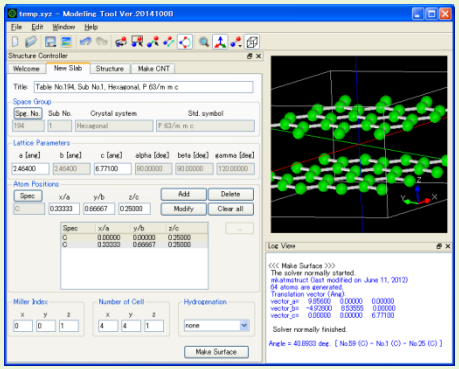
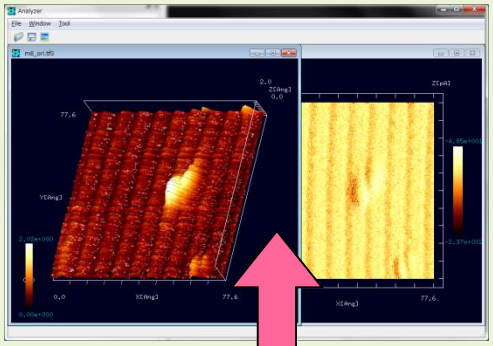
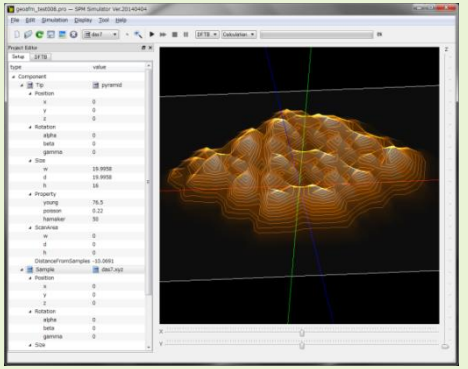
SPMシミュレータ 計算事例



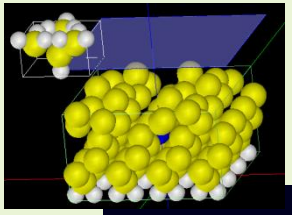


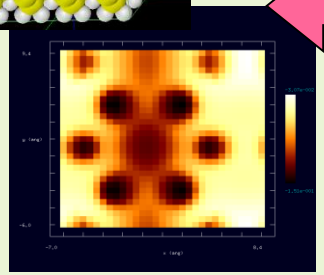


Analyzer
実験データ画像処理
プロセッサ

SetModel
原子モデル作成

GeoAFM
高速相互予測
AFMシミュレータ

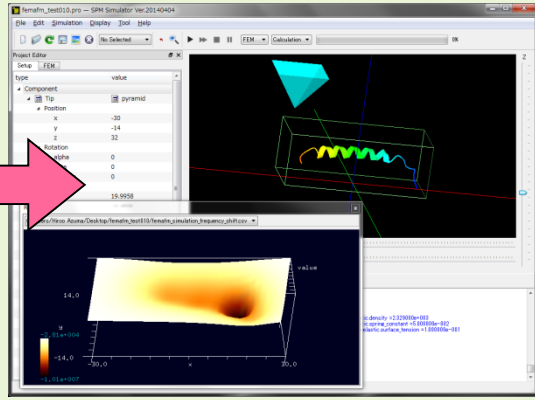




DFTB
量子論的
SPMシミュレータ

SPMシミュレータ

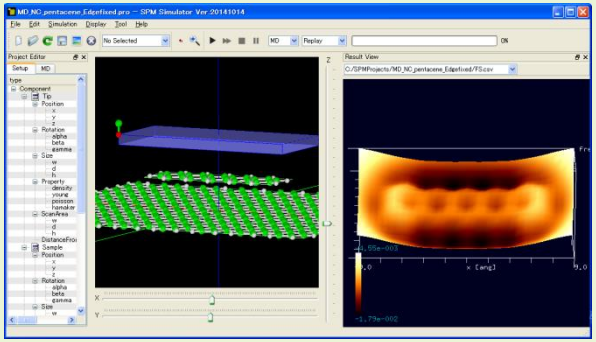
FemAFM
連続弾性体
AFMシミュレータ

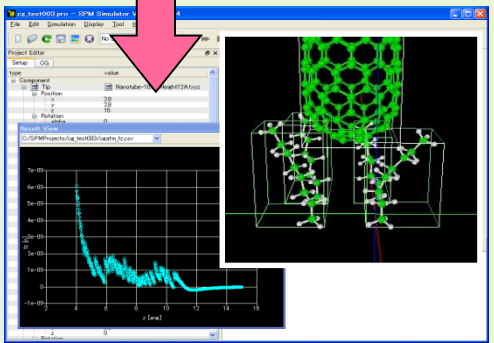


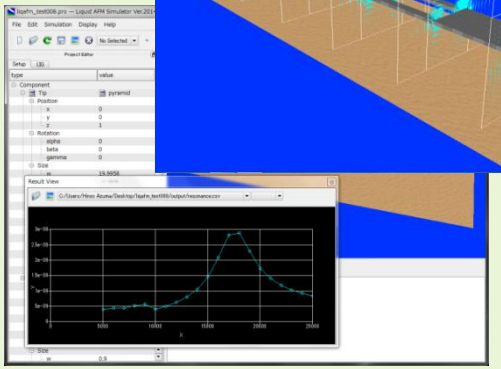
MD
分子動力学
AFM像シミュレータ

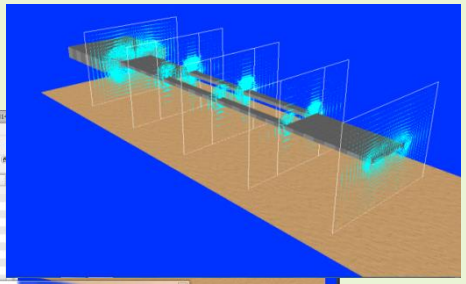
CG
構造最適化
AFM像シミュレータ

LiqAFM
液中ソフトマテリアル
AFMシミュレータ



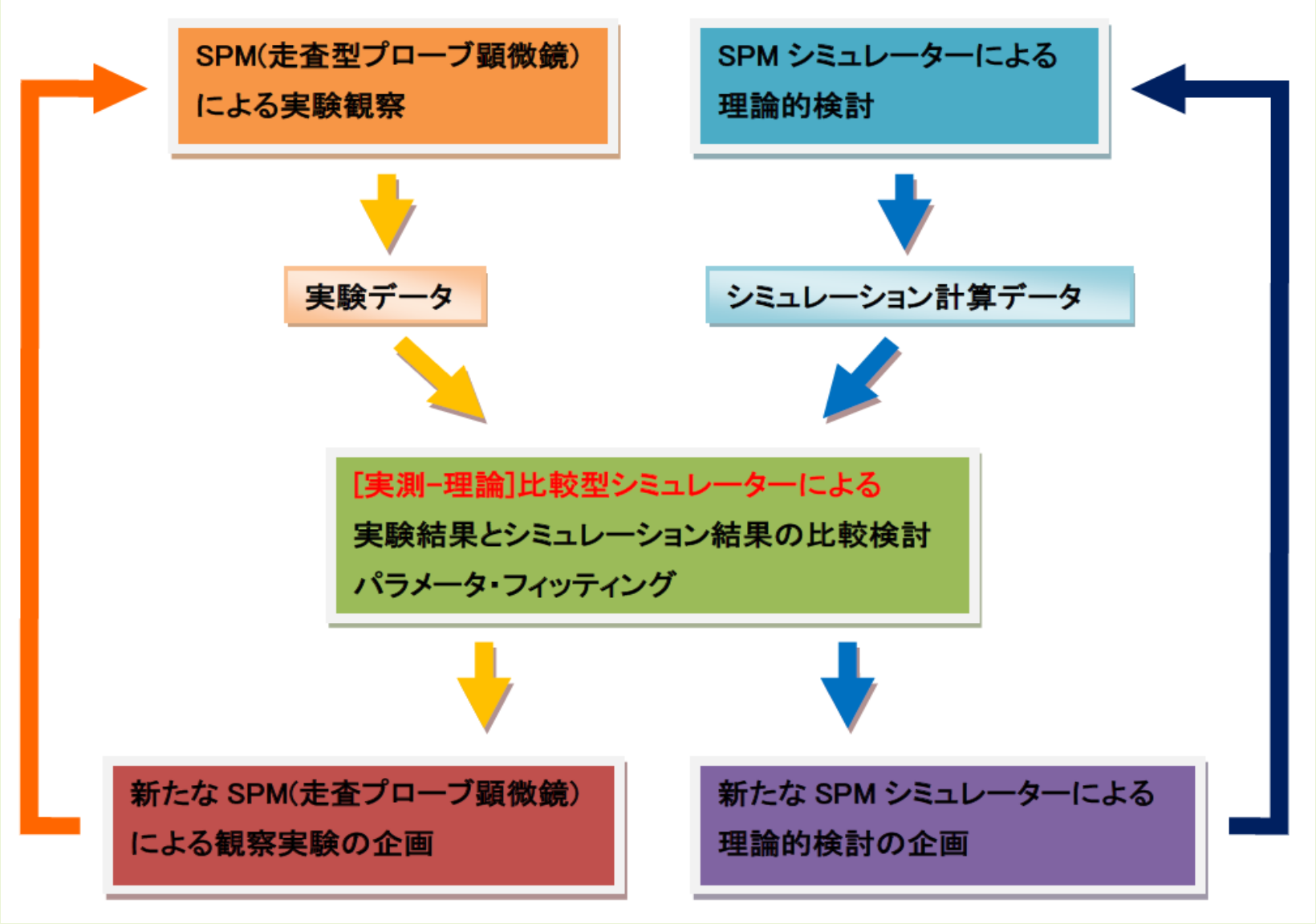






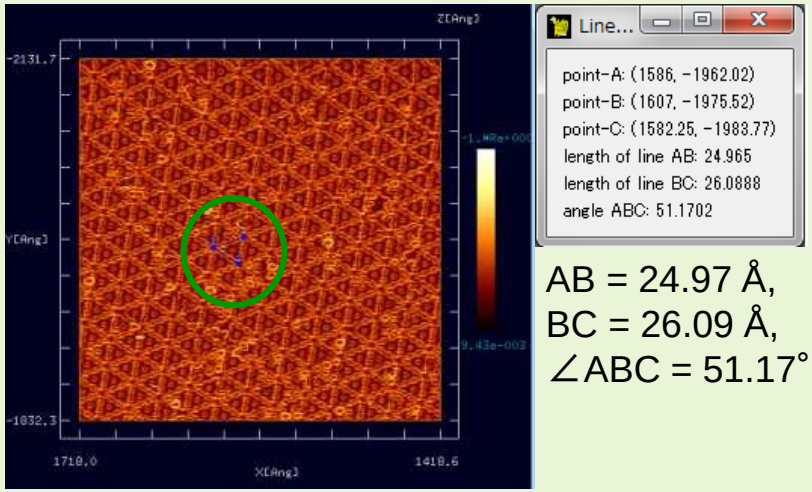
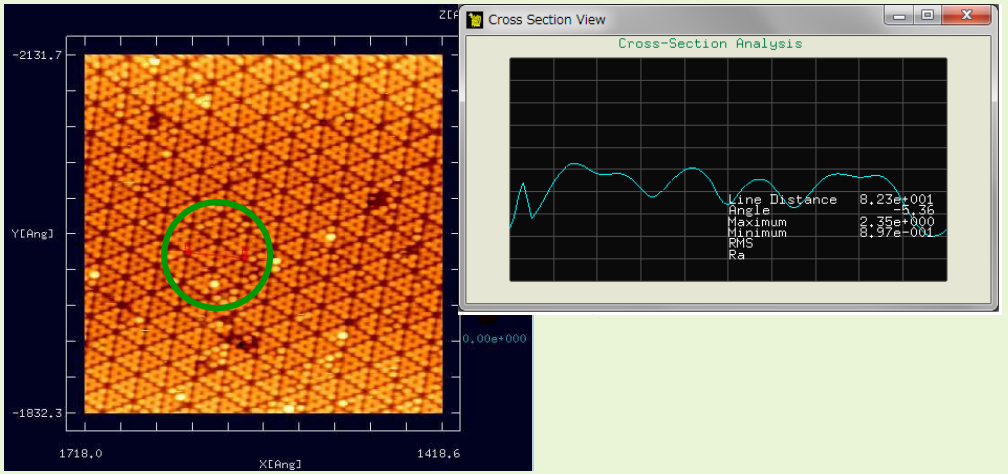
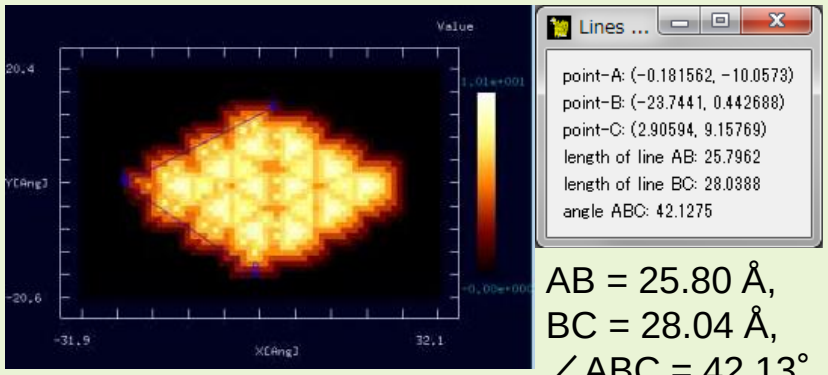
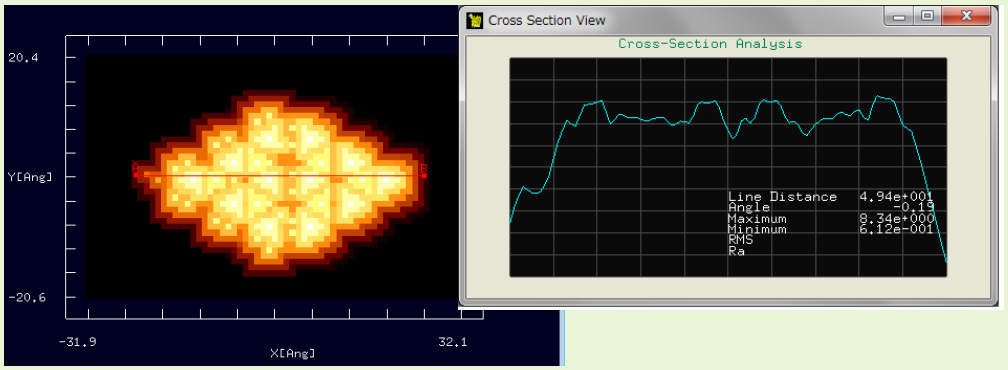
【Analyzer】実験像・計算像比較検証機能

実験データと理論シミュレーションデータを統一的に扱う。



【Analyzer】Si(111)-(7x7) DASの実測AFM－計算の比較例

Analyzer

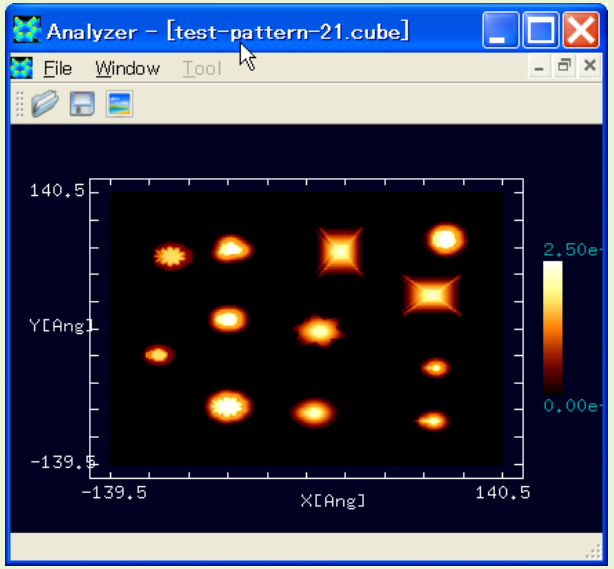
	格子の長さや角度を比較計測	SPM像の断面図の比較
実測画像	 AB = 24.97 Å, BC = 26.09 Å, ∠ABC = 51.17°	 (オリジナル画像は東京工業大学･大学院、総合理工学研究科、平山博之教授より提供)
計算画像	 AB = 25.80 Å, BC = 28.04 Å, ∠ABC = 42.13° （GeoAFMで作成した画像を読み込んだ）	 （GeoAFMで作成した画像を読み込んだ）

これらはすべて同一のプラットフォーム上で行うことができる。
比較によって、より良いシミュレーションを行うための指針が得られる。

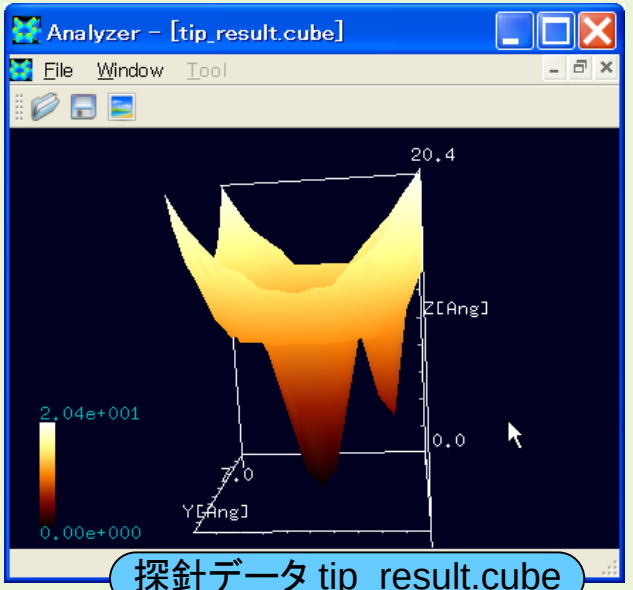
【Analyzer】探針形状推定・探針影響除去 （1）

探針形状推定

先端が二股になった不完全な探針による人工的な立体構造のAFM像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルAFM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する

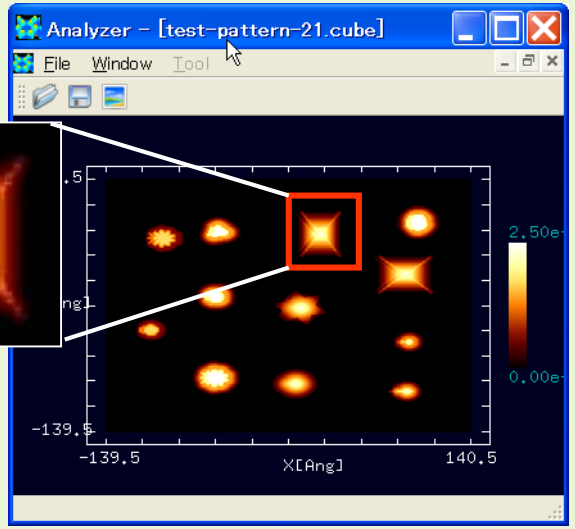


パラメータ(0.0～1.0)
0.0：最大探針
1.0：最小探針
を設定して探針形状推定

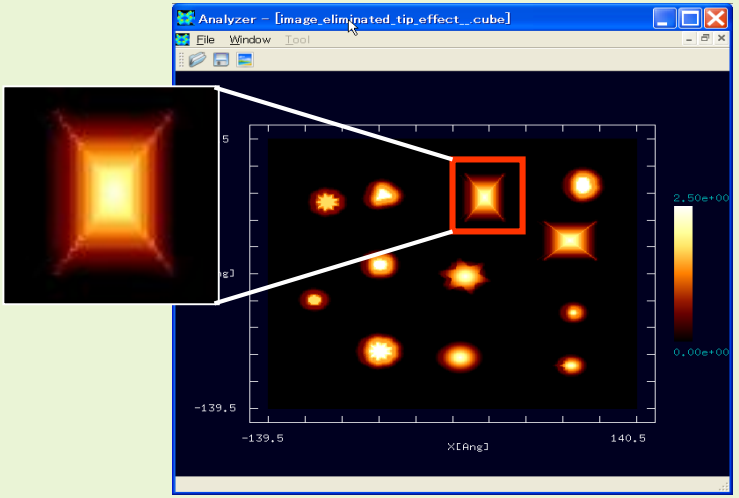


探針データ tip_result.cube

探針影響除去



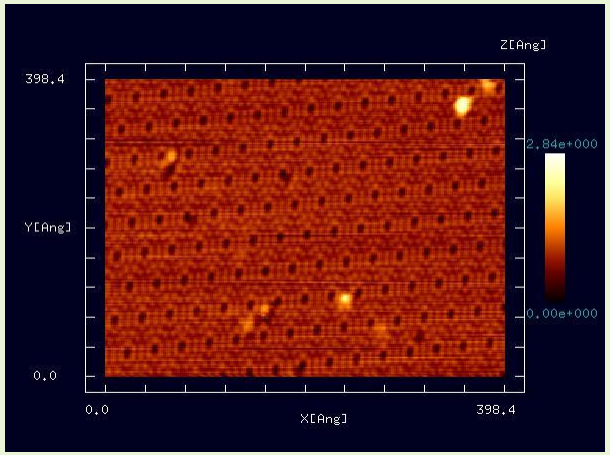
探針データを指定して
探針影響除去



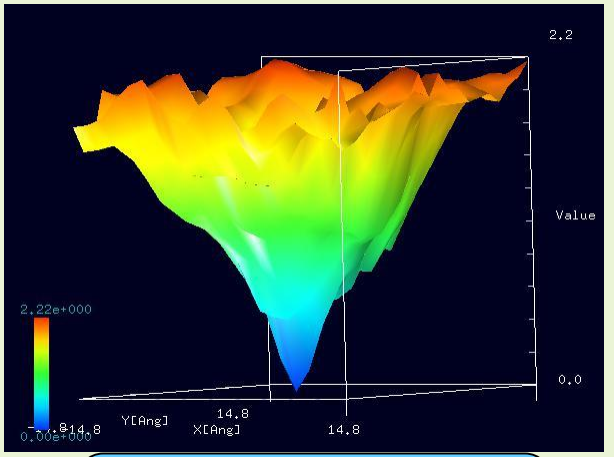
【Analyzer】探針形状推定・探針影響除去 （2）

探針形状推定

SPM実験画像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルSPM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する

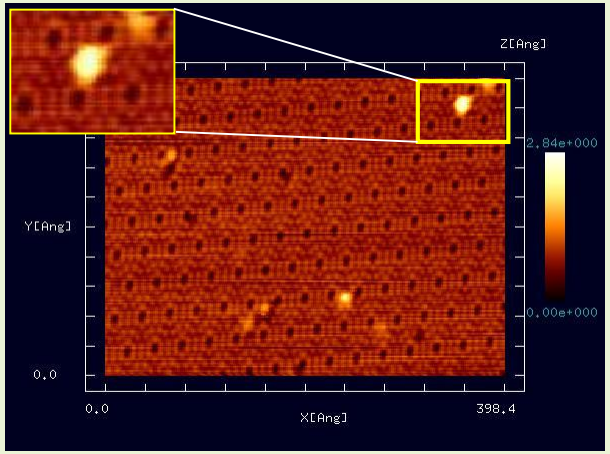


パラメータ(0.0～1.0)
0.0：最大探針
1.0：最小探針
を設定して探針形状推定

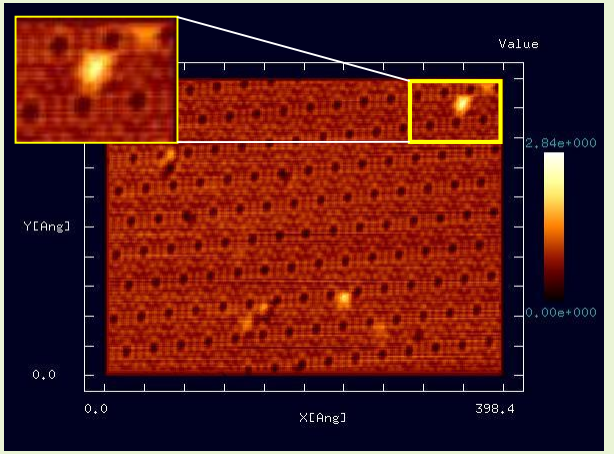


探針データ tip_result.cube

探針影響除去



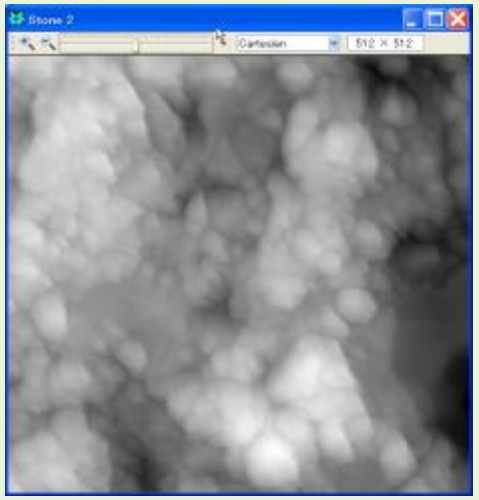
探針データを指定して
探針影響除去

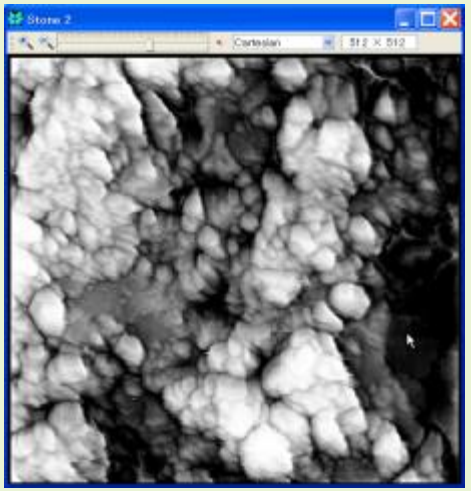


実験データは、東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授より提供

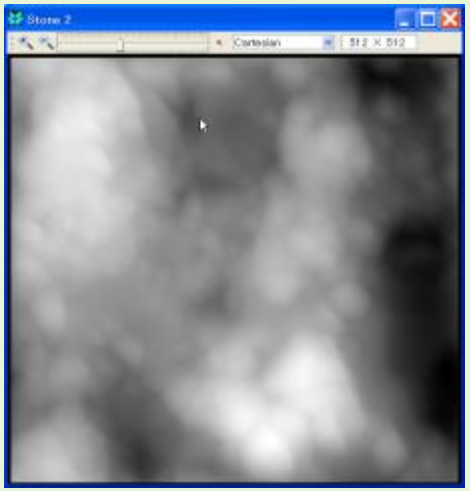
【Analyzer】画像のフーリエ解析・高解像度化(1)

画像のフーリエ解析

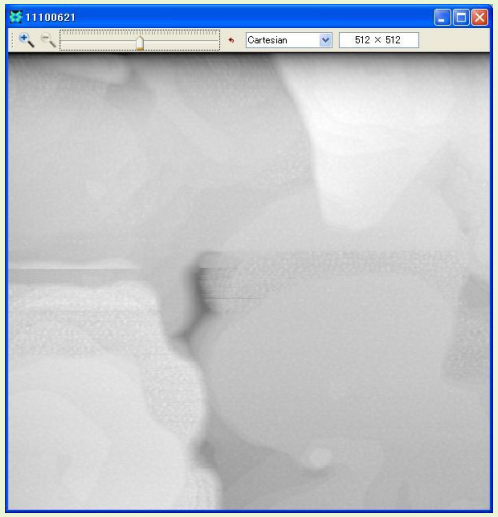


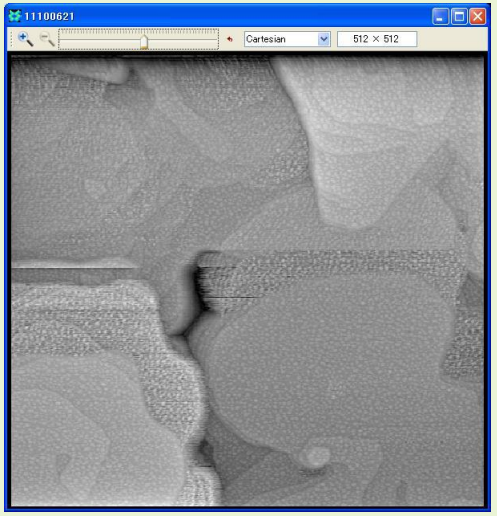


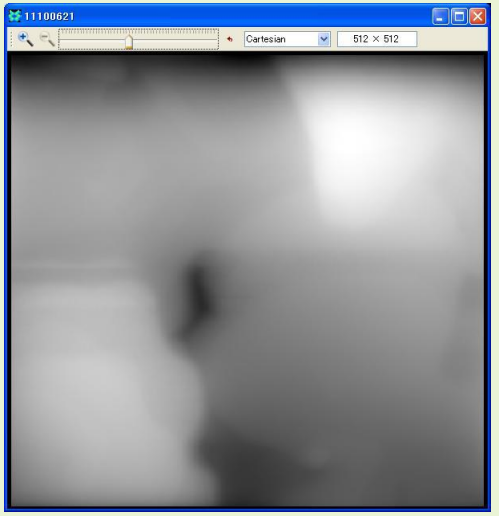
高周波を強調



低周波を強調





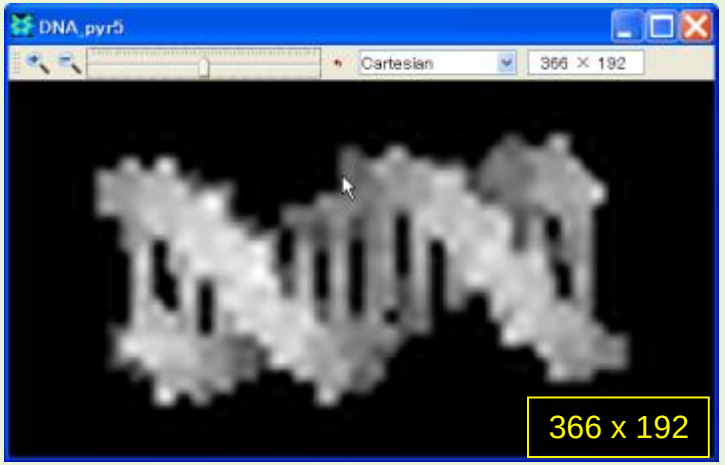


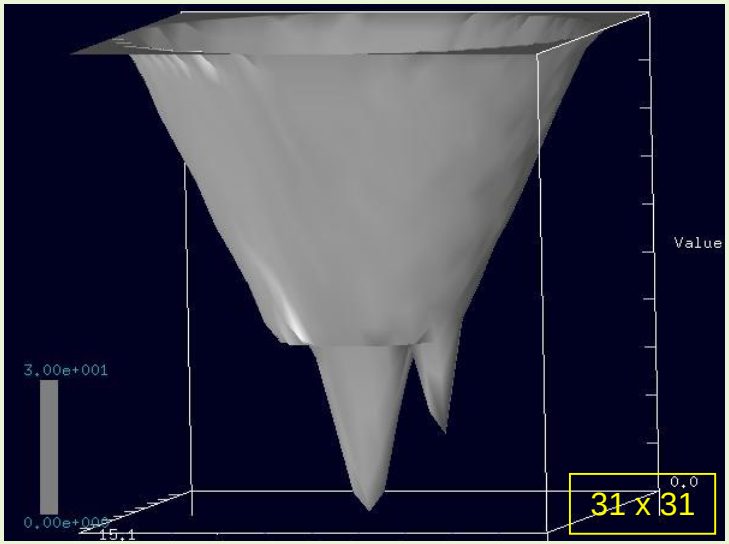
【Analyzer】画像のフーリエ解析・高解像度化(2)

