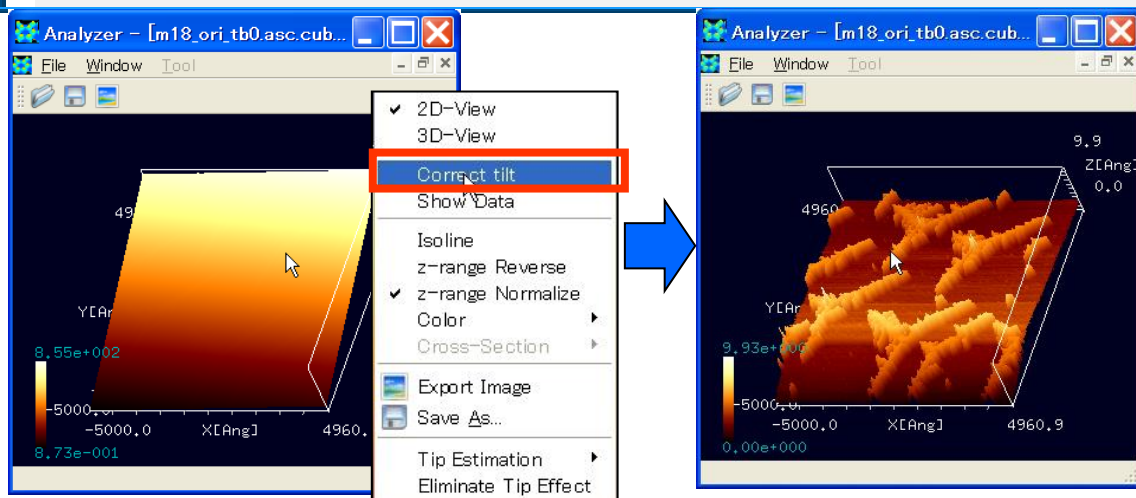
データ表示



1. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー → [Show Data]

Data View を用いて、数値データを表形式で閲覧することができます。

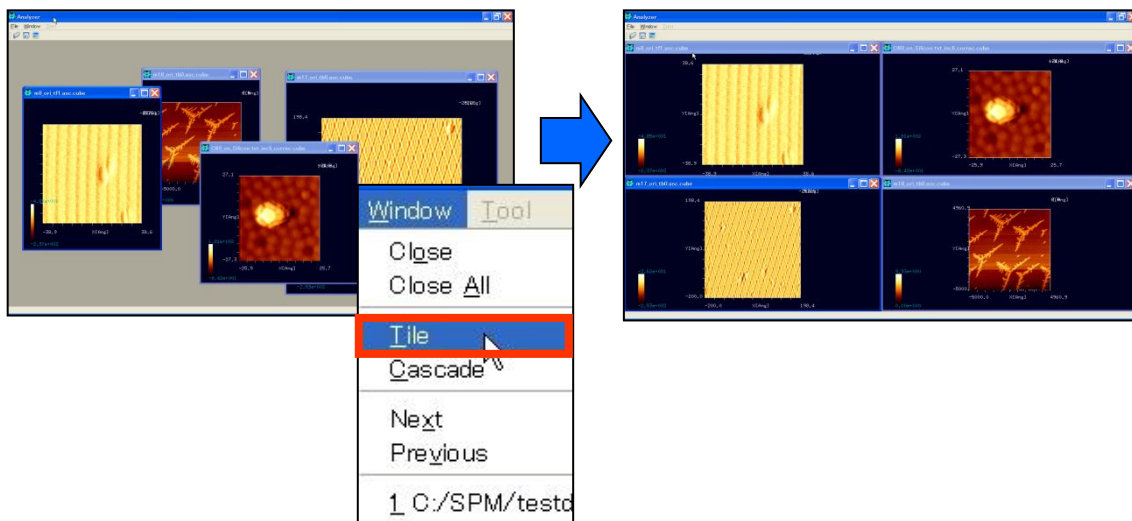
傾き自動補正



1. “Image View”右クリック → コンテキストメニュー → [Correct tilt]

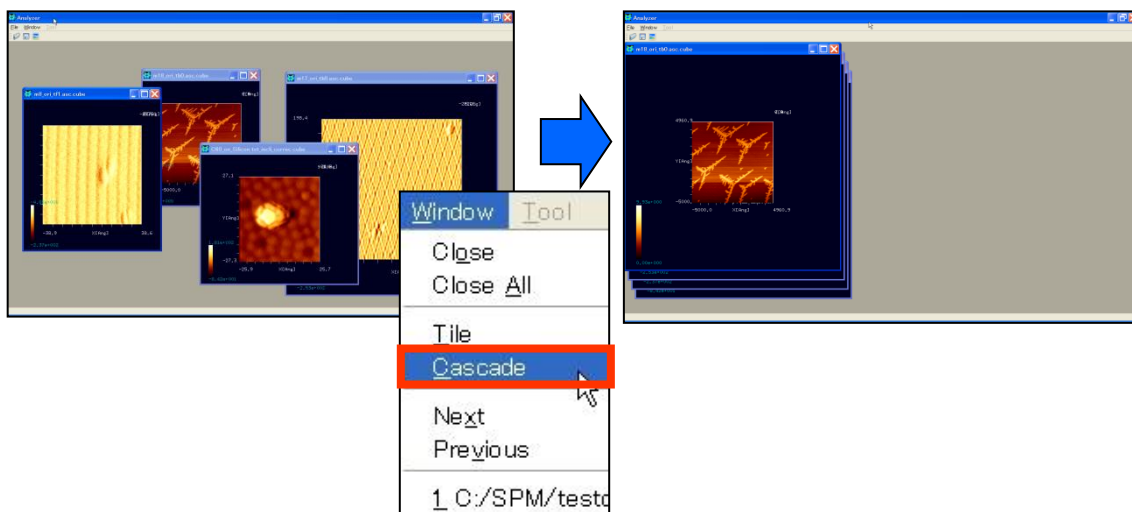
Image Viewの整列・クローズ

【タイル表示】



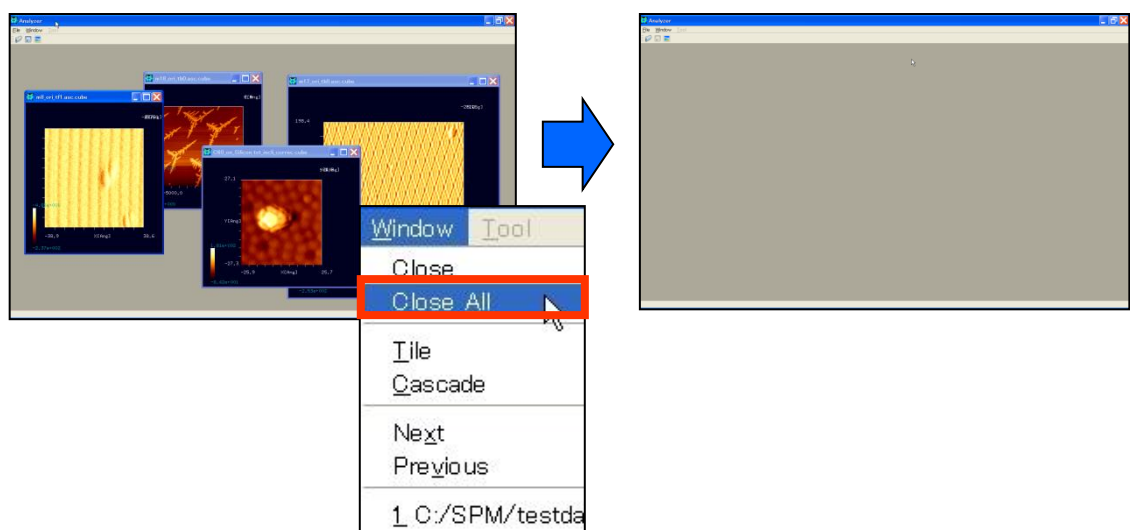
1. “Menu Bar” → [Window] → [Tile]

【カスケード表示】



1. “Menu Bar” → [Window] → [Cascade]

【Image View のクローズ】



1. “Menu Bar” → [Window] → [Close All]

この操作によって、全ての Image View が閉じられます。

第5章

試料モデリング機能

この章では、SPM シミュレータで用いる試料構造を作成するための補助ツールの使い方をご紹介します。現在この補助ツールは、「1. 薄膜モデリング」、「2. 分子モデリング」の大きく2つの機能に分かれております。

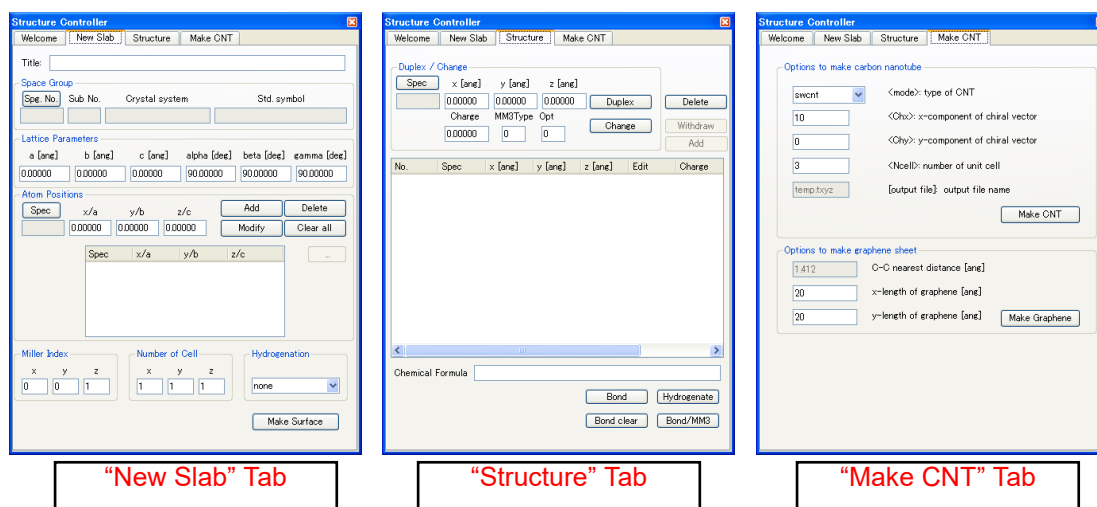
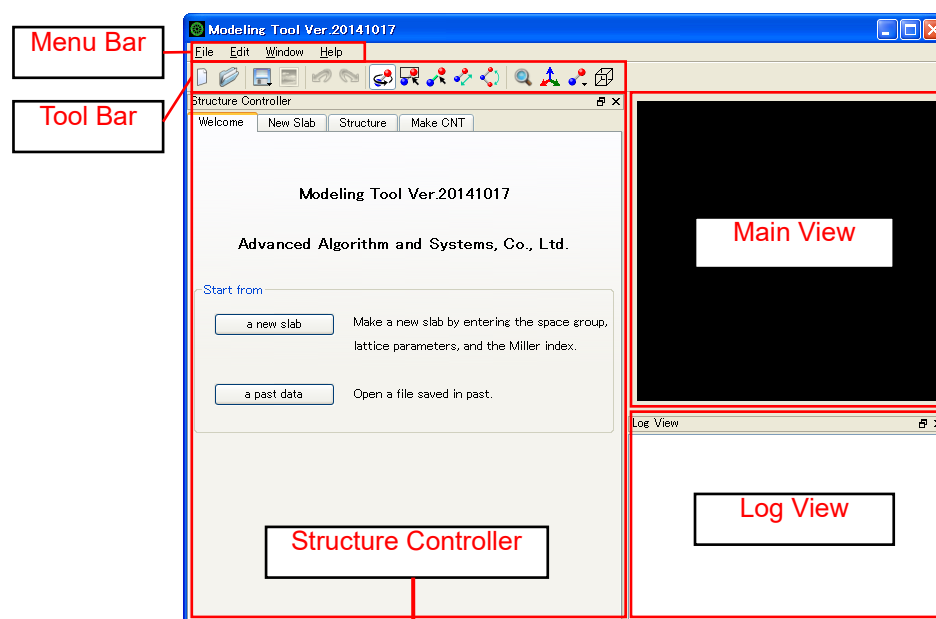
両者ともにグラフィカル・ユーザー・インターフェイス（GUI）を備えており、ユーザーが視覚的に試料構造データを作成することが可能となっております。

1 薄膜モデリング

はじめに

SPM シミュレータには補助機能としてモデリングツールが同梱されます。このツールは理想表面を持つ薄膜モデルを作成でき、そのデータをシミュレータに利用できる形式で出力します。主にミクロスケール（DFTB・CG・MD）で使用される原子モデルを作成しますが、一部マクロスケールでも使用することができます。また、任意の原子の追加・削除・移動の編集を行う事ができます。その他、モデルに別の分子モデルをインポートする機能や、カーボンナノチューブやフラーレン構造をモデリングする機能も備えています。本節はこのモデリングツールの使い方をご紹介します。

画面説明



画面ごとの主な機能を説明します。

【Menu Bar】

モデルの新規作成、読み込み、保存などのファイル操作、各画面の表示／非表示の切り替えなどを行います。

【Structure Controller】

モデルの作成・編集を行います。次の4つのタブから成ります。“Welcome”タブは初期画面です。“New Slab”タブは薄膜モデルを作成します。“Structure”タブは原子の

座標を表示し、また原子の編集も行います。“Make CNT” タブはカーボンナノチューブやその誘導体のモデルを作成します。

【Main View】

作成したモデルを 3D で可視化します。マウスやキーボード操作によって視点を変更でき、また原子の選択・移動などを行えます。

【Log View】

GUI からのメッセージを表示します。

モデリングツールの起動

SPM シミュレータが正常にインストールされますと、デスクトップとスタートメニューにモデリングツールを起動するリンクが作られます。いずれかをダブルクリックするとモデリングツールが起動します。⁵⁹

画面の基本操作

本ツールでは“Main View”をマウスで操作することによってさまざまな動作が実行できます。モデルを見る視点を変更したり、分子の表示の描画方法を変えたりもできます。ここではこのような“Main View”における操作方法を紹介します。

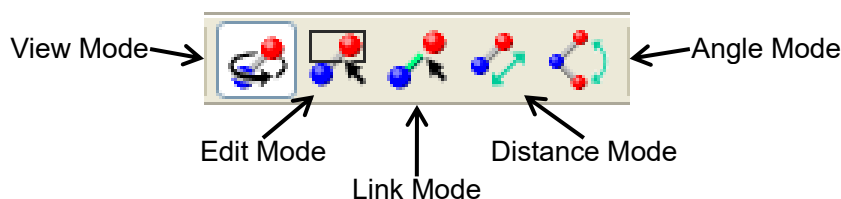
【操作の前準備】

以下の作業の前に、あらかじめモデルを開きます。例えば、“Make CNT” タブをクリックし、そのまま [Make CNT] ボタンをクリックして下さい。カーボンナノチューブモデルが“Main View”に表示されます。

【操作モード】

“Main View”の操作方法として 5 つのモードがあります；“View Mode”, “Edit Mode”, “Link Mode”, “Distance Mode”, “Angle Mode”。通常は主に視点の変更を扱う“View Mode”を利用することになります。その他のモードについては順次説明します。これらのモードを切り替えるには、ツールバーの対応するアイコンをクリックして下さい。これら 5 つのボタンは排他的なトグルボタンであり、いずれか一つのみ選択できます。

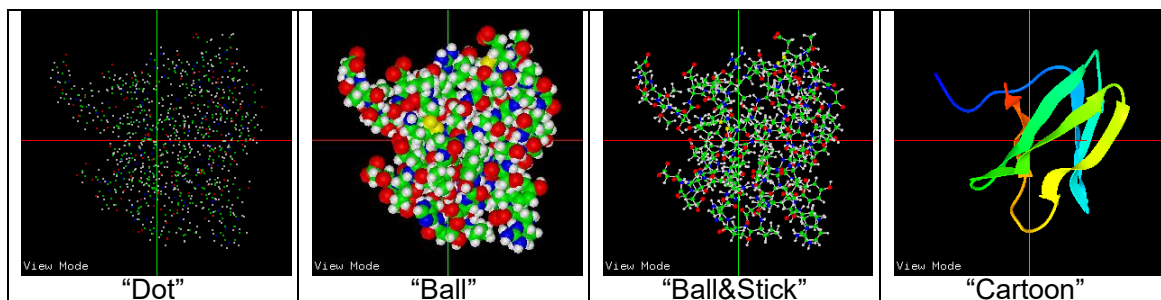
⁵⁹ インストールしたディレクトリ(デフォルトでは、“C:/Program Files/SPMSimulator”)の中にある mkatmstruct.exe がモデリングツールの本体です。



また、ショートカットキー [Ctrl+E] によりこれらのモードを順番に切り替えることもできます。

【描画方法の設定】

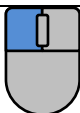
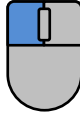
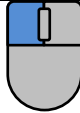
分子の描画方法を切り替えます。コンテキストメニューから “View Option” を選択し、“Auto”, “Dot”, “Ball”, “Ball&Stick”, “Cartoon” のいずれかを選択します。“Auto” はモデルのデータから適切な描画法を自動判定します。なお、これらの表示はファイル形式によって表示できないものがあります。“Ball&Stick” は原子間結合情報が必要で、“Cartoon” は PDB ファイルのみに対応しています。

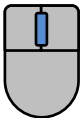


【視点の変更】

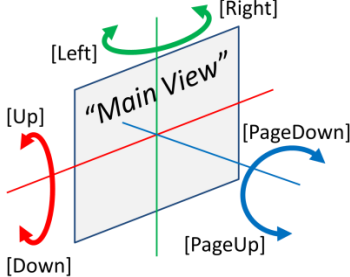
コンテキストメニューから “Top”, “Front”, “Side” を選択すると視点を変更でき、それぞれ真上(Top)、正面(Front)、真横(Side)から見たモデルが描画されます。“Perspective” を選択すると遠近感のある描画になります。マウスホイールを回転させると表示の拡大・縮小ができます。

“View Mode” のときは、“Main View” 上をマウスでドラッグすることにより、以下のように視点を変更することができます。

View Mode		
	ドラッグ	視点を回転する
 キー + 	ドラッグ	視点を平行移動する
 キー + 	ドラッグ	拡大・縮小

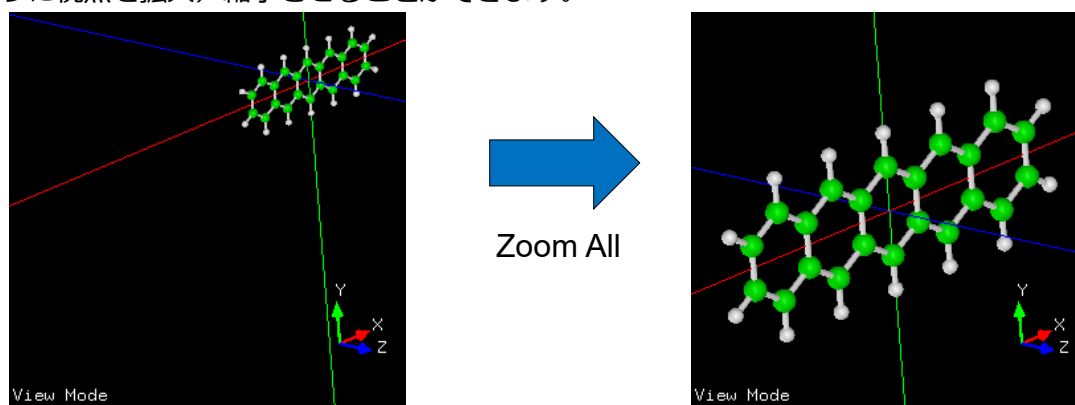
 ホイール回転	
--	--

キーボード操作により視点を変えることもできます。

キーボード操作	動作	
[上, 下, 左, 右]	視点の平行移動	
[Shift] + [上, 下] [Shift] + [左, 右] [Shift] + [PageUp, PageDown]	視点の回転 (右図参照)	
[Ctrl] + [上, 下] [PageUp], [PageDown]	拡大・縮小	

