

# 汎用走査プローブ顕微鏡像解析ソフトウェア 「SPM シミュレータ」

柿沼 良輔

Advanced Algorithm & Systems

## 1. はじめに

走査プローブ顕微鏡(Scanning Probe Microscopy; SPM)は、無機結晶表面や半導体微細構造、有機分子、タンパク質分子や DNA など、様々な物質における微細スケールでの形状や物性(硬さ、電気伝導度、磁気分布など)を計測し、それらの機能開発を導く強力な実験手法です。ところが、SPM での計測には原子レベルの物理的現象が複雑に関わっているため、実験結果の解析に理論的な支援がなければ難しいという現状にあります。実験者自身が SPM 理論にも十分精通している場合や、気軽に解析をお願いできる研究者がいるならば問題ありませんが、全ての実験者が常にそのような環境にあるとは限らないことは容易に想像できることです。

このような背景の中、東北大学原子分子材料科学高等研究機構の塚田捷特任教授らは、SPM 実験者がそのような理論的な支援をいつでも受けられるような、必ずしも SPM 理論の専門的な知識を必要としない SPM 像シミュレータの開発を行って参りました。本ソフトウェアはこれらのシミュレータをより使い易くまとめ上げ、また、さらに機能を強化した製品であります。本ソフトウェアの開発も塚田教授のご指導の下に行われました。本稿では、簡単にではありますが本ソフトウェアの紹介をしたいと思います。

## 2. 製品概要

本ソフトウェアでは、解析対象に応じて必要十分な計算手法を選択できるようにと、以下に挙げた複数のシミュレータを扱うことが可能となっています。

- ◆ 幾何学的高速相互予測 AFM 像シミュレータ
- ◆ 連続弾性体 AFM 像シミュレータ
- ◆ 液中ソフトマテリアル AFM 像シミュレータ
- ◆ 原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータ
- ◆ 量子力学的 SPM 像シミュレータ

(AFM は Atomic Force Microscopy(原子間力顕微鏡)の略。) これらのシミュレータは、統合型グラフィカルユーザーインターフェース(GUI)を用いて操作することができます(図 1)。

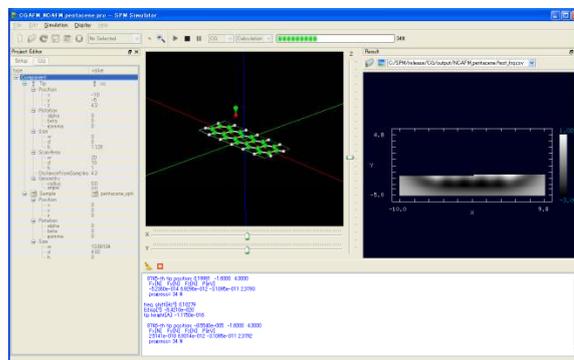


図 1: 統合型グラフィカルユーザーインターフェースを用いたシミュレーションの様子

また、これらのシミュレータの補助機能として、

- ◆ 探針・試料構造モデリング機能
- ◆ 実験像・計算像比較検証機能

を搭載しています。

さらに、ドキュメントとして、操作方法のマニュアルだけでなく、計算手順例を紹介したチュートリアルや計算原理を紹介したデザイン書が付属しています。

本ソフトウェアは Windows 上で動作します。

## 3. 各シミュレータ/機能の概要

### 3.1 幾何学的高速相互予測 AFM 像シミュレータ

$\mu\text{m}$  スケールでの AFM 像解析に対応した高速シミュレータです。「探針形状」、「試料形状」、「測定像」のデータのうち 2 つを入力することで、残りの 1 つを予測します。探針や試料は剛体として扱われ、幾何学的な接触により探針試料間相互作用が発生するという近似をしているため、パーソナルコンピュータを用いてもオンタイムで計算結果を得ることができます(図 2)。

### 3.2 連続弾性体 AFM 像シミュレータ

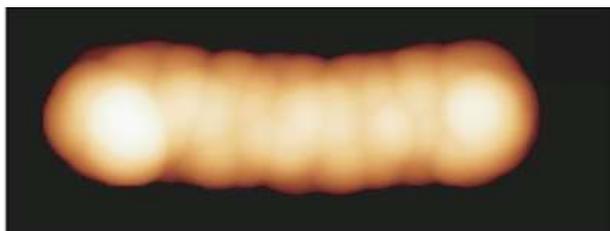


図 2: 幾何学的高速相互予測 AFM 像シミュレータによるコラーゲン分子の AFM 像予測画像。この結果を一瞬のうちに得ることができる。

同じく  $\mu\text{m}$  スケールでの AFM 像解析に対応したシミュレータですが、探針や試料が連続弾性体であるという仮定の下で力学的相互作用の計算を行います。タンパク質やゴムなど、巨大でかつ変形しやすい試料のシミュレーションに力を発揮します。