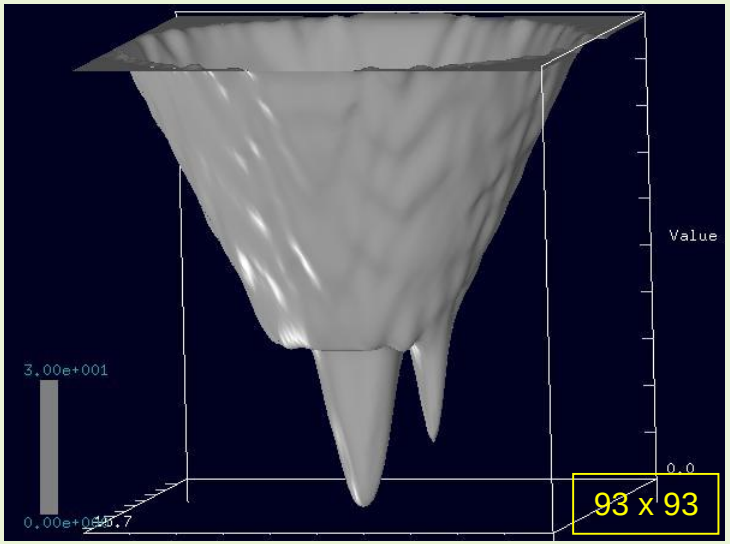
Analyzer

画像高解像度化



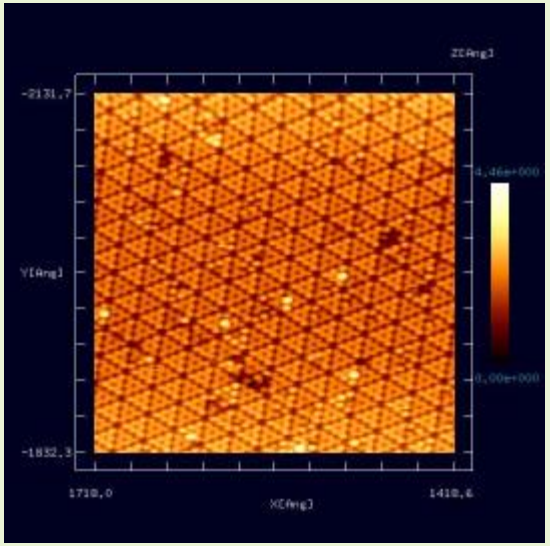




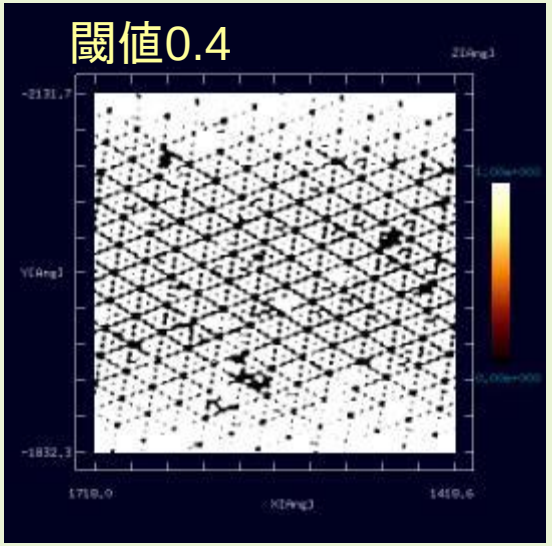


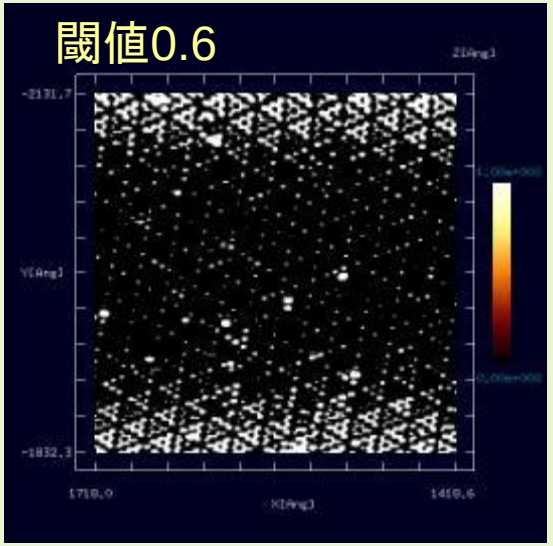
【Analyzer】デジタル画像処理機能 （1）

画像データの二値化



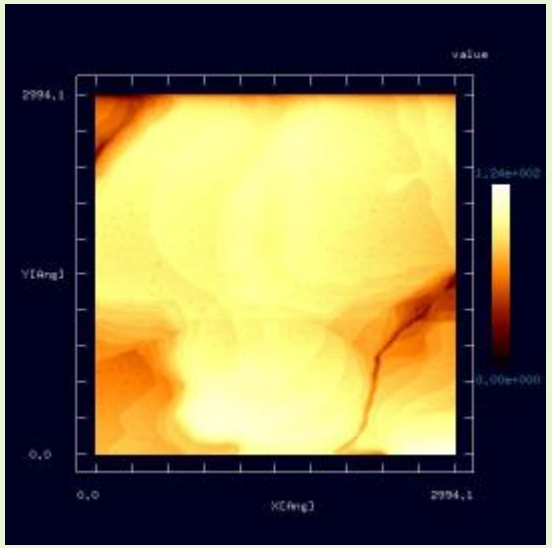
閾値(0.0～1.0)
を設定して
白黒画像変換



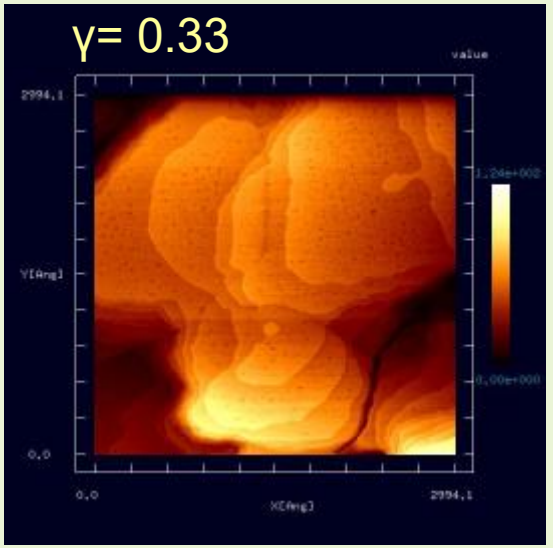


(オリジナル画像は東京工業大学・大学院、総合理工学研究科、平山博之教授より提供)

コントラスト調整（ガンマ補正）



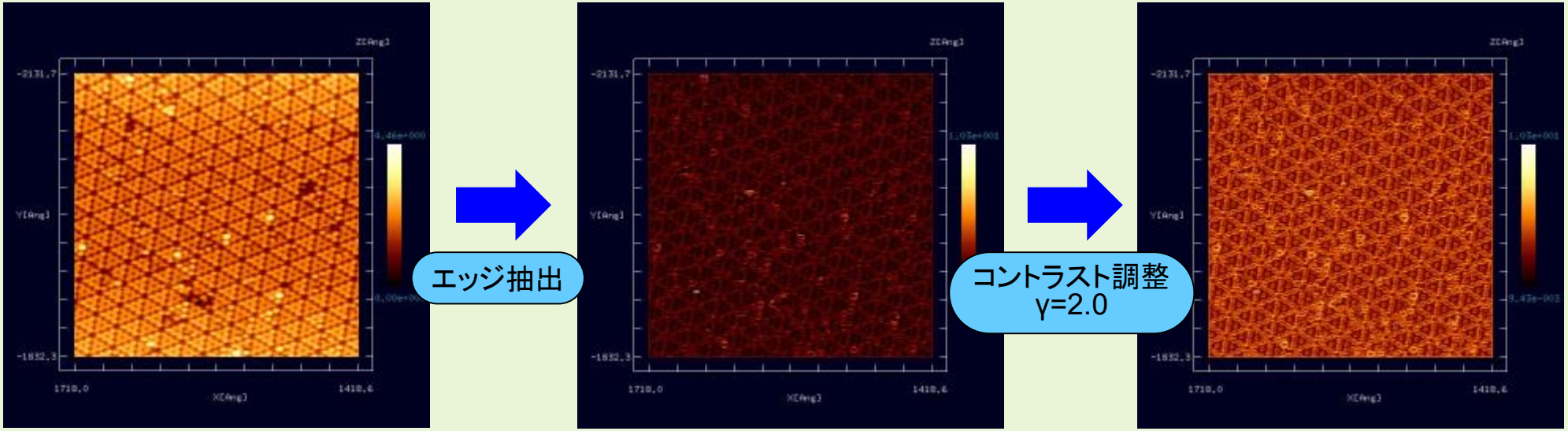
γ値(0.25～4.0)
を設定



(オリジナル画像は大阪大学大学院、基礎工学研究科、福井賢一教授より提供)

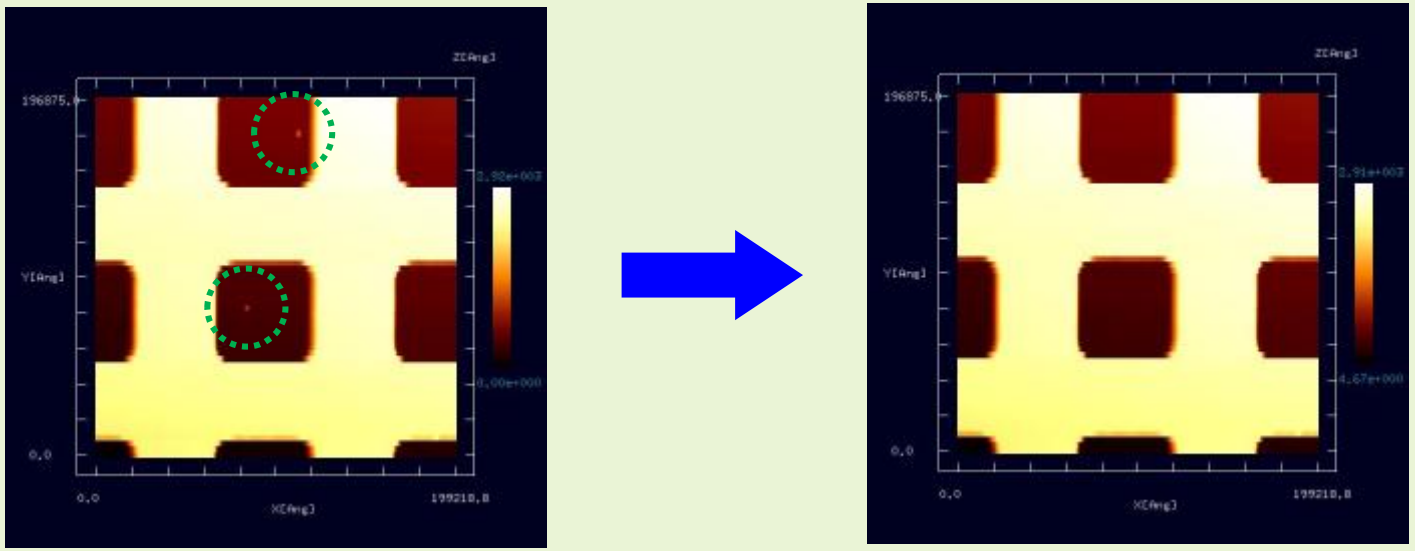
【Analyzer】デジタル画像処理機能 （2）

エッジ抽出(Sobelフィルタ処理)



(オリジナル画像は東京工業大学・大学院、総合理工学研究科、平山博之教授より提供)

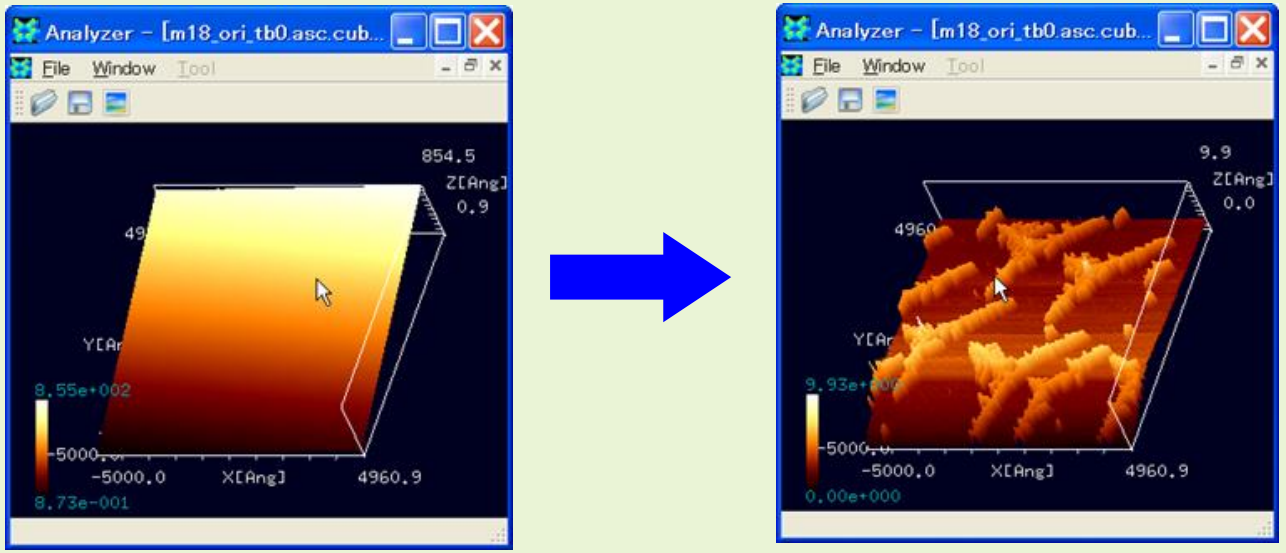
ノイズ除去(メディアンフィルタ処理)



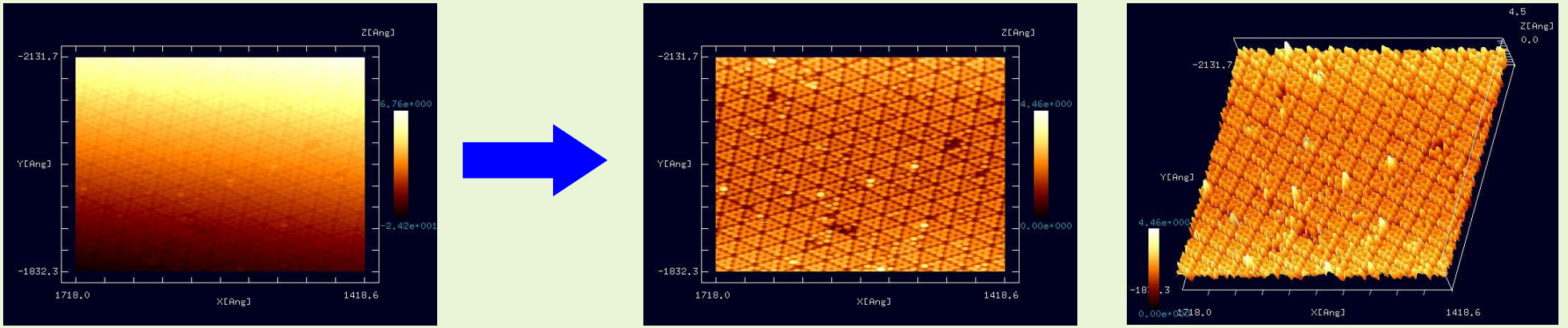
(オリジナル画像は東北大学大学院、
理学研究科、橋本克之助教より提供)

【Analyzer】デジタル画像処理機能 （3）

傾き自動補正と立体表示機能



（オリジナル画像は東京大学、生産技術研究所　福谷研究室提供 ）

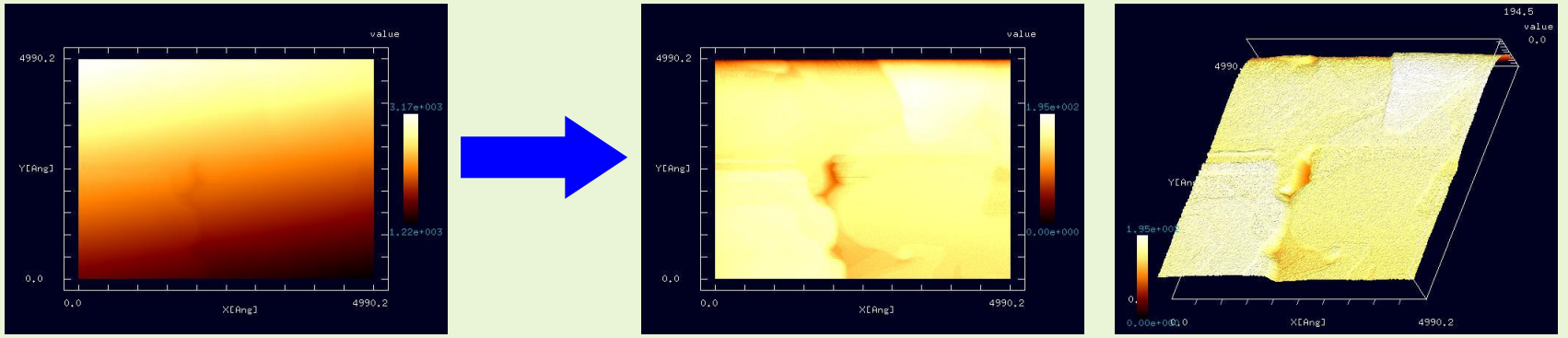


（実験データは、東京工業大学・大学院、総合理工学研究科、材料物理科学専攻、量子表面講座、平山博之教授より提供）

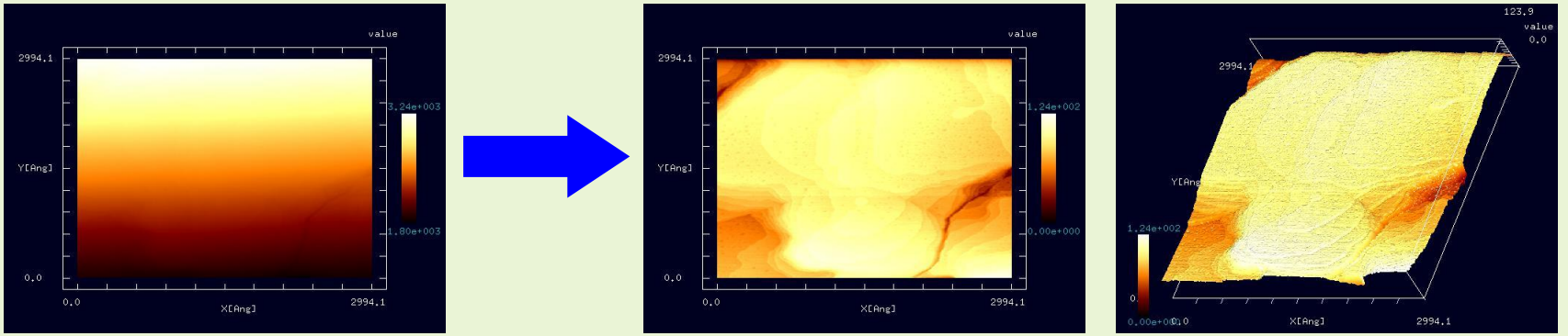
【Analyzer】デジタル画像処理機能 （4）

Analyzer

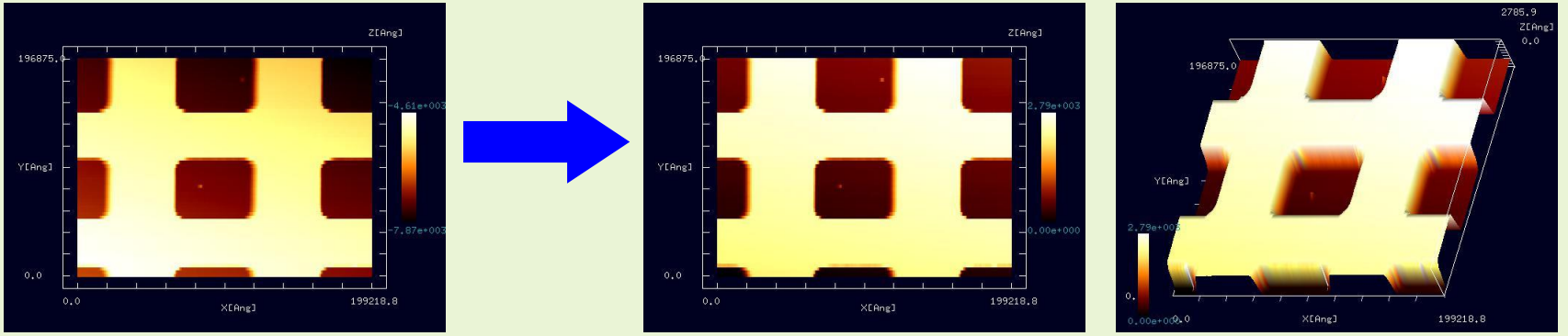
傾き自動補正と立体表示機能



（実験データは、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、福井賢一教授より提供）



（実験データは、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、福井賢一教授より提供）

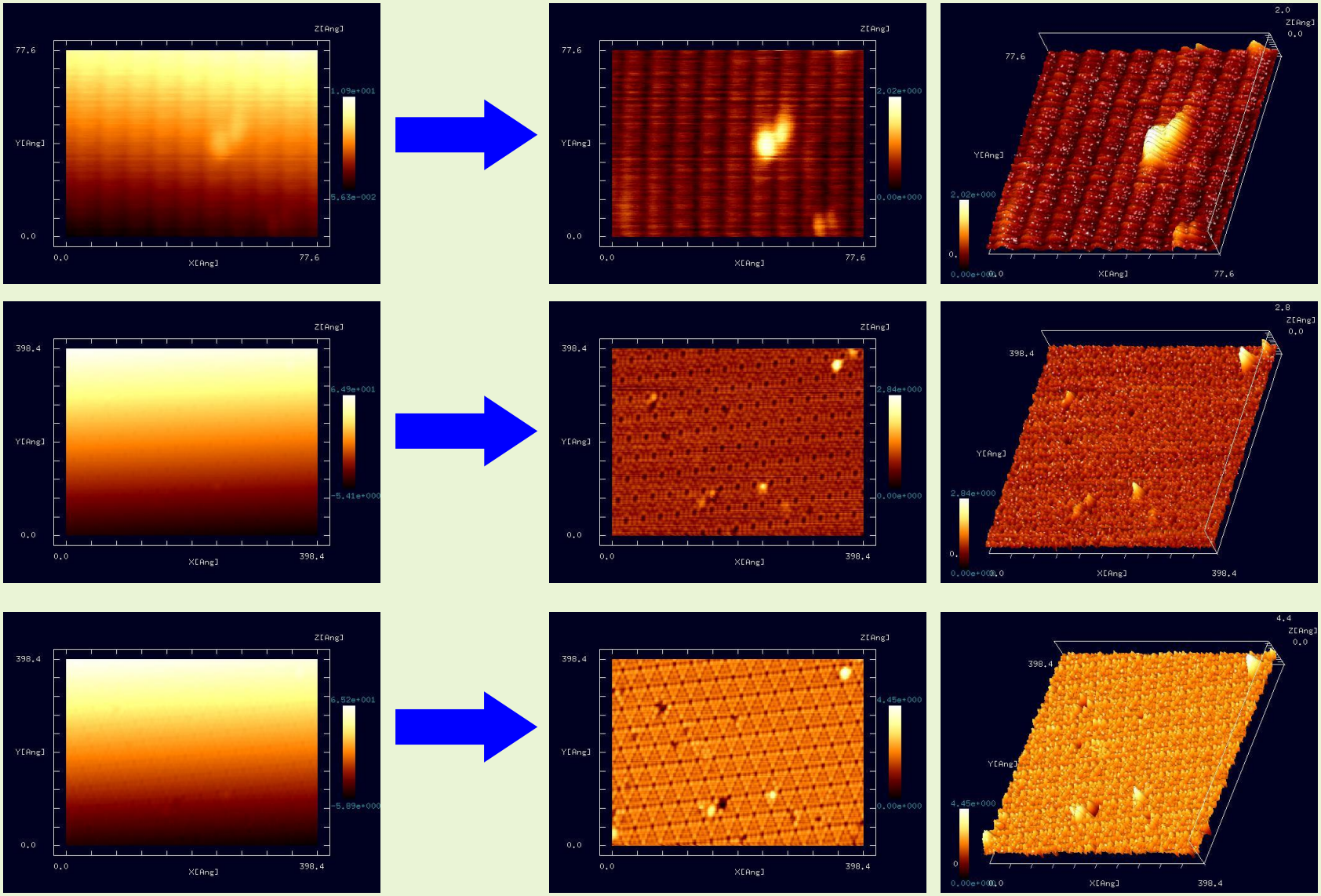


（実験データは、東北大学大学院、理学研究科物理学専攻、量子物性物理学講座、量子伝導物性研究室、橋本克之博士より提供）

【Analyzer】デジタル画像処理機能 （5）

Analyzer

傾き自動補正と立体表示機能



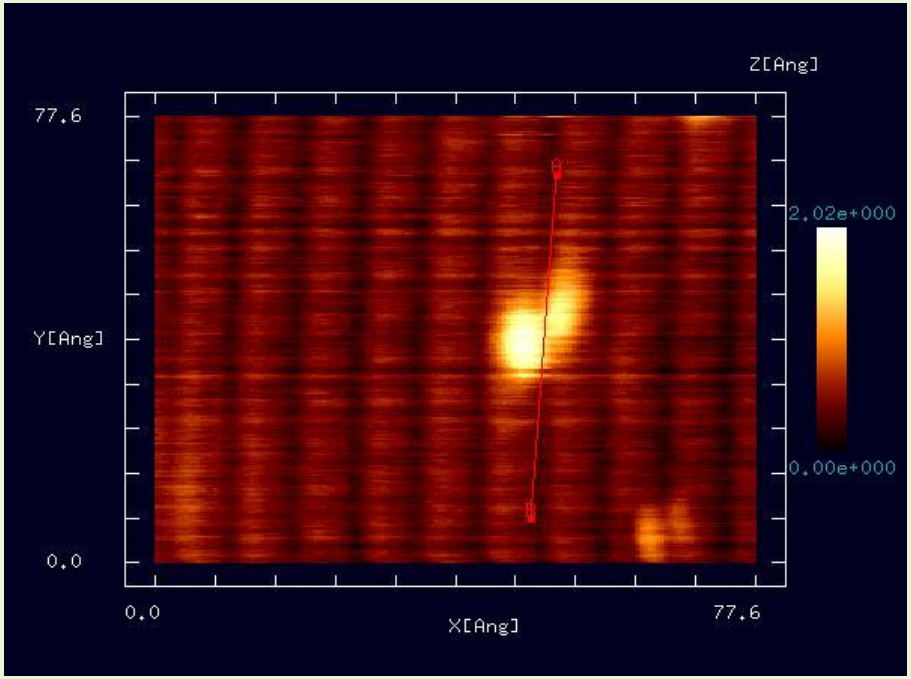
（実験データは、東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授より提供）

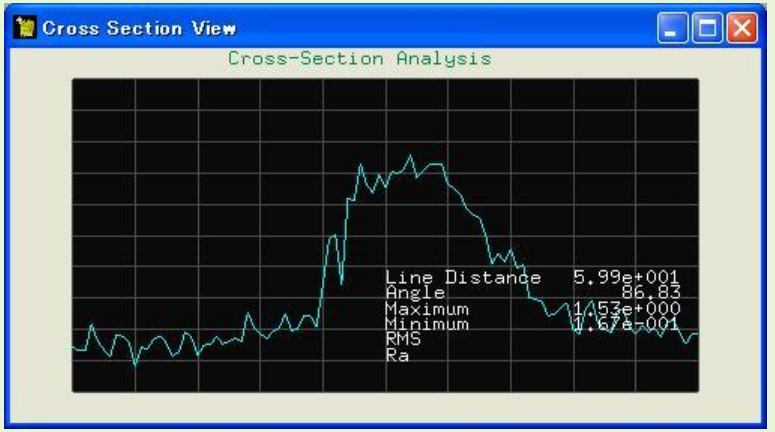
（実験データは、東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授より提供）

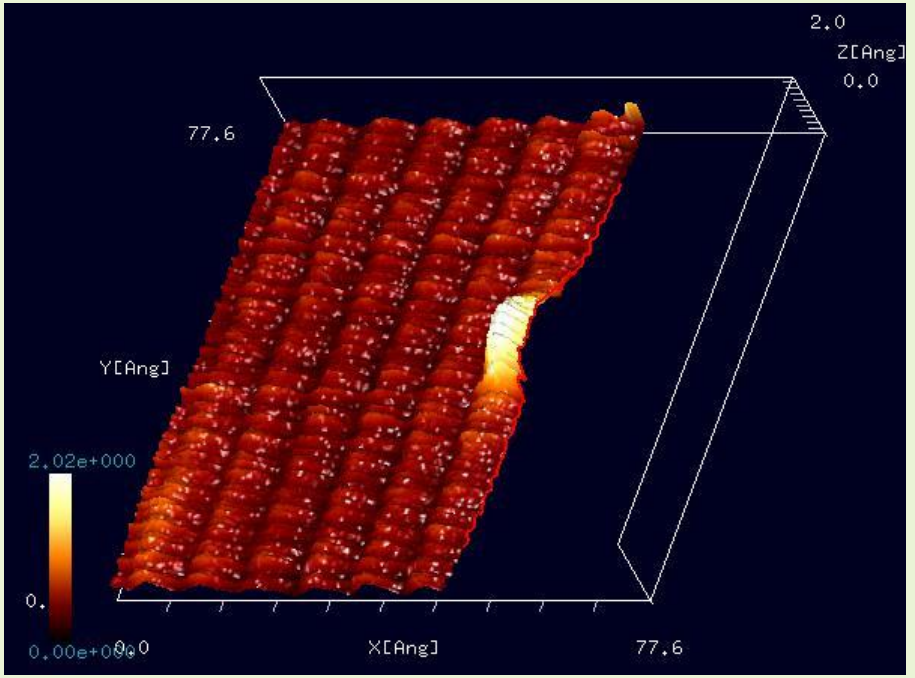
（実験データは、東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授より提供）

