

第4章 高速相互予測 AFM シミュレータ(GeoAFM)

高速相互予測AFMシミュレータGeoAFMは、探針の三次元形状データ、試料表面の凹凸形状データ、測定AFM像データの三種類のデータのうち、二種類のデータを元にして残り一種類のデータを迅速に予測する。ソルバーは、純粋に幾何学的な計算によりデータを相互予測する仕組みとなっている。従って、探針・試料間のファンデルワールス力等の相互作用、探針・試料の形状変形等は考慮されず、物理的な力は反映されていないことになる。GeoAFMでは、探針は力を検出する瞬間に試料表面に接触するという幾何学的な条件を仮定しており、AFMコンタクトモードに相当する。

GeoAFMは、古典論あるいは量子論による相互作用力を使わず、探針、試料表面、AFM測定像を単なる幾何学的な構成物と見なし、「AFM測定中、探針は常に試料表面に接触している」という仮定だけで、計算を実行する。そのため、GeoAFMは量子力学的なミクロな原子間力を再現することは不可能で、原子・分子のようなミクロスケールの物質構造をシミュレーションすることには適さない。一方、 $[\mu\text{m}]$ スケールオーダーの半導体デバイスや高分子化合物のAFMシミュレーションにおいては、GeoAFMは極めて有効なシミュレータと言える。

GeoAFMは幾何学的な計算だけから、探針の三次元形状データ、試料表面の凹凸形状データ、測定AFM像データを推測する。物理学的な考察は抜きにして運動方程式等を解くことなく結果が導き出せるので、シミュレーションに必要な計算時間が極めて短いのも特徴の一つである。

4.1 探針形状、試料形状、AFM 像の相互予測の仕組み・計算方法の概略

GeoAFMでは取り扱う全てのデータ、すなわち、探針の三次元形状データ、試料表面の凹凸形状データ、測定AFM像データを、2次元 xy 平面上の高さデータとして表現する。より正確に述べると、2次元 xy 平面を幅 $1[\text{\AA}]$ の正方格子として、各格子点上での高さデータで立体形状を表現する。

GeoAFMのGUIを使用した場合、例えば、探針として、データベースに登録されているpyramid形を選択する場合は有る。この場合、探針形状データは、pyramid形を正方格子上の離散的な立体として表現することになる。つまり、縦横高さが $1[\text{\AA}]$ の立方体のブロックで構成された、近似的にpyramid形と見なせる立体形状を、計算上では取り扱うことになる。

探針や試料が、多数の原子からなる結晶や高分子の場合は、原子や分子が作り出す立体形状を、やはり、縦横高さが $1[\text{\AA}]$ の立方体のブロックで構成されたものと見なすことになる。

