

SPMシミュレータの現時点での構成

Analyzer SPM実験画像データのデジタル処理プロセッサ

GeoAFM 幾何学情報に基づく高速相互予測AFMシミュレータ

FemAFM 連続弾性体AFMシミュレータ DLVO理論機能追加済み

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

macroKPFM マクロスケールKPFMシミュレータ DLVO理論機能追加作業中

CG 構造最適化AFM像シミュレータ

MD 分子動力学AFM像シミュレータ

DFTB 量子論的SPMシミュレータ

SetModel 原子モデル作成ツール

いずれかのソルバーに、本格的な逆問題計算機能を追加する予定

青い文字が、新たに追加される機能

赤い文字が、新たに追加されたバイオ・ソフトマテリアル関連ユーザー向けの機能

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

実用・開発者向き

## FemAFM 連続弾性体AFM シミュレータ

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

DLVO理論シミュレーション機能が追加されている。

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

LiqAFM  
(tapping)  
液中ソフトマテ  
リアルAFMシ  
ミュレータ

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

- ・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応
- ・単振動加振・二重加振／多モードに対応
- ・カンチレバーの共鳴曲線（真空中、大気中、液中）を描く
- ・マルチコア並列計算機能
- ・対象（コラーゲン、タンパク質分子）
- ・逆問題解析機能が追加された。これにより、AFM周波数シフト、位相シフトの値から、試料のヤング率、表面張力、高さ情報が逆算できるようになった。
- ・タッピング機能が強化された。これにより、探針-試料間の粘弾性凝着効果を考慮したスキャンをシミュレーションすることが可能となった。
- ・タッピング・モードの逆問題計算機能が強化された。これにより、周波数シフト・位相シフトの観測データより、試料のヤング率、表面張力、高さ情報を逆算することが可能となった。
- ・粘弾性を考慮したタッピング・モードのシミュレーションによって、大気中でカンチレバーを動かす、試料表面に薄い水の被膜が有るような系のシミュレーションが実行可能となった。

macroKPFM  
巨視的KPFM像シミュレータ

KPFM像シミュレーションを、 $\mu\text{m}$ から $\text{nm}$ のオーダーで行う。境界要素法を用いて、古典電磁気学のポテンシャル問題を解くことに相当する。

現在、DLVO理論機能追加作業中である。

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

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

## バイオ・ソフトマテリアル関連ユーザー向けに、新たに追加された機能

### LiqAFMタッピング機能

探針-試料間の粘弾性凝着効果を考慮したスキャン

### LiqAFMタッピング・モードの逆問題計算機能

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

### FemAFM\_DLVO機能

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

### macroKPFM\_DLVO機能

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

今後の展開としては、逆問題機能が残されている

## 株式会社XXXXXX様への対応

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



FemAFM\_DLVOで、対応可能

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



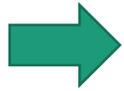
macroKPFM\_DLVOで、対応可能

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



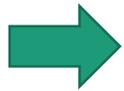
LiqAFMのtapping機能で、対応可能

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



FemAFM\_DLVO、macroKPFM\_DLVOで、対応可能

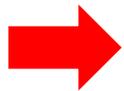
どのソルバにおいても、単に、シミュレーションをするのではなく、物理的な量が分かりやすく計算・導出されるようにした方が望ましい。物理量が絶対的な値で表示されるように工夫してほしい。



一部、LiqAFMのtapping機能の逆問題で対応可能  
すでに、LiqAFMにおいて逆問題ソルバーが完成している  
今後は、これをさらに拡張した逆問題ソルバーを開発して対応する予定

たんぱく質などの動的な振る舞いまでシミュレーションできるようになると良い。

様々な材質の微粒子の計測データについて、探針効果を明確にデコンボリュートできるようになるとよい。



どのようなソルバーで対応すべきか、方針が未定