【Analyzer】断面図の表示

断面図の表示







（オリジナルデータは東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授より提供）

【Analyzer】ニューラルネットシミュレータ



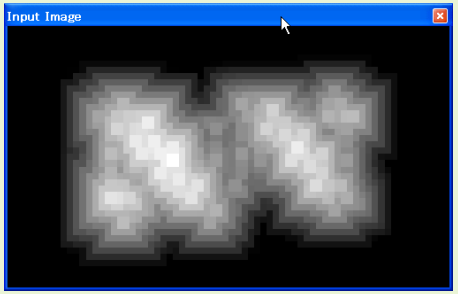
画像１ → Neuralnet Simulator → 画像２

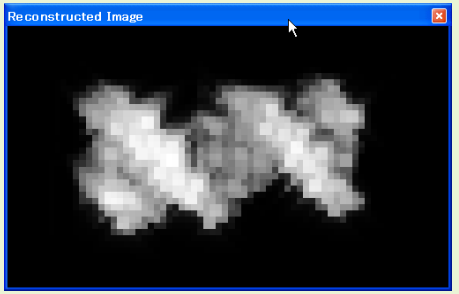
観測過程：試料 → 探針 → SPM画像

学習過程：既知試料SPM画像 → ニューラルネット → 既知試料

学習内容を適用

推定過程：任意のSPM画像 → ニューラルネット → 推定試料



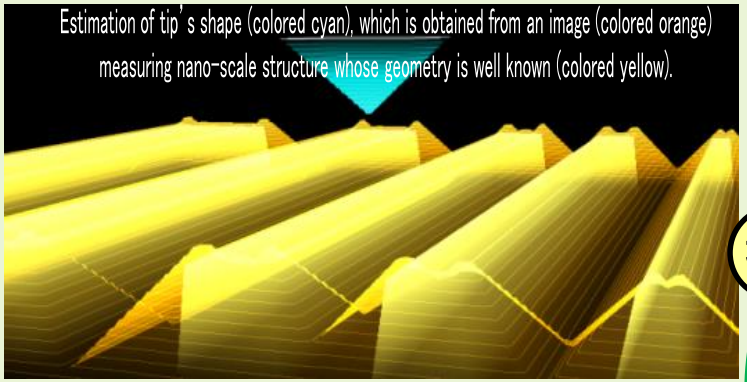


探針の影響を取り除いた画像が得られる。

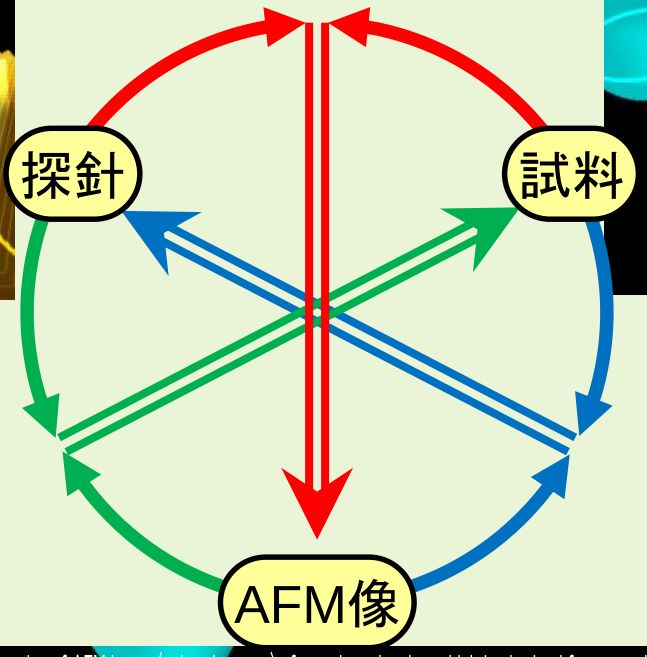
【GeoAFM】高速相互予測AFMシミュレータ

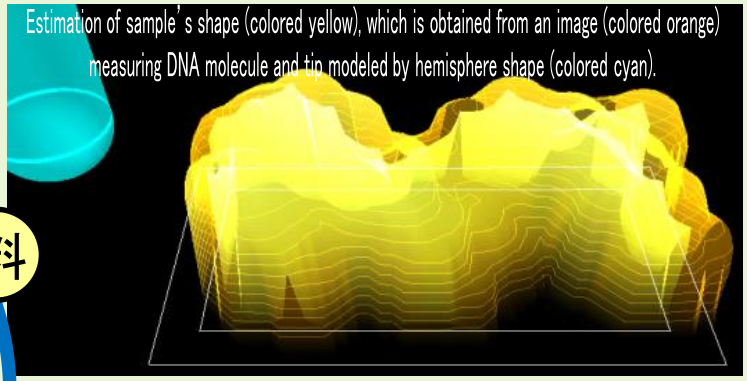
GeoAFM

「高速相互予測AFMシミュレータ」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する。探針 - 試料間の相互作用は考慮せず、純粋に幾何学的な計算のみ行う。

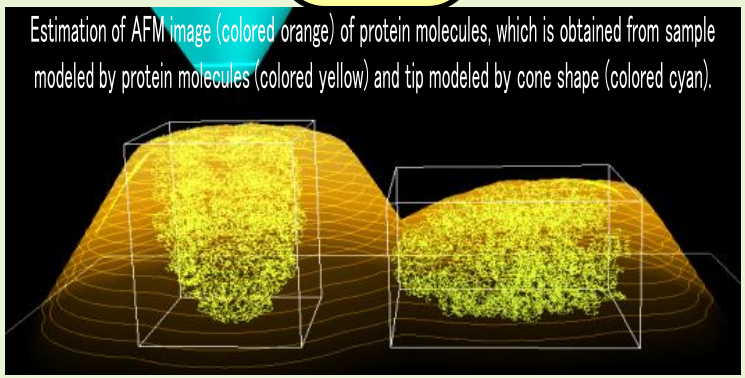


試料とAFM像から探針形状を予測





AFM像と探針から試料形状を予測



探針と試料からAFM像を予測

【GeoAFM】高速相互予測AFMシミュレータ

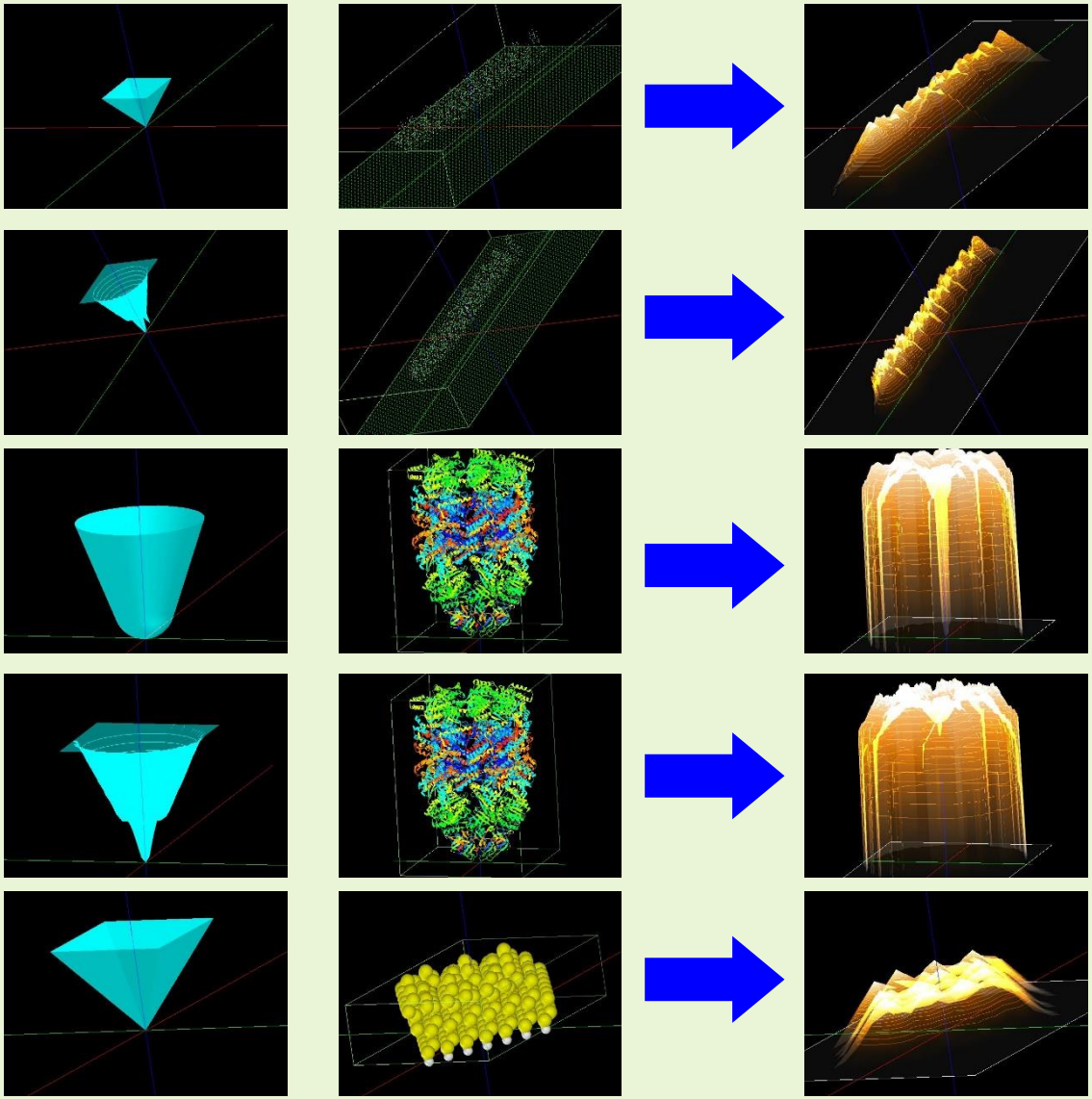
GeoAFM

探針と試料からAFM像を予測

探針

試料

AFM像



ピラミッド型探針を使用した、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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、シミュレーションによって求めたものです。

先端が二股になっている不完全な探針を使って、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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像をシミュレーションによって求めたものです。

Cone型探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)

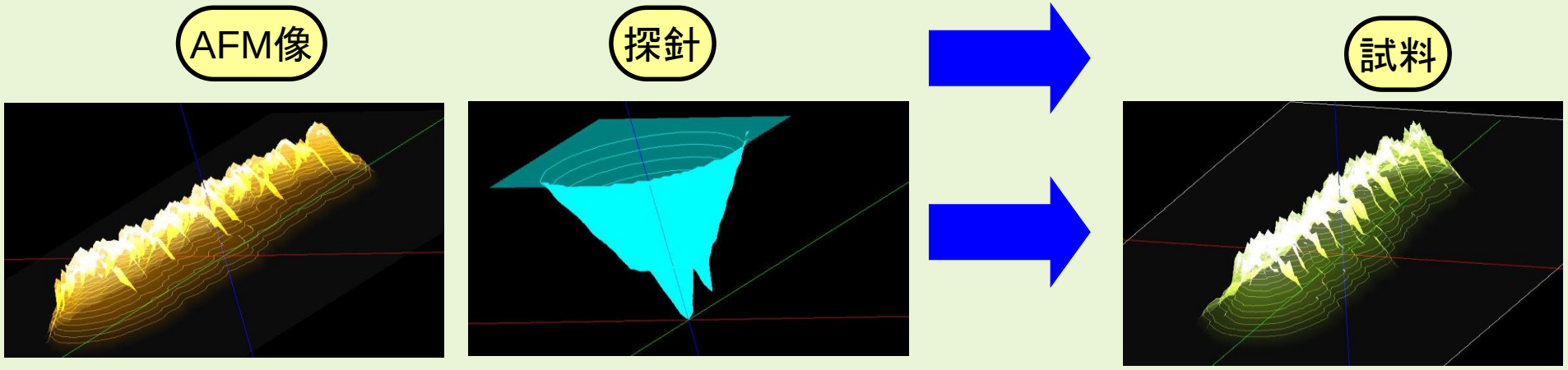
先端が二股になっている不完全な探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)

ピラミッド型探針を使用した、Si(111)-(7×7)DAS構造のAFM像を、シミュレーションによって求めたものです。

【GeoAFM】高速相互予測AFMシミュレータ

GeoAFM

AFM像と探針から試料形状を予測



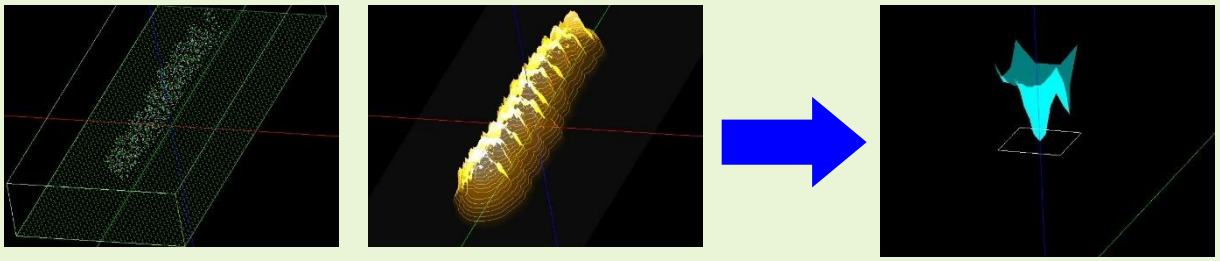
先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置されたラクトン系高分子量ポリマー(CLG：εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)のAFM像から、アーティファクトを除去した試料画像をシミュレーションによって求めたものです。

【GeoAFM】高速相互予測AFMシミュレータ

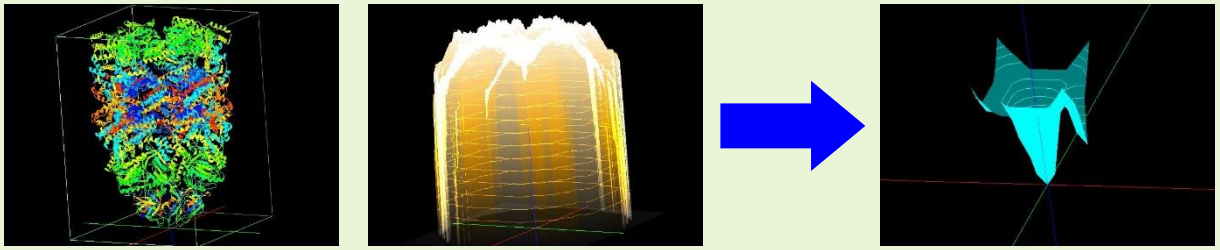
GeoAFM

試料とAFM像から探針形状を予測

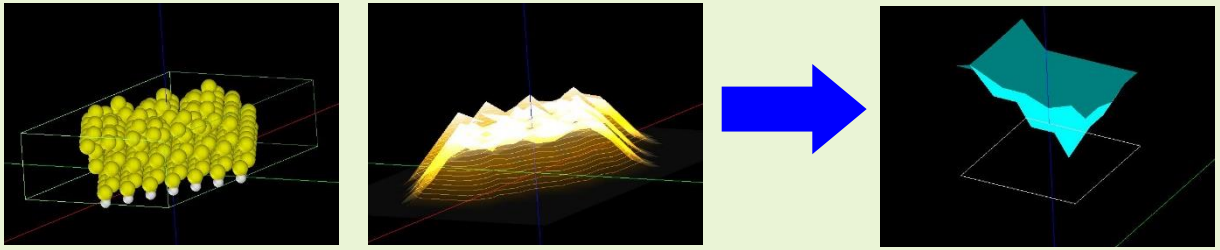
試料　AFM像　探針



先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。



先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、GroEL(シャペロニン)のAFM像、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。)



Si(111)-(7×7)DAS構造のAFM像、および、結晶原子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。

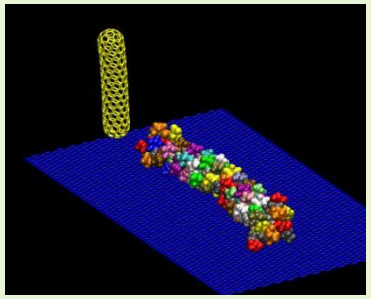
【GeoAFM】標準型および簡易高速型AFMシミュレーションの比較

通常の力計算法
WS上で2週間

幾何学法による高速計算法
PC上で1秒

MD

GeoAFM



実験で観察されるAFM像
を良好に再現する。

探針は Pro と Gly の
高さの違いを認識できる

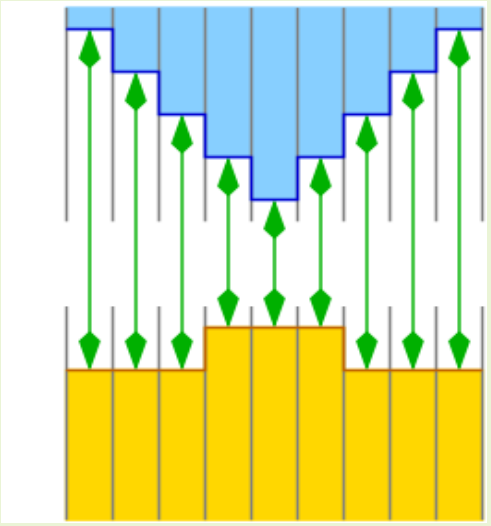


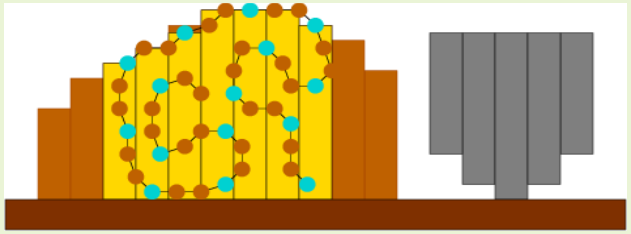


コラーゲン像

By 2 x 10^{-8} shorter !!

簡易法



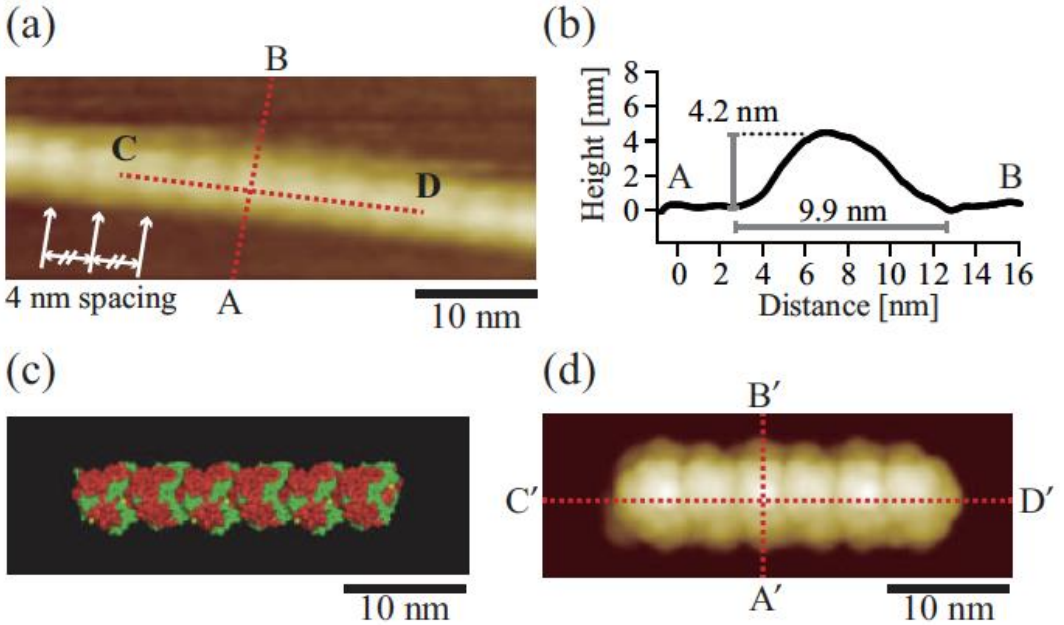


探針・試料の原子をメッシュに分ける。メッシュごとに最高点原子を決め、高さの差を測る。幾何学的な計算で計算量が少ない。

【GeoAFM】液中のtubulinのFM-AFM観察とAFMシミュレーション

H.Asakawa, K.Ikegami, M.Setou, N.Watanabe, M.Tsukada, T.Fukuma.
Biophysical Journal 101(5), 1270-1276 (2011).

AFM 実験観察



AFM シミュレーション

GeoAFM

実験・理論の比較

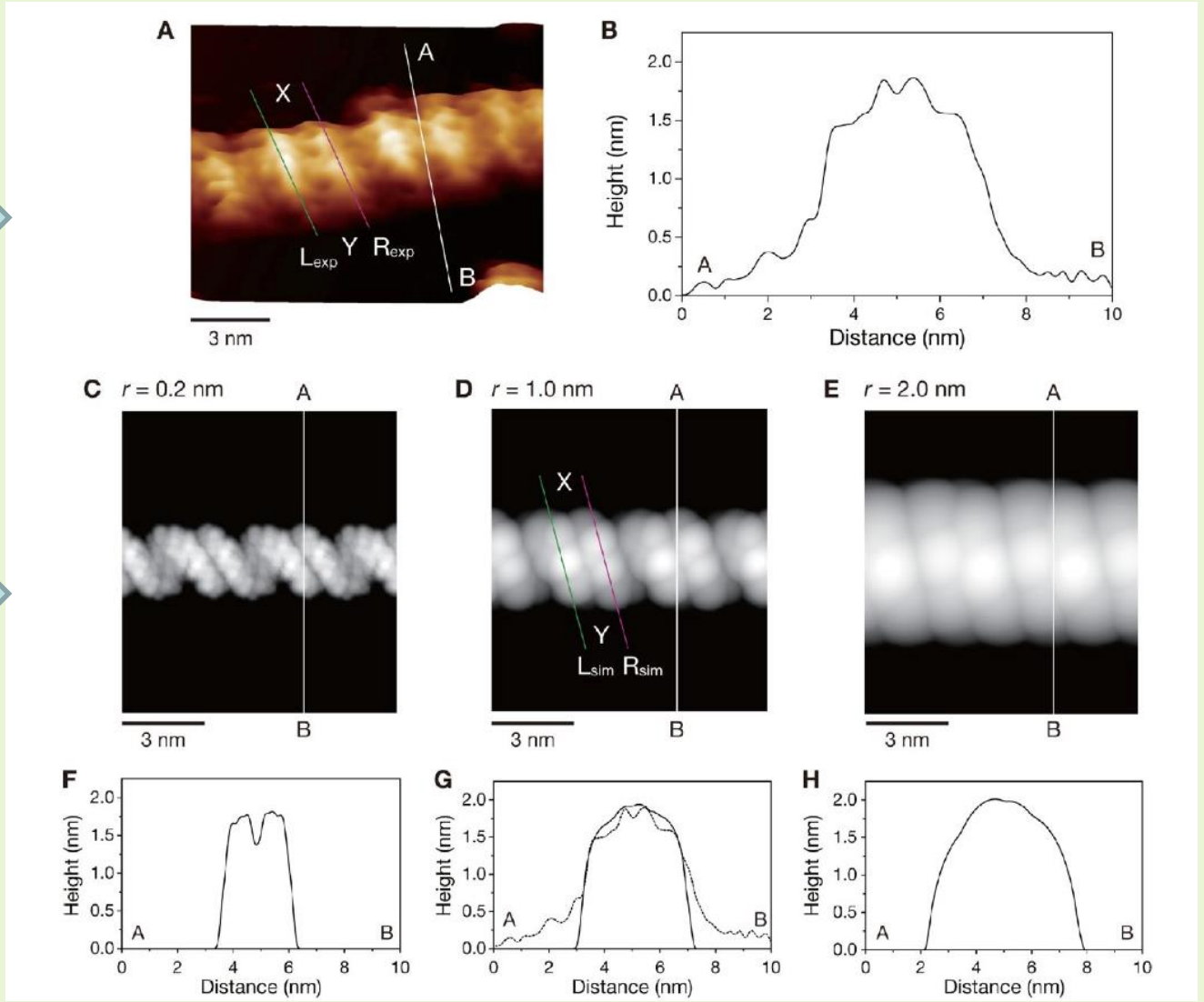
【GeoAFM】水溶液中のDNAの直接観察とシミュレーション

S. Ido, K. Kimura, N. Oyabu, K. Kobayashi, M. Tsukada, K. Matsushige and H. Yamada,
ACS Nano 7(2), 1817-1822 (2013). DOI: 10.1021/nn400071n

FM-AFM実験

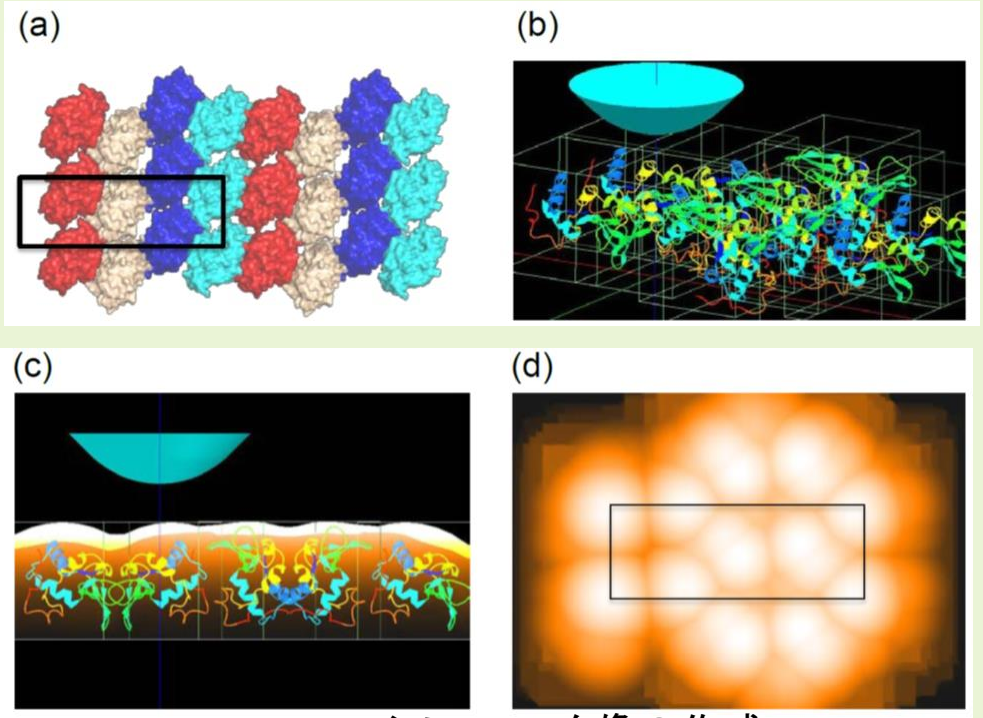
理論シミュレーション

GeoAFM

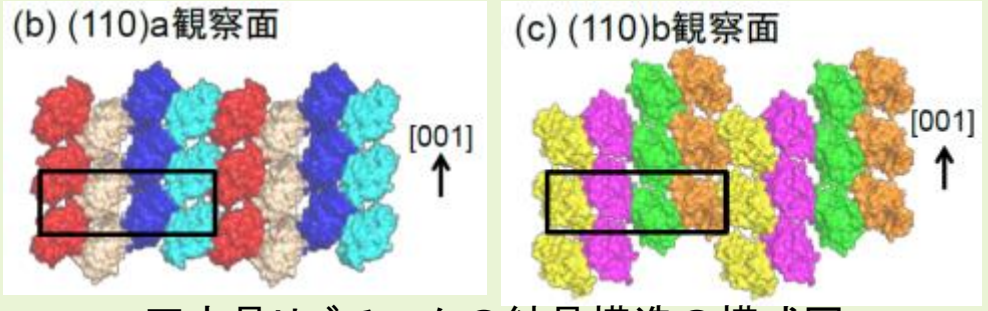


【GeoAFM】液中の正方晶リゾチーム単結晶(110)表面の決定

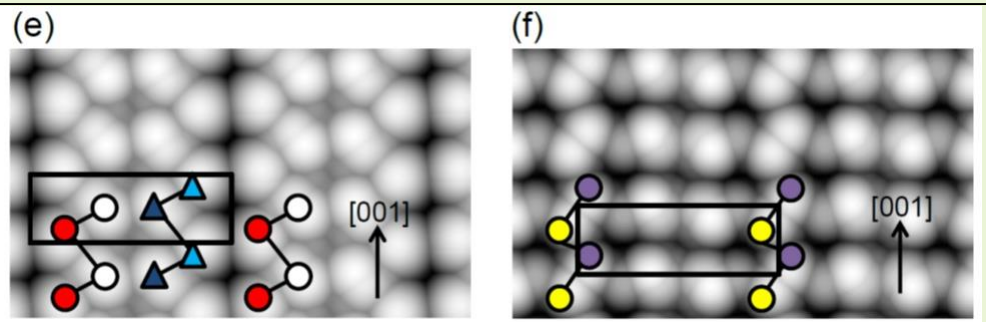
正方晶リゾチーム単結晶(110)表面は、二通りの表面構造(110)a面と(110)b面を取る可能性がある。



SPMシミュレータ像の作成

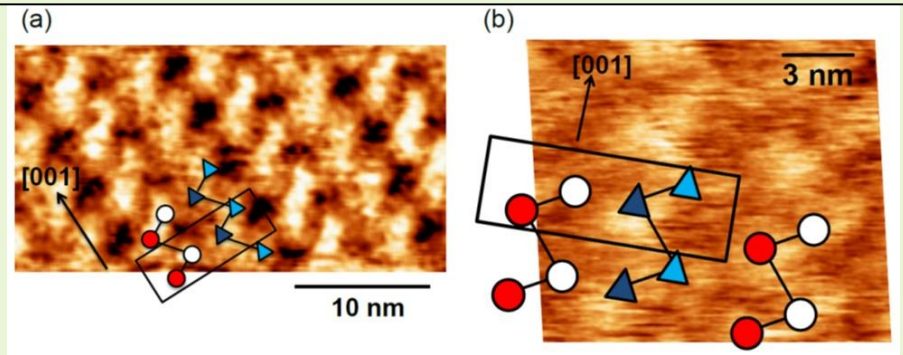


正方晶リゾチームの結晶構造の模式図



(110)a 面の予測画像　GeoAFM　(110)b 面の予測画像

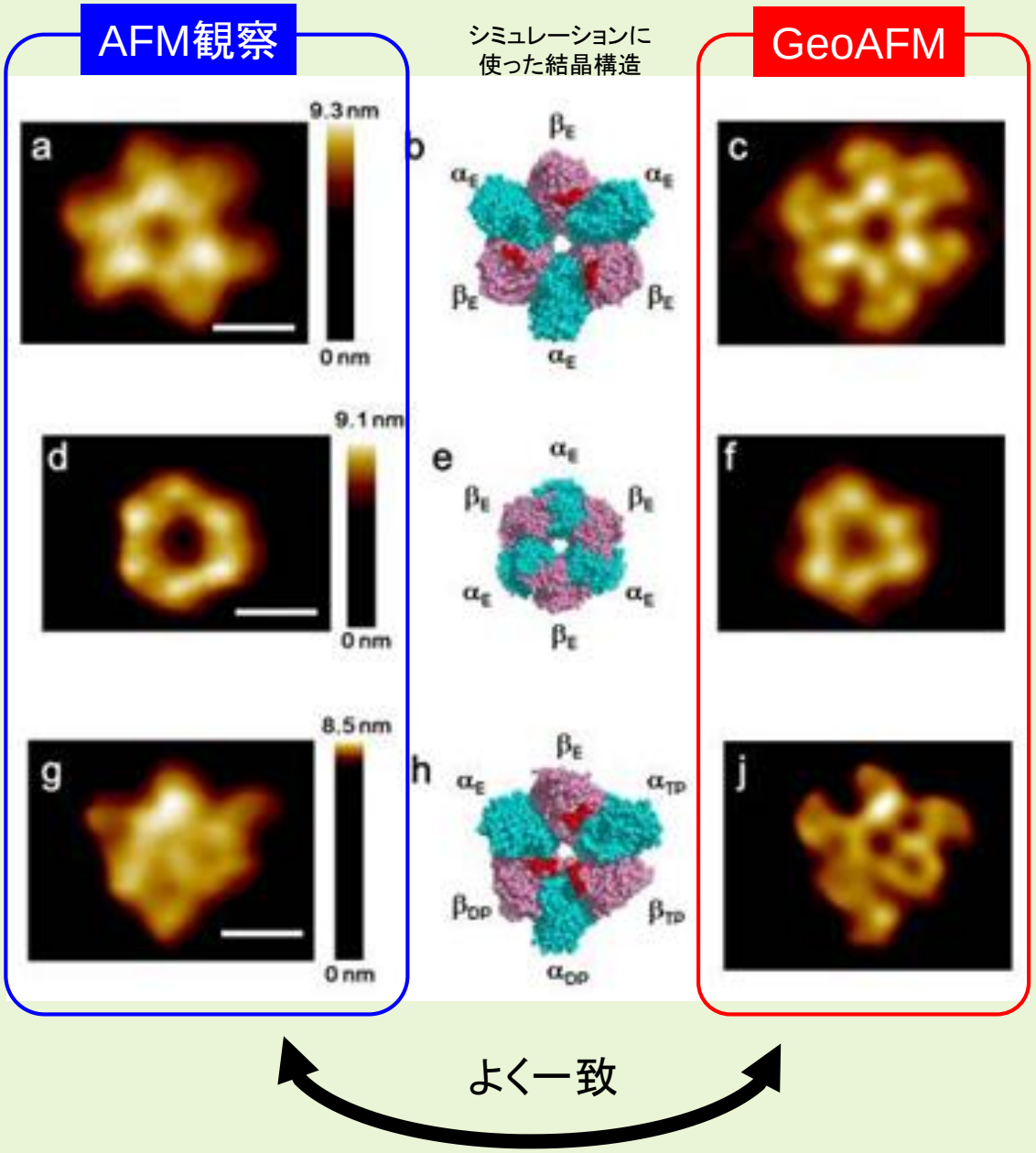
実験で得られたAFM像とSPMシミュレータ像とを比較し、(110)a 面の構造を持つことを裏付けた。