4.1.a 探針形状データおよび試料形状データから、AFM 像を推定する

図 68、図 69のように、探針形状データを $T(x, y)$ 、試料表面の形状データを $S(x, y)$ とする。

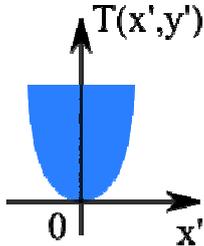


図 68 探針形状データを $T(x, y)$

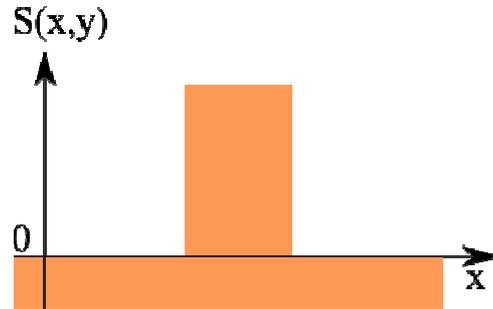


図 69 試料表面の形状データを $S(x, y)$

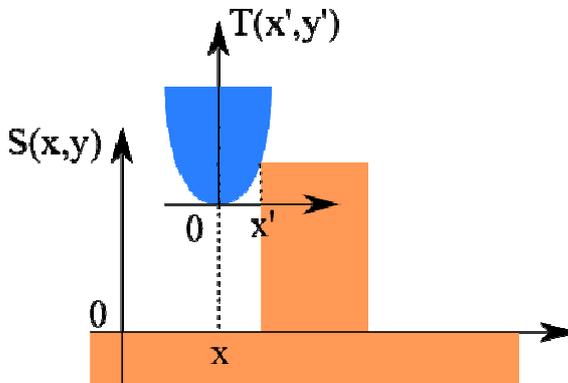


図 70 探針を試料表面に接触させた様子

この場合、探針を試料表面に接触させると、図 70のように、探針先端部の位置は、探針自身の形状に従って、試料表面から離れることになる。

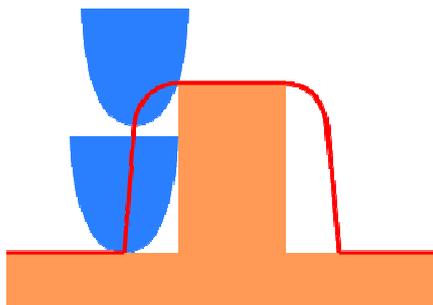


図 71 探針先端部がなぞる試料表面の形状

上記のような効果を考慮に入れると、探針先端部がなぞる試料表面の形状は、図 71のように、真の試料表面の形状を、探針先端部の太さだけ、なまらせたものになる。

これまでの説明より、推測されるAFM測定データ $I(x, y)$ は、以下の計算式で得られることになる。

$$I(x, y) = \max_{x', y'} [S(x + x', y + y') - T(x', y')]$$

4.1.b 探針形状データおよび AFM 像データから、試料形状を推定する

上の説明と同様の理由から、探針形状データ $T(x, y)$ 、AFM測定データ $I(x, y)$ より、試料表面形状データ $S(x, y)$ は、以下の計算式で求めることが可能である。

$$S(x, y) = \max_{x', y'} [I(x - x', y - y') + T(x', y')]$$

4.1.c 試料形状データおよび AFM 像データから、探針形状を推定する

上の説明と同様の理由から、試料表面形状データ $S(x, y)$ 、AFM測定データ $I(x, y)$ より、探針形状データ $T(x, y)$ は、以下の計算式で求めることが可能である。