【Zoom All】

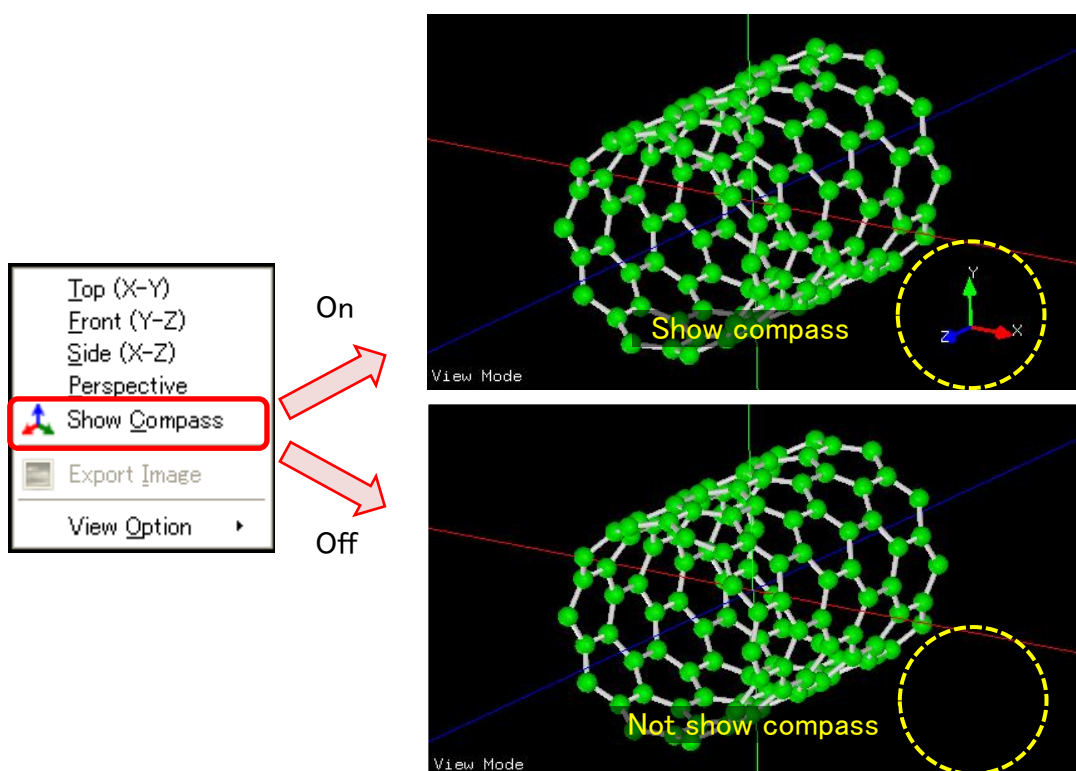
ツールバーにある虫眼鏡アイコンをクリックすると、現在の視点の向きをそのままに、モデルの中心を眺めるように視点を平行移動させ、かつモデルが画面のほぼ全体に収まるように視点を拡大／縮小させることができます。



ただし、モデルが2原子以上から成り、Perspective がオフのときのみ有効です。

【コンパス】

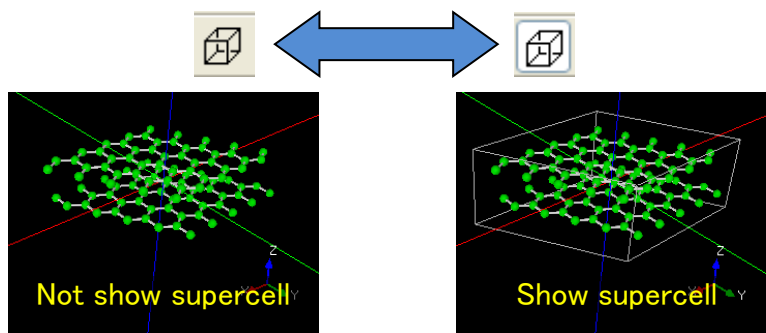
視点を回転させたときに現在の視点がどのような向きになっているかを、3次元のコンパスによって表示できます。モデルを描画すると、下図のようにモデル描画面面の右下に3つの矢印とX, Y, Zの文字が表示されます。それらはモデルの3次元座標軸 x, y, z 軸の正の向きを示しています。



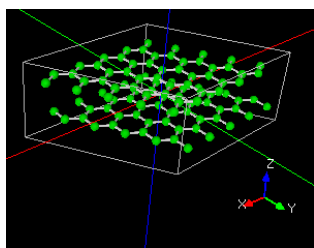
右クリックメニューから“Show Compass”をクリックすることで、コンパスの表示／非表示を切り替えられます。

【モデル範囲の表示】

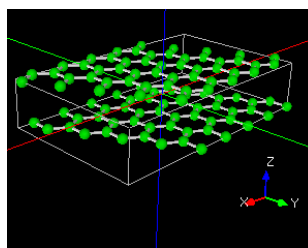
ツールバーにある直方体のアイコンをクリックすると、表示されているモデルの範囲を表す平行六面体が表示されます。もう一度クリックすると非表示になります。



“New Slab”タブから結晶の情報を利用してモデルを作成した場合は、格子ベクトルを考慮に入れた平行六面体の超格子が表示されます。一方、格子ベクトル情報を含まないモデルファイルを読み込んだ場合は、モデル中の原子すべてをぴったり含むような直方体が表示されます。



With supercell information



Without supercell information

薄膜モデルの作成事例

薄膜モデルを作成するために必要な情報は、作成したい物質の結晶データ（空間群・格子定数・既約原子位置）、およびミラー指数とスーパーセルの単位胞数です。これらの情報は、論文やウェブ上で公開されているもの等から得ることができます。

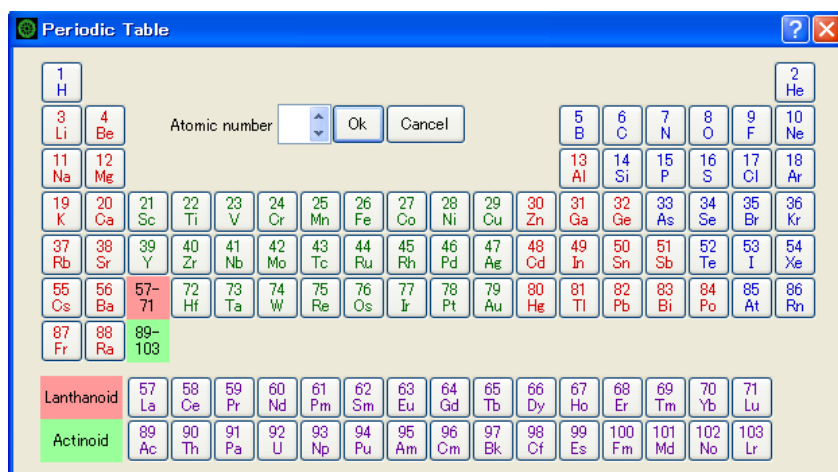
【シリコン（001）表面の作成方法】

ここでは、シリコン(001)表面を摸した薄膜模型を新規に作成する方法を説明します。新規で作成する場合は、初期画面から [a new slab] ボタンをクリックして “New Slab” タブを開きます。直接 “New Slab” タブをクリックしてもかまいません。このタブに結晶データを入力します。まず入力部最上段の “Title” フォームには、ご希望のタイトルを入力してください。ただし省略することが可能で、その場合は指定した空間群の名称が自動的に代入されます。ここでは例として “**Si001**” とします。全てのフォームへの入力は半角英数字の使用を推奨します。

二番目のフォームでは空間群の指定を行います。[Sp. No.] のボタンをクリックすると、“Space group” という名前のポップアップウィンドウが立ち上がり空間群のリストが表示されます。適切な空間群を選択してクリックしてください。あるいは空間群の番号を直接タイプすることでも入力可能です。ここでは、シリコンの面心立方構造を想定していますので、**227** とタイプします。OK をクリックすると本ウィンドウは閉じ、空間群の入力が完了します。

三番目のフォームでは、格子定数を入力します。それぞれÅと度の単位で直接タイプして入力してください。シリコンの場合は、**5.4**, 5.4, 5.4, 90.0, 90.0, 90.0 となりますが、対称性から格子定数 a のみを入力するように制限がかかります。

次にブラベー格子内の原子種とその既約な座標を入力します。まず原子種を指定します。[Spec] ボタンをクリックすると次のような “PeriodicTable” ダイアログが立ち上がります。



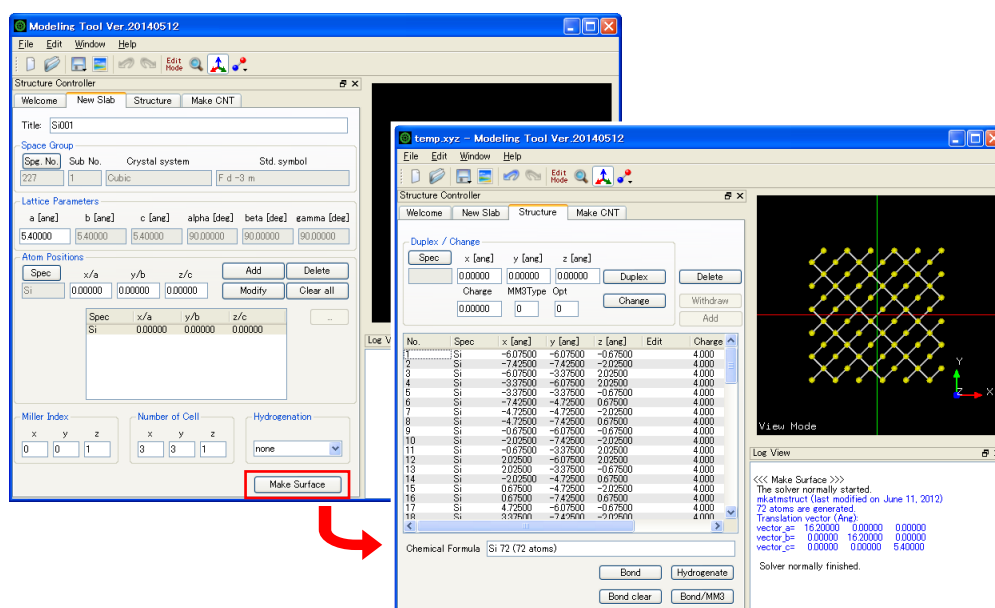
元素の周期律表の順番にボタンが並んでいます。適切な原子種、ここでは原子番号 14 の **Si** をクリックしてください⁶⁰。ダイアログが閉じ、原子名フォームに元素記号 Si が入力されます。続いて既約座標、ここでは(0.0, 0.0, 0.0)を入力し、その右の [Add] ボタンを押してリストに追加します。シリコンの場合はこれで完了ですが、物質によっては以下、必要な情報の量だけ同じ作業を繰り返します。入力に失敗した場合、その行を指定し、[Modify] で訂正、[Delete] で削除することができます。また [Clear all] でリストの全ての情報を削除することができます。

以上で、結晶としての情報を入力することができました。薄膜モデルを作成するためには、さらに、表面に現れる面の情報と薄膜のサイズの入力が必要となります。表面に現れる面の指定はミラー指数によって行われます。ご希望の面を表すミラー指数を“Miller index”フォームにタイプして下さい。隣の“Number of cells”フォームでは、薄膜モデルのサイズの指定を行います。それぞれ x, y, z 方向へ指定した数だけ結晶情報から得られる単位胞を並べてスーパーセルを作成します。ここでは、Si(001)表面ですので、ミラー指数には **0, 0, 1** を入力します。スーパーセルのサイズは、1 から 3 のあたりで入力されると、DFTB の計算コストに似合うモデルが作成できます。ここでは、例として **3, 3, 1** と入力します(下左図)。

最後に [Make Surface] ボタンをクリックしてください。正常に処理されると、“Main View” にシリコン表面を表す薄膜モデルの原子構造が表示されます。また“Log View”には、この薄膜モデルにおける並進ベクトルが表示されます(下右図)。ここで表示される並進ベクトルは、結晶模型についての並進ベクトルであり、薄膜モデルのものではありません。詳細は後述の「SPM シミュレータでの利用に関する注意点」を参照してください。

原子模型が表示されると、“Structure Controller” は“Structure” タブをハイライトします。ここには、表示中のモデルに含まれるすべての原子について、原子種や座標などの情報や組成式が示されます。このタブを操作して、個々の原子を編集することができます。詳細は後述の「個々の原子座標の編集」を参照してください。作成したモデルを保存するには後述の「モデルの保存」を参照してください。

⁶⁰ 原子番号を直接入力して Ok ボタンを押すことでも、原子を選択できます。



【シリコン（1 1 1）表面の作成方法】

シリコン(111)の薄膜モデルを作成する方法を説明します。先ほどと同じシリコンですので、結晶を表す情報はすべて同じです。同様の作業を繰り返して下さい。ただし“Title”を“Si111”とします。結晶の情報の入力終了したら、次にミラー指数を変更します。“Miller index”フォームに1, 1, 1を直接入力します。最後に [Make Surface] ボタンをクリックします。“Main View”で最終確認をします。また、“Log View”にこの結晶モデルにおける並進ベクトルが表示されますので、必要に応じて確認します。

【グラファイト（0 0 0 1）表面の作成方法】

グラファイトの結晶の情報は、以下の通りです。

格子定数	2.464	2.464	6.711	90.0	90.0	120.0
空間群	194 (P 63/m m c)					
既約原子座標	C1	0.00000	0.00000	0.25000		
	C2	0.33333	0.66667	0.25000		

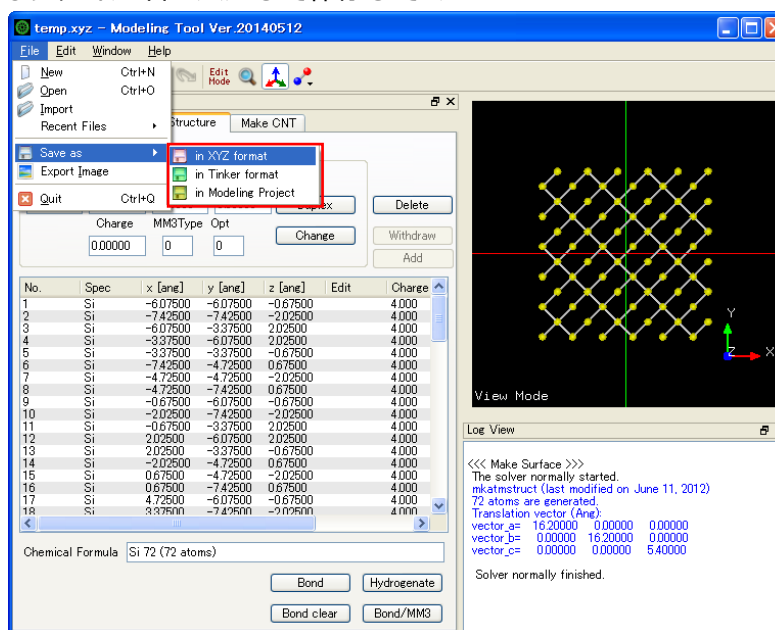
ここでひとつ注意点ですが、二つ目の炭素の正確な既約原子座標は、x座標が1/3でy座標が2/3です。1/3のように少数で正確に表せない場合は、少数点以下第4位の範囲内で原子の同一性を判断しています。そのため入力値として少数点以下第5位まで入力する必要があります。

次にミラー指数について述べます。ミラー指数の表示は、六方晶・三方晶の場合、3つではなく4つの整数によって表されることが多いのですが、後者の場合独立な数字は3つですので、ここでは3つの整数によって指定して頂くようにしています。(0001)表面の場合は、(001)を入力してください。基本的には、3番目の数字が省略されています。あとはシリコンと同様に処理してください。

モデルの保存

【データファイルとして保存】

表示されているモデルをデータとして保存することができます。メニューバーの“File”から“Save as”を選択し、続いて“in XYZ format” (DFTB 形式)、“in Tinker format” (CG/MD 形式)、または“in Modeling Project”を選択してください。ファイル保存ダイアログが現れますので、適切なファイル名を入力して保存してください。



“in Tinker format” として保存する前に必ず原子種 ID を決めて下さい（後述）。原子種 ID は SPM シミュレータで CG/MD ソルバーを利用する場合に必要となります。

“in Modeling Project” として保存するためには、“New Slab” タブに内容を適切に入力している必要がありますのでご注意ください。

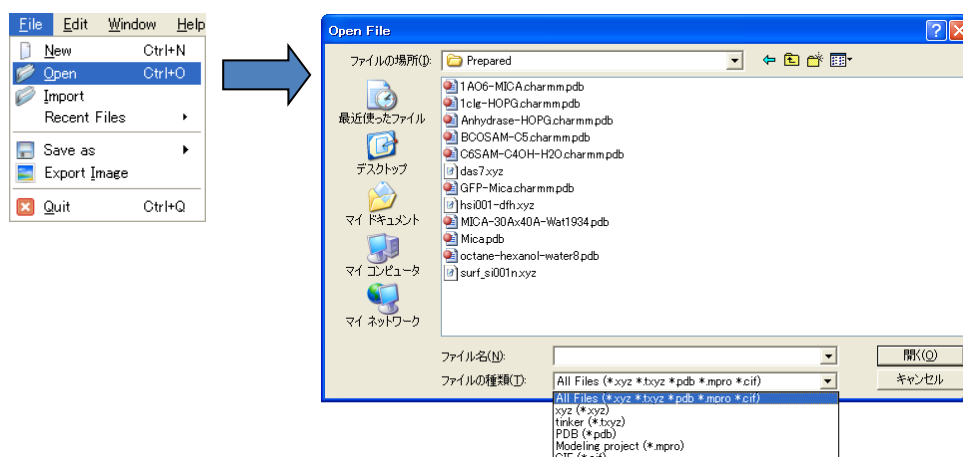
【画像ファイルとして保存】

“Main View” に表示されている画面を画像として保存することができます。メニューバーの“File”から“Export Image”を選択すると“Save Capture”ダイアログが現れます。任意のファイル名を入力し、ファイルの種類を PNG (*.png), Bitmap (*.bmp), JPEG (*.jpg) から選んで保存します。