溶液中での正方晶リゾチーム(110)面のFM-AFM像（実測）

（北海道大学低温科学研究所 長嶋剣 助教より提供 ）

【GeoAFM】回転分子モーター F_1-ATPaseのAFM観察とシミュレーション



F_1-ATPase：

ATP の加水分解エネルギーを利用してサブユニットを一方向に回転させる回転分子モーター。

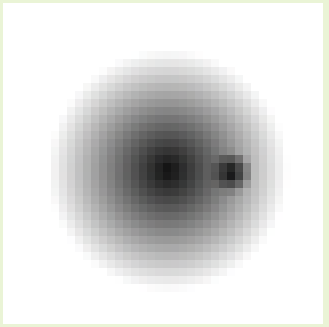
実験で得られたAFM像とSPMシミュレータ像とを比較し、実験の信頼性を裏付けた。

（金沢大学　内橋貴之 准教授より提供 ）

【GeoAFM】オリジナルの探針形状データの作成／使用 1/2

Step 1. 探針形状を想定した画像データを作る。

ペイントツール(例、GIMP)を用いて、探針形状を想定した試料面の画像データを作る。
ペイントツールのグラデーション機能、ブラシ機能、ぼかし機能などを使い、左図のようなグレースケールの画像ファイルを作成する。ここでは縦横サイズをそれぞれ40ピクセルとした。
それをpngまたはbmp形式の画像ファイルとして保存する。
形状データに変換する際、白が高く、黒が低いとみなされる。

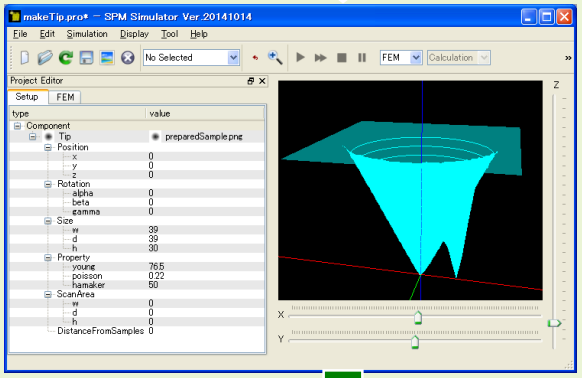


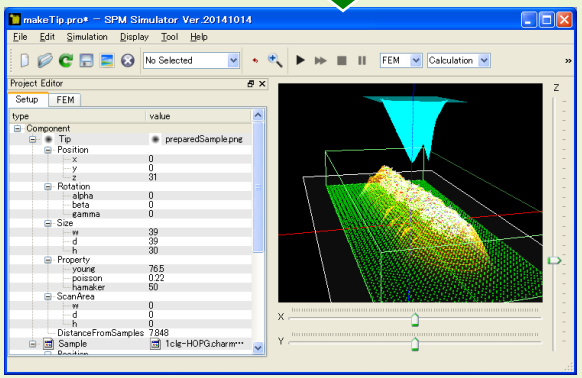
Step 2A. 画像データを探針形状として利用する。

SPMシミュレータは、探針形状または試料形状として、画像データを利用できる。
読み込んだ画像ファイルは、高さ形状のデータに変換される。
探針形状として画像ファイルを利用する場合。

1. Componentを右クリック → Add Tip → Fileをクリックし、上記の画像ファイルを選択する。
2. 1ピクセルあたりの長さを入力する。例えば1 [Å]とする。
3. 高さ方向のサイズを入力する。例えば30 [Å]とすると、画像ファイルの各ピクセルの明度が0～30 [Å]の高さデータに変換される。

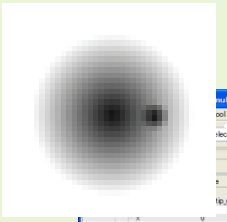
読み込んだ形状データは、GeoAFMおよびFemAFMによる計算に利用できる。





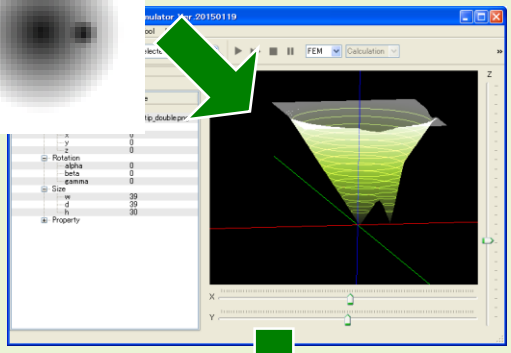
【GeoAFM】オリジナルの探針形状データの作成／使用 2/2

Step 2B. 画像データに基づき、先端を丸めた探針形状を作成する。



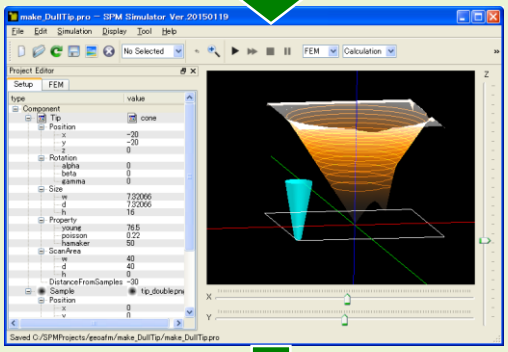
(1) 画像データを試料形状として読み込む。

1. Componentを右クリック → Add Sample → Fileをクリックし、上記の画像ファイルを選択する。
2. 1ピクセルあたりの長さを入力する。例えば1 [Å]とする。
3. 高さ方向のサイズを入力する。例えば30 [Å]とすると、画像ファイルの各ピクセルの明度が0～30 [Å]の高さデータに変換される。



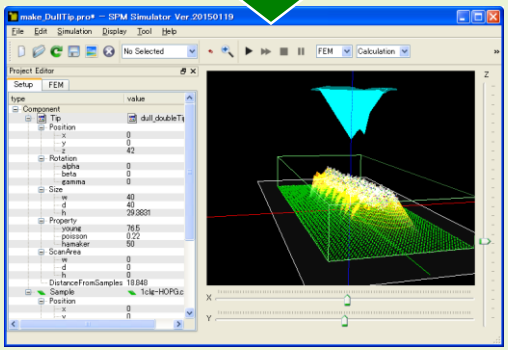
(2) 細く先端の丸い探針を利用して、GeoAFMによりImageをシミュレートする。

Componentを右クリック → Add Tip → Cone をクリックし、先端の半径を1.0 [Å]、頂角を10°とする。
Tip → Position を(-20, -20, 0)、ScanAreaを(40, 40, 0)とする。
画面を右クリック → GeoAFM → Set Resolutionをクリックし、解像度を1 [Å]とする。
画面を右クリック → GeoAFM → Show Simulated Imageをクリックし、Imageをシミュレートする。



(3) ImageをcubeファイルとしてエクスポートするImageをcubeファイルとしてエクスポートする。

画面を右クリック → GeoAFM → Export Simulated Dataをクリックし、cube形式で保存する。



(4) GeoAFMおよびFemAFMによる計算に利用する。

新しいSPMプロジェクトを用意して、今作成したcubeデータをGeoAFMおよびFemAFMによる計算に利用できる。

【GeoAFM】GIMPによるオリジナルの探針形状画像データの作成

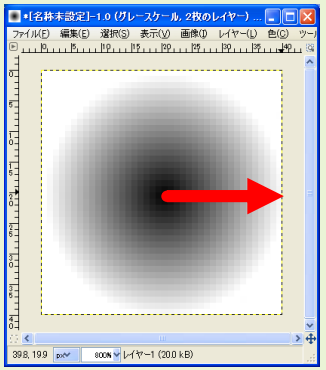
探針形状を想定した画像データを作る。　GIMPを起動。40 x 40 pixelのキャンバスを作成。

レイヤー1

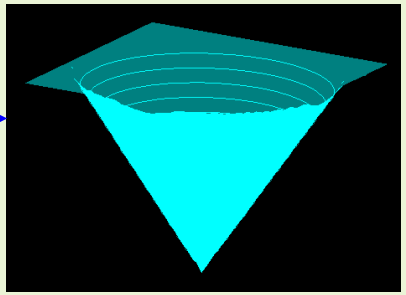
円錐形状を想定した画像を描く。

グラデーションツールを選択。
形状として「放射状」を選択。

「モード」→「標準」



画像ファイルをpng, bmp, jpg形式で保存し、
SPMシミュレータに読み込ませる。

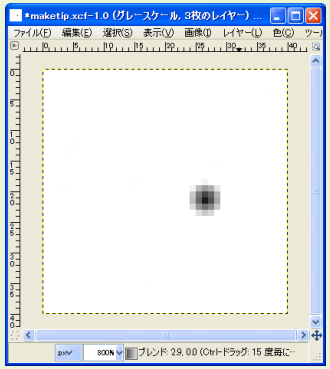


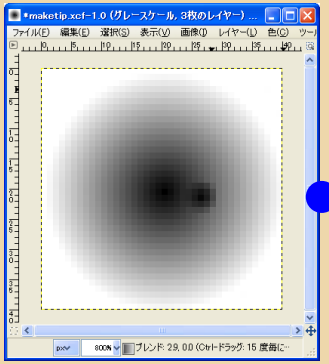
レイヤー2

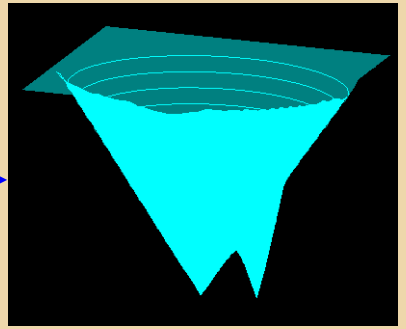
中心から少し離れた位置に
鋭い円錐形状を描く。

グラデーションツールを選択。
形状として「放射状」を選択。

「モード」→「乗算」





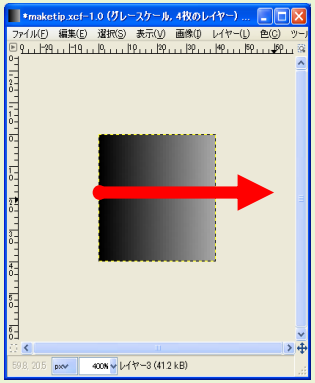


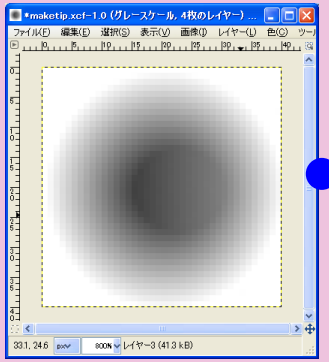
レイヤー3

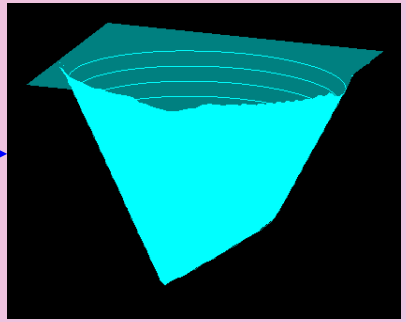
円錐の下を斜めにカットする
ための形状を描く。

グラデーションツールを選択。
形状として「線形」を選択。

「モード」→「比較（明）」





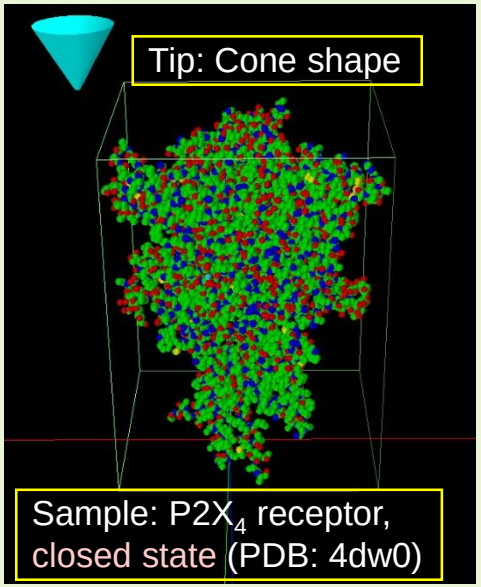


【GeoAFM】P2X$_4$受容体のAFM 像

GeoAFM

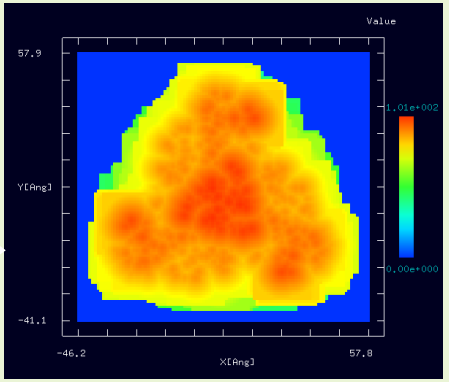
P2X$_4$受容体は細胞表面のイオンチャネル型ATP受容体で、ATP存在下で構造が変化する。

Before activation



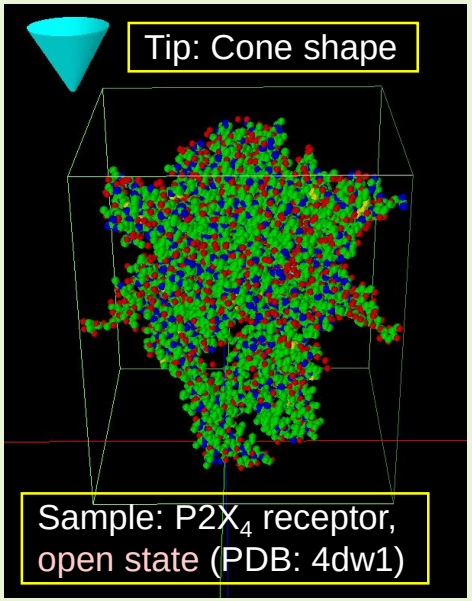
Simulation

GeoAFM result is imported to Analyzer.

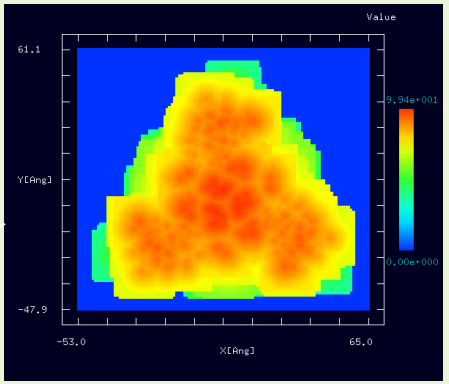


obtuse triangular structure

After binding with ATP



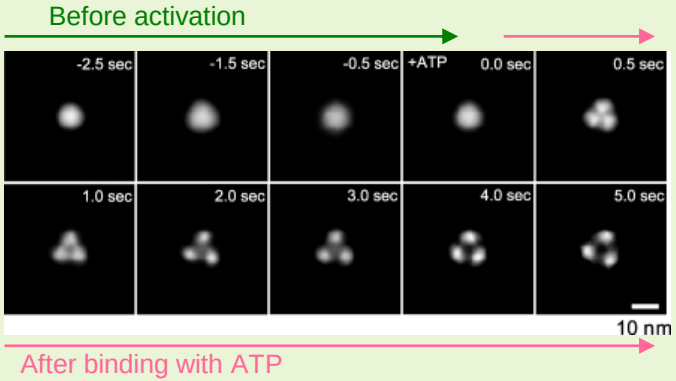
GeoAFM result is imported to Analyzer.



Trimer structure

Experiment

Fast-Scanning AFM Observations of the ATP-Induced Structural Changes in the P2X4Rs.

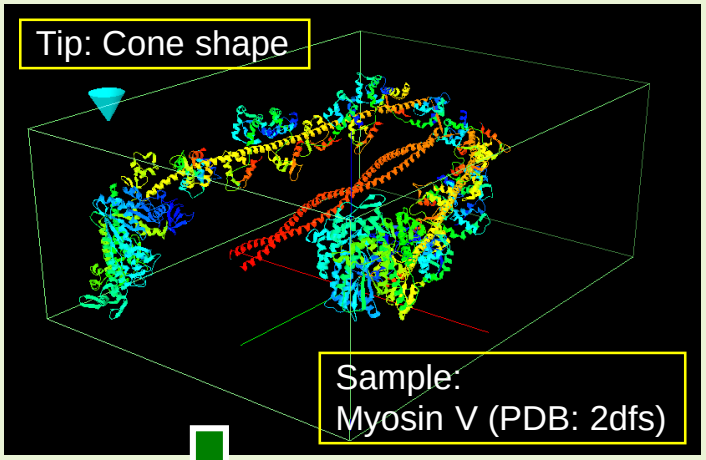


Y. Shinozaki, K. Sumitomo, M. Tsuda, S. Koizumi, K. Inoue, K. Torimitsu, PLoS Biol., 5;7(5):e103, 2009.

【GeoAFM】生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション

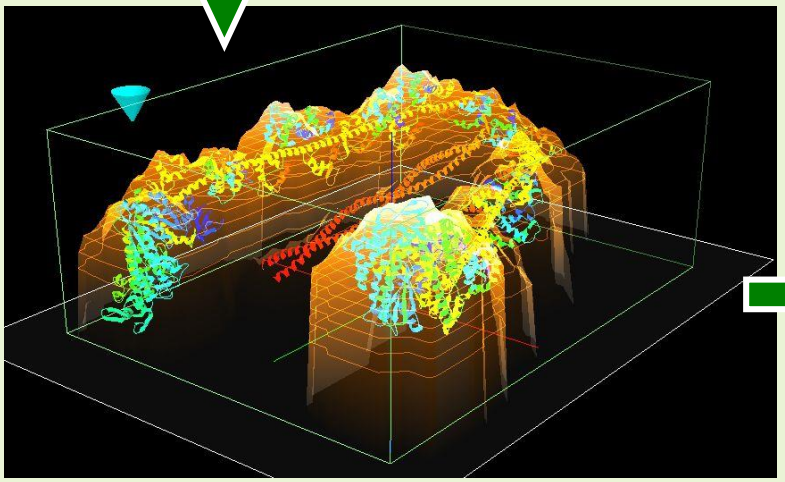
GeoAFM

Simulation

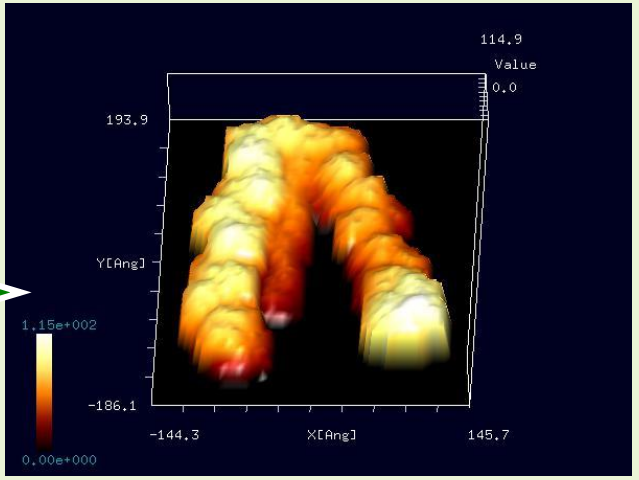


Result of GeoAFM

Less than 1 second



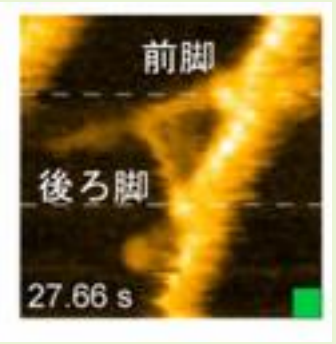
Export to result.cube,
Import the result.cube to Analyzer.



Experiment

金沢大学 理工研究域数物科学系の安藤 敏夫教授と古寺 哲幸助教らの研究グループは、世界最高性能の高速原子間力顕微鏡を開発し、アクチンフィラメントに沿って動くミオシンV分子の振舞いを直接高解像撮影することに世界で初めて成功した。

http://www.jst.go.jp/pr/announce/20101011/



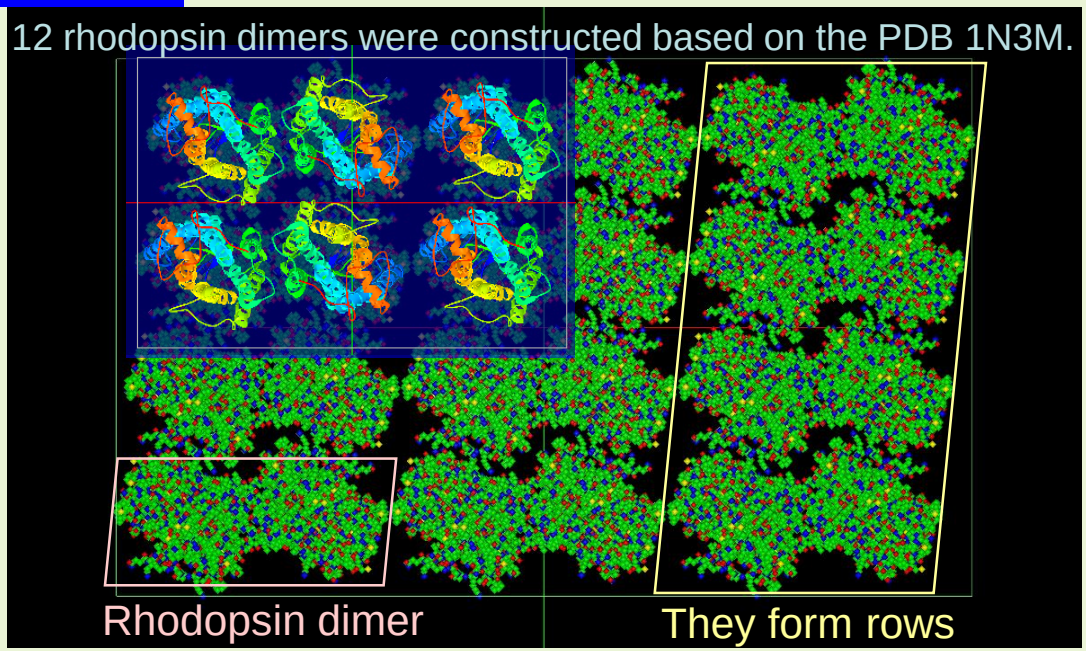
【GeoAFM】Rhodopsin のAFM 像

GeoAFM

ロドプシンは眼の網膜に存在し、光を認識するためのタンパク質である。ロドプシンはディスク膜中に大量に埋め込まれており、AFMによる観察が行われている。ロドプシンはダイマーの列を形成する。ロドプシン・ダイマー列が形成する準結晶を想定し、ロドプシン・ダイマー12ユニット（水素原子を除いて65904原子）から成るモデルを用意した。

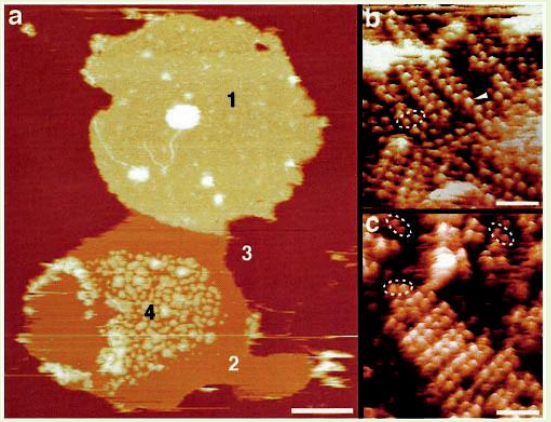
Simulation

Bird view of the sample.



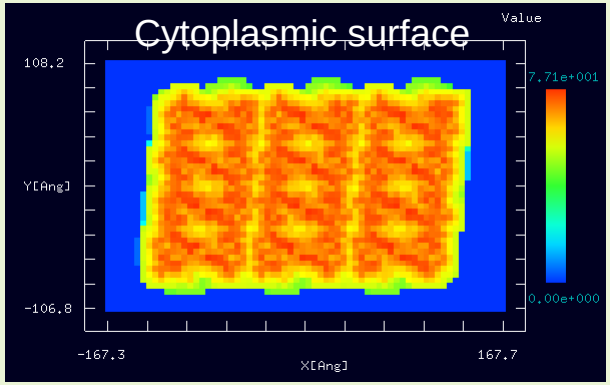
Experiment

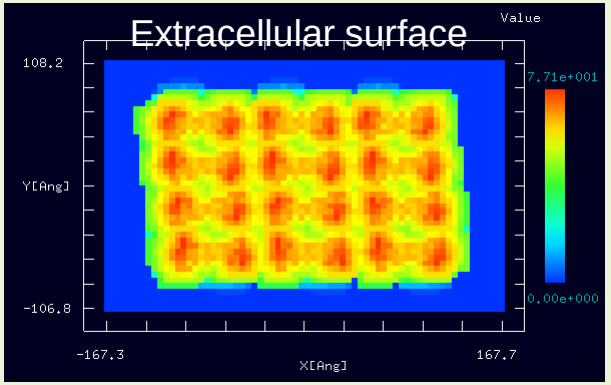
Topography of an open, spread-flattened disk adsorbed to mica and imaged in buffer solution.



Y. Liang et al., J.Biol.Chem. 278 (2003) 21655-21662.

GeoAFM result is imported to Analyzer.

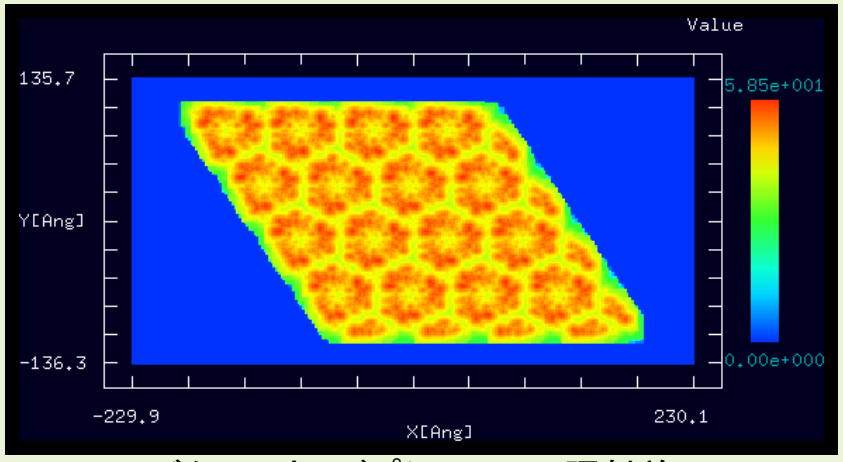




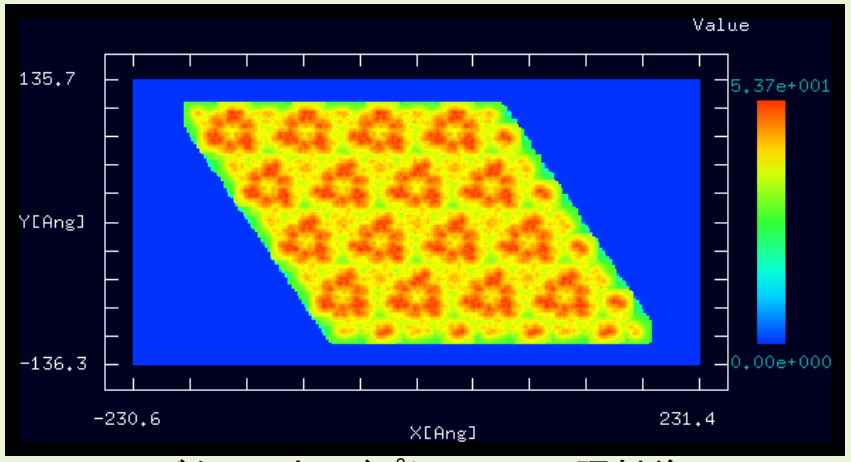
【GeoAFM】バクテリオロドプシン(bacteriorhodopsin)のAFM像

- バクテリオロドプシンは高度好塩菌の膜タンパク質であり、光駆動プロトンポンプとして、プロトンを細胞質内から外へ輸送する。
- ある波長の光を照射されると構造変化する。

シミュレーション結果

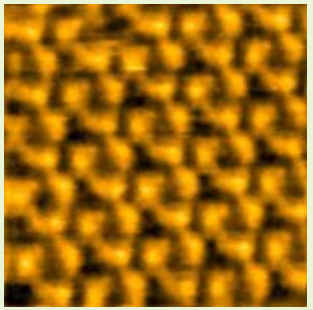


バクテリオロドプシン(1c8r:照射前)

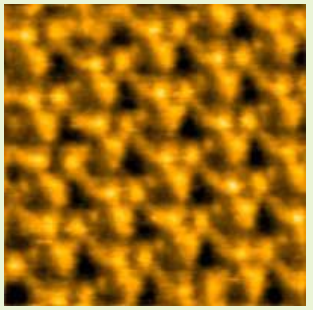


バクテリオロドプシン(1c8s:照射後)

実測画像



照射前

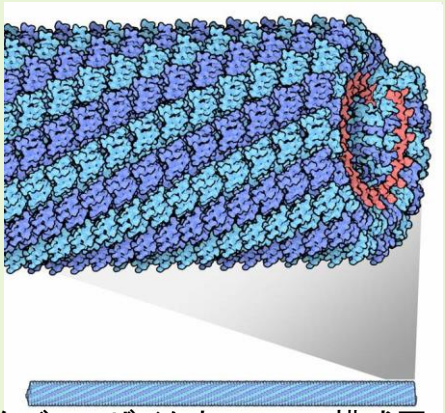


照射後

Shibata, Mikihiro; Yamashita, Hayato; Uchihashi, Tkayuki; Kandori, Hideki; Ando, Toshio; Nature Nanotechnology, 5(3):208-212; 2010-03

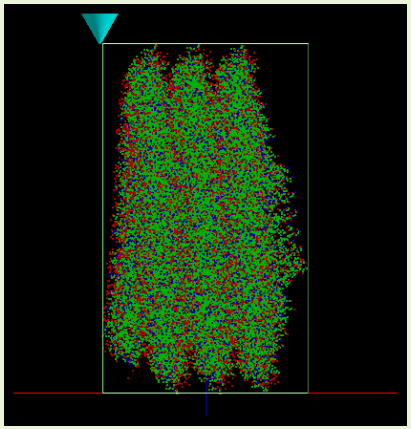
【GeoAFM】タバコモザイクウィルス（TMV）のAFM像

- タバコモザイクウィルスは、タバコなどの葉にモザイク状の斑点ができ葉の成長が悪くなるタバコモザイク病の原因である。
- その構造は螺旋状に積み重なり円筒形の形をしたタンパク質の覆いとそれに包まれた1本のRNAからなる。

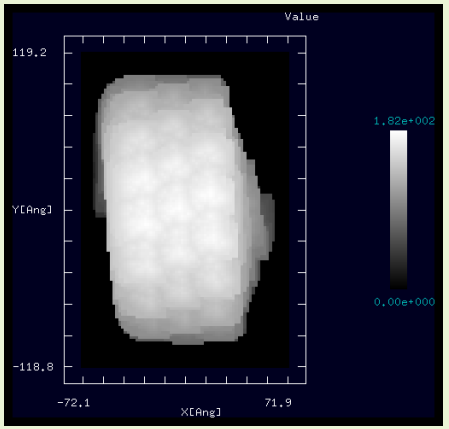


タバコモザイクウィルスの模式図[1]