$$T(x, y) = \max_{x', y'} [S(x + x', y + y') - I(x', y')]$$

4.2 種々の計算実例

4.2.a 探針形状データおよび試料形状データから、AFM 像を推定する

例として、ピラミッド型探針、試料としてcollagen-1clgを選択した場合の、推定されるAFM像を示す。

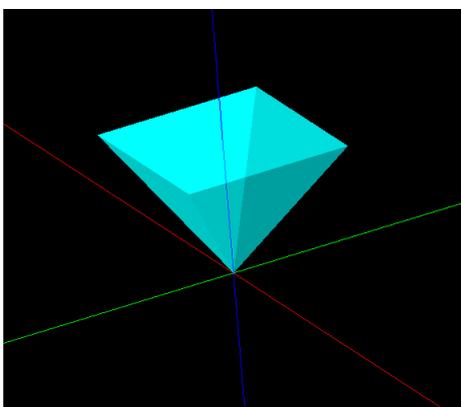


図 72 ピラミッド型探針

図 72に示されるピラミッド型探針を選ぶ。

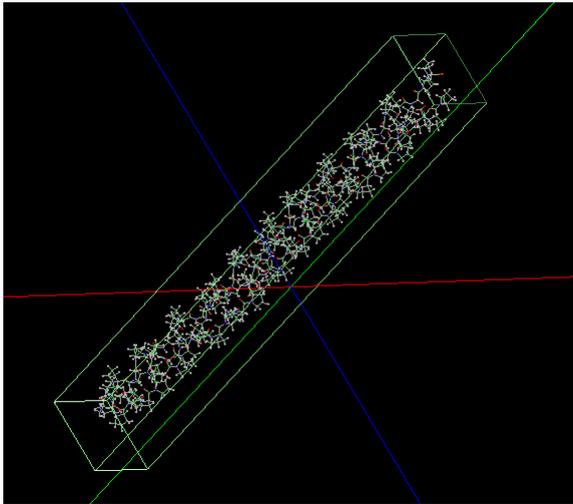


図 73 collagen-1clg 高分子鎖の分子構造

図 73は、collagen-1clgの高分子鎖の分子構造を表している。

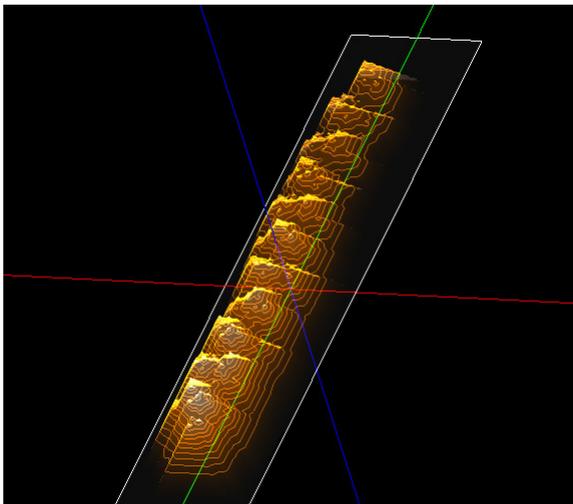


図 74 推定される AFM 像

図 72、図 73から推定されるAFM像は、図 74で与えられる。

4.2.b 探針形状データおよび AFM 像データから、試料形状を推定する

例として、ピラミッド型探針、AFM像として上の操作で得られた推定像を選択した場合の、推定される試料形状を示す。

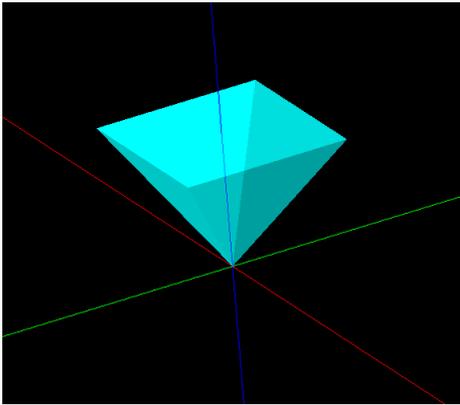


図 75 ピラミッド型探針

図 75に示されるピラミッド型探針を選ぶ。

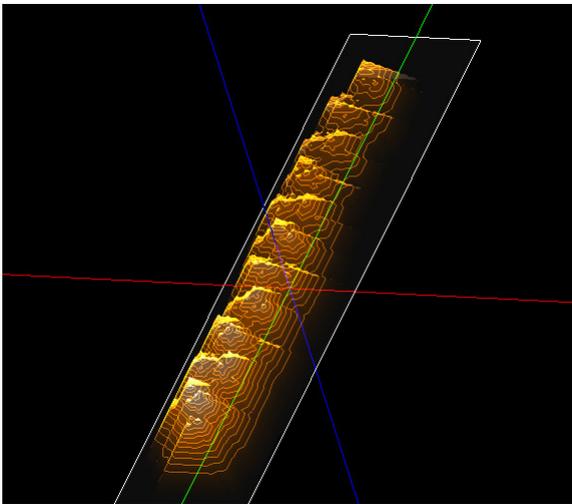


図 76 collagen-1clg 高分子鎖の AFM 像

AFM像として、図 76に示される、前の操作で得られた推定像を選択する。

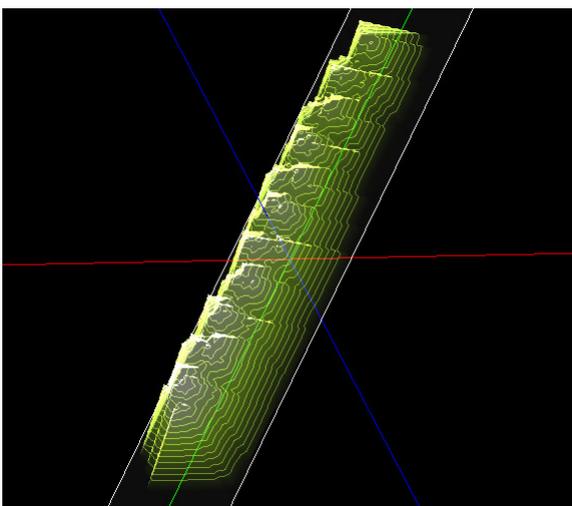


図 77 推定される試料形状

推定される試料形状は、図 77で与えられる。

4.2.c 試料形状データおよび AFM 像データから、探針形状を推定する

例として、試料形状として上の操作で得られた推定像、AFM像として前の操作で得られた推定像を選択した場合の、推定される探針形状を示す。

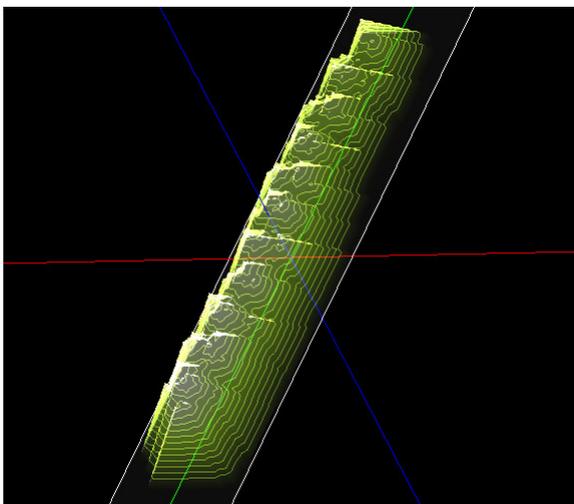


図 78 collagen-1clg 高分子鎖の試料形状

試料形状として、図 78のように、上の操作で得られた推定像を選択する。

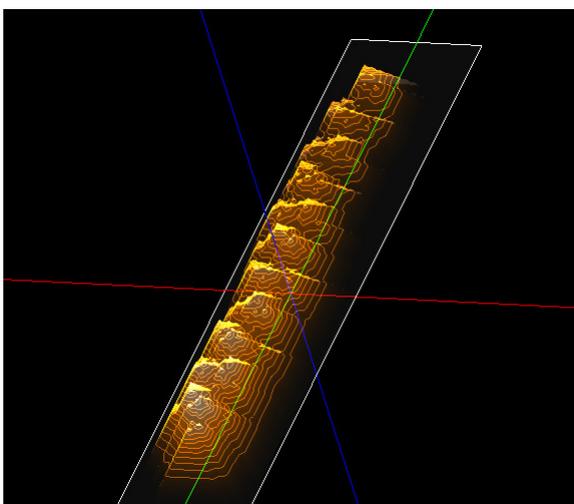
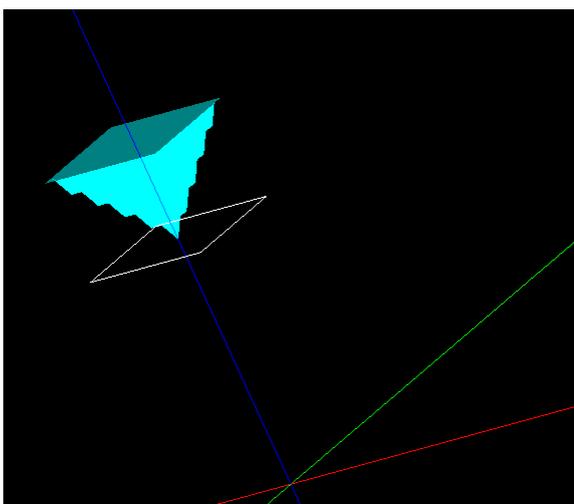


図 79 collagen-1clg 高分子鎖の AFM 像

AFM像として、図 79のように、前の操作で得られた推定像を選択する。



推定される探針像は、図 80で与えられる。

図 80 推定される探針像

4.3 GeoAFM 使用法の実例 —使用手引—

前の節で示した計算実例を行う、具体的な操作手順を以下に示す。

4.3.a 探針形状データおよび試料形状データから、AFM 像を推定する

表 3 探針形状データおよび試料形状データから、AFM 像を推定する手順

操作手順	入力例
[File]→[New]をクリック	
[Create new project]ボックスが現れる	[Project name]に"geoafm_test001"を入力
[Project Editor]の[Setup]タブをクリック	
[Component]を右クリックして[Add Tip]	[Pyramid]を選択
angle (deg)が要求される	デフォルト値32.0度で[OK]