“Main View” を右クリックし、コンテキストメニューから“Export Image”を選択しても同じ操作が行えます。

既存モデルの読み込み

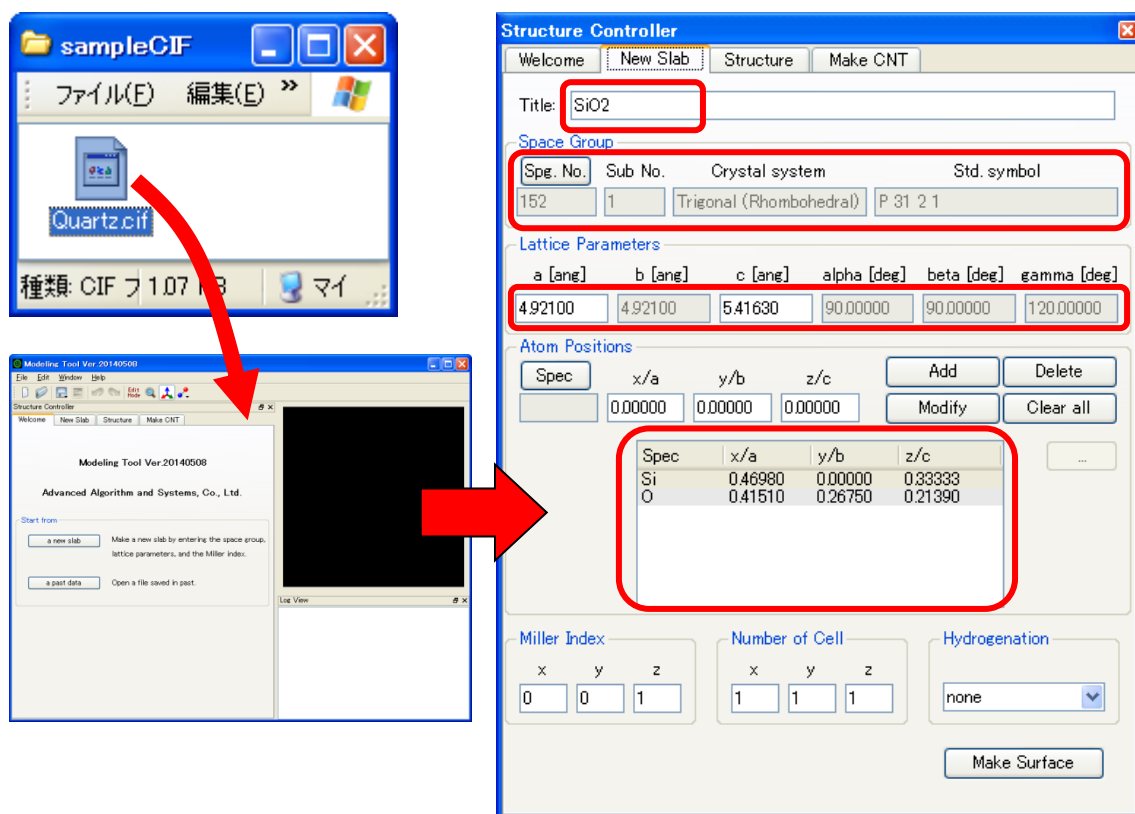
既存のデータを読み込んで画面に表示することができます。メニューバーの“File”から“Open”を選択し、“Open File”ダイアログを開きます。



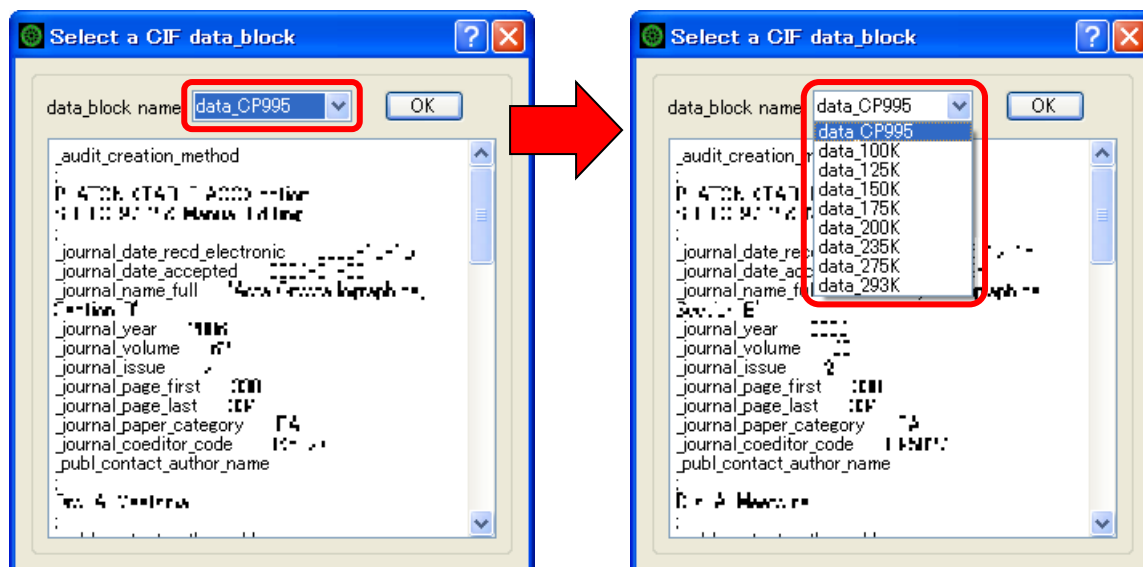
読み込むことのできるファイル形式は xyz (*.xyz), tinker (*.txyz), PDB (*.pdb), Modeling project (*.mpro), CIF (*.cif), VASP (*.vasp)です。ダイアログから読み込みたいファイルを選択してください。ファイルのアイコンをモデリングツールヘドラッグ&ドロップすることでも、既存のデータを読み込むことができます。

ファイル形式のうち xyz, txyz, pdb ファイルには原子種や原子のデカルト座標などが与えられており、これらのファイルを読み込むと “Structure” タブにモデルの座標などのデータが表示され、“Main View” にモデルが 3D で可視化されます。txyz, pdb ファイルに含まれる原子間結合の情報も反映されます。

一方、mpro, cif, vasp ファイルには結晶構造の情報（格子定数や既約原子サイトの情報）が含まれており、これらのファイルを読み込むと “New Slab” タブに結晶構造の情報が自動的に入力されます。【薄膜モデルの作成事例】では結晶構造の情報を手作業で入力しましたが、その作業を自動的に行うことができます（下図参照）。



CIF の場合、一つのファイルに複数の結晶構造情報が含まれる場合があります。そのような場合、CIF を開いたときに次のようなダイアログが表示され、どのデータブロックを利用するかを選択することができます。



最近使用したファイルを開くこともできます。メニューバーの“File”から“Recent Files”を選択し、表示される一覧から開きたいファイルを指定します。最近の 10 件までが履歴に残ります。

既存モデルのインポート

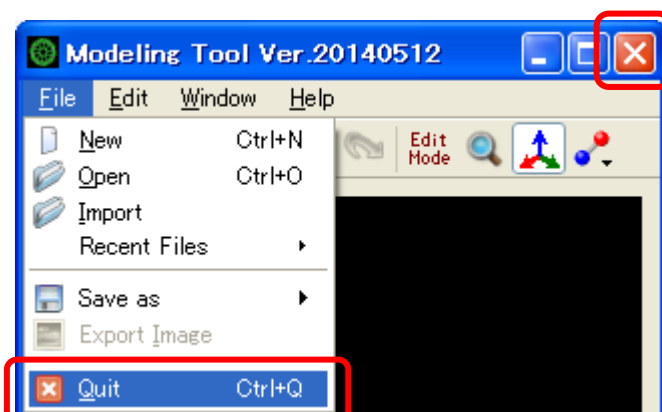
表示中のモデルに対し、新たに既存のデータを取り込み、それらを同時に表示させることができます。まずあらかじめ原子構造を作成または読み込んでおきます。次にメニューバーの“File” から“Import” を選択します。ファイル選択ダイアログから取り込みたいファイルを選択します。これにより新たにデータが取り込まれ、先に表示されていたモデルと同時に表示されます。

読み込んだ原子モデルは、すでに表示されていたモデルに対して z 軸正の方向に配置され、お互いに重ならないような距離が空けられます。インポートできるファイルの形式は xyz (*.xyz), tinker (*.txyz)に限られます。

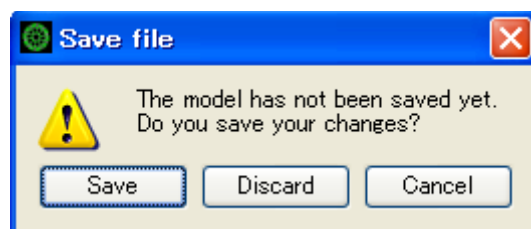
なお、ファイルのアイコンをモデリングツールへ、[Ctrl]キーを押しながらドラッグ&ドロップすることでも、既存のデータをインポートすることができます。

モデリングツールの終了

メニューバーの“File” から“Quit” を選択するか、タイトルバーの右にある×ボタンをクリックすると、モデリングツールが終了します。



その際、編集中のモデルデータが保存されていない場合は、保存を促すメッセージが表示されます。



[Save] をクリックするとモデルデータを保存するダイアログが開き、保存が完了した後でツールが終了します。[Discard] をクリックすると、現在のモデルデータを破棄してツールが終了します。[Cancel] をクリックするとツールは続行します。

キーボードの [Shift] キーを押しながらモデリングツールの終了操作を行うと、モデルの

保存を行わずに強制終了することができます。

モデルの編集

“Structure” タブを利用すると、作成したモデルに対して原子を追加、編集、あるいは削除することができます。編集が終了し画面での確認がとれましたら、ファイルへ保存してください。

【原子を追加】

原子を追加したい場合は [Duplex] ボタンを使います。まず座標の基準となる原子をリストの列から選択します⁶¹。次に原子を追加したい座標を、基準原子からの相対座標で入力します。そして [Duplex] ボタンをクリックすると新しい原子が描画されます。デフォルトでは同じ原子種が追加されますが、[Spec] ボタンを押して別の原子種を選んで追加することもできます。

なお、原子が全く存在しないときに [Duplex] ボタンを押した場合、入力した x, y, z 値が絶対座標として扱われ、指定した種類の原子が一つだけ配置されます。

【原子を編集】

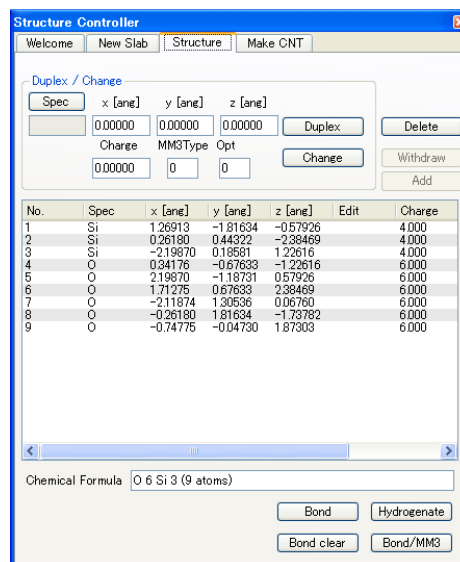
原子を編集したい場合は [Change] ボタンを使います。まず編集したい原子をリストの列から選択します。相対座標を入力して [Change] ボタンをクリックすると選択した原子が移動します。移動先に原子が存在するときは変更できません。あるいは原子選択後に [Spec] ボタンを押して原子種を選択し、[Change] ボタンをクリックすると原子種が変更されます。

【原子を削除】

原子を削除したい場合は [Delete] ボタンを使います。削除したい原子をリストの列から選択します。そこで [Delete] ボタンをクリックすると選択した原子が削除されます。キーボードの [Delete] キーでも同じように削除できます。

【原子の選択／非選択】

原子を編集したいときに “Structure” タブのリストから原子を選択する方法をすでに紹

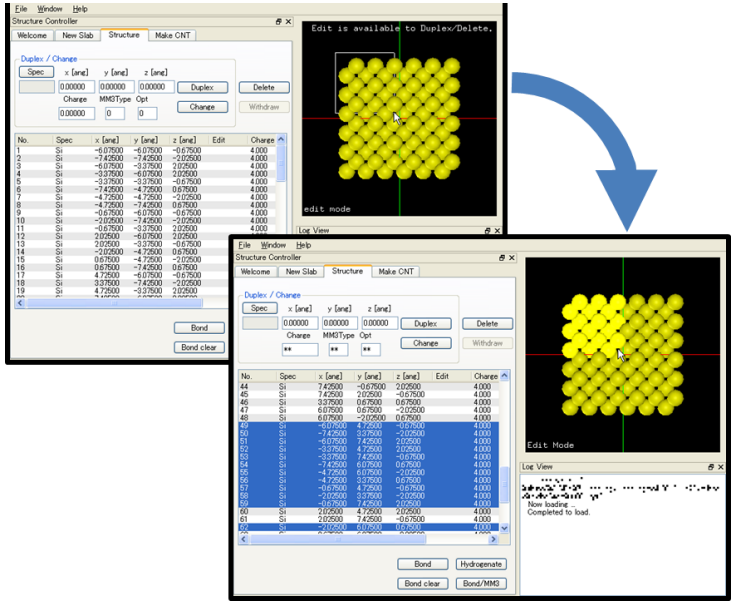


⁶¹ リストの列を Ctrl+クリックすると複数選択できます。リストの列を Shift+クリックするとリスト内を範囲選択できます。Ctrl+A キーを押すとすべての原子を選択できます。“Main View” から選択することもできます(後述)。

介しましたが、マウスを使って選択することもできます。“Main View” 画面のモデルを見ながら選択したい原子をマウスで直接指定できます。“View Mode” と “Edit Mode” のそれぞれについて、以下のような原子選択機能があります。

View Mode	
空白（原子や結合が何もないところ）をダブルクリック	すべての原子が非選択になる。
原子をダブルクリック	選択／非選択が反転する。
Edit Mode	
空白（原子や結合が何もないところ）をダブルクリック	すべての原子が非選択になる。
原子をクリック	選択／非選択が反転する。
空白を始点としてドラッグ	範囲内にあるすべての原子が追加的に選択される。
空白を始点として Shift+ドラッグ	範囲内にあるすべての原子が非選択になる。
空白を始点として Ctrl+ドラッグ	範囲内にあるすべての原子の選択・非選択が反転する。

このようにして一つあるいは複数の原子を選択状態にすると、“Structure” タブのリスト中の対応する項目もまた選択された状態になります。すると先に述べた方法で編集や削除などを行うことができます。



【原子の移動・回転】

“Edit Mode” で一つまたは複数の原子が選択されているとき、マウスのドラッグ操作により原子の移動や回転を行うことができます。“Structure” タブのリスト中の原子座標はリアルタイムで更新されます。

Edit Mode、原子選択時	
選択した原子群を始点としてドラッグ	マウスの動きに応じてその原子群が平行移動する。
選択した原子群を始点として Shift + ドラッグ	マウスの動きに応じてその原子群が一まとまりとなって回転する。

結合情報の編集

“Structure” タブでは原子間の結合を生成したり、水素原子を付加したり、結合の種類を特定したりもできます。

【結合の生成】

“Bond” ボタンをクリックすると原子間結合情報が更新されます。“View Option” として “Ball&Stick” を選択するとこの結合が可視化できます。原子数が多いときは計算に時間がかかるのでご注意ください。また、“Link Mode” を利用すると原子間結合を自由に編集できます（後述）。

【結合の消去】

[Bond clear] ボタンをクリックすると原子間結合情報が破棄されます。原子数が多いときに結合情報を保ったまま編集作業をすると、処理に時間がかかることがあります。そのような場合に一時的に結合情報を破棄すると良いでしょう。編集作業が終わったら “Bond” ボタンを利用して結合情報を更新してください。

【水素付加】

[Hydrogenate] ボタンをクリックすると、結合数の不完全な原子に水素原子を付加し結合数を正常に保ちます。

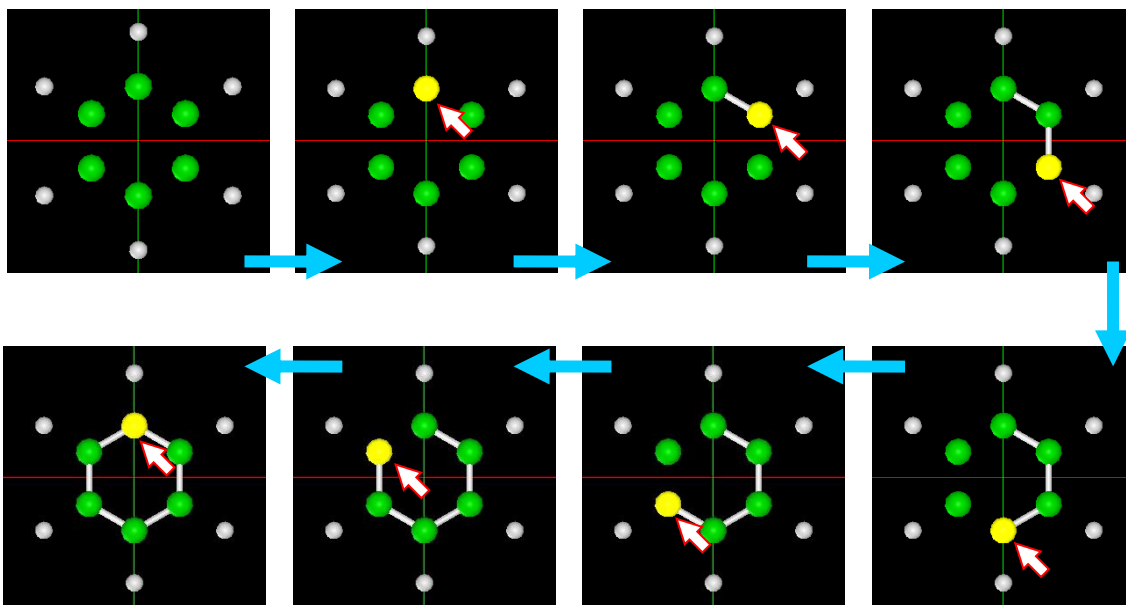
【原子種 ID の決定】

[Bond/MM3] ボタンをクリックすると、原子ごとの原子種 ID を自動的に決定します。これは SPM シミュレータで CG/MD ソルバーを利用する場合に必要となります。使用例の手順としては、(1) xyz 形式のファイルをモデリングツールで読み込む。(2) 原子種 ID を決定する。(3) Tinker 形式で保存する。(4) それを CG/MD ソルバーの計算に利用する、という方法があります。

Link Mode

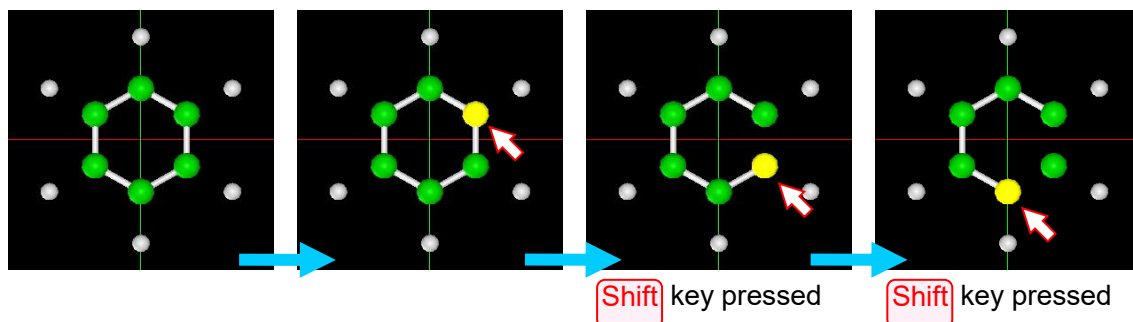
“Link Mode” を利用すると原子間結合を自由に編集できます。ツールバーの“Link Mode”アイコン  をクリックして“Link Mode”に切り替えられます。