シミュレーション結果



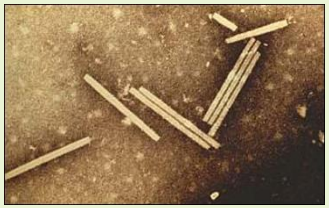
シミュレーションに用いたモデル



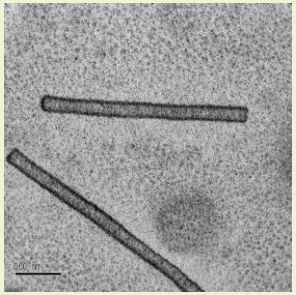
Tobacco mosaic virusのGeoAFMでのシミュレーション画像

EMやTEM、SEMではタンパク質のサブユニットを見ることは難しいが、AFMならばこのくらいはっきりと輪郭を捉えられる可能性がある。

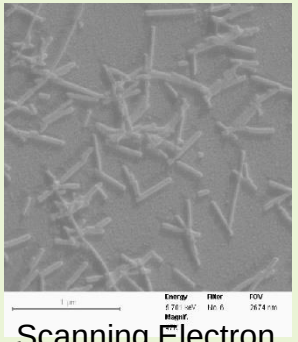
実測画像



Electron Microscopeでの実測画像[2]



Transmission Electron Microscopyでの実測画像[3]

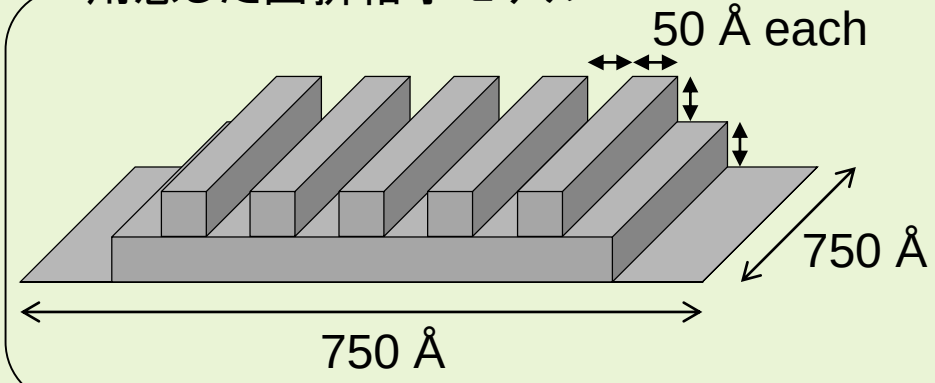


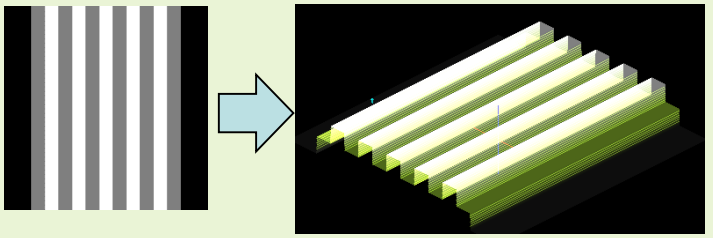
Scanning Electron Microscopeでの実測画[4]

[1]:http://pdbj.org/mom/109
[2]:http://erec.ifas.ufl.edu/plant_pathology_guidelines/module_02.shtml
[3]:http://www.smem.uni-bayreuth.de/en/samples_gallery/Transmission-Electron-Microscopy-_TEM_/Biological-Samples/virus/index.html
[4]:http://www.lv-em.com/sem-tobacco-mosaic-virus

【GeoAFM】回折格子のAFM像シミュレーション

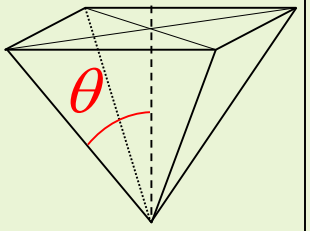
用意した回折格子モデル





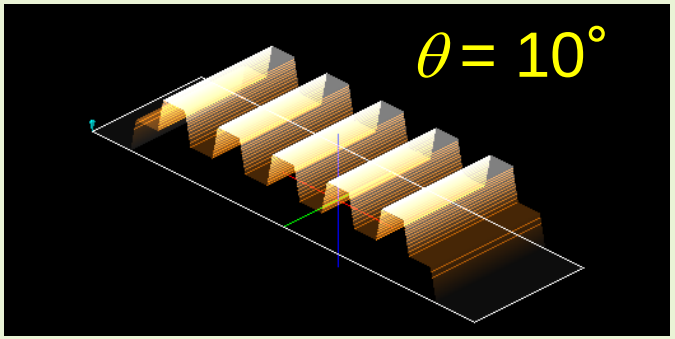
画像ファイルから形状データを作成

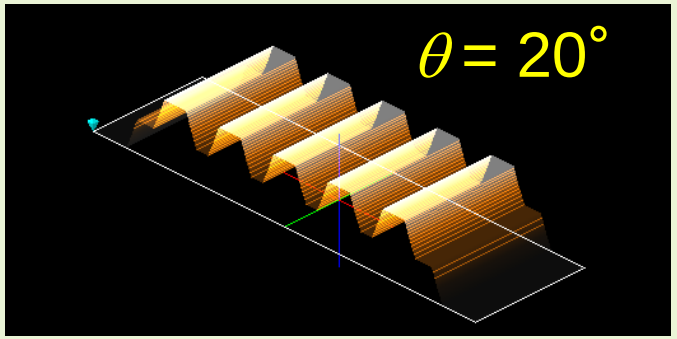
探針

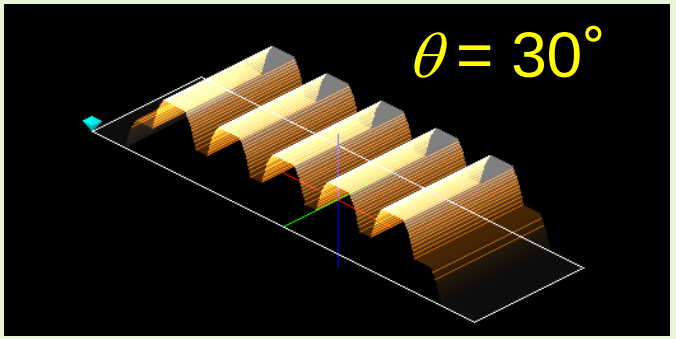


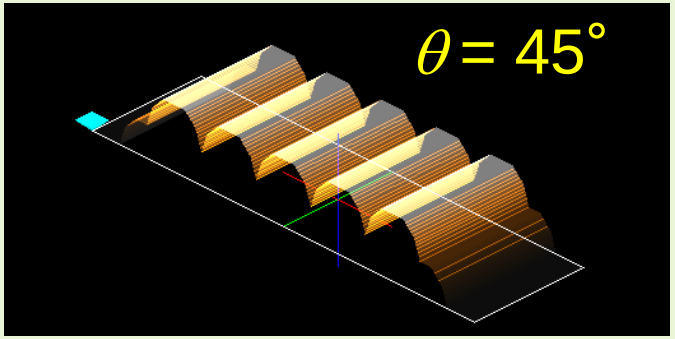
ピラミッド探針

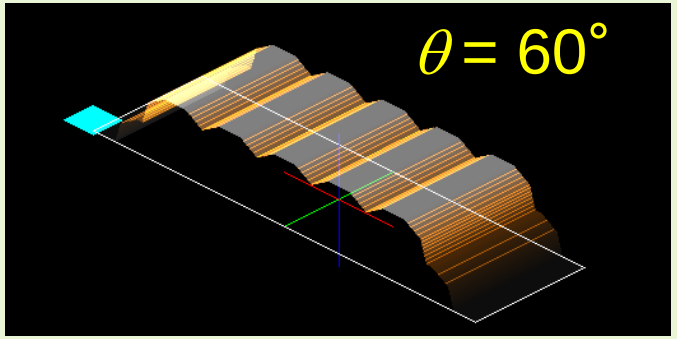
探針の先端を鋭いものからだんだん鈍くしてシミュレートした結果。

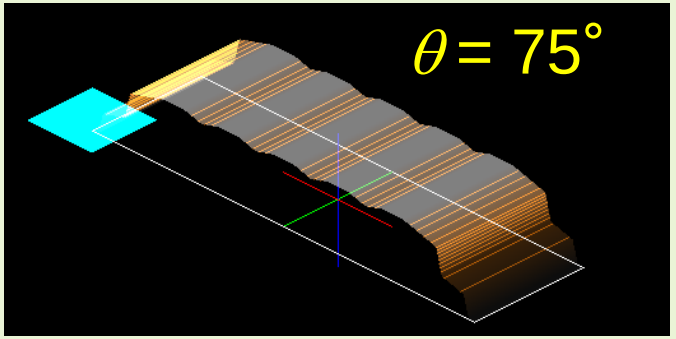






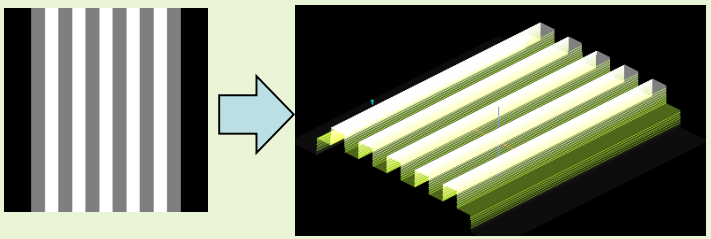






【GeoAFM】ベンチマークテスト

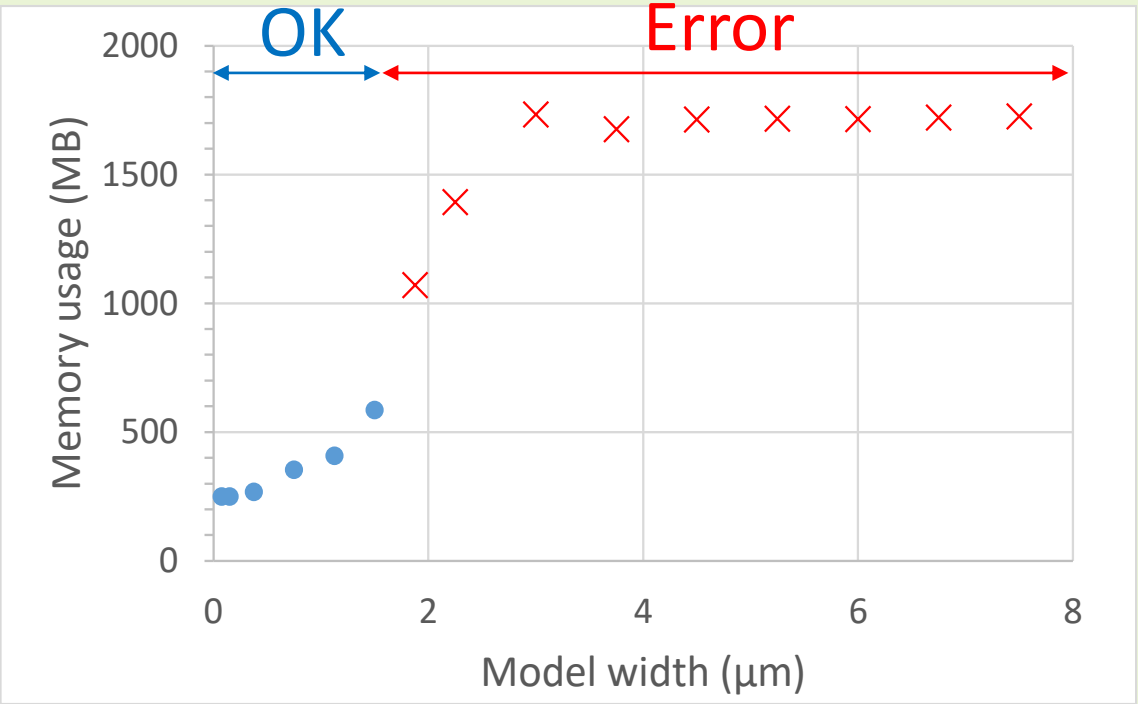
計算可能なサイズを調べる。回折格子モデルを大きくしながら、GeoAFMのシミュレートを試みた。



画像ファイルから形状データを作成

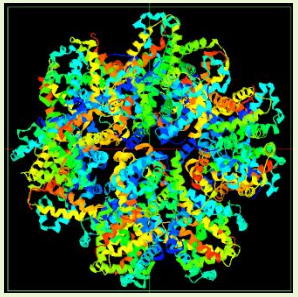
SPMシミュレータで画像ファイルをSampleとして読み込む際に、xy方向の縮尺およびz方向の高さを変えられる。

探針は $\theta = 10^\circ$ のピラミッド形状。
GeoAFMの分解能を10 Å（上限値）に固定した。



モデルの大きさが1.9 μm以上になると計算不可能。一般的なSEM画像のサイズは5 μm以上なので、残念ながら、SEM像をSPMシミュレータで再現することはできない。

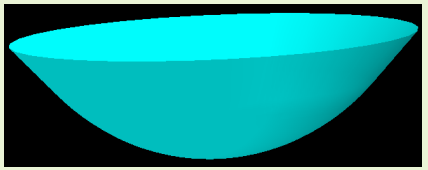
【GeoAFM】球状タンパク質の粒径解析



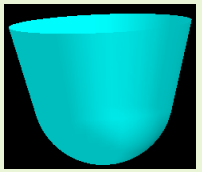
試料
ヘモグロビン
(PDB: 1yhu)
横幅127.9[Å]

GeoAFM

シミュレーションに用いた探針



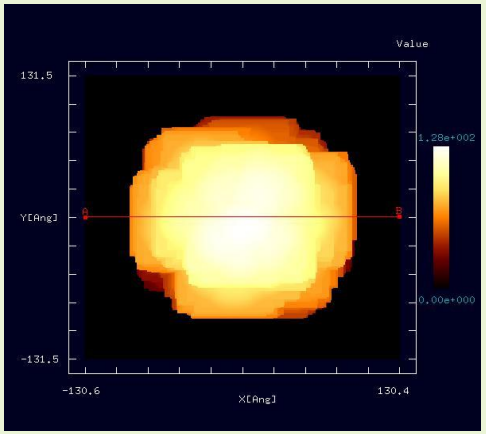
Cone
Radius 32.0[Å]
Angle 45.0[deg]

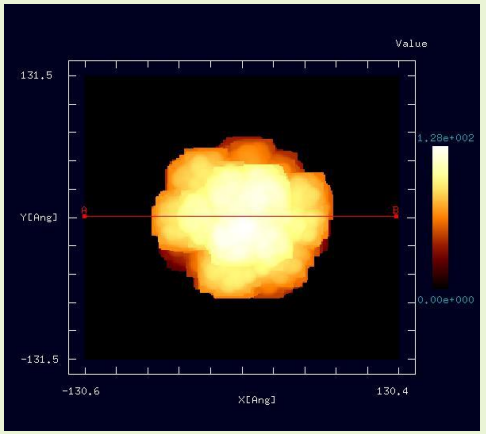


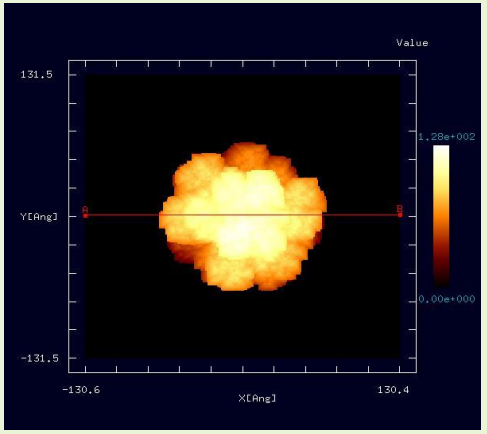
Cone
Radius 8.0[Å]
Angle 15.0[deg]



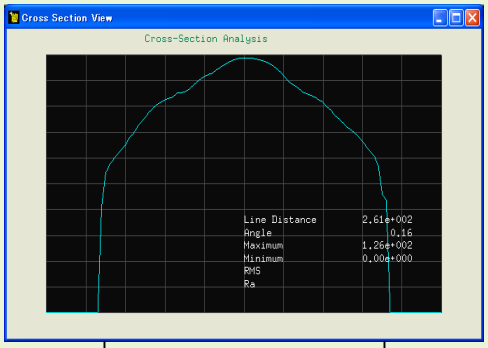
Pyramid
Angle16.0[deg]



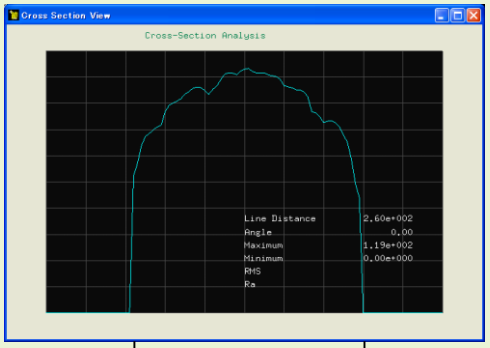




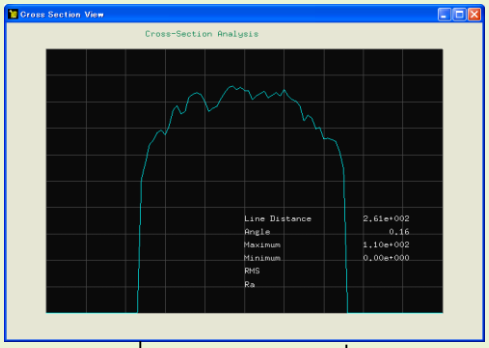
Cross Section



189[Å]



151[Å]

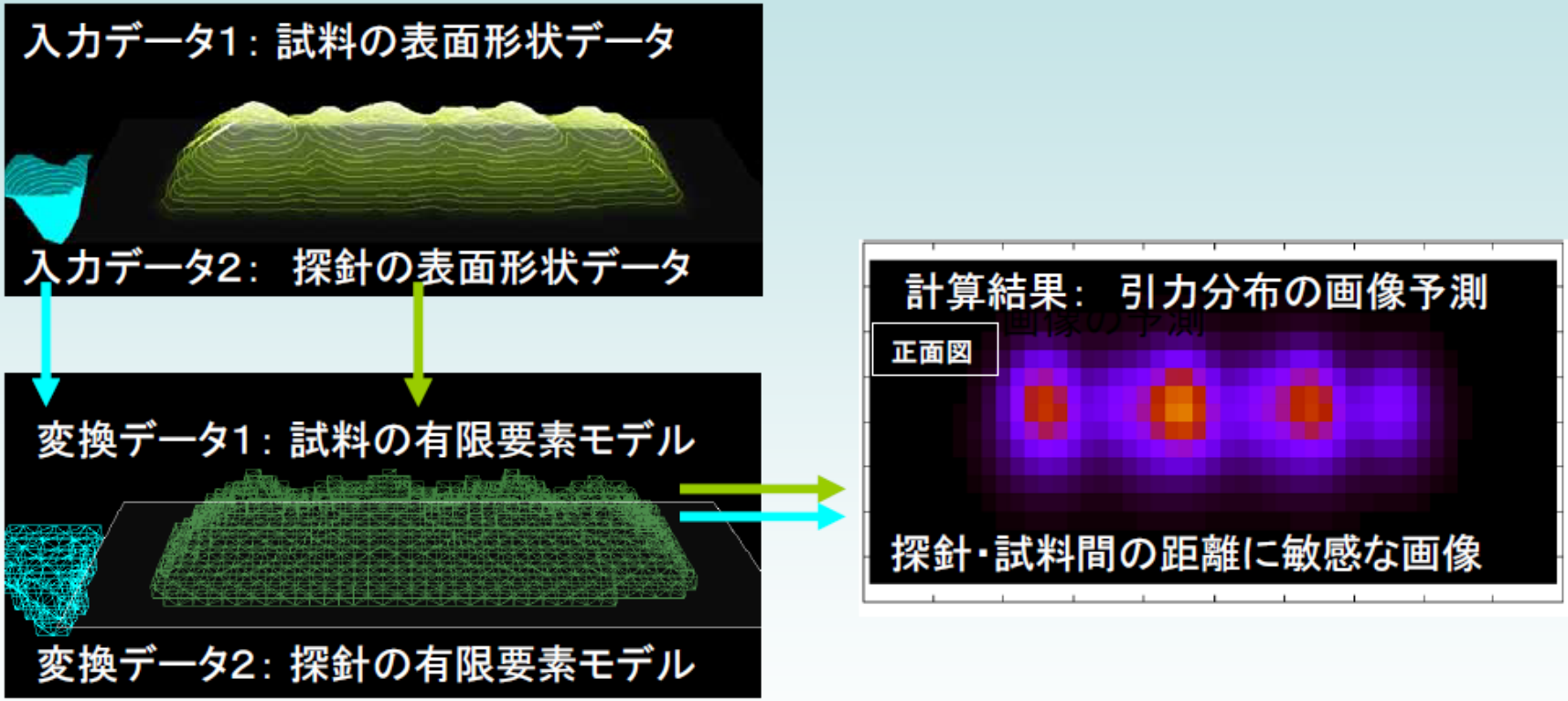


136[Å]

探針形状によって、得られるAFM像が大きく変わる。細い探針ほど実際の大きさに近づく。

【FemAFM】試料モデルからの相互作用・変形による測定画像の予測

FemAFM

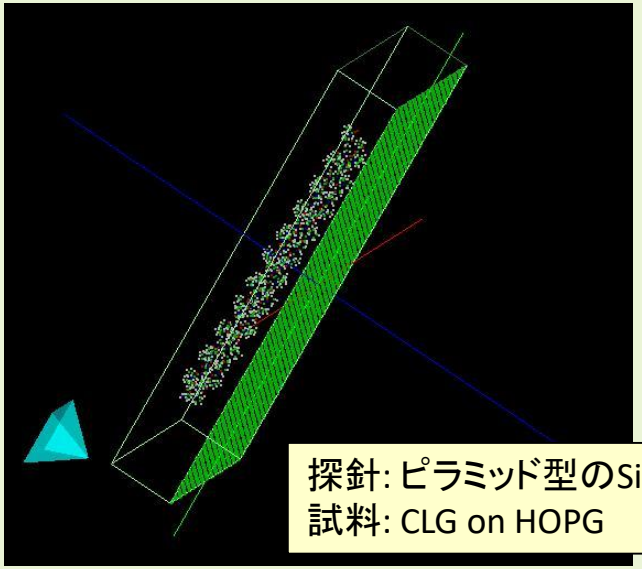


探針・試料の表面形状を弾性率とファンデルワールス力をもつ
有限要素の連続体に変換し、その相互作用と弾性変形を計算し、
探針が受ける引力の分布を画像化。

連続弾性体AFMシミュレータ(FemAFM)は、有限要素法を使用して、AFM像をシミュレートする。
高速相互予測AFMシミュレータ(GeoAFM)とは異なり、試料や探針の形状の変形に対応できる。

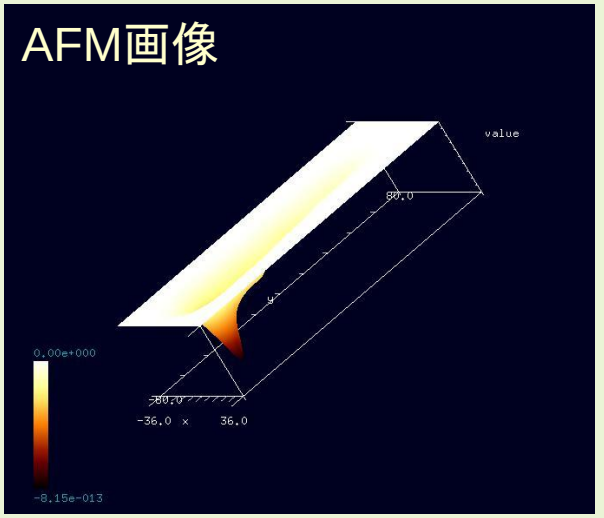
【FemAFM】ラクトン系高分子ポリマーのAFMシミュレーション

FemAFM



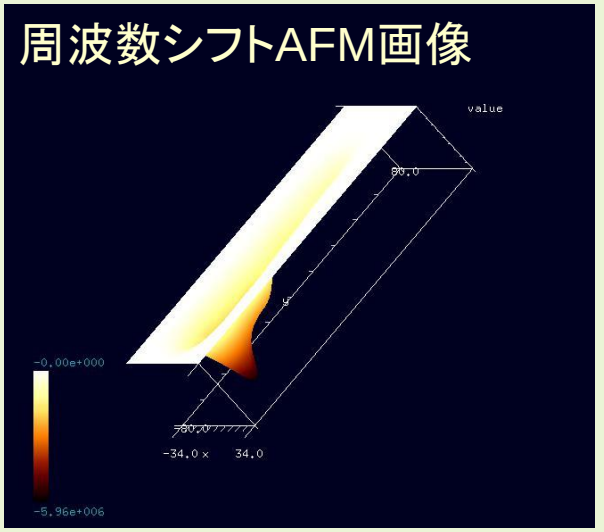
HOPG: 高配向熱分解黒鉛 (Highly Oriented Pyrolytic Graphite)
CLG:ラクトン系高分子量ポリマー(CLG:εカプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)

Constant height (static) mode



探針が試料に接近している部分では、逆6乗法則に従ってファンデルワールス力が急激に増大している。

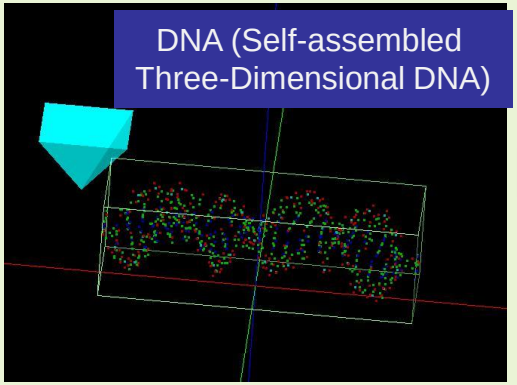
Frequency shift mode

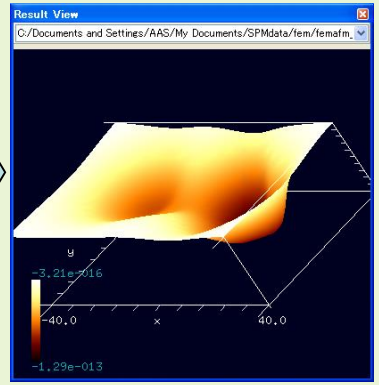


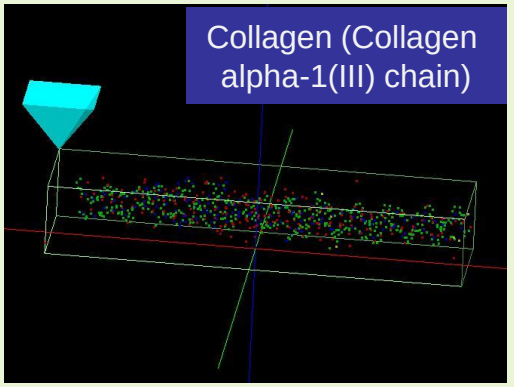
カンチレバーを周波数500[MHz]で励振させており、周波数のずれは最大で5.96[MHz]

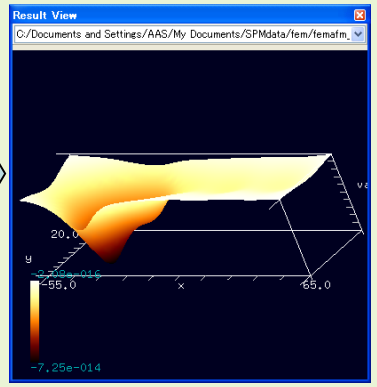
【FemAFM】ノンコンタクトモード

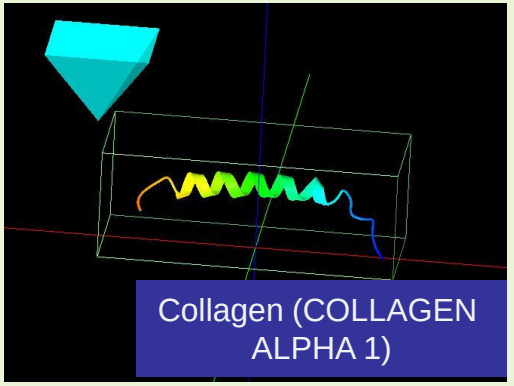
カンチレバー先端の探針が、試料表面から数Åの離れた状態で原子間に働く相互作用を測定しつつ、試料表面を走査する状況に対応しています。

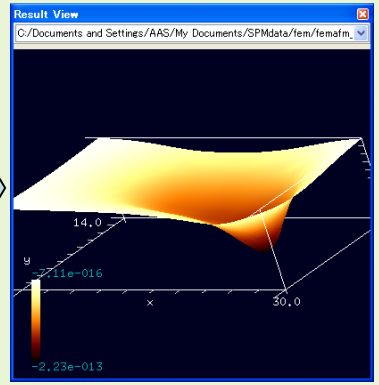








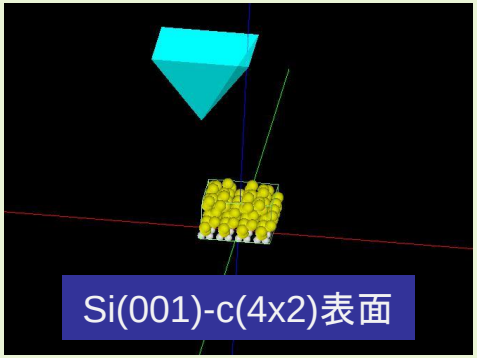


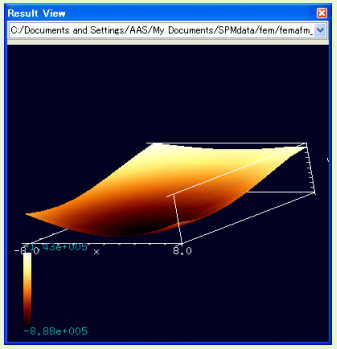


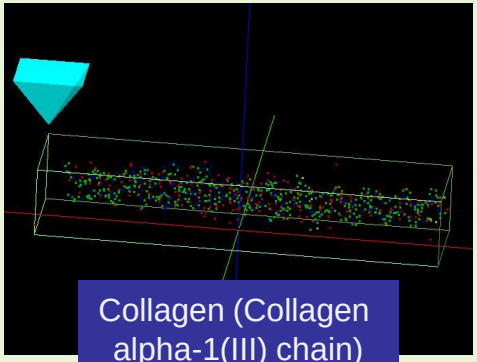
【FemAFM】周波数シフト像モード

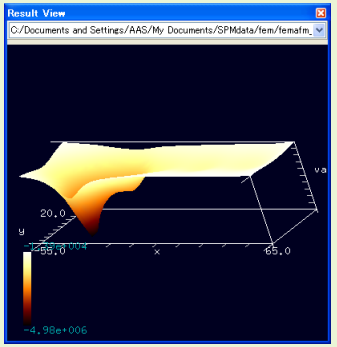
FemAFM

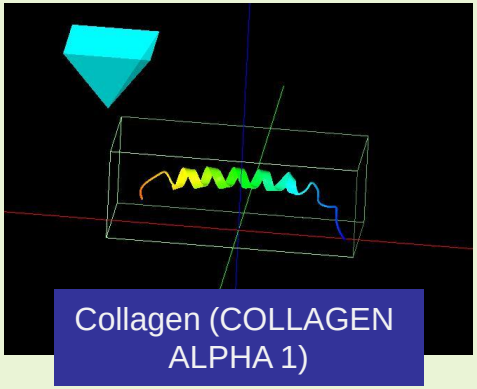
カンチレバーを外力によって一定の周波数で振動させながら、非接触で試料表面に近付け、探針-試料間の相互作用により生じる周波数シフトの分布画像を求める状況に対応しています。