### 3.3 液中ソフトマテリアル AFM 像シミュレータ

探針を駆動するカンチレバーの運動を予測するシミュレータです。カンチレバーの運動はそれを構成する材料や形状、レバーを取り巻く流体の物性に強く依存します。そのため、このシミュレータによる予測は、カンチレバーの材料・形状設計の助けとなります。将来はカンチレバーの運動の影響を考慮した液中  $\mu\text{m}$  スケール AFM 像シミュレータへと発展させる予定です。

### 3.4 原子分子ナノ材料 AFM 像シミュレータ

nm スケールでの AFM 像解析に対応したシミュレータで、個々の原子の間に働く力学的相互作用を古典力学的に計算することで像予測を行います。原子構造が瞬時に緩和する場合と、緩和せずに原子が複雑に振動する場合の両者の計算を行うことができます。(図 1 はこのシミュレータによるペンタセン分子の AFM 像予測の様子です。)

### 3.5 量子力学的 SPM 像シミュレータ

同じく nm スケールでの像解析に対応したシミュレータですが、個々の原子の間に働く相互作用の計算を量子力学的に行うため、AFM 像だけでなく、トンネル電流顕微鏡像やケルビン

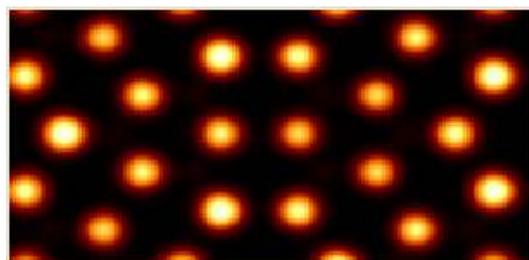


図 3: 量子力学的 SPM 像シミュレータによる Si(111)-7x7 表面 DAS モデルのトンネル電流顕微鏡像予測画像

プローブフォース顕微鏡像の解析も行うことが可能となっています(図 3)。

### 3.6 探針・試料構造モデリング機能

探針や試料等の初期原子配置構造を GUI を操作することで作成できます。本ソフトウェアで利用可能な形式でのファイル出力が可能です。

### 3.7 実験像・計算像比較検証機能

SPM 装置から出力される測定データを取り込み、本シミュレータの計算像と比較することができます(図 4)。

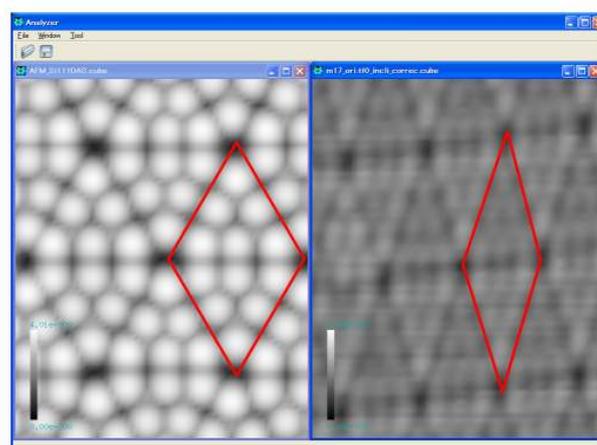


図 4: 計算予測画像(左)と実験データ画像(右)の比較。(赤の四辺形は画像の作成後に書き加えたものであり、本ソフトウェアの機能には含まれない。実験データ提供: 東京大学生産技術研究所福谷研究室)

## 4. 今後の予定

SPM 計測技術は日進月歩であり、新たな手法が次々と生み出されています。本ソフトウェアもそれらに対応するべく、機能の増強を図っていく予定です。現在は、試料の粘弾性パラメータ推定機能の追加、液中 AFM 像シミュレーション機能の追加、解析可能な対象の拡大、トンネル電流の計算精度向上、SPM 装置データの対応範囲の拡大などが計画されています。

## 謝辞

本ソフトウェアは独立行政法人科学技術振興機構研究成果展開事業(先端計測分析技術・機器開発プログラム)要素技術タイプ、並びに、同事業のプロトタイプ実証・実用化タイプの支援を受けて開発されました。ここに深謝申し上げます。