原子 A と原子 B の間に結合を作りたい場合、まず原子 A を画面上でクリックし、続いて原子 B をクリックします。二つの原子のどちらを先にクリックしても構いません。引き続き原子を順番にクリックすることで、結合を連続して生成することができます。



結合の生成を中止するためには、画面上の原子以外の空白領域をクリックします。それにより原子の選択状態が解除されます。

逆に原子 A と原子 B の間の結合を消去したい場合、まず原子 A を画面上でクリックし、続いてキーボードの[Shift]キーを押しながら原子 B をクリックします。二つの原子のどちらを先にクリックしても構いません。引き続き[Shift]キーを押しながら原子を順番にクリックすることで、結合を連続して消去することができます。



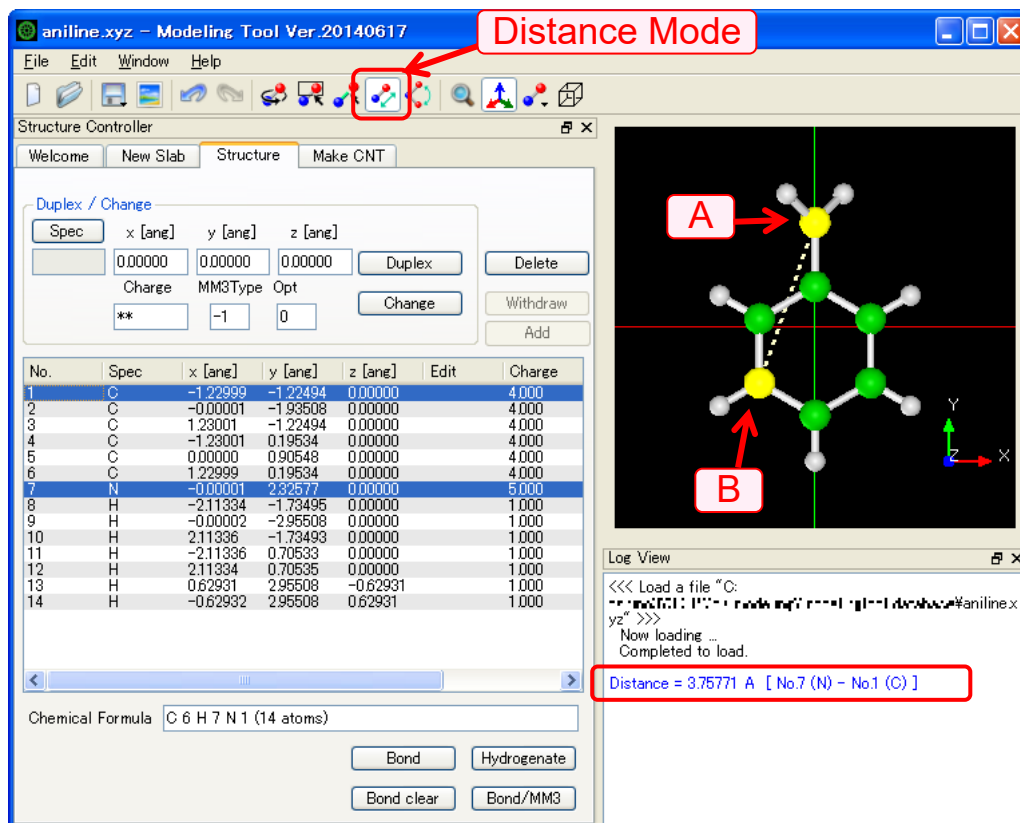
また、View モードと同じように、マウスのドラッグ操作によって視点の操作（回転、移動、ズーム）ができます。

Distance Mode

“Distance Mode” を利用すると原子間距離を測ることができます。ツールバーの

“Distance Mode” アイコン  をクリックして “Distance Mode” に切り替えられます。

原子 A と原子 B の距離を測る場合、まず原子 A を画面上でクリックし、続いて原子 B をクリックします。二つの原子のどちらを先にクリックしても構いません。選択した二つの原子間に点線が引かれ、計算した距離は出力ログに表示されます。



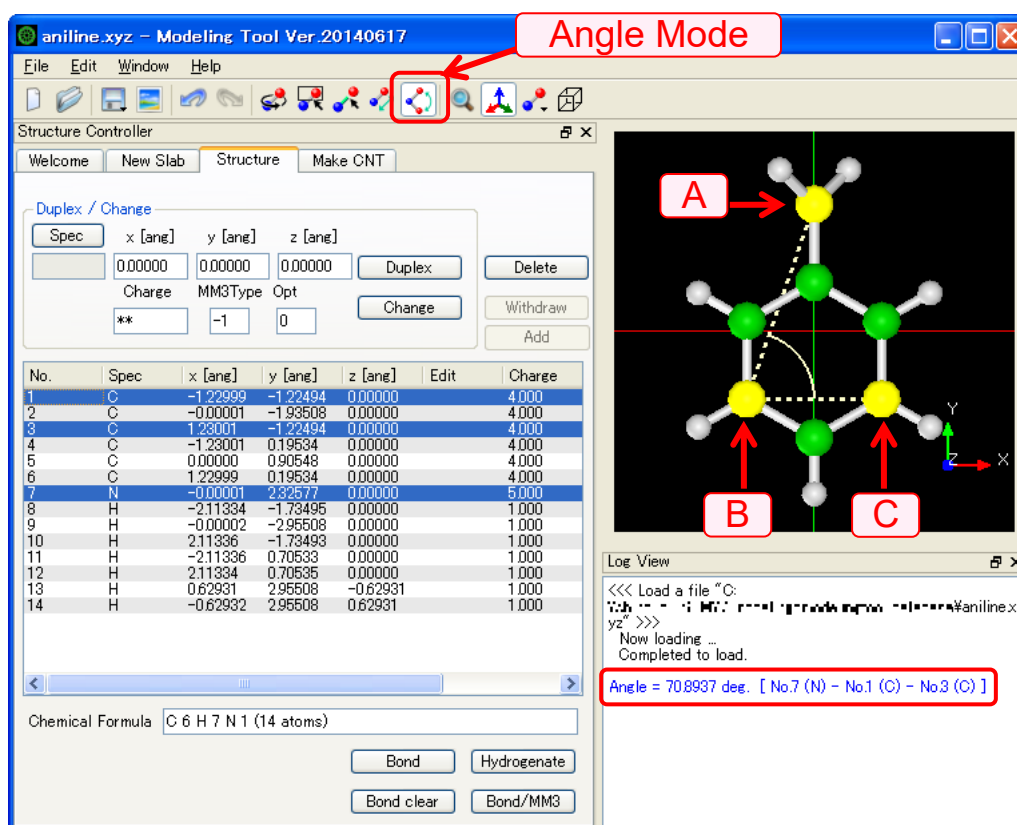
距離の測定を中止するためには、画面上の原子以外の空白領域をクリックします。それにより原子の選択状態が解除されます。

また、View モードと同じように、マウスのドラッグ操作によって視点の操作（回転、移動、ズーム）ができます。

Angle Mode

“Angle Mode” を利用すると 3 つの原子が成す結合角を測ることができます。ツールバーの “Angle Mode” アイコン  をクリックして “Angle Mode” に切り替えられます。

原子 A、B、C が成す角度 $\angle ABC$ を測る場合、画面上で原子 A、原子 B、原子 C の順番にクリックします。A-B-C を結ぶ点線および円弧が引かれ、計算した角度は出力ログに表示されます。



角度の測定を中止するためには、画面上の原子以外の空白領域をクリックします。それにより原子の選択状態が解除されます。

また、View モードと同じように、マウスのドラッグ操作によって視点の操作（回転、移動、ズーム）ができます。

編集操作の undo, redo

様々な編集操作を元に戻したり(undo)、逆にやり直したり(redo)することができます。Undo は編集操作を行う前のモデルのデータ（原子の数、原子種、原子座標、結合情報、編集状態）を復元します。これらの機能は、メニューバーから操作することもできますし、また便利なショートカットキーも割り当てられています。

機能	メニューによる操作	キーボードショートカット
元に戻す(undo)	メニューバー→“Edit”→“undo”	Ctrl+Z
やり直す(redo)	メニューバー→“Edit”→“redo”	Ctrl+Y

Undo を実行すると redo が使えるようになります。

undo, redo 可能な編集操作の一覧を示します。

1	現在のモデルに別のモデルをインポートしたとき。
2	[Duplex] 操作で原子を複製したとき。
3	[Delete] 操作で原子を削除したとき。

4	[Change] 操作で原子を編集したとき。
5	[Bond] 操作で結合情報を生成したとき。
6	[Bond clear] 操作で結合情報を破棄したとき。
7	[Hydrogenate] 操作で水素原子の付加を行ったとき。
8	[Bond/MM3] 操作で原子種 ID を決定したとき。
9	Edit モード時にマウス操作で原子を移動／回転したとき。
10	“New Slab” タブから [Make Surface] ボタンによりモデルを作成したとき。
11	“Make CNT” タブから [Make CNT] ボタンによりモデルを作成したとき。
12	[File]→[Open] により、編集集中のモデルを破棄し、既存のモデルを読み込んだとき。
13	[File]→[Import] により、編集集中のモデルに既存のモデルを追加したとき。
14	[File]→[Recent Files] から最近開いたファイルを読み込んだとき。

元に戻せる編集操作の履歴は最大で 30 件です。

また、次の操作を行ったときに undo, redo の履歴がクリアされます。

1	GUI を起動したとき。
2	“File” → “New” を選択したとき。
3	GUI を終了するとき。

次のタイミングでクリーンインデックスが設定されます。

1	“File” → “Open” により、編集集中のモデルを破棄し、既存のモデルを読み込んだとき。
2	“File” → “Recent Files” から最近開いたファイルを読み込んだとき。
3	“File” → “Save as” → “in XYZ Format” により、モデルを XYZ 形式で保存したとき。
4	“File” → “Save as” → “in Tinker Format” により、モデルを TXYZ 形式で保存したとき。
5	“New Slab” タブから [Make Surface] ボタンによりモデルを作成したとき。
6	“Make CNT” タブから [Make CNT] ボタンによりモデルを作成したとき。

いずれの場合も、保存済みのファイルを開いたときやモデルをファイルに保存したときにクリーンインデックスが設定されます。

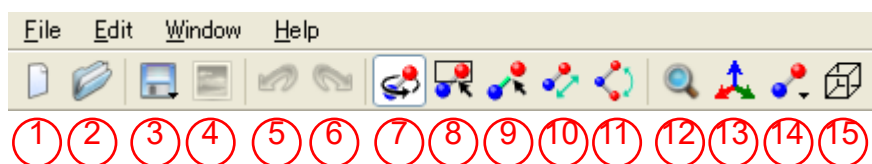
表示中のモデルを編集するとタイトルバーに表示されるファイル名にアスタリスク [*] が付き、これは現在のモデルが非保存状態であることを意味します。このときに GUI を終了しようとする、データの保存を促すメッセージが表示されます。

一方、データを保存するなどしてクリーンインデックスが設定されると、タイトルバーのファイル名からアスタリスクが消えます。このときは、GUI を終了する際にモデルデータの保存を促すメッセージが表示されません。

ツールバー

画面上部にツールバーがあります。ツールバーに用意されたアイコンをクリックすることで、GUI に搭載されているいろいろな機能を利用できます。利用できる機能は次の通り

です。



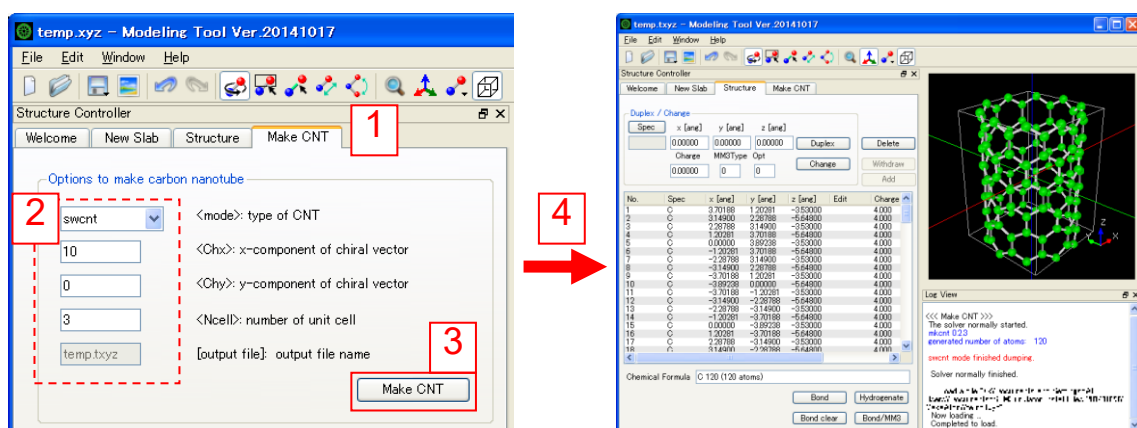
	機能	別の操作方法
①	モデルの新規作成開始。スタートメニューに戻り、すべての設定をリセットする。	“File” → “New”
②	モデルの読み込み。既存のモデルを新しく開く。	“File” → “Open”
③	モデルを保存。	“File” → “Save as”
④	“Main View” を画像ファイルとして保存。	“File” → “Export Image”
⑤	元に戻す (undo)。	“Edit” → “undo”
⑥	やり直す (redo)。	“Edit” → “redo”
⑦	“View Mode”に切り替える。トグル可能。	[Ctrl+E]
⑧	“Edit Mode”に切り替える。トグル可能。	[Ctrl+E]
⑨	“Link Mode”に切り替える。トグル可能。	[Ctrl+E]
⑩	“Distance Mode”に切り替える。トグル可能。	[Ctrl+E]
⑪	“Angle Mode”に切り替える。トグル可能。	[Ctrl+E]
⑫	現在の視点を保ったまま、モデルサイズを画面にフィットさせる (Zoom All)。	
⑬	コンパスの表示／非表示を切り替える。トグル可能。	“Main View” を右クリック → “Show Compass”
⑭	分子の描画方法を切り替える。	“Main View” を右クリック → “View Option”
⑮	モデル範囲の表示／非表示を切り替える。トグル可能。	

カーボンナノチューブ作成

カーボンナノチューブ(CNT)モデル作成プログラムを呼び出し、カーボンナノチューブやその誘導体を作成して画面に表示できます。

【操作手順】

1. “Make CNT” タブを開く。
2. オプションを設定する。
3. [Make CNT] ボタンを押す。
4. 出力結果が “Structure” タブや “Main View” に表示される。



【CNT モデル作成プログラムの引数】

<mode>: type of CNT:

CNT の種類を次の 4 つから選択します。

1. swcnt: シングルウォールカーボンナノチューブ
2. sheet: グラフェンシート
3. fuller: フラーレン族
4. capped: キャップ付き CNT

<Chx>, <Chy>: x, y-component of chiral vector:

CNT のカイラル指数(n,m) = (<Chx>, <Chy>)を指定します。

これは CNT の巻き方や大きさを表します。

n, m は整数で、 $0 \leq |m| \leq n$ とします。

“sheet”, “fuller”, “capped”の場合、n, m は 5 の倍数のみ利用できます。

<Ncell>: number of unit cell:

CNT の単位胞の数です。

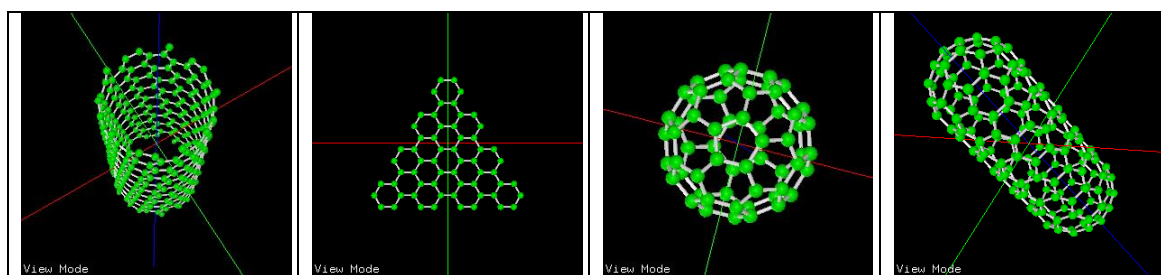
カイラルベクトルで生成される CNT を 1 として、これをいくつ並べるか指定します。

[output file]: output file name: (編集不可)

出力ファイル名。指定がない場合は標準出力。

【実行例】

<mode> = swcnt	<mode> = sheet	<mode> = fuller	<mode> = capped
<Chx> = 10	<Chx> = 20	<Chx> = 5	<Chx> = 5
<Chy> = 5	<Chy> = 20	<Chy> = 5	<Chy> = 5
<Ncell> = 2	<Ncell> = 1	<Ncell> = 1	<Ncell> = 5

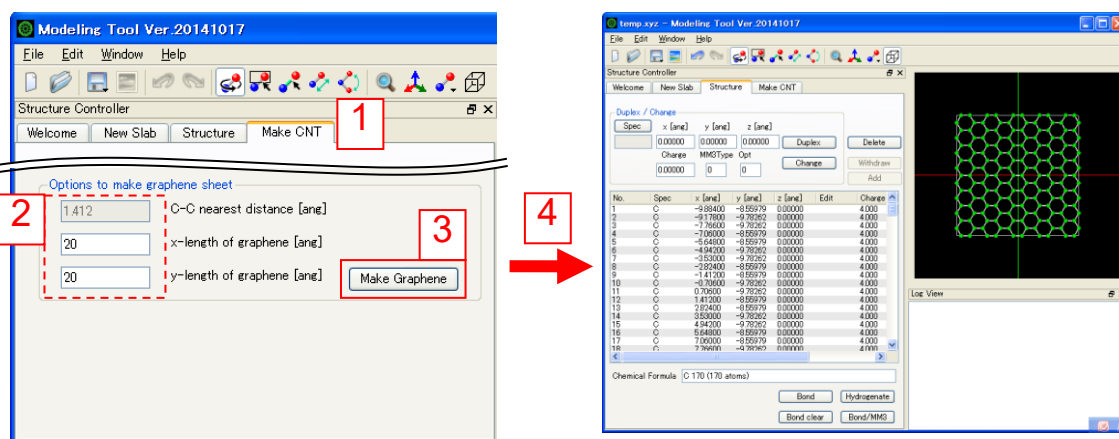


グラフェンシート作成

単層のグラフェンシートを作成できます。

【操作手順】

1. “Make CNT” タブを開く。
2. グラフェンシート作成用のオプションを設定する。
3. [Make Graphene] ボタンを押す。
4. 出力結果が “Structure” タブや “Main View” に表示される。



【グラフェンシート作成用のオプション】

C-C nearest distance [ang]: (編集不可)