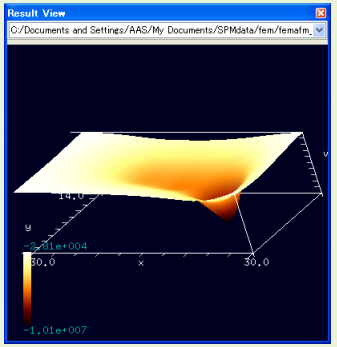






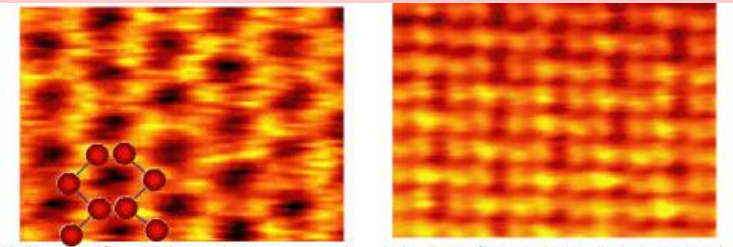






cf. Experiment

Si(001)-c(4x2)　　Si(001)-p(2x1)



(a) 弱い相互作用 (Δf=−10Hz)　(b) 強い相互作用 (Δf=−30Hz)

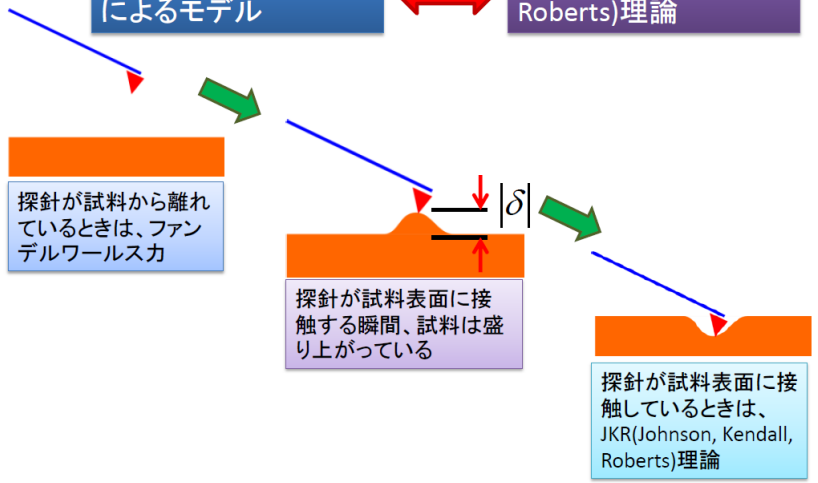
図1：Si (001) 表面のNC-AFM像 (40 Å x30 Å)

第26回表面科学講演大会(2006) 要旨集2C04
内藤 賀公ら、LT-NC-AFM によるSi(001)ダイマー構造変化の観察

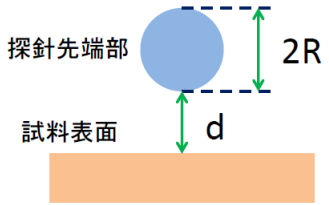
【FemAFM / LiqAFM】粘弾性接触解析の計算原理（参考）

探針-試料間の粘弾性接触を記述するモデル

ファンデルワールス力によるモデル ⟷ JKR(Johnson, Kendall, Roberts)理論



ファンデルワールス力



$$F \cong \frac{A}{12}\frac{D}{d^2}$$

ただし、$D = 2R$ ， $A = \sqrt{H_1 H_2}$

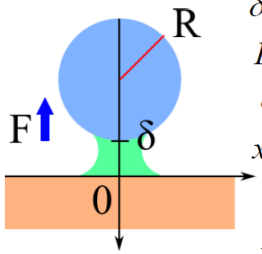
H_1 , H_2 ：Hamaker定数

探針先端部→純粋な弾性体

試料→粘弾性の性質を持たせる ➡ 表面張力の導入

➡ JKR理論を使うことにする

JKR理論



F ：二つの固体の間に働く力(上向きを正)

δ ：二つの固体の間の距離(下向きを正)

$$F = 4F_c(x^3 - x^{3/2})$$

$$\delta = \delta_0(3x^2 - 2\sqrt{x})$$

x ：二つの固体の接触面積に比例する無次元量

$$6^{-2/3} \le x \le 1$$

$$F_c = 3\pi\gamma R \quad (\ \gamma\ \text{：試料の表面張力})$$

$$\delta_0 = \frac{a_0^{\,2}}{3R} \quad , \quad a_0 = \left(\frac{9\pi\gamma R^2}{E^*}\right)^{1/3} \quad , \quad \frac{1}{E^*} = \frac{1-\sigma_1^{\,2}}{E_1} + \frac{1-\sigma_2^{\,2}}{E_2}$$

E_1 , E_2 ：ヤング率　　σ_1 , σ_2 ：ポアソン比

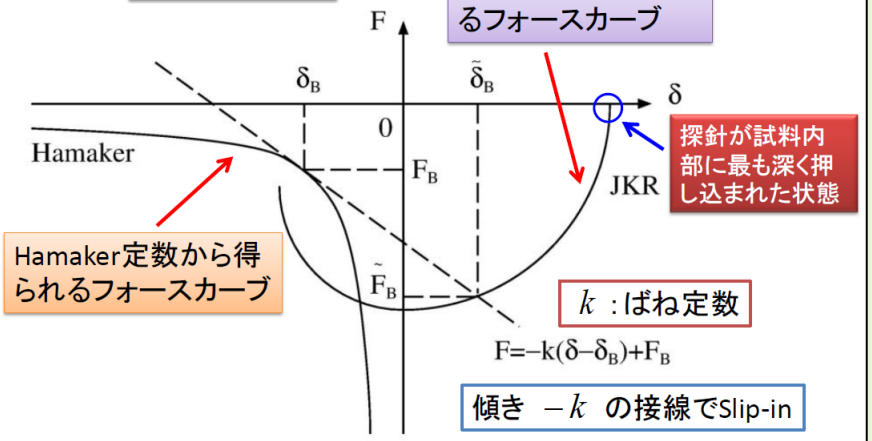
a_0 ：探針を粘弾性物質内部に押し込んだ際、凝着力と弾性反発力が相殺して、探針の試料から受ける力がゼロになる際の、接触面積

$a = a_0 x$ ：接触面積

ファンデルワールス力によるモデルとJKR理論の間の転移

Slip-inとSlip-out

JKR理論から得られるフォースカーブ

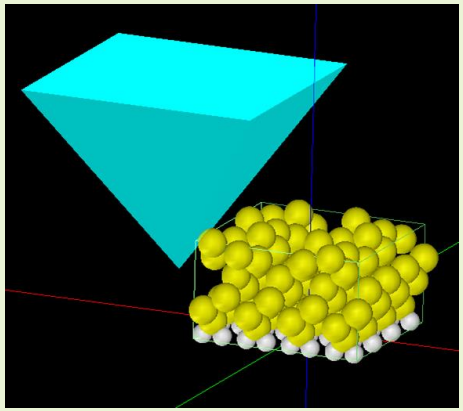


Hamakerモデルのフォースカーブから、JKR理論のフォースカーブへSlip-in

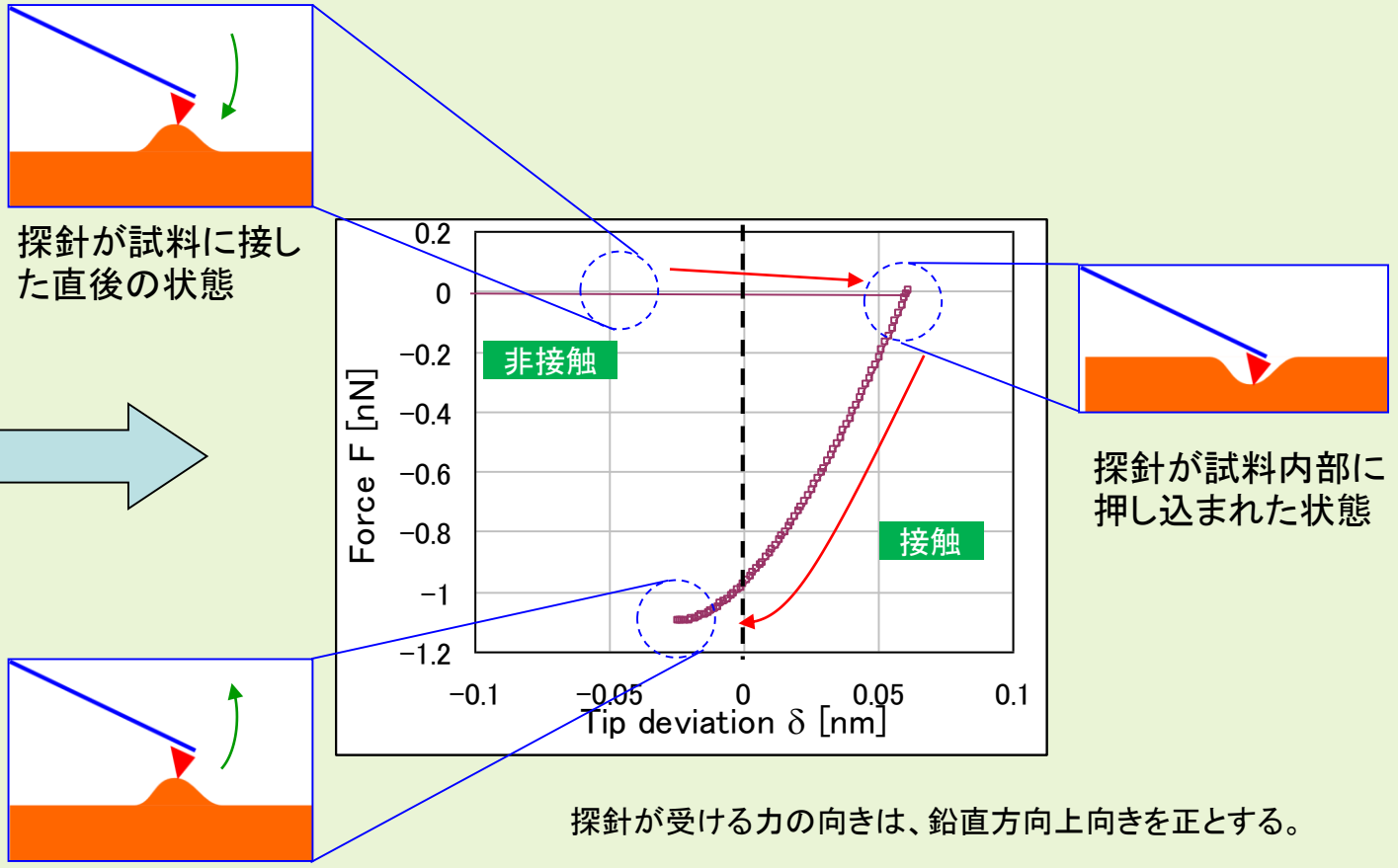
【FemAFM】粘弾性接触解析

FemAFM　粘弾性接触解析モード

外力によってカンチレバーを一定の周波数で振動させる。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する。



探針: ピラミッド型のSiO_2
試料: Si(001)

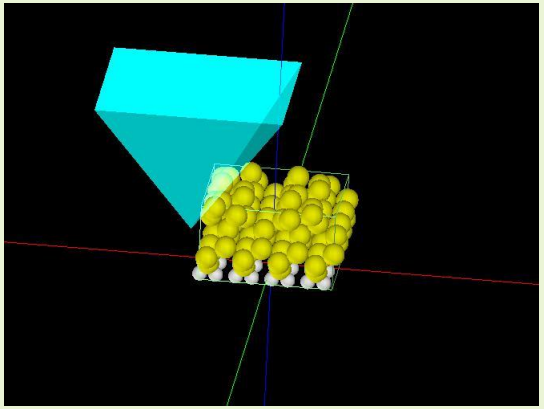


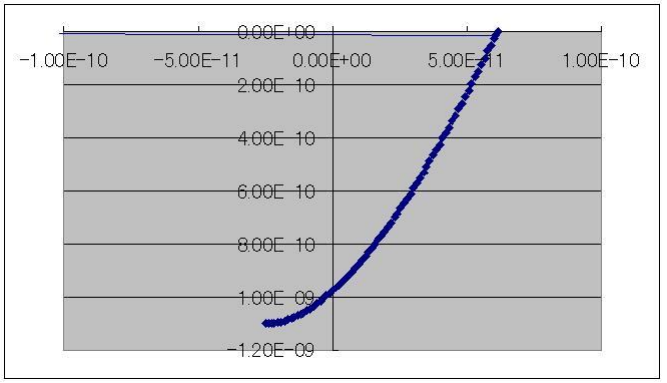
探針が受ける力の向きは、鉛直方向上向きを正とする。

【FemAFM】粘弾性接触解析モード

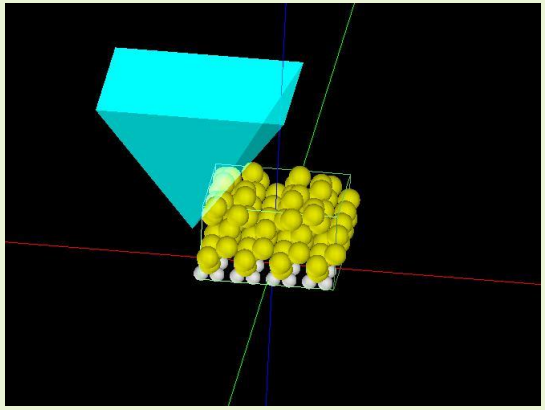
FemAFM

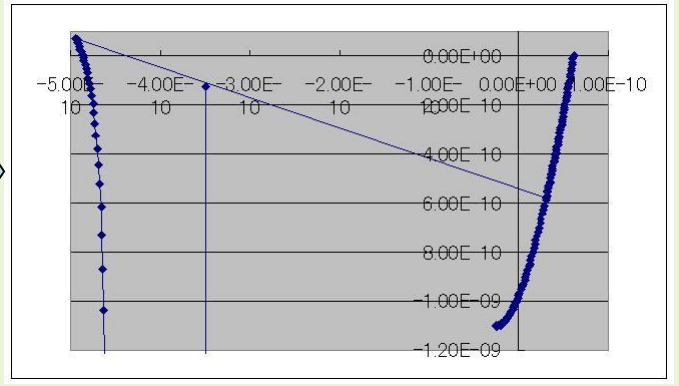
試料表面の一点上において、外力によってカンチレバーを一定の周波数で振動させ、探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれてから、引き戻されて離脱する直前までの様子を再現します。





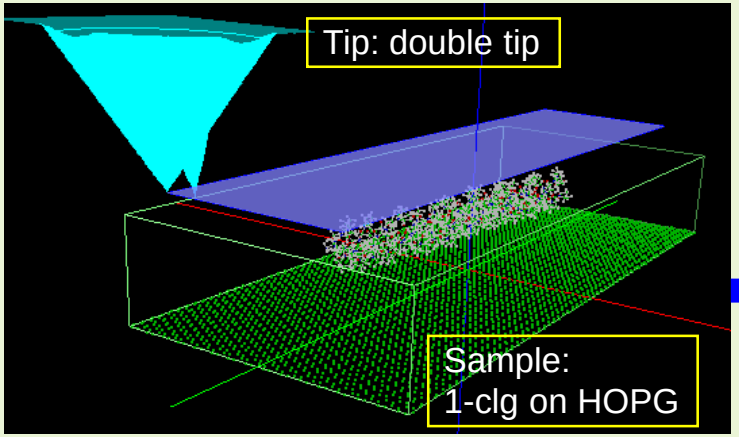
粘弾性のあるSi(001)表面に探針が凝着する際の、探針の垂直方向の変位、および、探針の感じる外力の時間変化をシミュレーションによって求めたもの。(ばね定数が小さい場合)

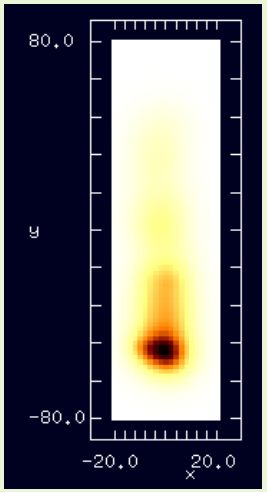


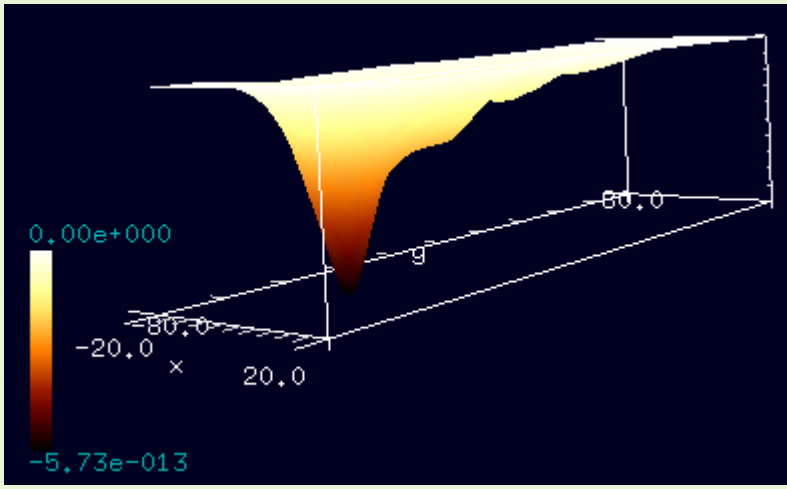


粘弾性のあるSi(001)表面に探針が凝着する際の、探針の垂直方向の変位、および、探針の感じる外力の時間変化をシミュレーションによって求めたもの。(ばね定数が大きい場合)

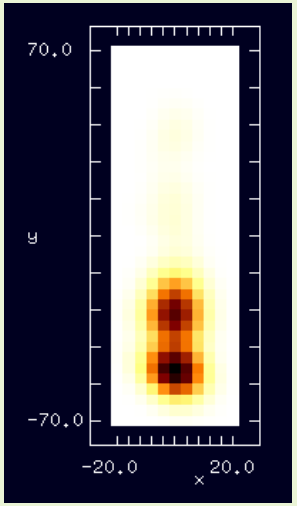
【FemAFM】double-tipを使った、HOPG基板上の1-clgのAFM像、周波数シフトAFM像シミュレーション

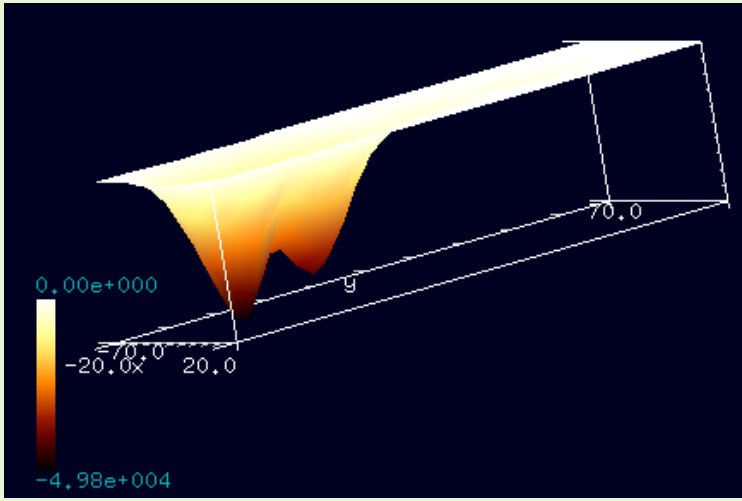






Constant height (static) mode

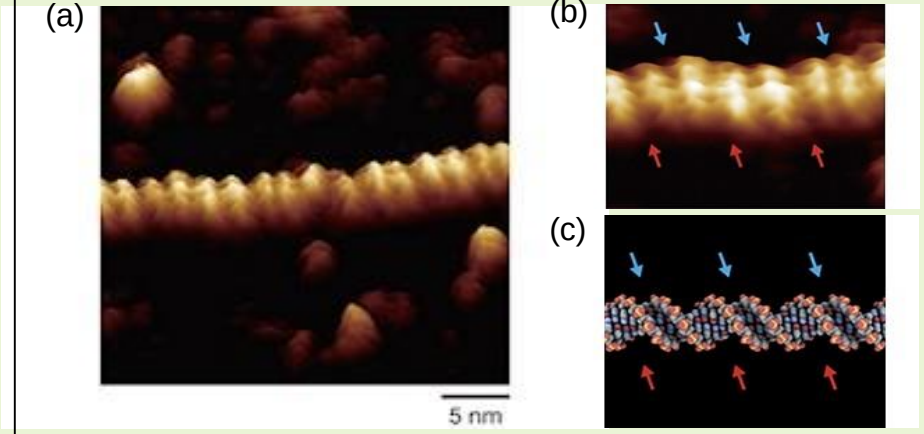




Frequency shift mode

【FemAFM】DNAのAFM像、周波数シフトAFM像シミュレーション

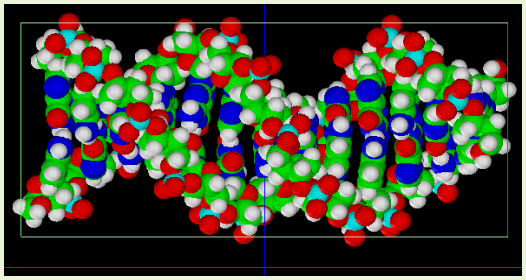
実測画像



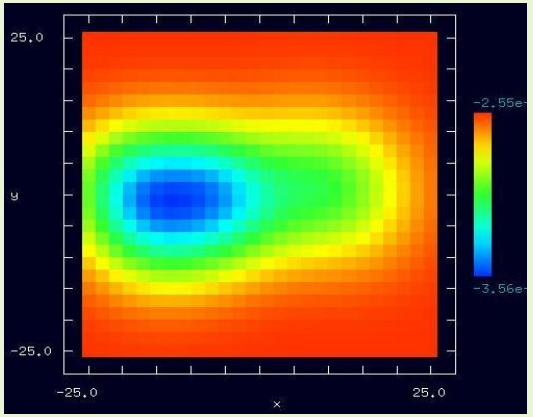
周波数変調原子間力顕微鏡（FM-AFM）で捉えられた二重らせんDNA分子（pUC18 プラスミドDNA）の（a）水溶液中における分子像。
（b）部分拡大像、（C）構造モデル。

Ido Shinichiro, Kimura Kenjiro, Oyabu Noriaki, Kobayashi Kei, Tsukada Masaru, Matsushige Kazumi, Yamada Hirofumi.
Beyond the Helix Pitch: Direct Visualization of Native DNA in Aqueous Solution.
ACS Nano (2013)

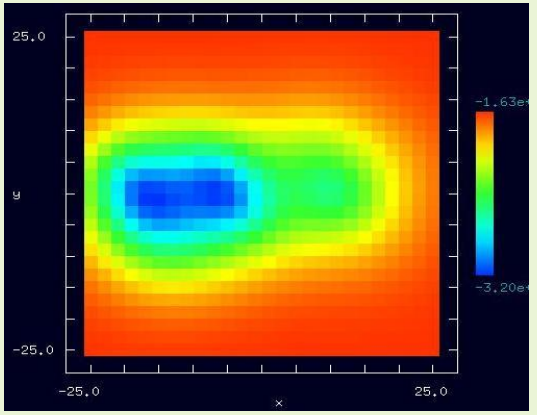
シミュレーション結果



シミュレーションに用いたモデル（横から見た図）



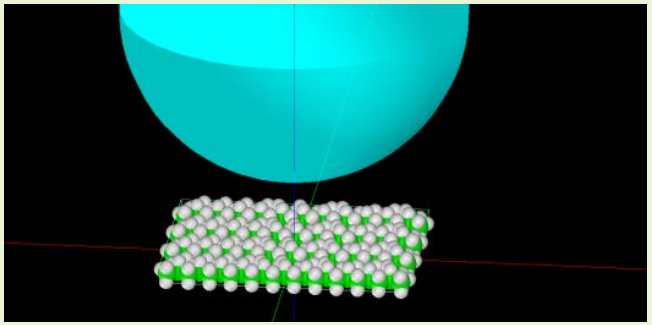
高さ一定モードによるAFM像のシミュレーション結果



周波数シフトAFM像のシミュレーション結果

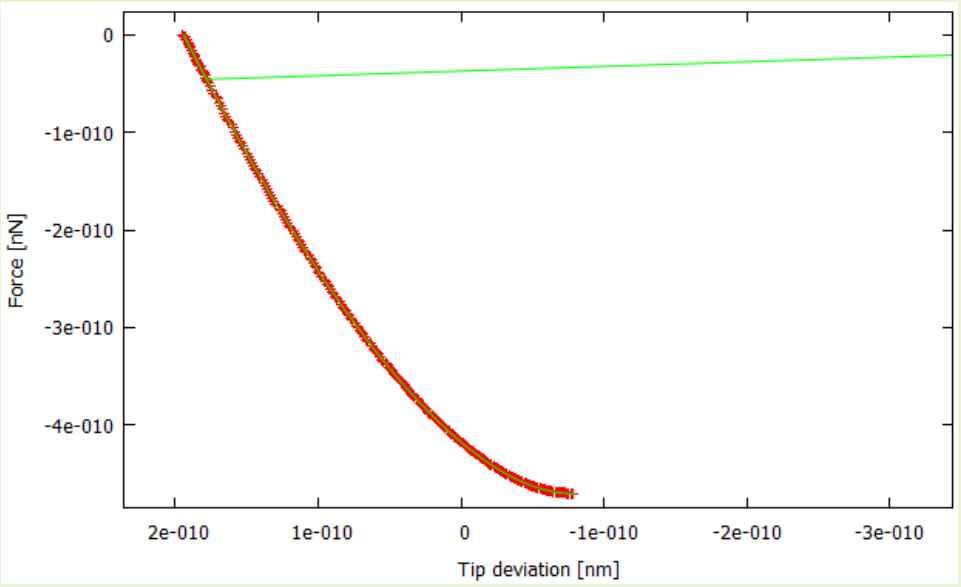
- 周波数シフトAFM像では、二重螺旋の狭い間隔と広い間隔をおおよそシミュレートできた。

【FemAFM】ポリプロピレンの粘弾性接触解析

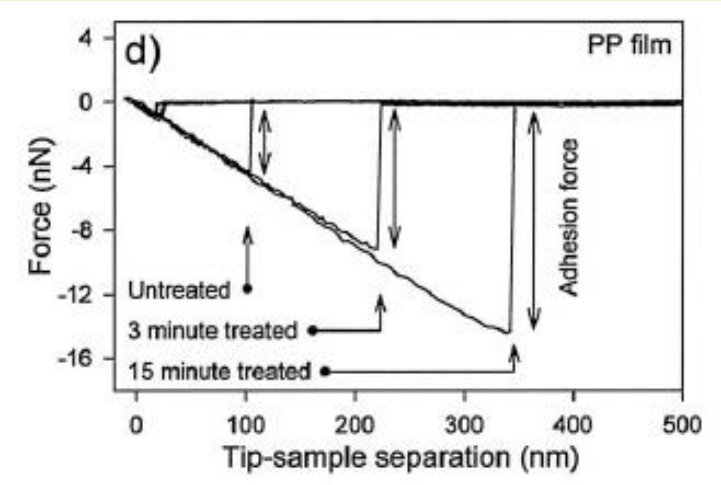


ポリプロピレン試料
窒化シリコン探針

FEMソルバー
フォースカーブ
粘弾性解析



実験例



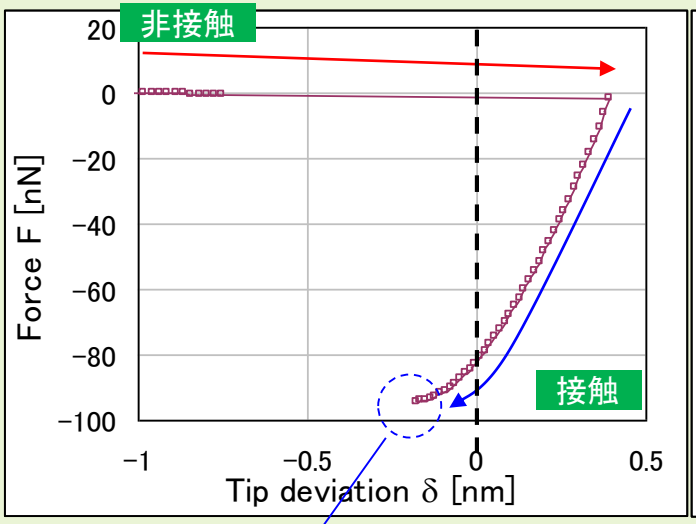
Appl. Surf. Sci., 144-145, 627 (1999)

【LiqAFM】粘弾性接触解析

LiqAFM　粘弾性接触解析

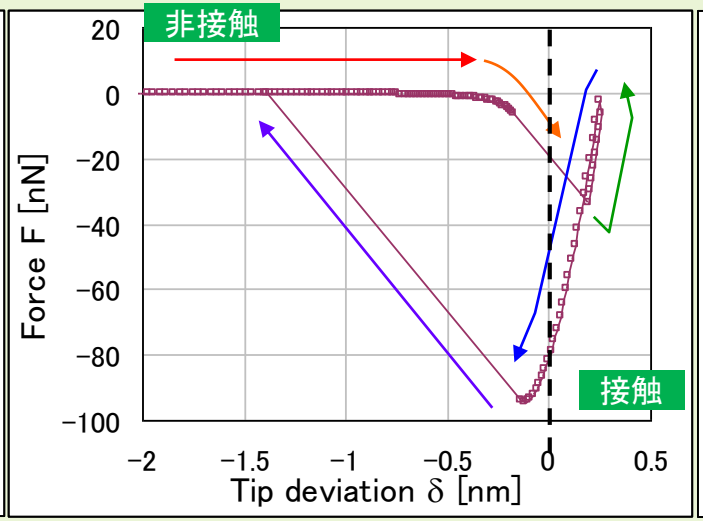
粘弾性を持つ試料と探針の接触の様子をシミュレーションによって調べ、フォースカーブ等を求めることができる。

真空中、カンチレバーのばね定数 小

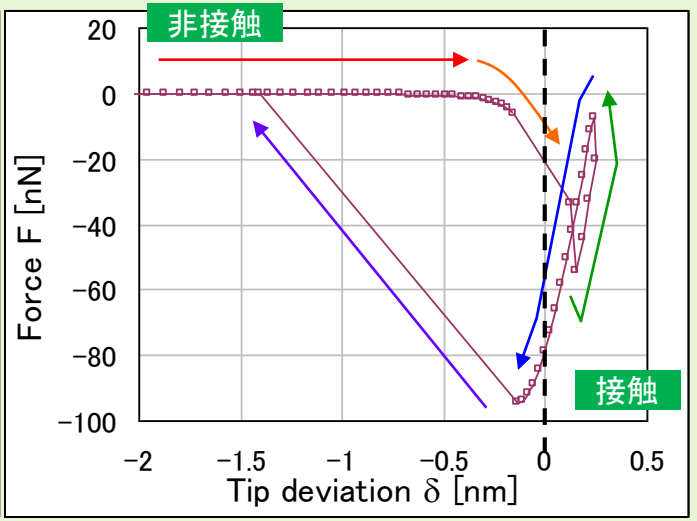


ばね定数が小さ過ぎるため、凝着力に逆らえず、試料から探針が離れない。

真空中、カンチレバーのばね定数 大



液体中、カンチレバーのばね定数 大



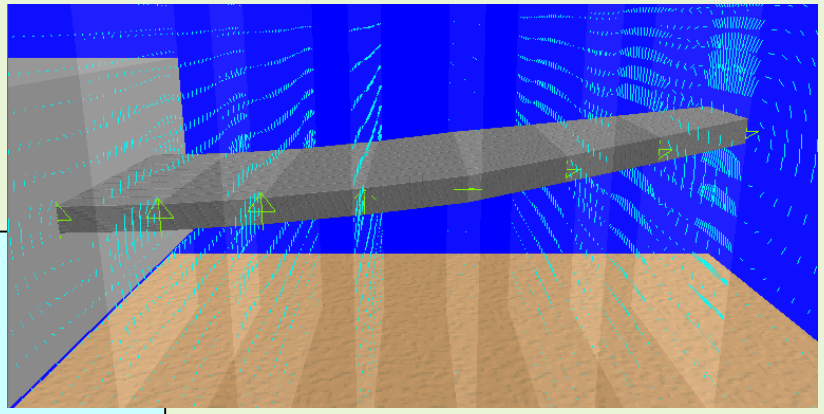
1. 探針が試料表面に近づく。
2. 試料表面から上部に突き出た部分で接触し、試料の内部に押し込まれる。
3. 凝着力がゼロになる位置まで押し込まれる。
4. 試料から離れる方向に引き戻される。
5. 試料から離脱する。