[Add Sample]→[Database]	[collagen-1clg]を選択
ウィンドウ内の画像が表示されている領域にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが表示される	
[GeoAFM]→[Set GeoAFM Resolution]	1[Å]と設定
[GeoAFM]→[Show Simulated Image]	シミュレーションによって得られた推定AFM像が表示される
[Show Tip]をクリックして、チェックを外す	
[Show Sample] をクリックして、チェックを外す	
[GeoAFM]→[Export Simulated Data]	collagen-1clg_afm_image.cubeと名付けて保存

4.3.b 探針形状データおよび AFM 像データから、試料形状を推定する

表 4 探針形状データおよび AFM 像データから、試料形状を推定する手順

操作手順	入力例
[File]→[New]をクリック	
[Create new project]ボックスが現れる	[Project name]に"geoafm_test002"を入力
[Project Editor]の[Setup]タブをクリック	
[Component]を右クリックして[Add Tip]	[Pyramid]を選択
angle (deg)が要求される	デフォルト値32.0度で[OK]
[Add Image]→[File]	collagen-1clg_afm_image.cubeを選択
ウィンドウ内の画像が表示されている領域にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが表示される	
[GeoAFM]→[Set GeoAFM Resolution]	1[Å]と設定
[GeoAFM]→[Show Simulated Sample]	シミュレーションによって得られた推定試料形状が表示される
[Show Tip]をクリックして、チェックを外す	
[Show Image] をクリックして、チェックを外す	
[GeoAFM]→[Export Simulated Data]	collagen-1clg_sample.cubeと名付けて保存

4.3.c 試料形状データおよび AFM 像データから、探針形状を推定する

表 5 試料形状データおよび AFM 像データから、探針形状を推定する手順

操作手順	入力例
[File]→[New]をクリック	
[Create new project]ボックスが現れる	[Project name]に"geoafm_test003"を入力
[Project Editor]の[Setup]タブをクリック	
[Component]を右クリックして[Add Sample]	collagen-1clg_sample.cubeを選択
→[File]	
[Add Image]→[File]	collagen-1clg_afm_image.cubeを選択
ウィンドウ内の画像が表示されている領域にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが表示される	
[GeoAFM]→[Set GeoAFM Resolution]	1[Å]と設定
[GeoAFM]→[Show Simulated Tip]	シミュレーションによって得られた推定探針形状が表示される
[Show Sample]をクリックして、チェックを外す	
[Show Image] をクリックして、チェックを外す	