C-C 原子間の最隣接距離。1.412 Å に固定されている。

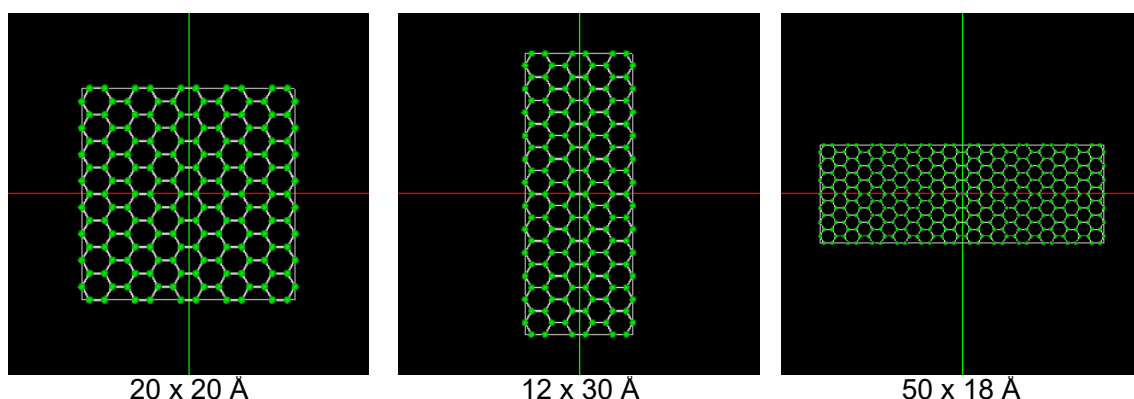
x-length of graphene [ang]:

グラフェンシートの横幅。デフォルトは 20 Å。

y-length of graphene [ang]:

グラフェンシートの縦幅。デフォルトは 20 Å。

入力する値に応じて任意のサイズのグラフェンシートを作成できます。



必要に応じて水素原子の付加 [Hydrogenate] や原子種 ID の決定 [Bond/MM3] を実行し、モデルを保存して下さい。

SPM シミュレータでの利用に関する注意点

モデリングツールで出力する原子構造ファイルは、SPM シミュレータの DFTB ソルバーおよび、CG/MD ソルバーで使うことができます（マクロ系ソルバーでは、原子構造のデータの中から高さ情報のみを抽出して利用します）。保存したファイルは、直接 SPM シミュレータでロードすることができます。ただし以下の点についてご注意ください。

- 各原子は、時として非常に接近した位置に生成される場合があります。このような原子構造ファイルを SPM シミュレータで使うとエラーを返すか、あるいは正常なシミュレーション結果が得られません。適当な原子をクリックしてハイライトしたとき、通常ですとその原子は、原子球の全体が黄色に変化します。しかし、ハイライトされた原子の一部しか変化しない場合、接近した位置に原子が生成された恐れがあります。その場合は、結晶データの相対原子位置などに誤りがないか確認をしてください。
- “Log View” に出力される並進ベクトルは、結晶データから生成されるもので、薄膜モデルのものではありません。薄膜モデルに利用する場合は、並進ベクトルの z 成分を無視してください。SPM シミュレータで利用するときは、 z 成分を 100.0 などの大きい数字を入力することを推奨します。将来的には、並進ベクトルの情報は、原子構造ファイルを通して SPM シミュレータへ自動的に渡されるよう変更する計画です。
- CG/MD 用の出力ファイルには、電子状態を摸した原子種情報が含まれています。たとえば、同じ炭素原子でも sp^3 状態なのか、 sp^2 状態なのかを区別する必要があります。モデリングツールでは、シリコン・炭素・水素に限り、これを自動的に処理します。ただし、原子の削除や追加に伴う変更は、現バージョンでは考慮しておりません。この場合、お手数ですが、テキストエディタを用いて “mm3.prm” 中から適切な値（正数値ひとつで表されています）を出力ファイル中の適切な位置へ記載して下さい。
- 探針用のモデルを作成するときは、結晶単位胞の角を利用すると簡単に作成できます。その場合、表面を全て水素原子で終端することで、安定な探針構造になります。ただ

し探針先端部の水素原子については適宜削除してください。

- CIF ファイルを読み込む際の注意事項。

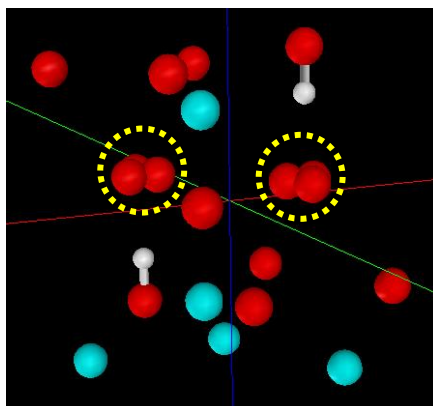
CIF に記載される原子サイトの占有率 occupancy について、以下のことにご注意ください。モデリングツールで結晶構造情報から作成したモデルにおいては、すべての原子の占有率は 1.0（指定のサイトに原子が必ず存在する）として扱われます。CIF ファイルによっては、特定の原子サイトに欠陥があるなどの場合に 1.0 未満の占有率が与えられることがあります。その場合は CIF の読み込み時に出力ログへ注意を促すメッセージが表示されます。

```
<<< Load a file "C:\sample\sample.cif" >>>
Now loading ...
Warning: incomplete occupancy 0.3333 for Ow at 0.736 0.368 0.491
Completed to load.
```

このとき、“New Slab” タブの原子サイト情報は次のように表示されます。

Spec	x/a	y/b	z/c
Zn	0.50000	0.00000	0.00000
V	0.00000	0.00000	0.25250
O	0.66667	0.33333	0.88230
O	0.15340	0.30680	0.82190
O	0.00000	0.00000	0.50000
O	0.73600	0.36800	0.49100
H	0.66667	0.33333	0.75000

出力ログには原子サイトの fractional 座標も示しており、この場合はリストの下から 2 番目の O 原子のサイトが占有率 0.3333 であることがわかります。[Make Surface] ボタンを押し、読み込んだ情報に基づいて原子モデルを作成すると、下図のように不自然なモデルが描画されます。



黄色の円で囲んだ部分を見ると、3つの酸素原子が非常に近接した位置に存在します。占有率 0.3333 を踏まえると、その3つの酸素原子のうちいずれか一つの位置に酸素原子が存在することが示唆されます。例えば多数のユニットセルを用意したときに、3つの位置のいずれかがランダムに現れるということが考えられます。

モデリングツールでは、1.0 未満の占有率を正しく考慮したモデルを作成することはできません。占有率について警告が与えられた場合、作成されたモデルには何らかの問題があることに注意してください。

本ツールは開発途上のものです。仕様の変更は極力避けるよう努めますが、やむを得ず変更される可能性があります。予めご理解ご了承ください。

2 分子モデリング

2 分子モデリング

はじめに

ここでは、SPM シミュレータの初期構造を作成するためのツールとして、フリーソフト ChemSketch と OpenBabel の使用方法を紹介いたします。このツールで作成した初期構造データは、原子・分子・ナノ材料 AFM シミュレータで利用可能です。

原子・分子・ナノ材料 AFM シミュレータでは、AFM 像のシミュレーションを行うために、Allinger によって開発された MM3 という古典力場パラメータを用いています。MM3 が対応している元素を下图に示します。

1																	18
1 H 1.0079	2	MM3 力場対応元素										13	14	15	16	17	18 4.0026
3 Li 6.941	4 Be 9.0122											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180
11 Na 22.990	12 Mg 24.305	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.409	31 Ga 69.723	32 Ge 72.64	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.798
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-71 *	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.21	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89-103 #	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (266)	107 Bh (264)	108 Hs (277)	109 Mt (268)	110 Ds (281)	111 Rg (272)	112 Uub (285)	113 Uut (284)	114 Uuq (289)	115 Uup (288)	116 Uuh (291)	117 Uus (294)	118 Uuo (294)
* Lanthanide series			57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97
# Actinide series			89 Ac (227)	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (262)

パラメータは元素だけではなく、その元素がどのような化学的な環境にあるかによっても区別して設定され、その区別のことを原子種(atom type)といいます(例えば、炭素元素に対して、アルキル基の炭素とベンゼン環の炭素とは区別されるため、異なる原子種です)。つまり、原子種、およびそれらの組み合わせによって、vdW 相互作用や二原子間の共有結合の相互作用等のパラメータが設定されることになります。考える原子種の組み合わせは非常に多いため、分子構造によってはパラメータが用意されておらず、その場合は分子内の構造変化の計算を行うことができません。

ChemSketch のダウンロード

ACD/ChemSketch は Advanced Chemistry Development 社の提供するフリーソフトです。こちらのソフトウェアのダウンロードにはユーザー登録が必要であり、また、ライセンス条項に同意の上でインストールを行っていただく必要があります。以下に、

ACD/ChemSketch のダウンロードを行う流れの一例をご紹介します。

- ①URL: <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>
の ACD/ChemSketch のダウンロードページを表示します。
- ②ページの下部にあるダウンロードのアイコンをクリックします。
- ③ログインページが表示されるので、Create an Account をクリックします。
- ④下图が表示されるので*の印がついている項目を入力し、Register をクリックします。

Registration:

The registration form is divided into three main sections: User Information, Additional Information, and Areas Of Interest.

User Information:

- Title: (Annotation: 性別 - Gender)
- First Name: (Annotation: 下の名前 - Last Name)
- Last Name: (Annotation: 苗字 - First Name)
- E-Mail: (Annotation: 確認のため同じ E-Mail アドレスを再度入力 - Confirm the same E-Mail address by re-entering it)
- Confirm E-Mail:

Additional Information:

- Password: (Annotation: 確認のため同じパスワードを再度入力 - Confirm the same password by re-entering it)
- Confirm Password:
- Address 1:
- Address 2:
- City:
- Country: (Annotation: 郵便番号 - Postal Code)
- Postal Code/Zip: (Annotation: 国籍 - Nationality)
- Province/State:
- Phone:
- Fax: (Annotation: 会社名 - Company Name)
- Company:
- Position:

Areas Of Interest:

Areas of Interest:

- ☐ NMR
- ☐ Chromatography
- ☐ MS
- ☐ UV-IR
- ☐ ADME Prediction
- ☐ Toxicity Prediction
- ☐ Physicochemical Property Prediction
- ☐ Nomenclature
- ☐ Chemical Drawing
- ☐ New Product Info
- ☐ Product Updates

Applications:

- ☐ Compound Identification
- ☐ Metabolite ID
- ☐ Method Development
- ☐ Analytical Data Processing and Interpretation
- ☐ Knowledge Management
- ☐ Medicinal Chemistry
- ☐ Software Automation
- ☐ Lead Optimization
- ☐ Environmental Monitoring
- ☐ Education
- ☐ Learning
- ☐ Impurities and Degradants

Periodic Updates:

- ☐ Send me periodic updates on products and special offers

Register

⑤記入した E-Mail アドレス宛に、メールが届いたら

Before you can login you need to activate your account:

To automatically activate your account, click [here](#)

とメール本文に記載されているので、青く反転した [here](#) をクリックします。

これでアカウントの作成は終了です。

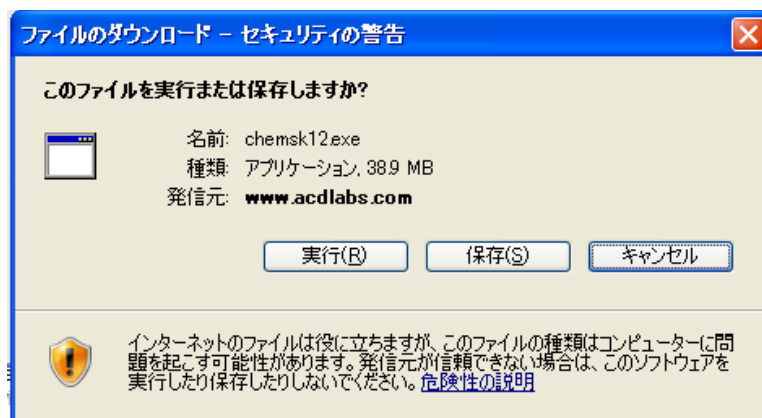
⑥再度 URL: <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>