探針が試料に接触する過程で、探針の動きが流体の影響を受けている。

【LiqAFM】液中動的AFMの理論とシミュレーション

LiqAFM

AFM理論の課題



非線形効果
多モード振動励起

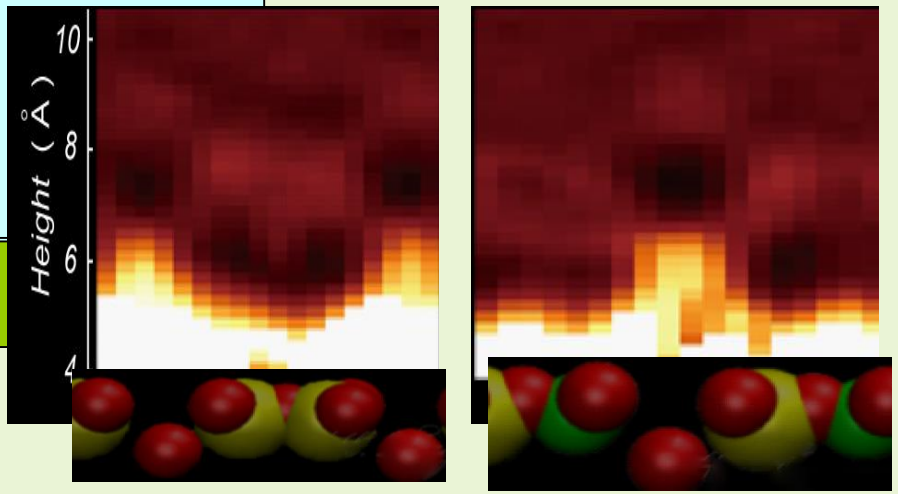
液中のてこ振動

凝着力
電気2重層

液体分子が
媒介する力
水の構造化

ソフトマテリアル
粘弾性応答の効果

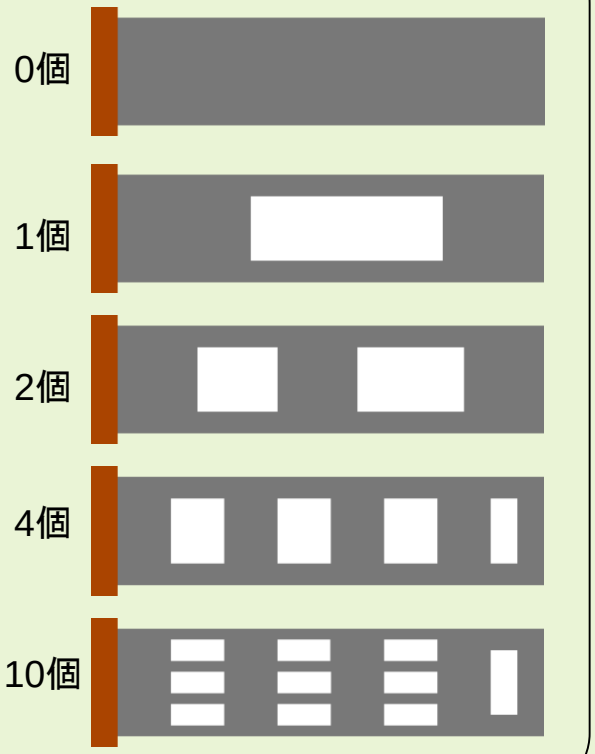
マイカ上の水のAFM像
水の構造化を示す



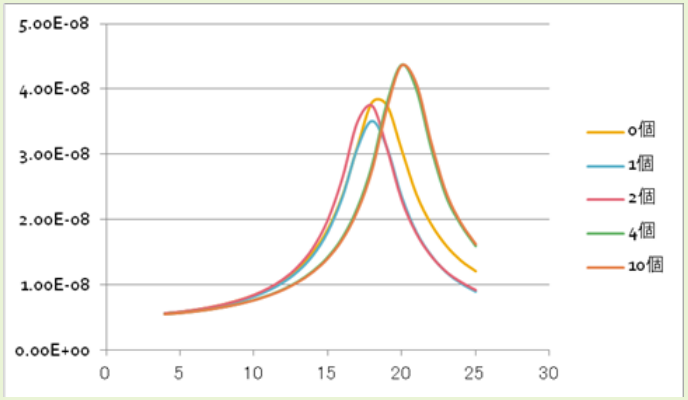
【LiqAFM】液中カンチレバーの固有振動解析

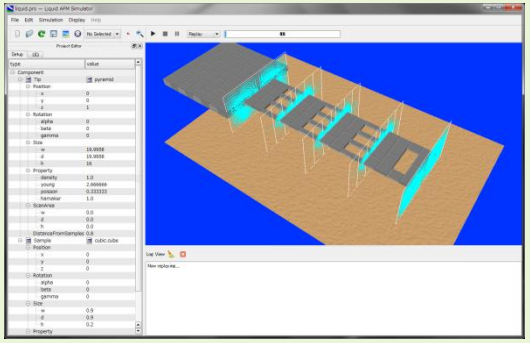
LiqAFM　液中平板状カンチレバーの振動

カンチレバーに穴を開ける



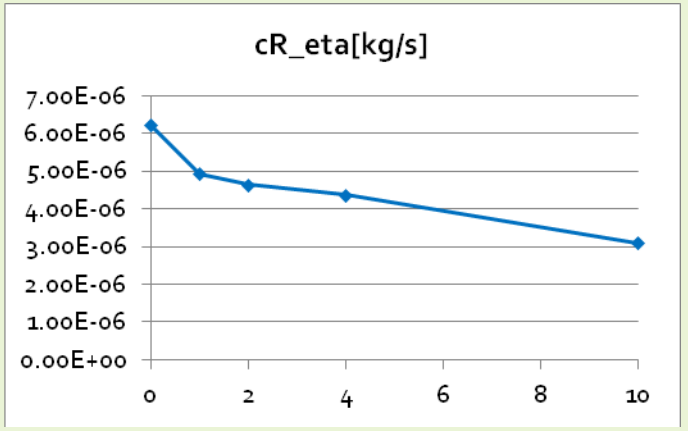
カンチレバーを流体中で強制振動させる。強制振動周波数を変化させて、カンチレバーの振幅の収束値を求める。





シミュレート中の概観

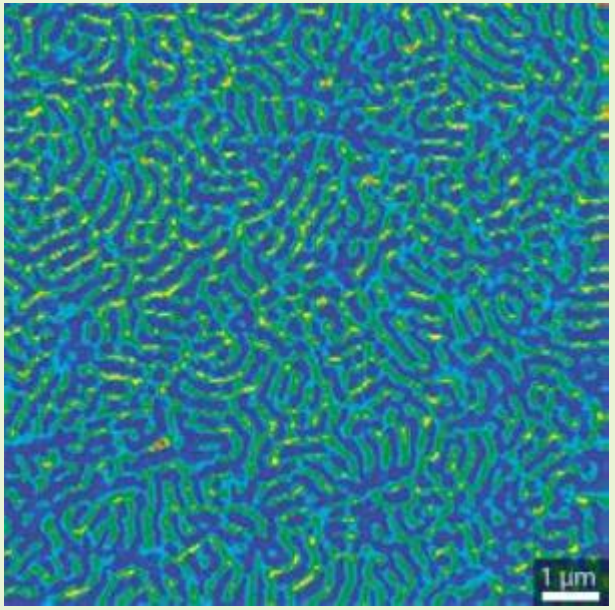
粘性抵抗力係数を求める。



孔の個数が増えると、粘性抵抗力係数が減少することが理解できる。

【LiqAFM】ソフトマテリアル系材料への展望

- ナノバイオ関連分野において、AFMによる実験解析が増加傾向
- DNAなどの生体物質のAFM実験画像を時系列的に測定
- 高分子の粘弾性をAFM測定など



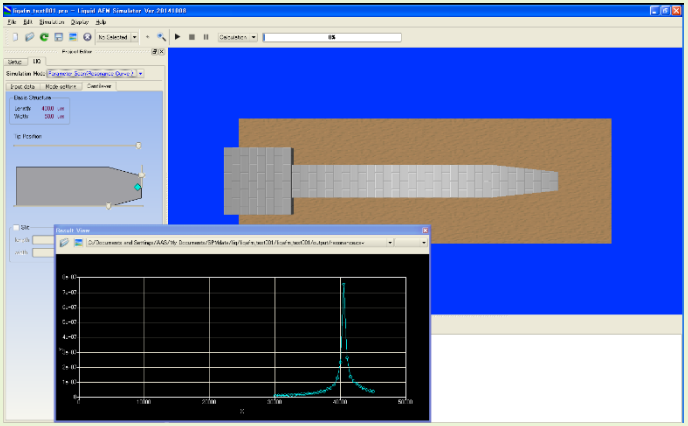
高分子薄膜をAFM観察し、粘弾性を可視化した図
D. Wang et al., Macromolecules 44, 8693–8697 (2011).

粘弾性接触解析を備えた弊社のシミュレータを発展させることで、このような例をシミュレート可能にする。

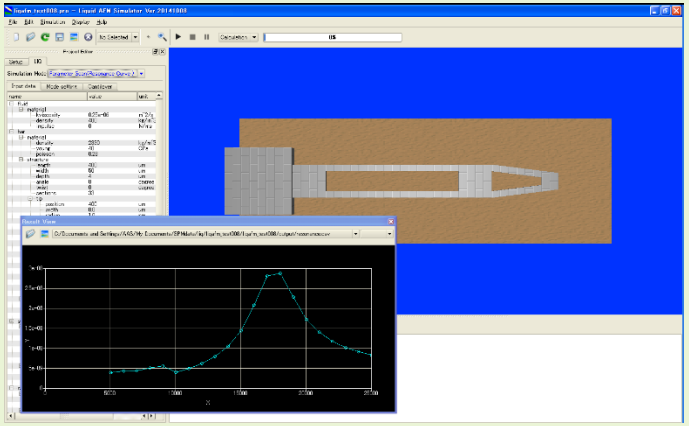
【LiqAFM】パラメータ･スキャンモード

LiqAFM

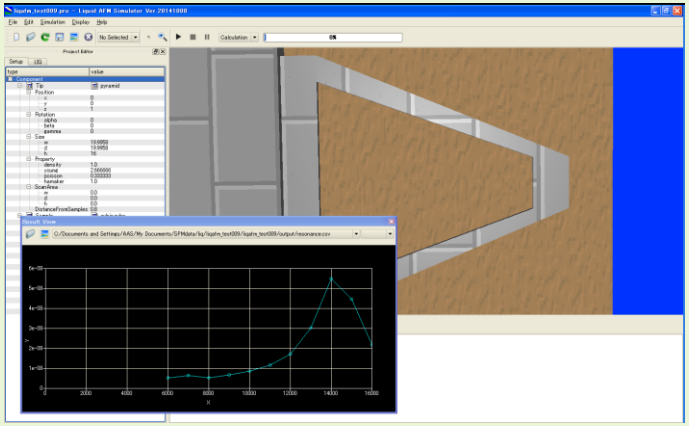
カンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を調べます。あらかじめ定められた範囲内において一定間隔で周波数を取り出し、それら各周波数でカンチレバーの根元を外力により励振させ、カンチレバーの動きの時間発展を調べます。最終的には、横軸に周波数、縦軸に対応する周波数成分の振幅とした共鳴曲線を求めます。この曲線から、共振周波数を推定できます。



真空中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の無い短冊形状としています。



液体中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の2個開いた短冊形状としています。

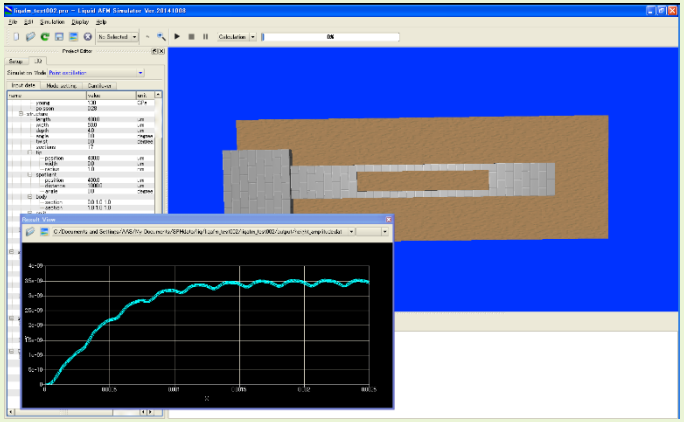


液体中で振動する三角形状のカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。

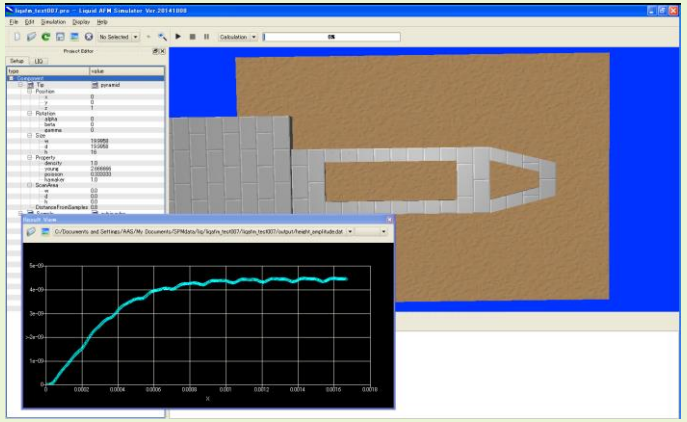
【LiqAFM】非粘弾性試料解析モード

LiqAFM

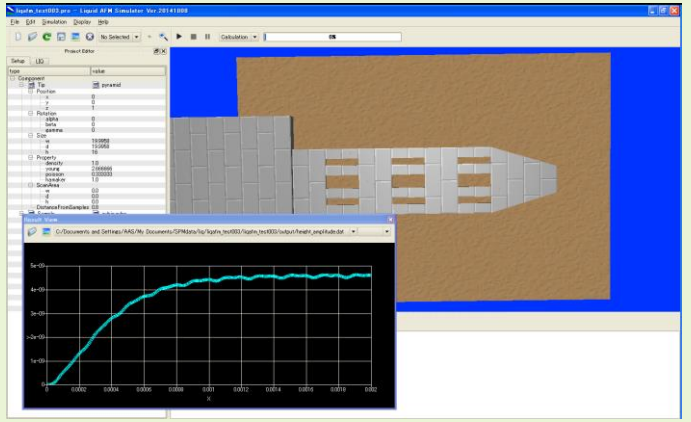
試料表面上の一点において、カンチレバーの根元を外力によって一定の周波数で振動させ、その時間発展を計算します。この際、試料は粘弾性の性質を持っておらず、探針が試料に接触しても凝着力が生じないと仮定します。



液体中で振動するカンチレバーの、振幅の時間変化を調べます。カンチレバーは、短冊形状で1個の孔が開いているとしています。液体中でカンチレバーの根元を外部から強制的に励振させ、その際の、励振周波数成分の振幅の時間変化を調べます。探針と試料表面の間の距離は十分大きく取られていて、探針は試料に接触しないように設定されています。



液体中で振動するカンチレバーの、振幅の時間変化を調べます。カンチレバーは、短冊形状で2個の孔が開いているとしています。液体中でカンチレバーの根元を外部から強制的に励振させ、その際の、励振周波数成分の振幅の時間変化を調べます。探針と試料表面の間の距離は十分大きく取られていて、探針は試料に接触しないように設定されています。



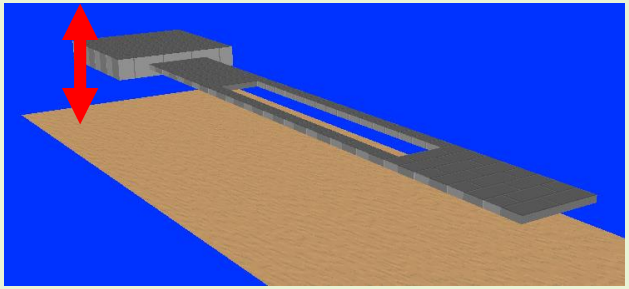
液体中で振動するカンチレバーの、振幅の時間変化を調べます。カンチレバーは、短冊形状で多数の孔が開いているとしています。液体中でカンチレバーの根元を外部から強制的に励振させ、その際の、励振周波数成分の振幅の時間変化を調べます。探針と試料表面の間の距離は十分大きく取られていて、探針は試料に接触しないように設定されています。

【LiqAFM】溶媒を変えたときのカンチレバー振動の比較

LiqAFM

溶媒として水、エタノール、n-ヘキサデカンを選び、カンチレバーの振動の条件を揃えてシミュレートを行った。

1つ穴の空いたカンチレバー



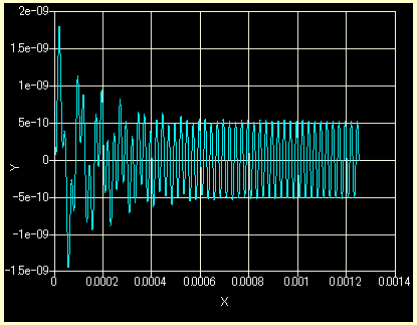
Frequency: 40 kHz
Amplitude: 1 nm
50 cycles
4096 steps/cycle

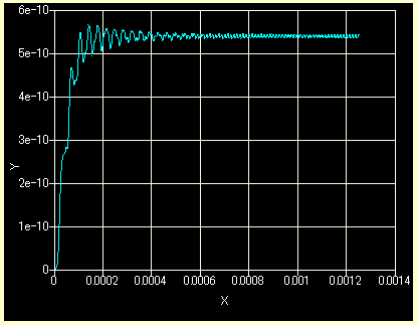
振動開始時はカンチレバー先端の動きは不規則である。振動を繰り返すにつれて、次第に一定の振動に収束していく様子が分かる。

動粘性係数は、水＜エタノール＜n-ヘキサデカンの順に大きくなる。特に動粘性係数が小さいほどカンチレバーの振動の収束が早く、直感的な予想とも合致する。このように、溶媒の違いがカンチレバーの振動に与える影響をシミュレートすることができる。

Water

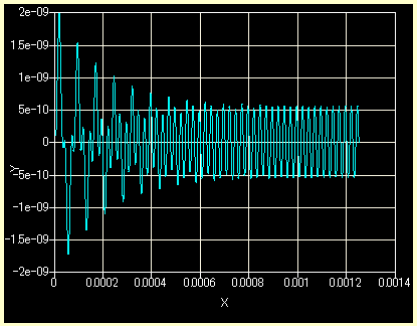
Kinematic viscosity:
0.891 x 10^{-6} m^2/s
Density:
997.0 kg/m^3

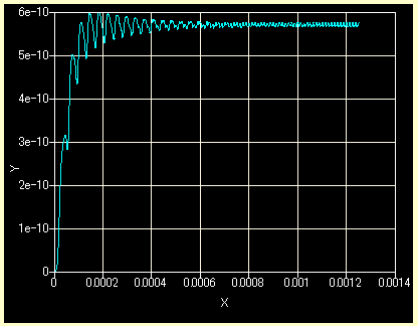




Ethanol

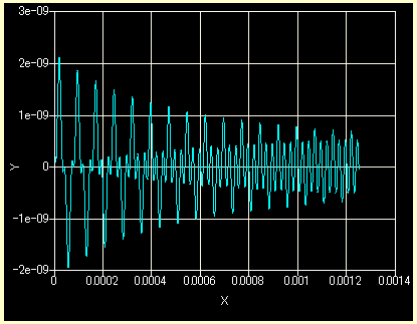
Kinematic viscosity:
1.396 x 10^{-6} m^2/s
Density:
785.0 kg/m^3

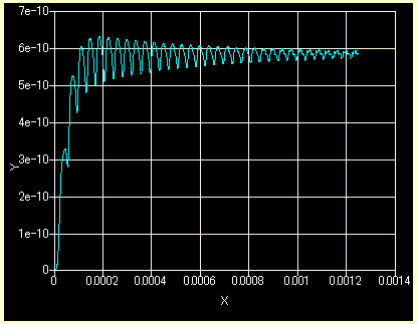




n-hexadecane

Kinematic viscosity:
4.34 x 10^{-6} m^2/s
Density:
769.99 kg/m^3





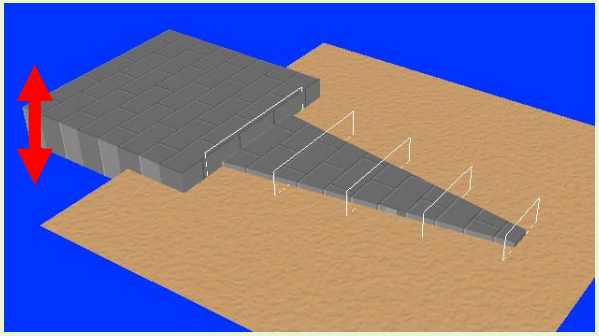
Head height vs. time　　Amplitude vs. time

【LiqAFM】溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較

LiqAFM

溶媒として水、エタノール、n-ヘキサデカンを選び、カンチレバーの振動の条件を揃えて粘弾性解析のシミュレートを行った。

先端に探針を取り付けたカンチレバー



Condition of the cantilever

Length: 400 μm
Width: 150 to 30 μm
Thickness: 15 μm
Frequency: 40 kHz
Amplitude: 10 nm
2048 steps/cycle

動粘性係数は、水＜エタノール＜n-ヘキサデカンの順に大きくなる。

今回のシミュレートでは、粘弾性解析によって得られたフォースカーブには溶媒による差異がほとんど見られなかった。ただしカンチレバー振動の時間変化にははっきりと違いが現れている。

Water

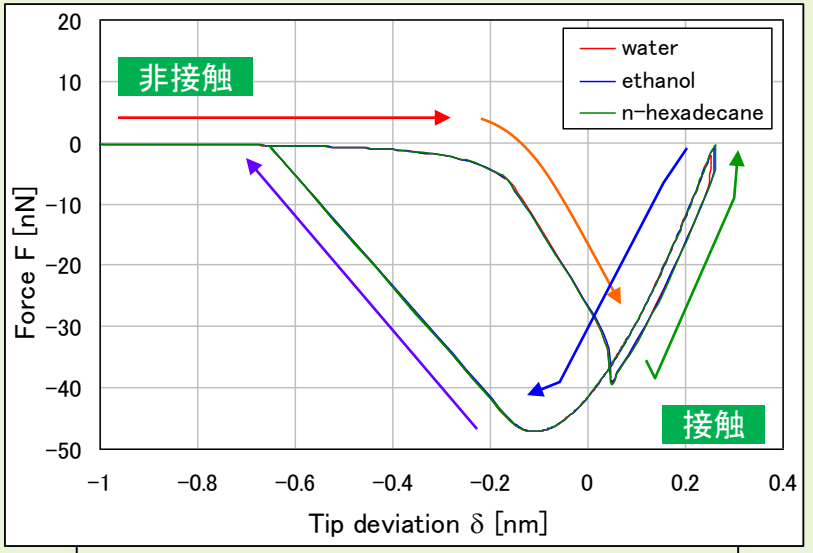
Kinematic viscosity:
0.891×10^{-6} m^2/s
Density:
997.0 kg/m^3

Ethanol

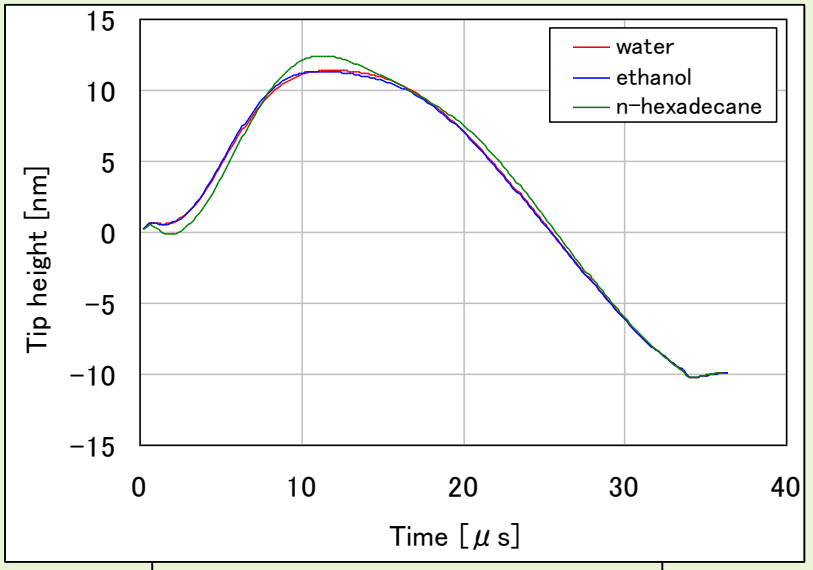
Kinematic viscosity:
1.396×10^{-6} m^2/s
Density:
785.0 kg/m^3