の web ページを表示します。

⑦ページの下の方にあるダウンロードのアイコンをクリックします。

⑧ログインページが表示されるので、手順④で入力した E-Mail アドレスとパスワードを入力し Login アイコンをクリックします。

⑨下図が表示されたら実行をクリックします。

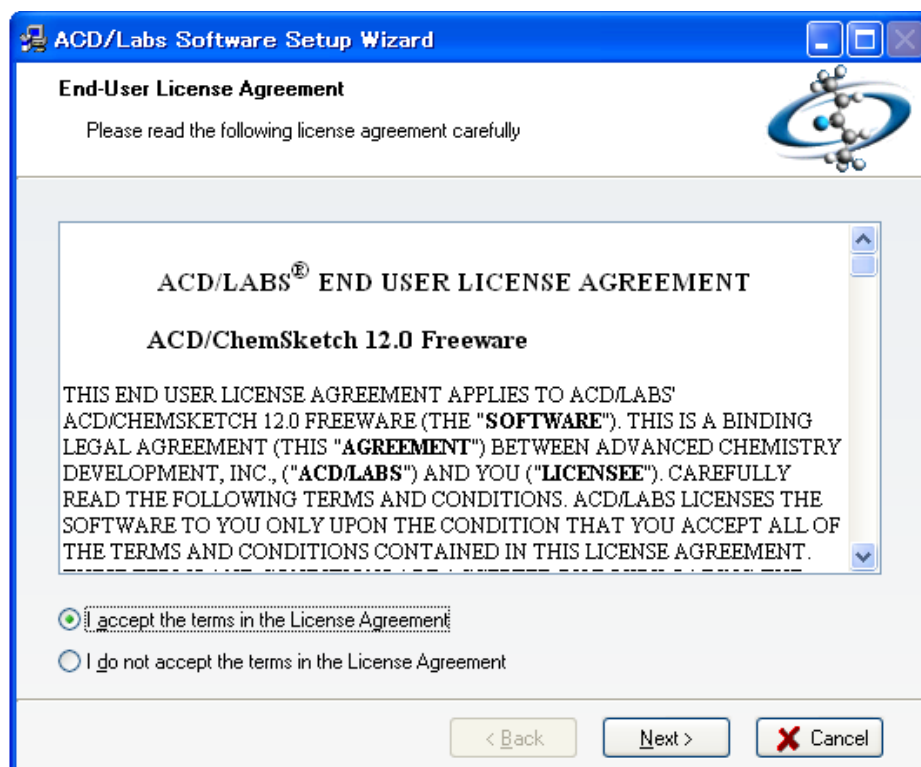


⑩Next > をクリック

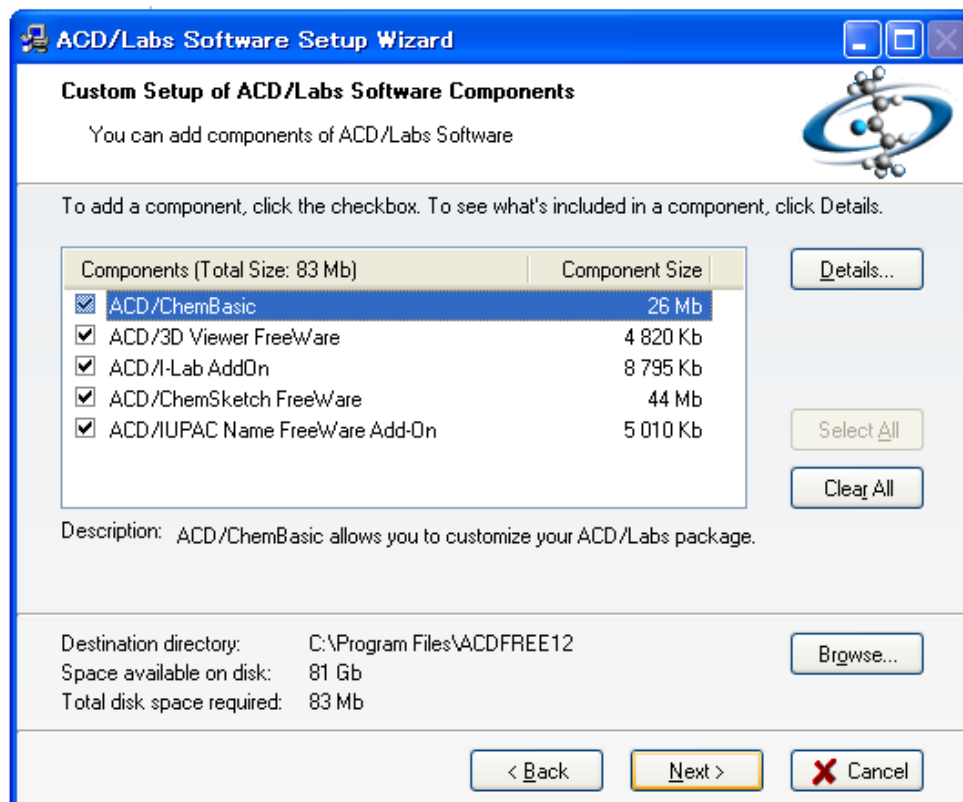


⑪ライセンス条項を確認したうえで、 I accept the terms in the License Agreement を選択

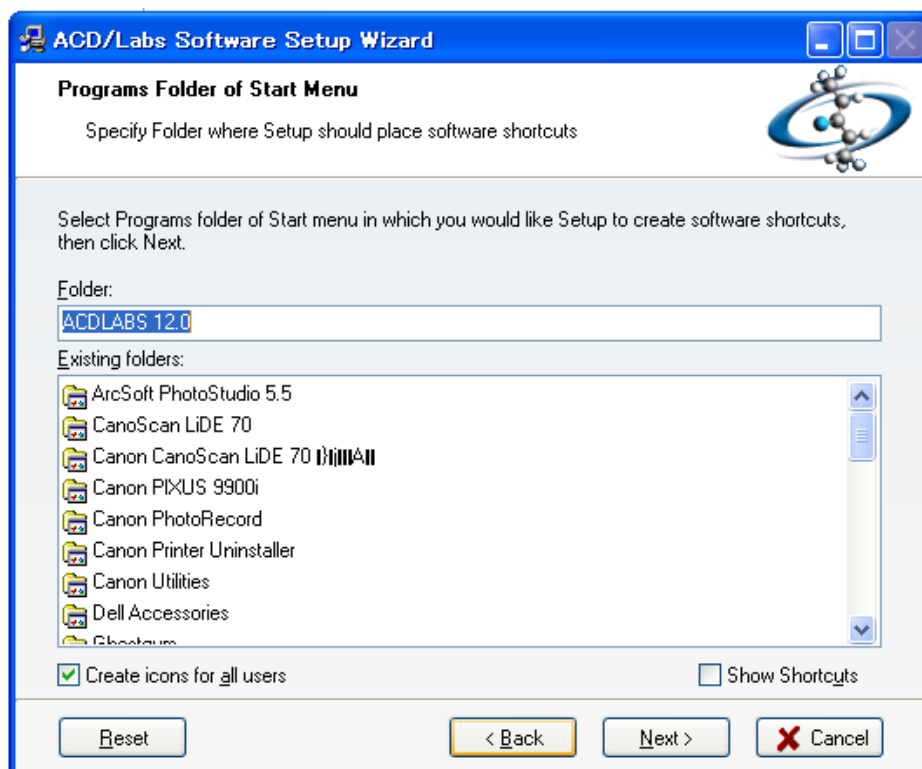
し、Next >をクリック。



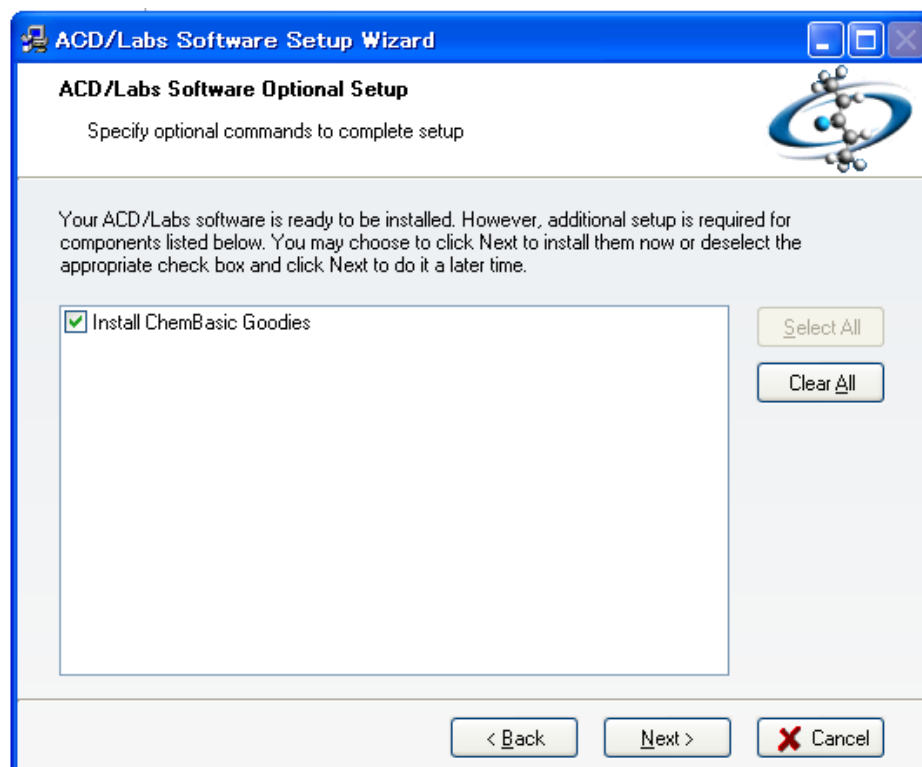
⑫Next >をクリック。



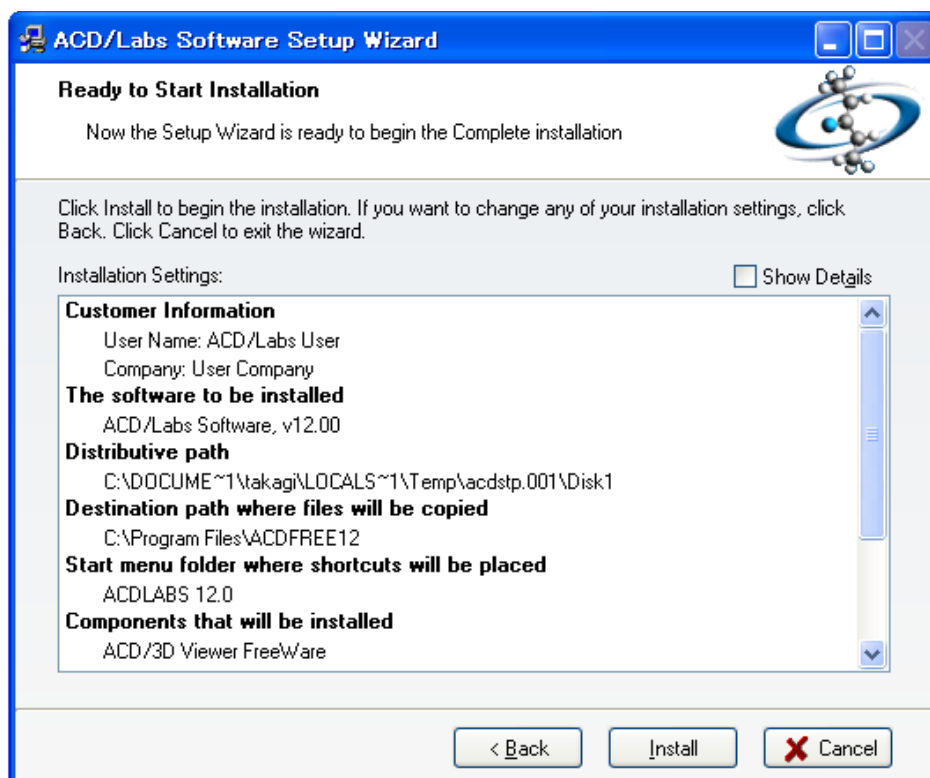
⑬Next >をクリック。



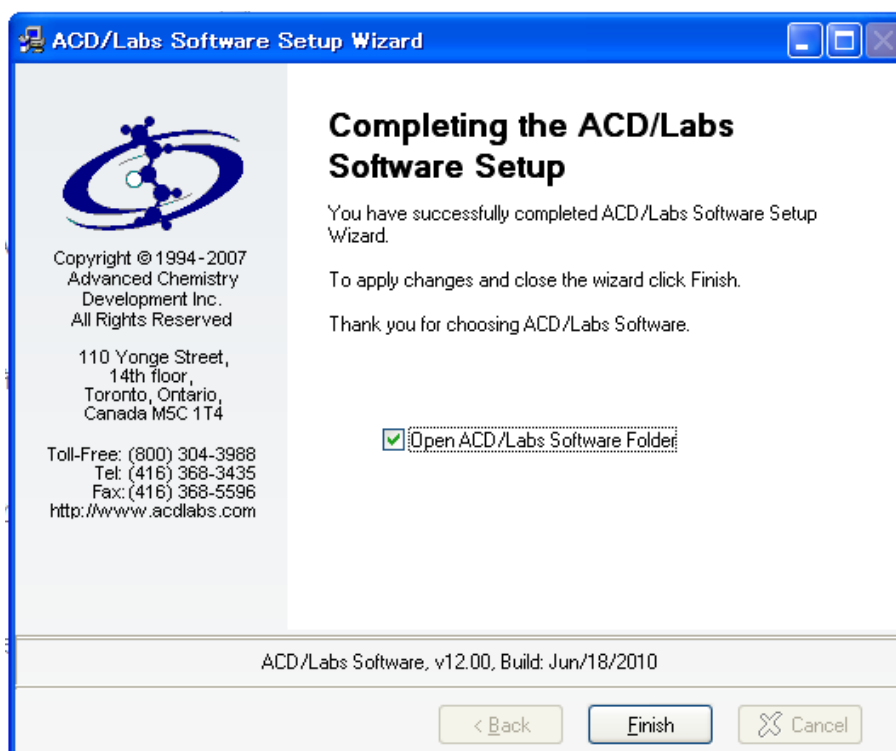
⑭Next >をクリック。



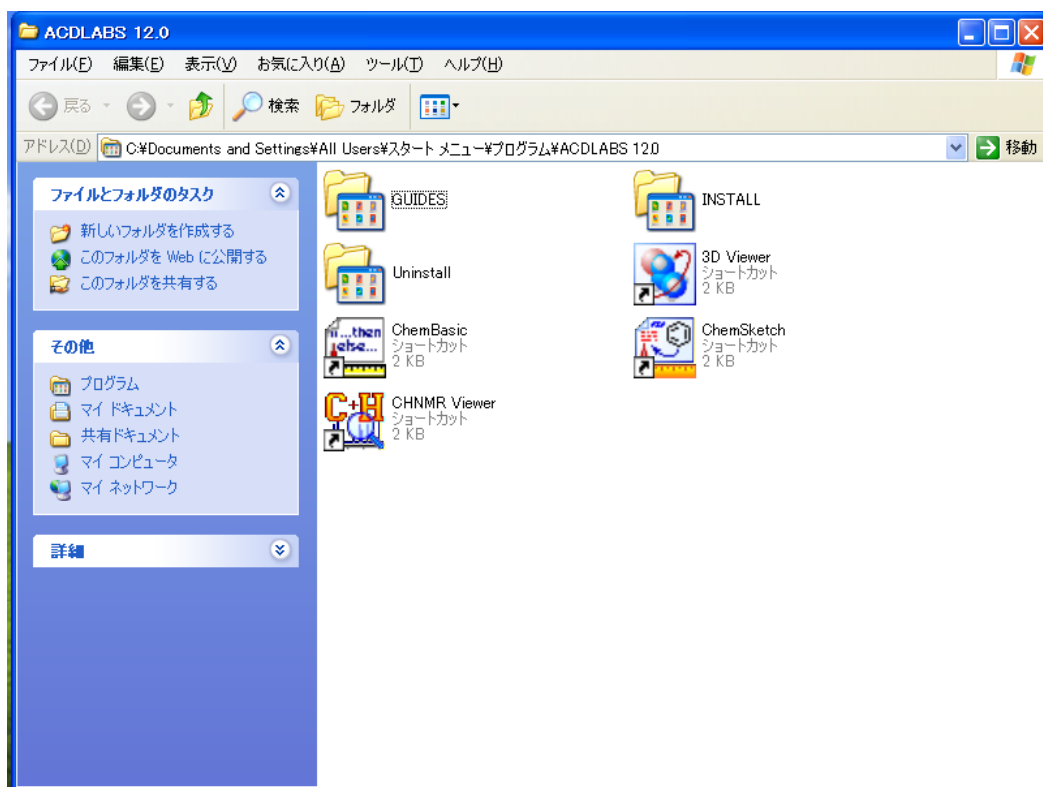
⑮Install をクリック。



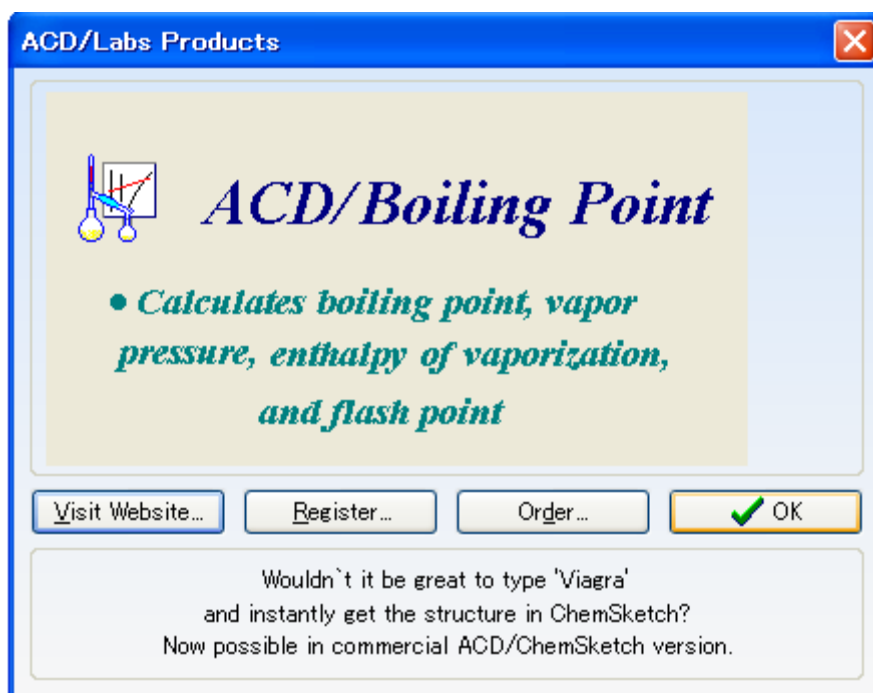
⑩Finish をクリック。



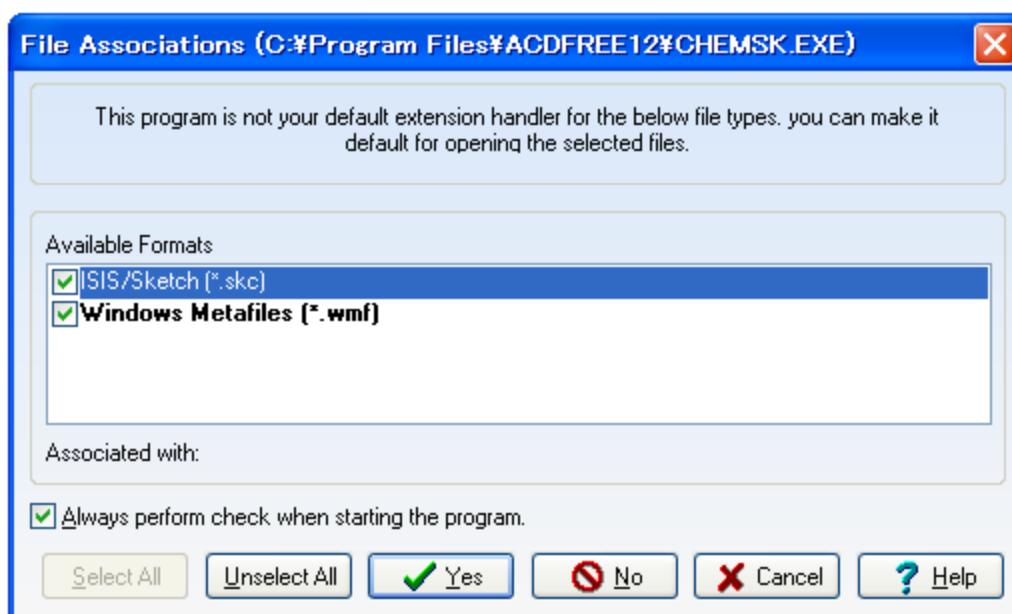
⑪ChemSketch をクリック。



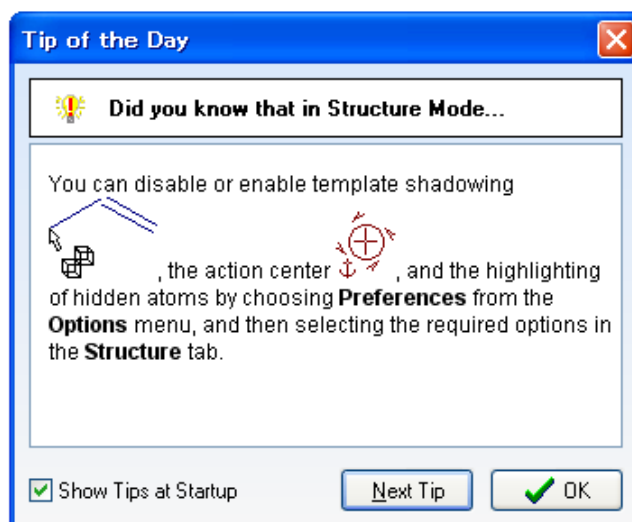
⑱ OK をクリック。



⑲ Select All をクリックし、Yes をクリック。



②OK をクリック。



以上でダウンロードと初期設定は終了です。

OpenBabel のダウンロード

OpenBabel は GPL ライセンスのもとで配布されているフリーソフトであり、化学情報のファイル形式の変換に用いられます。使用には、こちらのソフトウェアのライセンス条項に同意の上でインストールを行っていただく必要があります。以下に、OpenBabel のダウンロードを行う流れの一例をご紹介します。

- ① URL:http://openbabel.org/wiki/Main_Page の web ページを表示します。
- ② Download をクリック。

Create account Log in

Page [Discussion](#) [Read](#) [View source](#) [View history](#)

Open Babel: The Open Source Chemistry Toolbox

Open Babel is a chemical toolbox designed to speak the many languages of chemical data. It's an open, collaborative project allowing anyone to search, convert, analyze, or store data from molecular modeling, chemistry, solid-state materials, biochemistry, or related areas.

- **Ready-to-use programs, and complete programmer's toolkit**
- Read, write and convert over **110 chemical file formats**
- Filter and search molecular files using **SMARTS** and other methods
- Supports molecular modeling, cheminformatics, bioinformatics
- Organic chemistry, inorganic chemistry, solid-state materials, nuclear chemistry
- Downloaded over **164,000 times** and used by over **40 related projects**
- More about Open Babel
- Open Babel on SourceForge

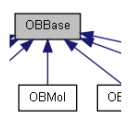
To support Open Babel, please cite J. Cheminf. 2011, 3:33



Download



[Online docs](#)
[PDF](#)
[Buy Book](#)
[Read Paper](#)



[Browse the API](#)

Main Page

[Get Open Babel](#)

[Need Help?](#)

[Capabilities](#)

[Using Open Babel](#)

[Develop with Babel](#)

[Get Involved](#)

[FAQ](#)

[Credits](#)

[Recent Changes](#)

Tools

[What links here](#)

[Related changes](#)

[Special pages](#)

③ Windows 版の Download v2.3.2 Installer をクリック。

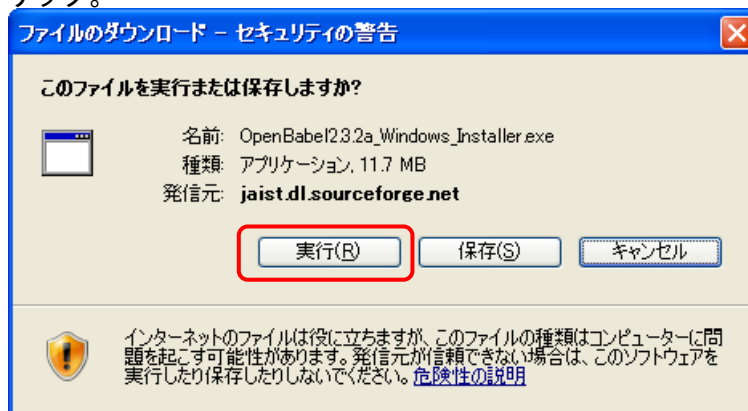
Category:Installation

(Redirected from [Get Open Babel](#))

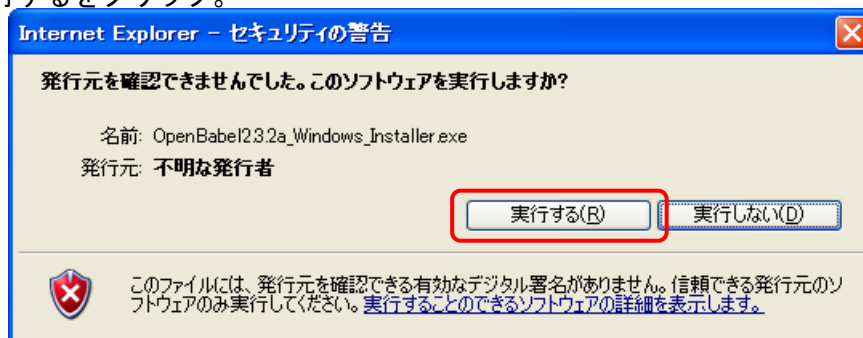
Open Babel is available for Windows, Linux and Macintosh.

Windows	Linux	Macintosh
• OpenBabelGUI Provides a graphical user interface for Open Babel, as well as a command-line interface. This is what most users are looking for Download v2.3.2 Installer Documentation • Python module (requires OpenBabelGUI above) Provides access to the Open Babel libraries from Python. The current version is 1.7.	• Compile from source Compile Open Babel: Download 2.3.2 stable release or Get latest development code (today) How to compile How to use obabel How to develop with Open Babel - Scripting language modules: Perl, Python, Ruby, Java, Mono or	• iBabel -- *recommended* A graphical interface to Open Babel. To get the command-line tools you need to choose one of the following: • Download v2.3.1 Installer • ChemSpotlight 2.0 -- Includes Open Babel for 10.5 and 10.6 • Fink • MacPorts • Compile the source code

④ 実行をクリック。



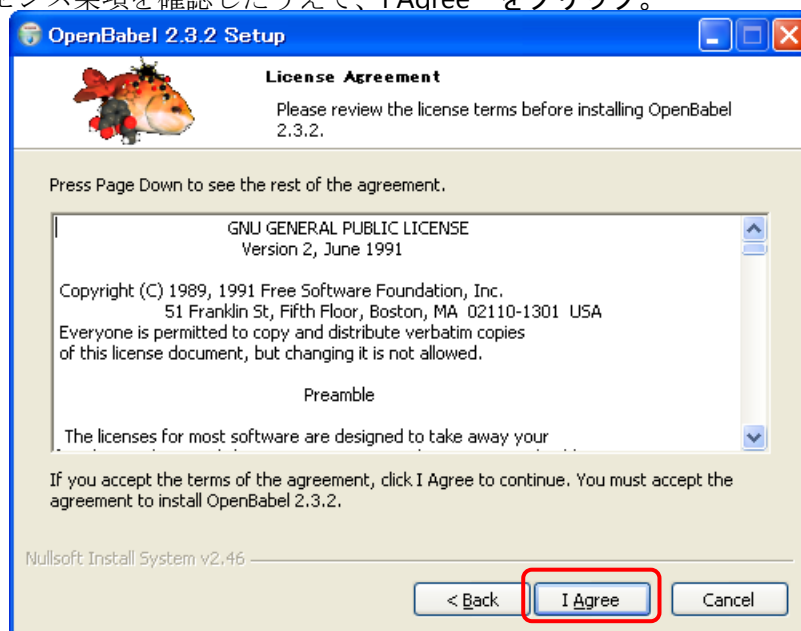
⑤ 実行するをクリック。



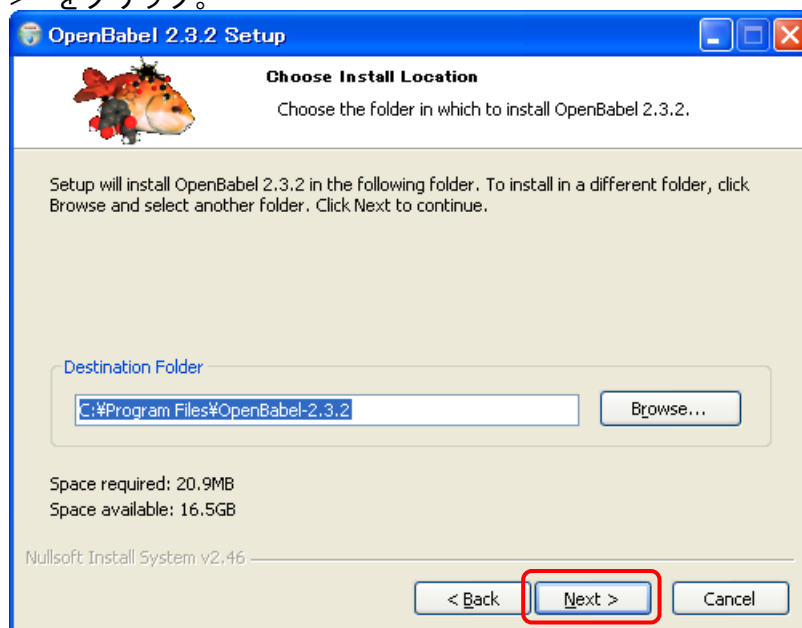
⑥ Next >をクリック。



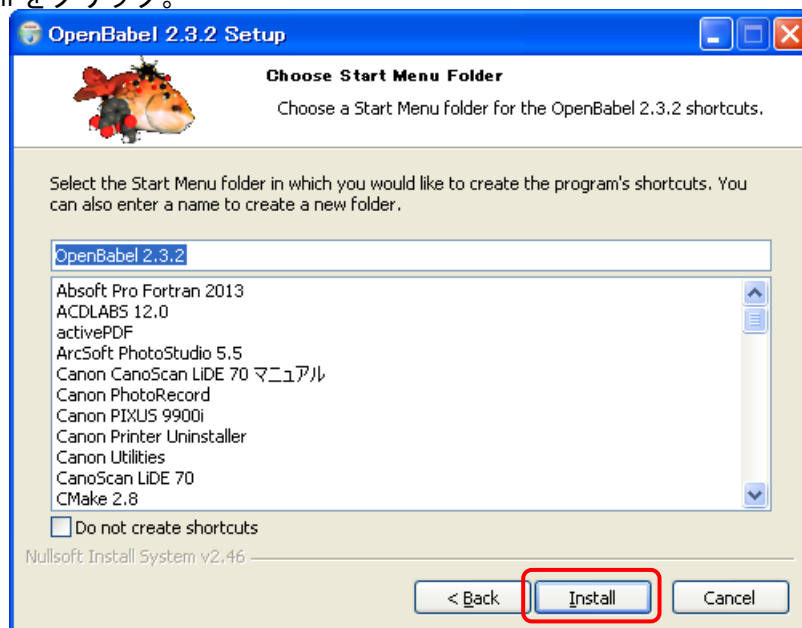
⑦ ライセンス条項を確認したうえで、I Agree をクリック。



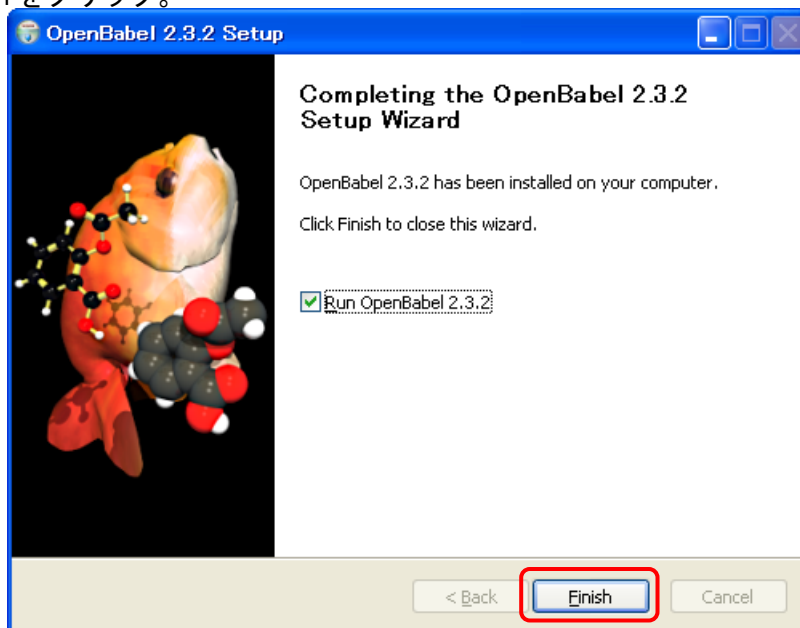
⑧ Next > をクリック。



⑨ Install をクリック。



- ⑩ Finish をクリック。

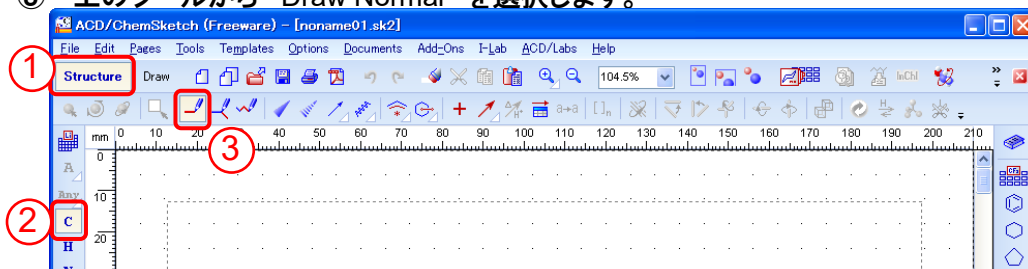


以上でダウンロードは終了です。

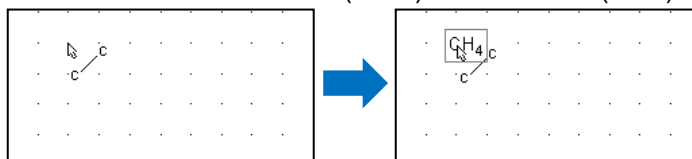
ChemSketch を用いたオクタン分子の作成

炭素数 8 のアルカンである、オクタン(分子式 C_8H_{18})を作成します。

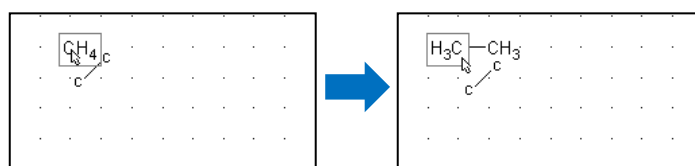
1. “ChemSketch” を起動します。
2. 炭素鎖を作成します。
 - ① “Structure” を選択します。
 - ② 左のツールから C(炭素原子)を選択します。
 - ③ 上のツールから “Draw Normal” を選択します。



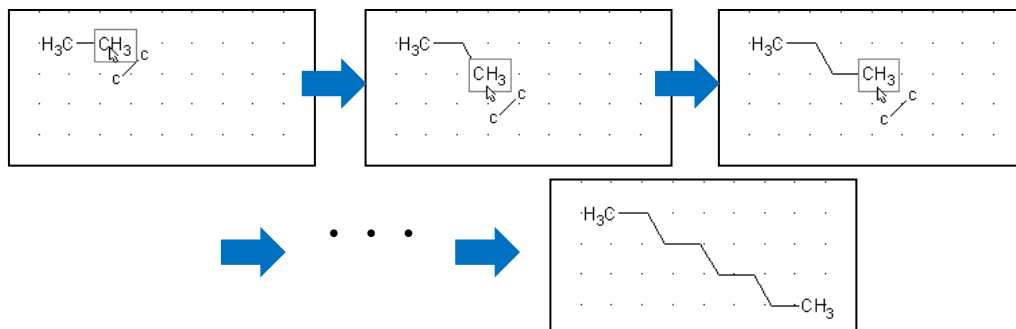
- ④ 空白の画面をクリックすると、炭素原子 1 つから成る CH_4 が生成します。以下の作業で操作を戻したい場合は、Ctrl+Z (undo)および Ctrl+Y (redo)を使うと便利です。



- ⑤ CH_4 にカーソルを合わせてクリックすると、H 原子の一つが CH_3 に置換され、エタン分子になります。

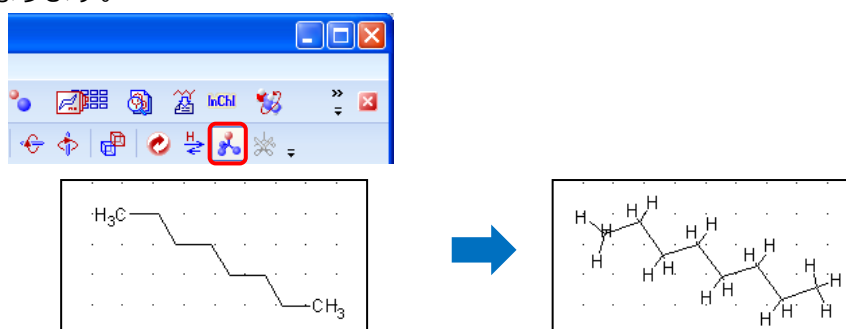


- ⑥ 以下、片方の端の CH3 にカーソルを合わせてクリック、を炭素数が 8 になるまで繰り返します。



- ⑦ これでオクタン分子の骨格が完成しました。

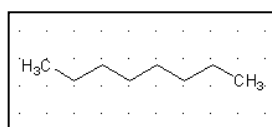
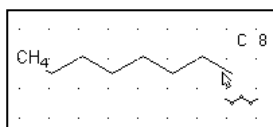
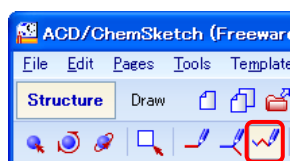
3. 3次元最適化。“3D Optimization”ボタンをクリックすると、水素原子が付加されて三次元構造になります。



4. モデルの保存。

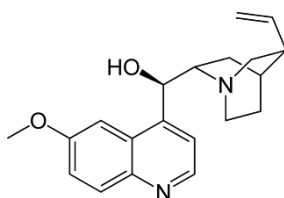
- ① メニューバーから[File]→[Save As]を選択し、データを保存するためのダイアログを開きます。
- ② ファイルの種類を “MDL Molfiles [V2000] (*.mol)” に設定し、ファイル名を入力して保存します。
- ③ 保存したファイルはフリーソフト OpenBabel を利用して*.txyz 形式に変換できます。(後述)

もっと簡単な方法もあります。上部のツールから “Draw Chains” アイコンをクリックします。画面上で Shift キーを押しながら、任意の点から右へドラッグします。炭素の数が “C 8” のように表示されたらマウスボタンをリリースします。以上でオクタン分子が出来上がります。

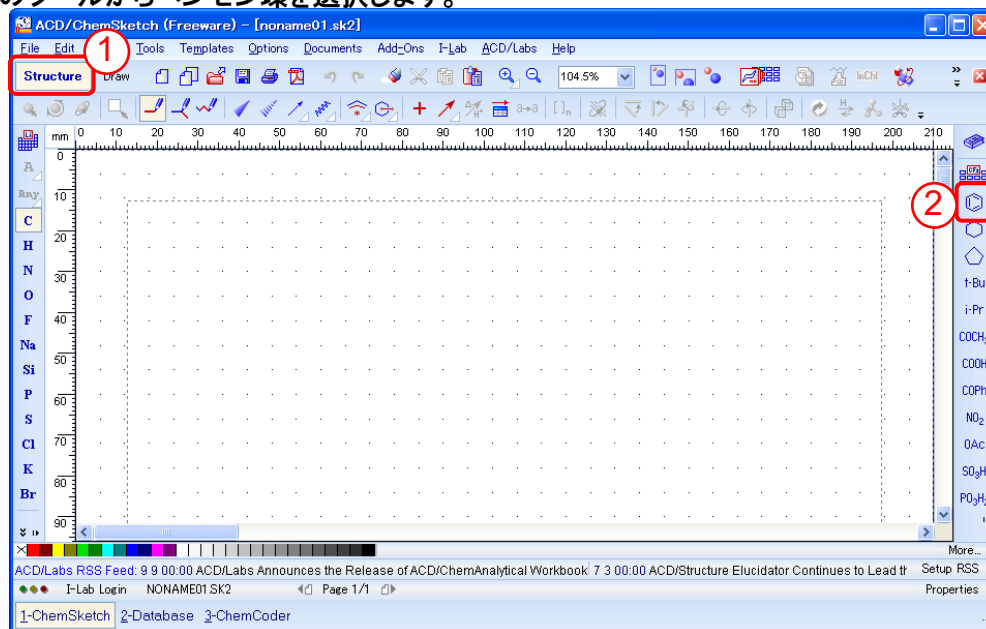


ChemSketch を用いたキニーネ分子の作成

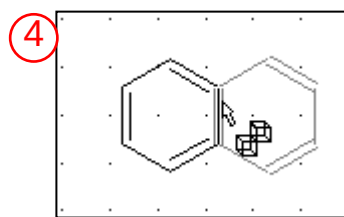
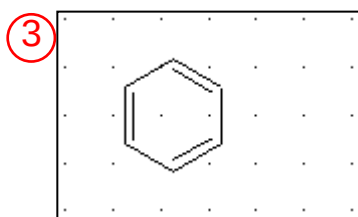
分子式 $C_{20}H_{24}N_2O_2$ のアルカロイドである、(-)-キニーネを作成します。次のような構造を持つ分子であり、これを一から作り上げます。



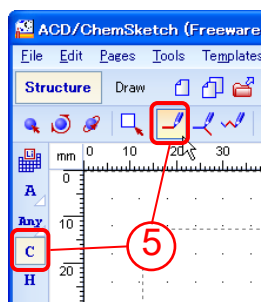
1. “ChemSketch” を起動します。
2. 分子の骨格を作成します。
 - ① “Structure” を選択します。
 - ② 右のツールからベンゼン環を選択します。



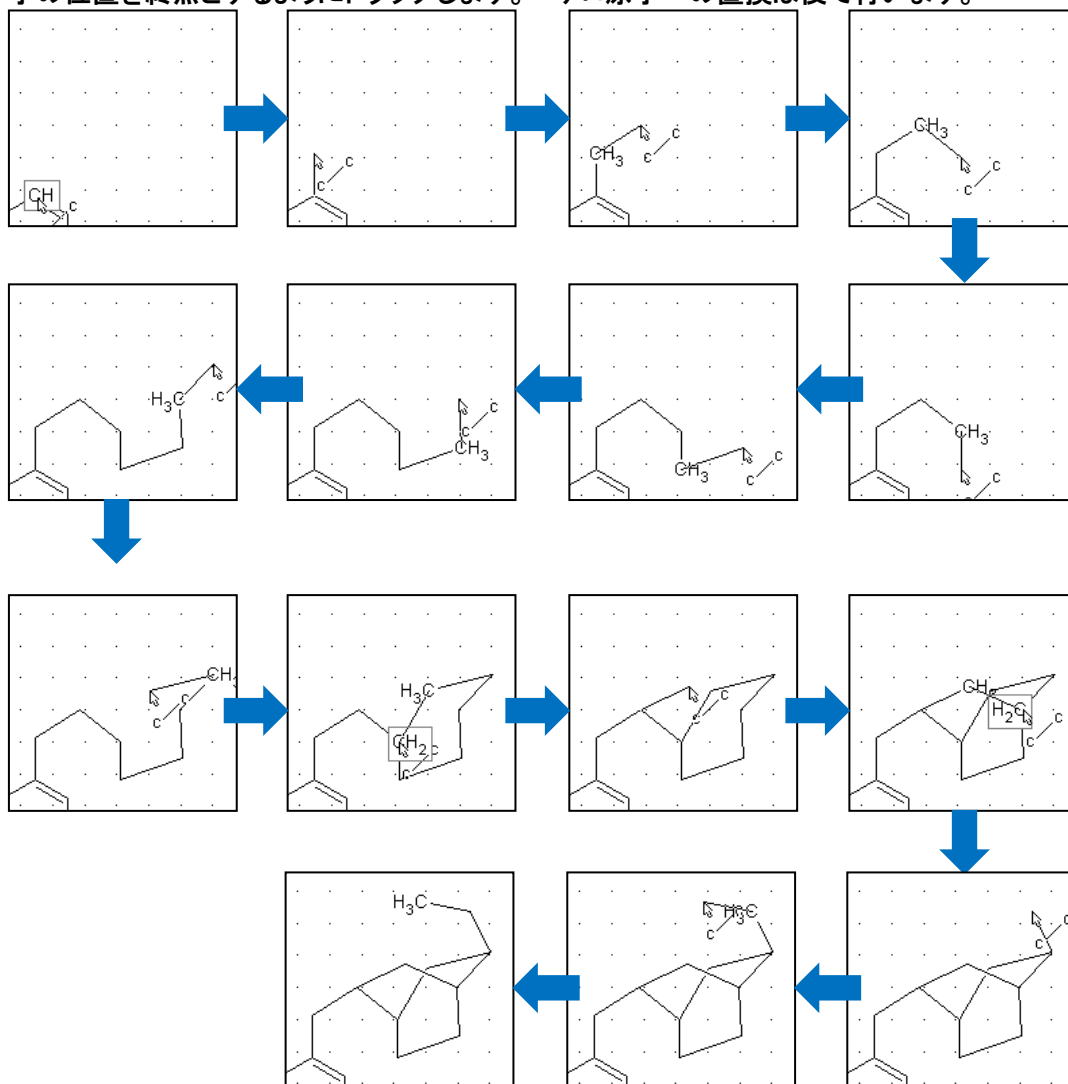
- ③ 空白の画面をクリックしてベンゼン環を生成します。以下の作業で操作を戻したい場合は、Ctrl+Z (undo)および Ctrl+Y (redo)を使うと便利です。
- ④ 続いて、配置されたベンゼン環の右の結合部分にカーソルを合わせ、クリックすることでナフタレン構造を作ります。ヘテロ原子への置換は後で行います。



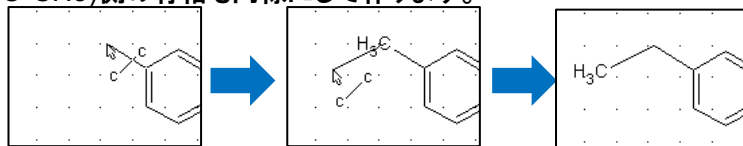
- ⑤ 左のツールから C(炭素原子)を選択します。上のツールから “Draw Normal” を選択します。



- ⑥ 炭素原子鎖の骨格を作ります。鎖を伸ばしたい炭素原子を始点とし、付加する炭素原子の位置を終点とするようにドラッグします。ヘテロ原子への置換は後で行います。

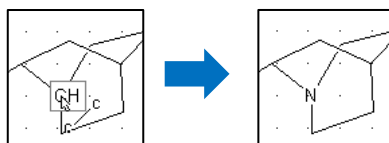
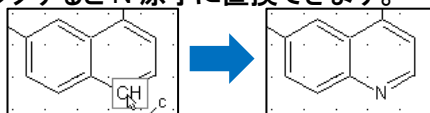


- ⑦ メトキシ基(-O-CH₃)側の骨格も同様にして作ります。

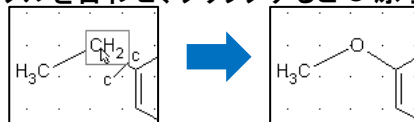


3. 原子の置換、官能基の付加、修飾をします。

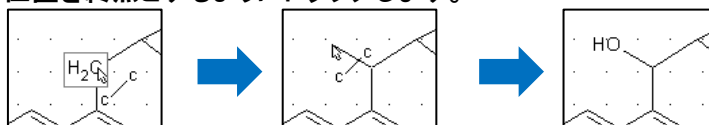
- ① 原子を置換します。左のツールから N(窒素原子)を選択します。置換したい原子上にカーソルを合わせ、クリックすると N 原子に置換できます。



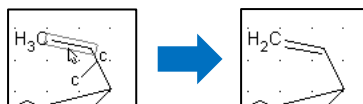
- ② 同様に O(酸素原子)への置換も行います。左のツールから O(酸素原子)を選択し、置換したい原子上にカーソルを合わせ、クリックすると O 原子に置換できます。



- ③ ヒドロキシ基を付加します。左のツールから O(酸素原子)を選択し、炭素骨格を作ったときと同様にして操作します。ヒドロキシ基を付加させる炭素原子を始点とし、酸素原子を配置したい位置を終点とするようにドラッグします。

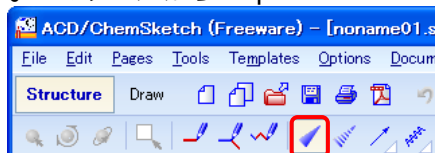


- ④ 二重結合を作ります。左のツールから C(炭素原子)を選択。上のツールから “Draw Normal” を選択します。結合部分にカーソルを合わせ、クリックすると二重結合に変わります。

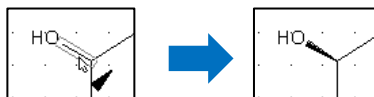


(クリックするたびに二重結合、三重結合、単結合と繰り返されます。)

- ⑤ 立体構造を指定します。上のツールから “Up Stereo Bonds” を選択します。

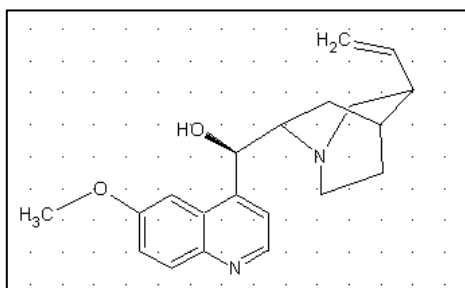


結合部分にカーソルを合わせてクリックすると、紙面上方へ向かうような立体を表現する結合に変わります。



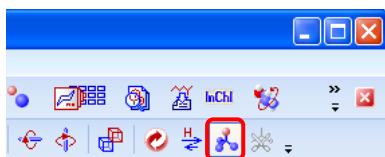
(クリックするたびにくさび形の向きが変わります。上のツールから隣の “Down Stereo Bonds” を使うと紙面下方に向かう結合を表現できます。)

- ⑥ 下のような構造ができあがりました。

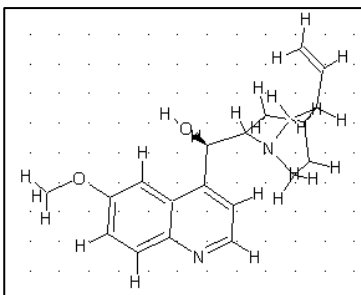


4. 3次元最適化。

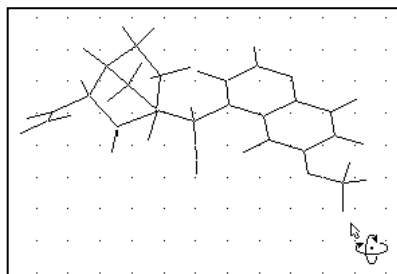
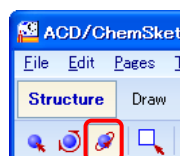
- ① “3D Optimization” ボタンをクリックすると、水素原子が付加されて三次元構造になります。



- ② 警告のダイアログが出ます。立体結合は残すので、“No” を選択します。
- ③ 次のような構造が得られます。



- ④ 左上のツールから “3D Rotation” をクリックし、画面上をドラッグすると、3次元回転させることができます。



5. モデルの保存。

- ① メニューバーから[File]→[Save As]を選択し、データを保存するためのダイアログを開きます。
- ② ファイルの種類を “MDL Molfiles [V2000] (*.mol)” に設定し、ファイル名を入力して保存します。
- ③ 保存したファイルはフリーソフト OpenBabel を利用して*.txyz 形式に変換できます。(後述)

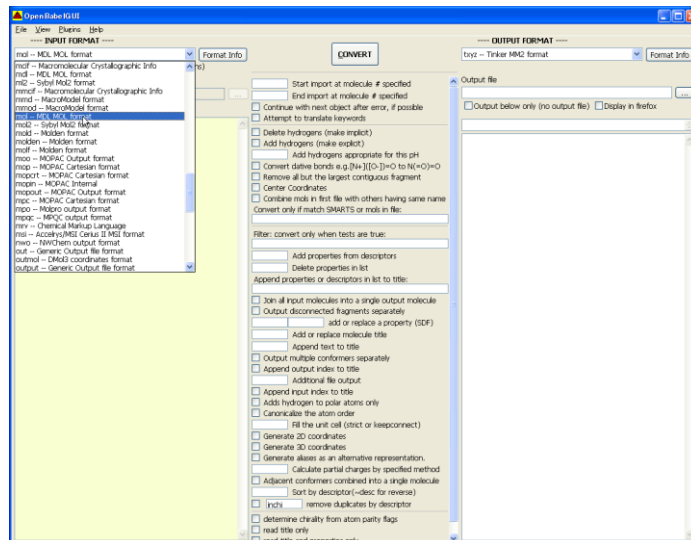
Open Babel を用いたファイル形式の変換

“Open Babel”を用いて、“ChemSketch”で作成したファイル(mol 形式)を、シミュレータで使用可能な形式(txz 形式)のファイルに変換します

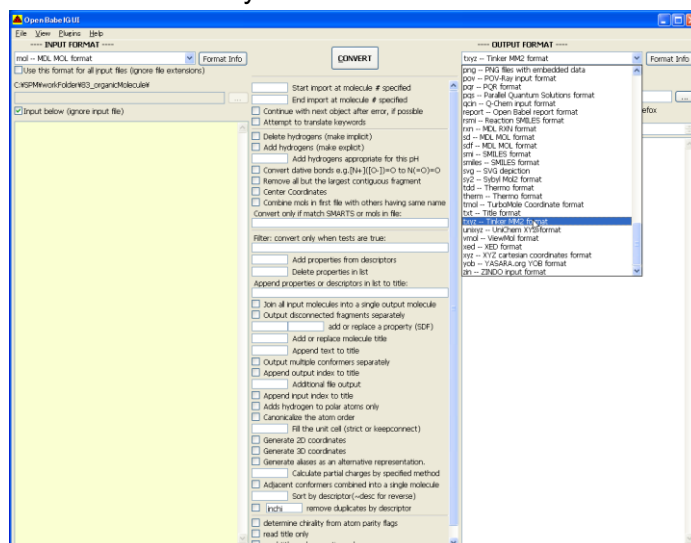
1. “Open Babel GUI”を起動

2. mol 形式から xyz 形式ファイルへの変換

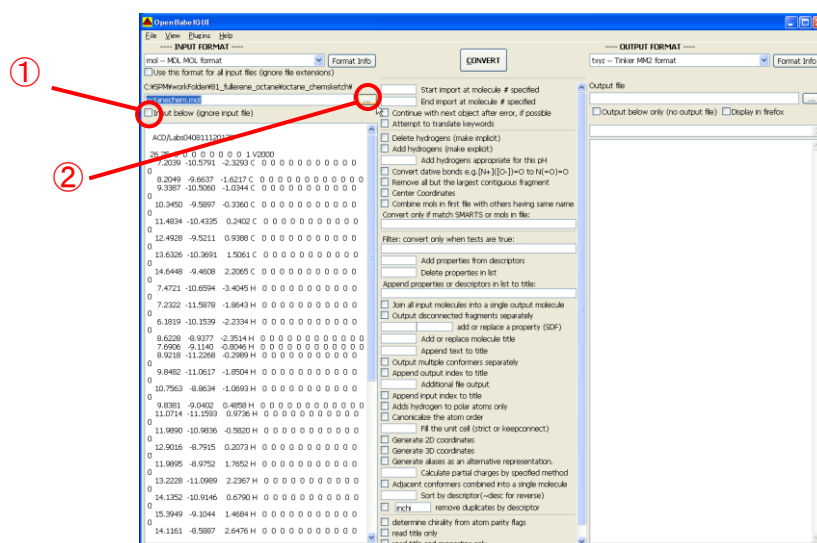
1) “INPUT FORMAT”から、“mol – MDL MOL format”を選択します



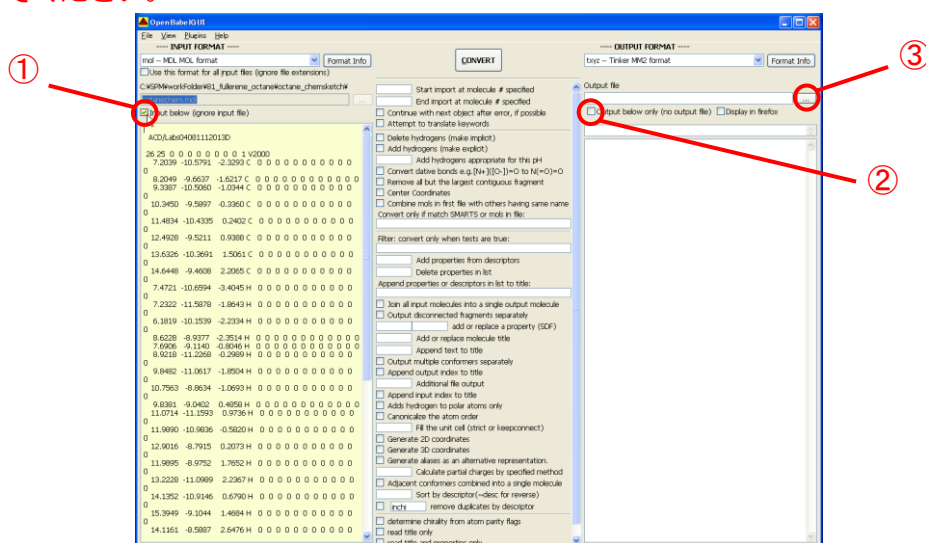
2) “OUTPUT FORMAT”から、“xyz – Tinker MM2 format”を選択します。



3) ①“Input below”チェックボックスのチェックをはずし、②ChemSketch で作成した mol ファイルを指定します。(注)指定する mol ファイルのパスには、日本語文字を含めないようにしてください。



4) ①”Input below”チェックボックスにチェックを入れます。②”Output below only”チェックボックスのチェックをはずし、③出力する場所を指定し、ファイル名を入力します。(注)指定する mol ファイルのパス、及びファイル名には、日本語文字を含めないようにしてください。



5) ”CONVERT”ボタンをクリックします。

第 6 章

トラブルシューティング

SPM シミュレータの利用時に起こり得るトラブル事例とその解決方法を紹介します。

シミュレータの実行に伴うトラブル

シミュレータが正常に起動しない

シミュレータが正常に起動しない場合、ig4dev32.dll（通常は C:¥WINDOWS¥system32 にあります）のバージョンが合っていない可能性があります。このファイル名を別名（例えば、ig4dev32.dll_bak）に変更後、再度 GUI を起動してみてください。

なお、他のアプリケーションで不都合が出た場合は、お手数ですが元にお戻しください。

設定したパラメータが計算に反映されない

読み込み中のプロジェクトファイルのあるフォルダに対して、ログインしているユーザアカウントが書き込み権限を持っていないことが原因と考えられます。

SPM シミュレータはデフォルトでは "C:¥Program Files" 以下のフォルダにインストールされますが、管理者権限を持たないユーザアカウントはこのフォルダ以下の内容を書き変えることができません。Windows Vista 以降の OS の場合、"C:¥Program Files" 以下のプロジェクトファイルや出力ファイルを書き換えようとすると、VirtualStore という仕組みが作動します。すると、Windows 側が保存先を自動的に切り替えてしまい、"C:¥Program Files" 以下のファイルを直接書き換えず、別の場所にファイルのコピーを作り、そのファイルを編集するようになってしまいます。SPM シミュレータは始めに選択したフォルダにある出力ファイルを読み込むため、結果として別の場所にある出力ファイルの変化を見出すことはできません。

この問題を解決するための 2 通りの方法をご紹介します。

まず一つ目は、一時的に管理者権限を付けてシミュレータを起動する方法です。SPM シミュレータを起動する際に、シミュレータのアイコンを右クリックし「管理者として実行」を選択して下さい。

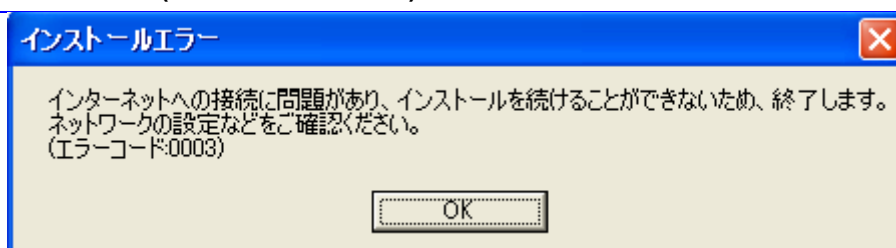
二つ目は、サンプルプロジェクトのコピーを作る方法です。SPM シミュレータのアイコンをダブルクリックし、通常の方法で起動します。サンプルプロジェクトを "C:¥Program Files¥SpmSimulator¥SampleProject" 以下から読み込みます。ここで、今開いているプロジ

エクトのコピーを作るために、メニューバーの [File] -> [save as] を選択して "Save project" ダイアログを開きます。プロジェクト名は初期値のまま構いませんが、保存先のディレクトリは、必ず書き込み権限のあるフォルダ(例えば "C:\Users\ユーザー名" 以下)を選択してください。プロジェクトの保存ができましたら問題は解決となります。計算の設定を更新して保存したり、計算を実行したりしたときに、選択されたフォルダ以下に結果が反映されるようになります。

インストールに伴うトラブル

インストーラ実行時に発生し得るエラーコード、ならびに対処方法を示します。

インストールエラー (エラーコード:0003)



ネットワークへの接続情報の取得に失敗している可能性があります。SPM シミュレータをインストールするにはインターネットへの接続が必要です。具体的には Windows に付属するアプリケーション ipconfig.exe を使用してネットワーク情報を取得する際に、正常な接続の情報が得られないことが原因となります。

まずインターネットへの接続を確認して下さい。正常に接続でき、なおかつ当該エラーコードが発生する場合は以下の手順を確認して下さい。

Windows の環境変数の PATH に ipconfig.exe へのパスが設定されていない場合に当該エラーコードが発生することがあります。以下の手順に従って環境変数を編集して下さい。

まず“システムのプロパティ”を表示するウィンドウを開きます。

【Windows XP をお使いの場合】

デスクトップまたは画面左下のスタートメニューから、マイコンピュータを右クリックし、プロパティをクリックします。

【Windows 7 をお使いの場合】

Windows7 の画面左下のスタートボタンを押します。

表示されるメニューの“コンピュータ”を右クリックし、プロパティをクリックします。システムを表示するウィンドウが開きましたら、左側の“システムの詳細設定”をクリックします。

“詳細設定”のタブをクリックします。

“環境変数”ボタンを押し、環境変数を設定するためのウィンドウを開きます。

ここからは間違えないようにご注意ください。

システム環境変数のリストから “Path” を探して選択し、“編集” ボタンを押します。(ユーザー環境変数のリストではありません。)

“変数値”に次のようにして値を追加します。

変数値の文字列の一番最後にカーソルを合わせます。それに引き続き、以下の内容をセミコロン『;』を含めてすべてコピー＆ペーストします。

```
;%SystemRoot%;%SystemRoot%\System32;%SystemRoot%\System32\Wbem
```

“OK”ボタンを押してシステム変数の編集を終えます。

“OK”ボタンを押して “環境変数” の編集を反映させます。

“OK”ボタンを押して “システムのプロパティ” の編集を終えます。

以上で環境変数の設定は完了です。改めてインストーラを起動して下さい。

株式会社 Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F

TEL 03-3447-5501 (代) FAX 03-3447-4100