n-hexadecane

Kinematic viscosity:
4.34×10^{-6} m^2/s
Density:
769.99 kg/m^3



Force to the tip vs. tip deviation

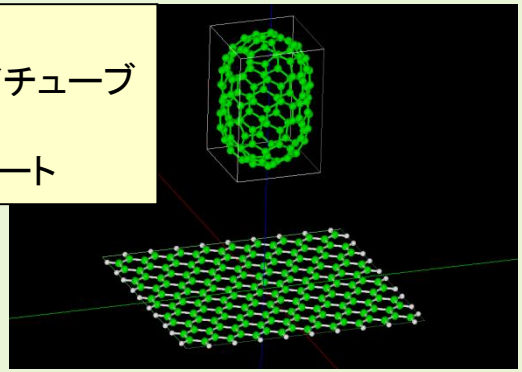


Head height vs. time

【CG】真空中／液中の系のエネルギーカーブおよびフォースカーブ

CG　CG-RISM

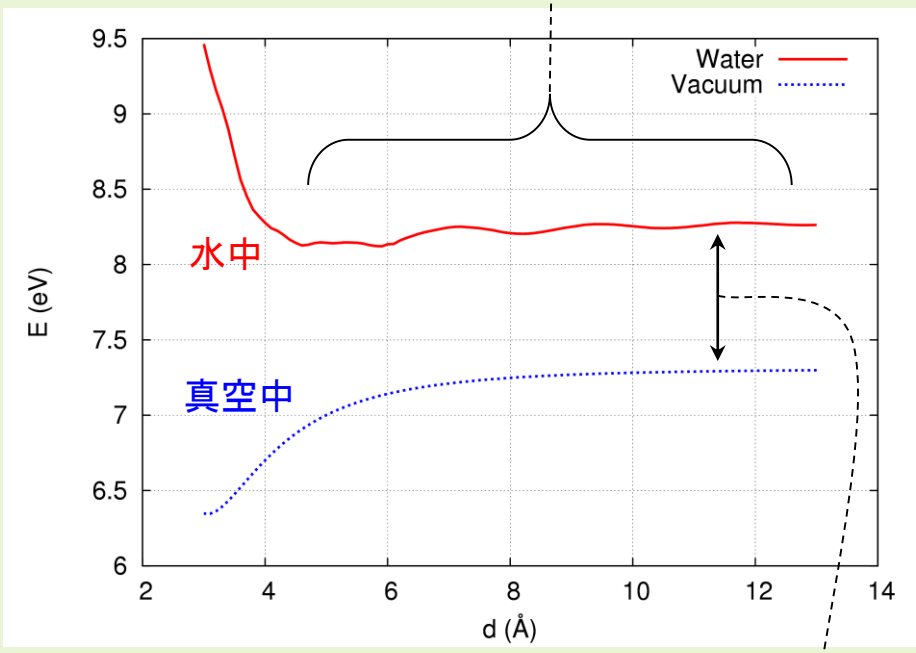
探針：
　カーボンナノチューブ
試料：
　グラフェンシート



系のエネルギー

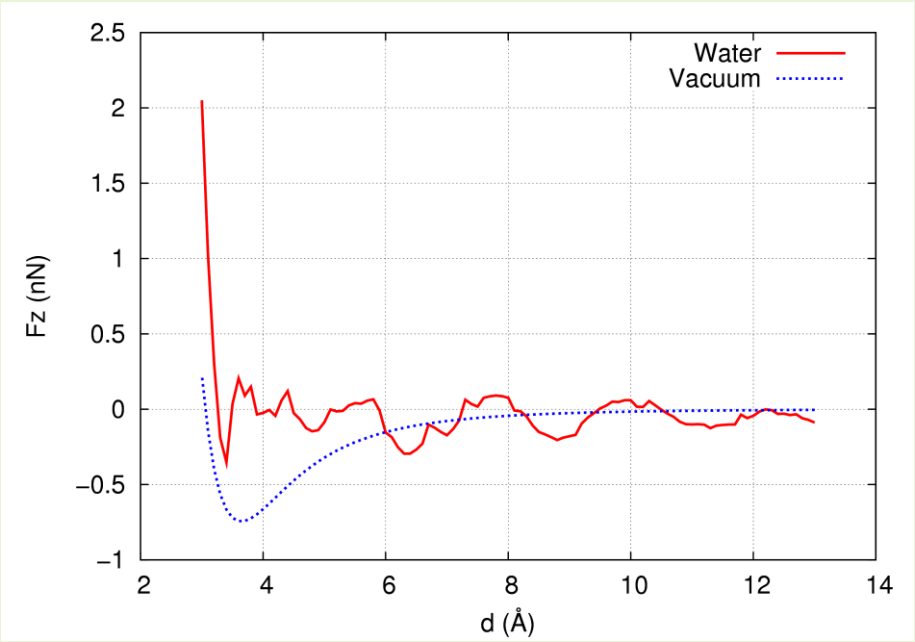
探針ー試料間の距離 d を変化させ、
系のエネルギーを算出

水和構造による振動的振舞い



水中環境によるオフセット

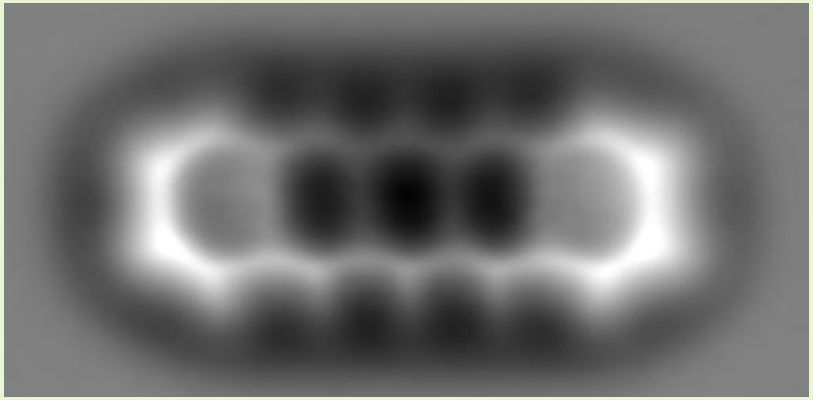
フォースカーブ



（水中計算側（赤線）は単純な数値微分）

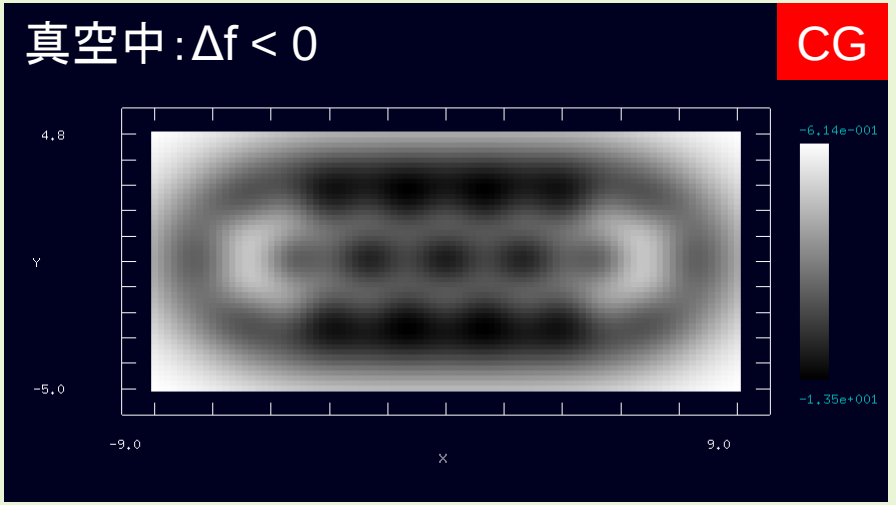
【CG】ペンタセンのAFM（周波数シフト像）観察とシミュレーション

周波数シフト像の実験結果

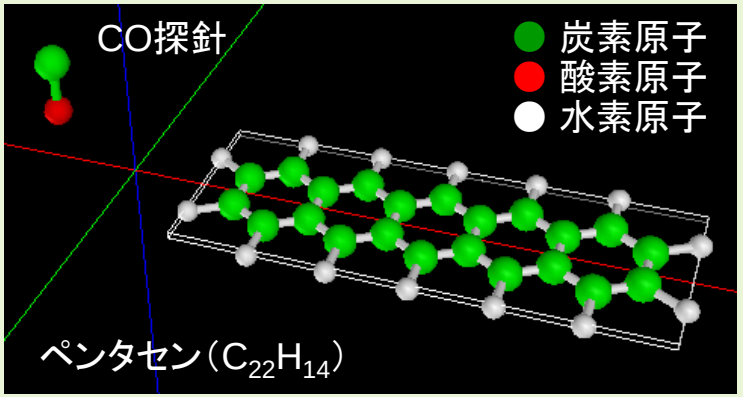


L. Gross *et al.*, Science **325**, 1110-1114 (2009).

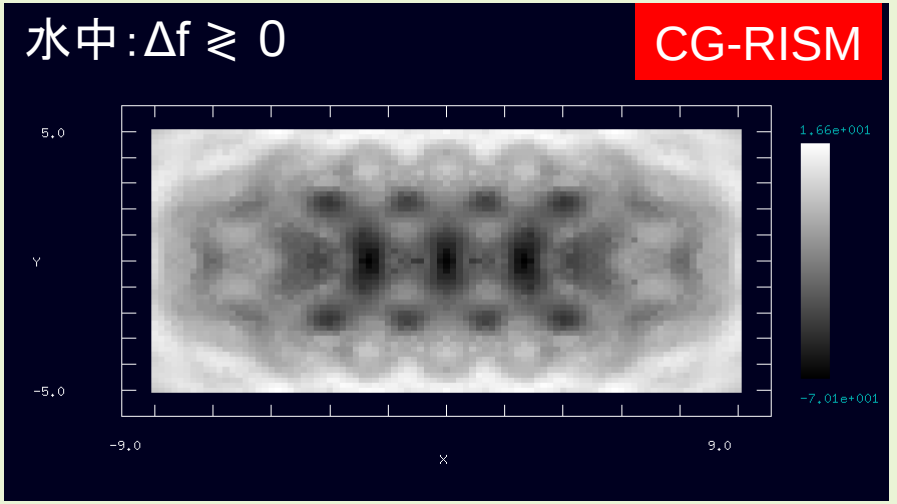
周波数シフト像のシミュレーション



Good agreement



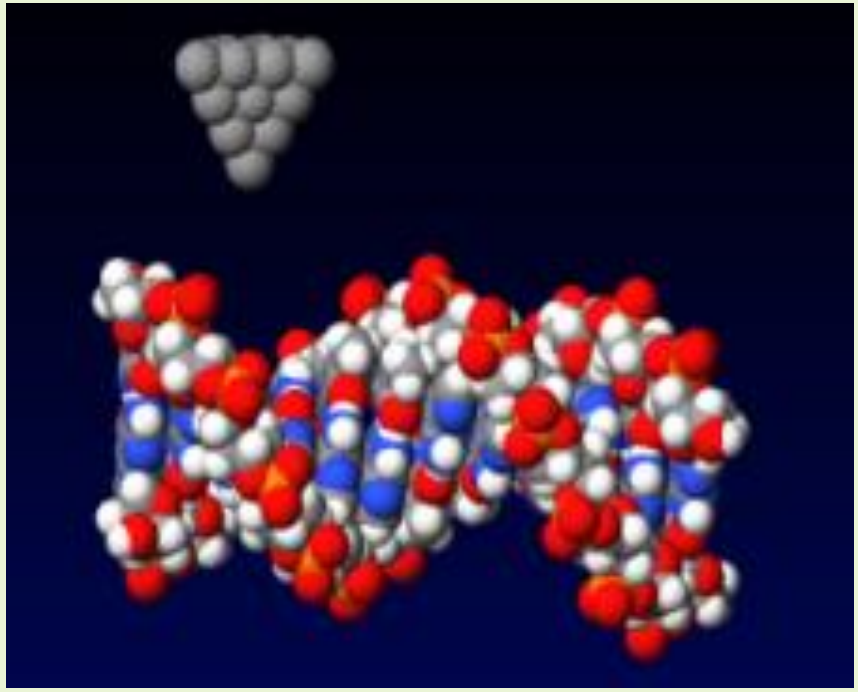
水中のシミュレートも可能



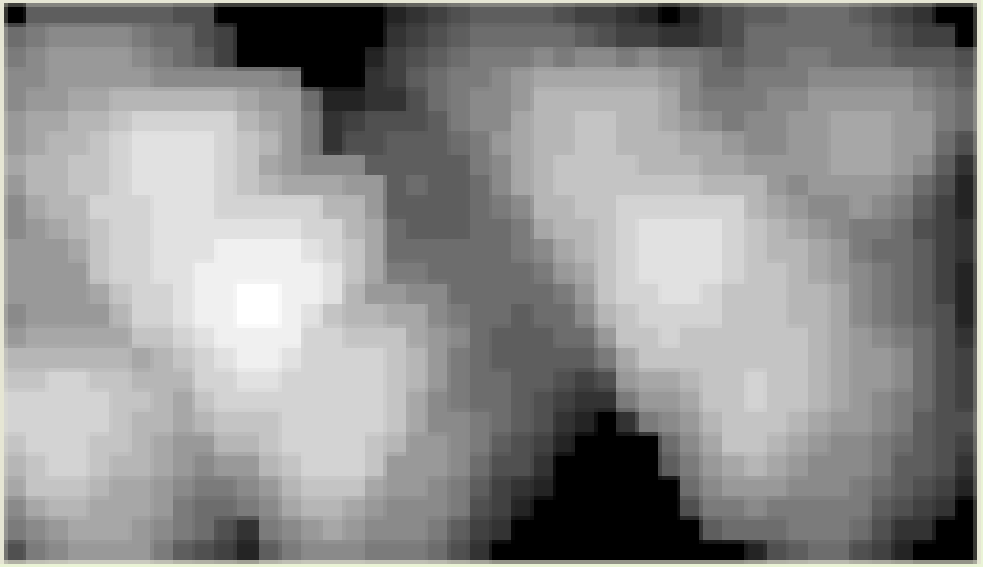
【CG】DNAのNC-AFMシミュレーション

Example of NC-AFM topography image

DNA model

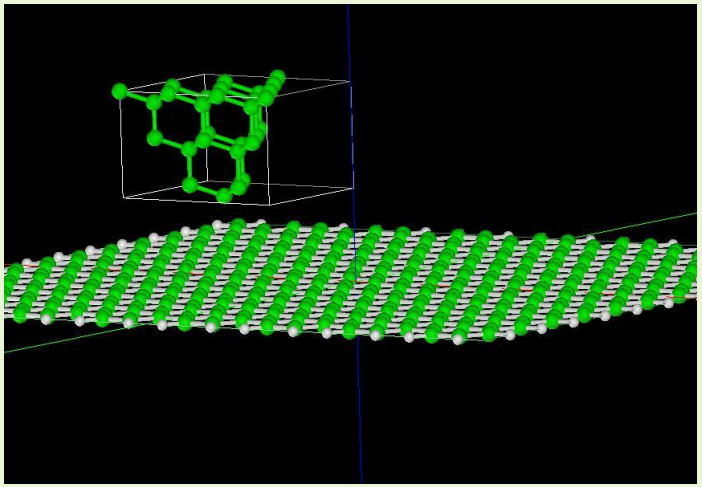


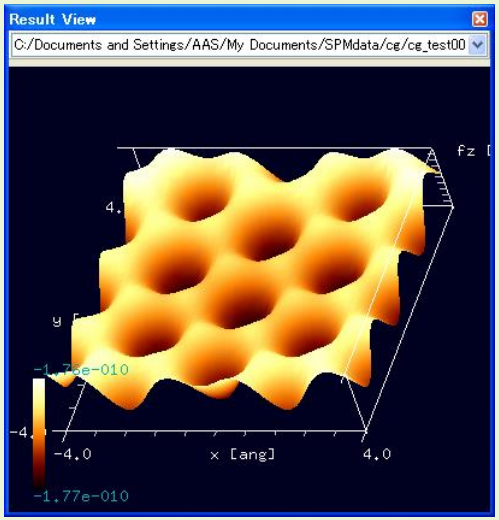
Simulation result



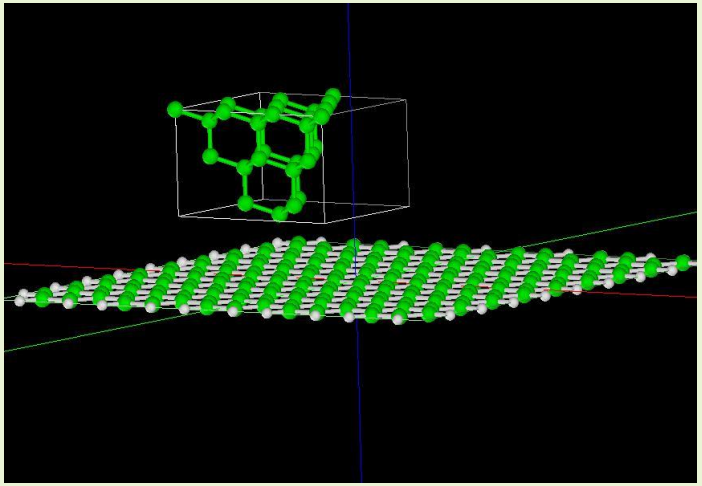
【CG】高さ一定モード

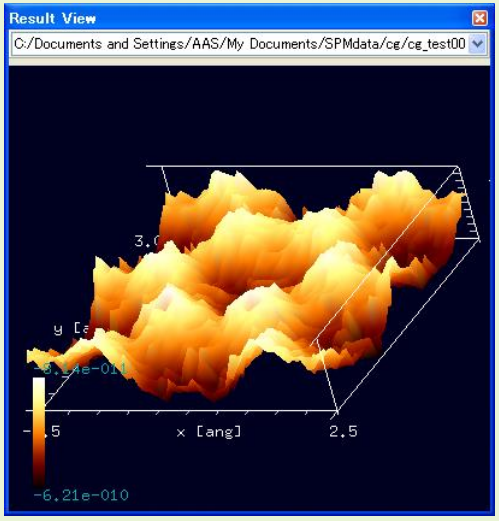
CG　CG-RISM　探針を高さ一定で平面上を走査し、探針に作用する力を計算します。





ダイヤモンド探針による、グラフェンシートの高さ一定モード真空中AFMシミュレーション



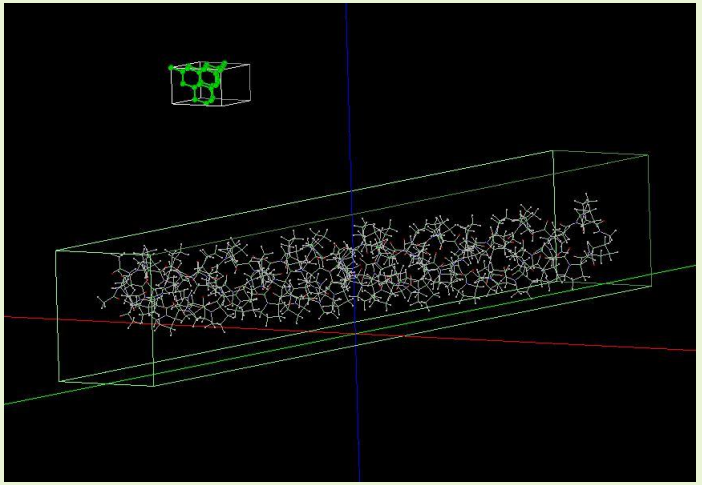


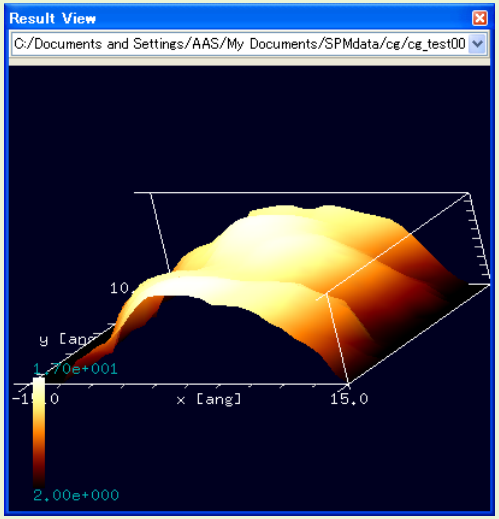
ダイヤモンド探針による、グラフェンシートの高さ一定モード水中AFMシミュレーション

【CG】カー定モード

CG

平面上の各位置において、探針に作用する力が設定した値と近くなる探針高さを求めます。（水中計算は対応していません。）

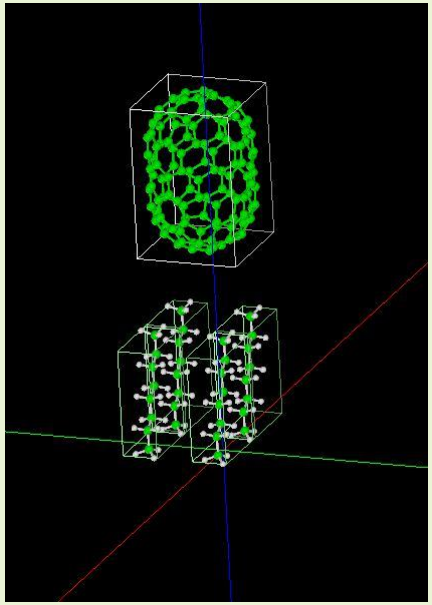


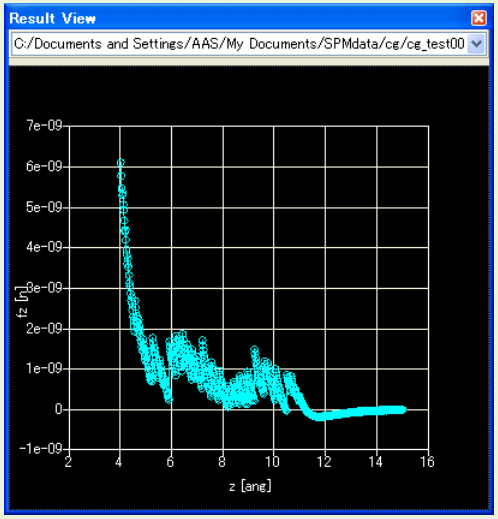


ダイヤモンド探針による、コラーゲン鎖のカー定モードAFM像シミュレーション

【CG】フォースカーブ測定モード

CG　CG-RISM　あるxy位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します。



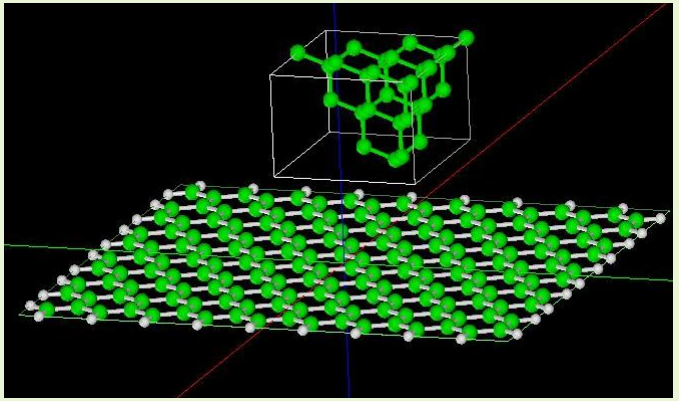


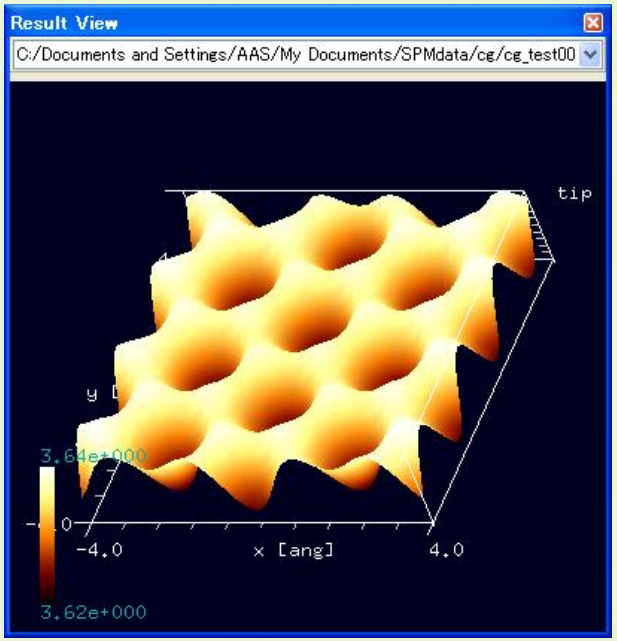
カーボンナノチューブ探針による、4つのオクタン分子鎖の構造最適化AFMフォースカーブシミュレーション
この例では試料構造の変形を考慮に入れた計算を行います。

【CG】力最小モード

CG 平面上の各位置において、探針に作用する力の値が負の極小になる探針高さを求めます。（水中計算は対応していません。）

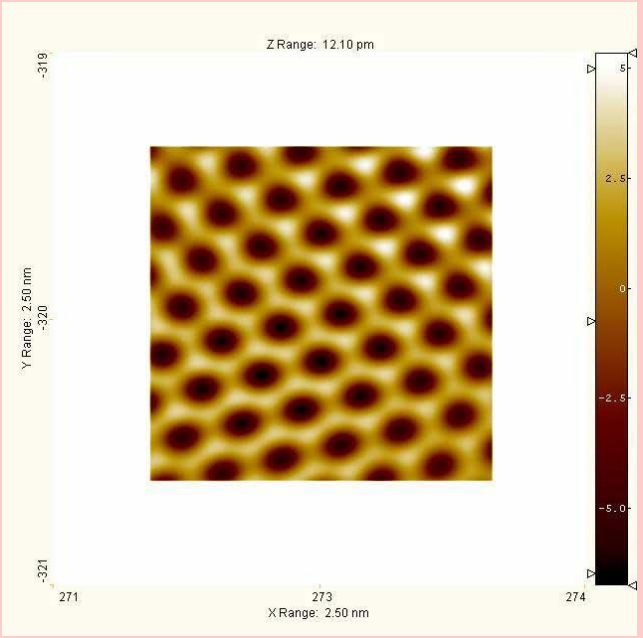
ダイヤモンド探針による、グラフェンシートの
力最小モードAFMシミュレーション





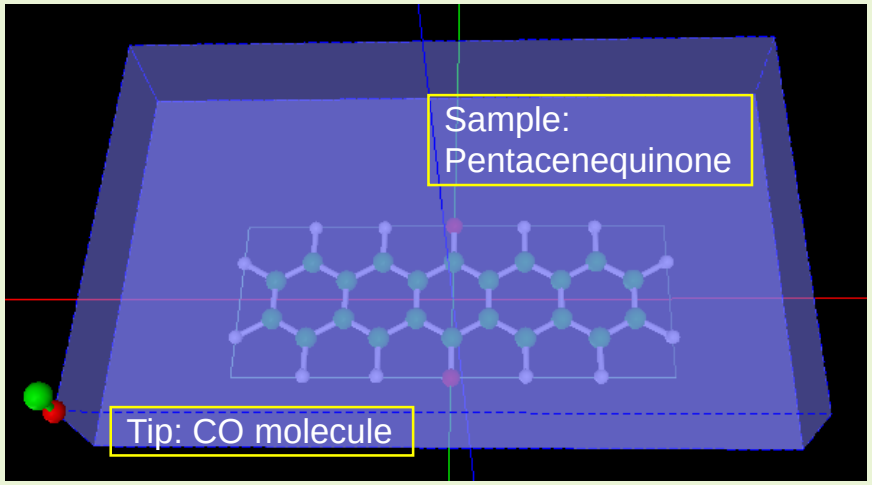
cf. Experiment

Highly oriented pyrolitic graphite
AFM contact mode.

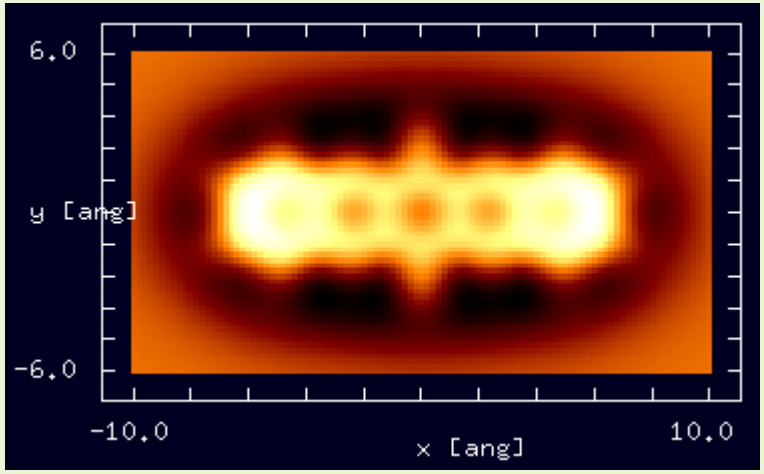


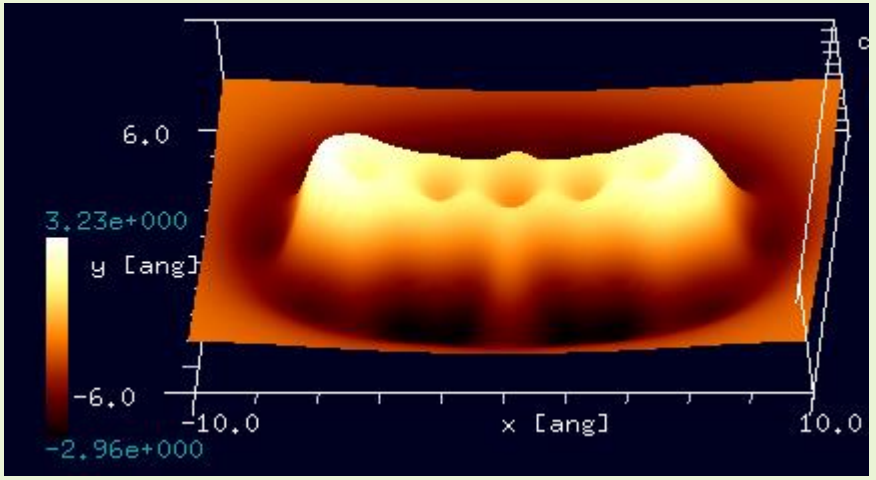
Group for Physics of Ordered Nanostructures and New Materials in Photonics
http://www.graphene.ac.rs/eq-AFM.html

【CG】ペンタセンキノン分子の周波数シフトAFM像シミュレーション



試料モデルを空間に固定。

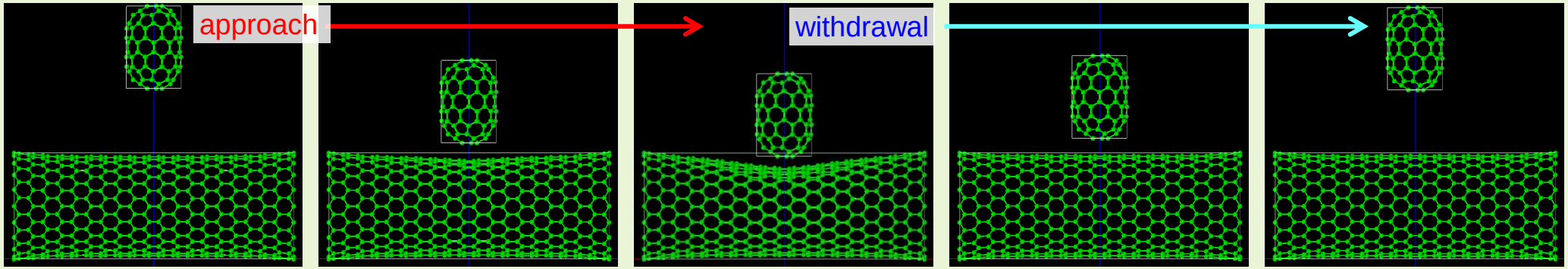




周波数シフト像の計算結果。左：2D表示、右：3D表示。

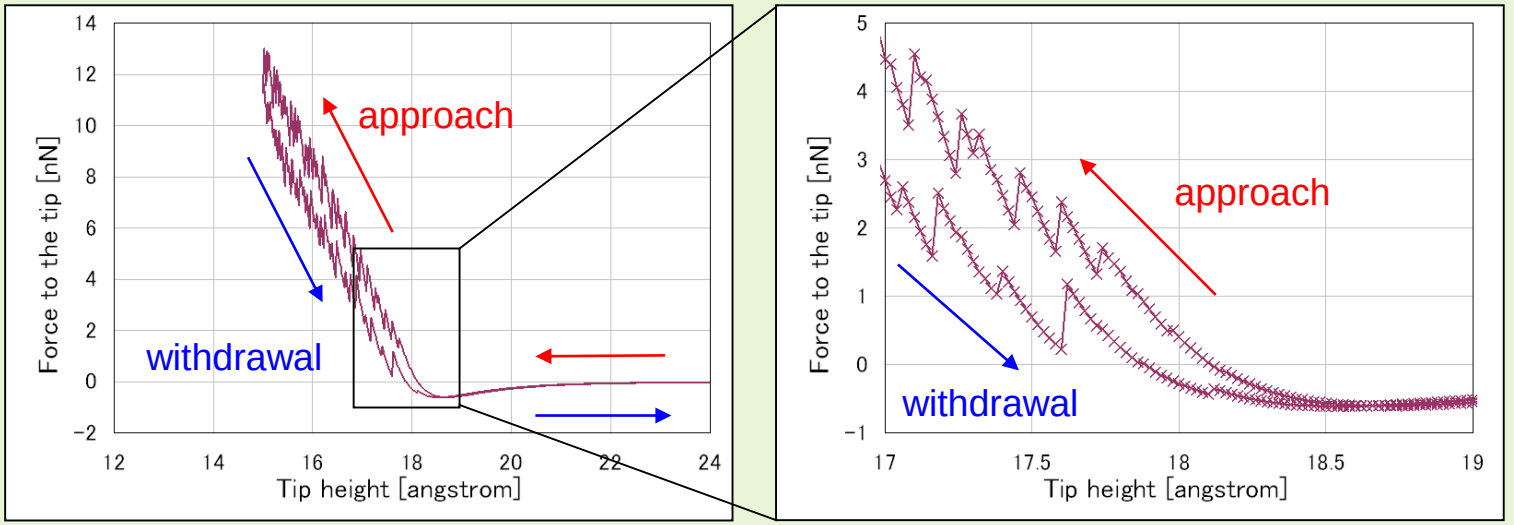
ペンタセン骨格が見える。また、中央の二つの酸素原子の位置にも形状が見られる。

【CG】CNTに対するフォースカーブのヒステリシス



Tip: capped SWCNT,
diameter = 7.99 Å,
length = 12.08 Å,
Atomic configuration is fixed.

Sample: SWCNT,
diameter = 15.57 Å,
length = 40.95 Å,
both edges are fixed in space,
the others can be relaxed.



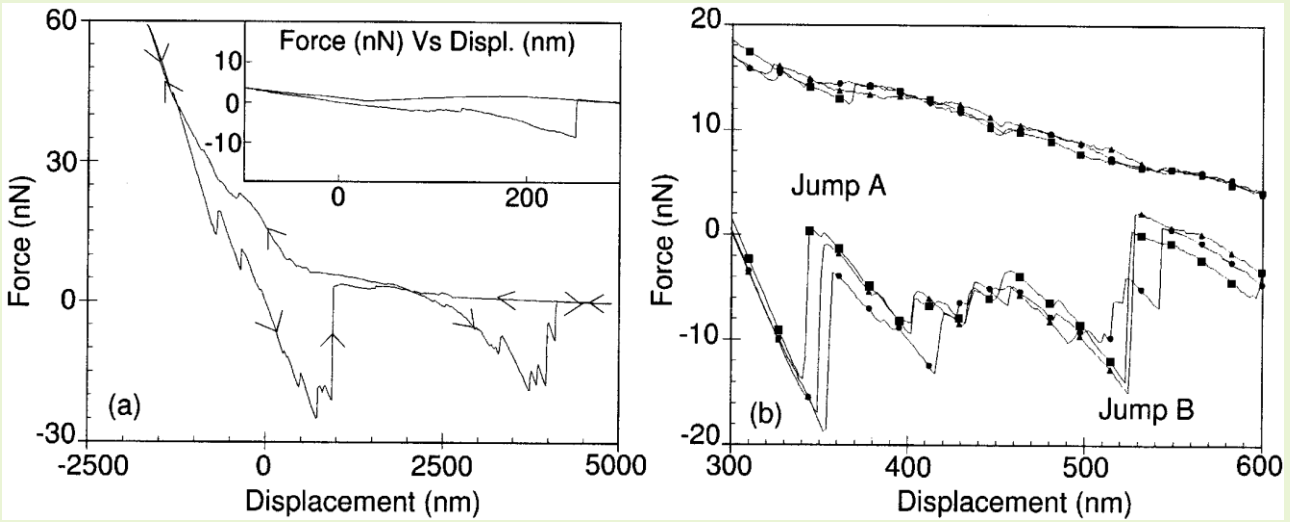
フォースカーブ（右は拡大図）

探針が試料を押し込むときのフォースカーブと、試料から離れるときのフォースカーブが異なる。すなわちヒステリシスが発現した。斥力のカーブにはジグザグ構造が見られる。接近させるときは斥力が少しずつ高くなり、あるところで急激に斥力が弱くなる。これが繰り返される。斥力が弱くなるところでは試料のCNT構造の緩和が起こっていると想定される。ただし、具体的にどのような構造変化が斥力の緩和をもたらしているか、そこまではリプレイ動画を見ても分からなかった。

（参考）CNTに対するフォースカーブのヒステリシス、実験例

Experiment

S. Decossas et al., Europhys. Lett., **53** (6), pp. 742-748 (2001).



測定環境：
　大気中、室温、湿度40%
装置：
　Digital Dimension 3100 AFM
カンチレバーのばね定数：
　0.58 or 0.06 N/m
探針：
　Si_3N_4探針、先端の半径20-50nm
試料：
　絡まったMWCNTのカーペット
　典型的な直径はおよそ25 nm
　長さは数百nmから数μm

MWCNTカーペットに対して、Si_3N_4探針によるフォースカーブの測定を行い、粘性や弾性を調査したもの。探針が試料を押し込んでから離れようとするとき、CNTが探針にくっついてくる。1000 nmにおいて、探針が試料から離れるときに力の急激なジャンプが現れる。探針になおくっついているCNTがあり、2000 nm以上のフォースカーブの形状の原因になる。

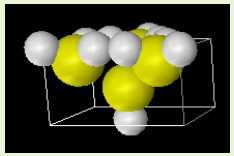
SPMシミュレータで再現することはできない。

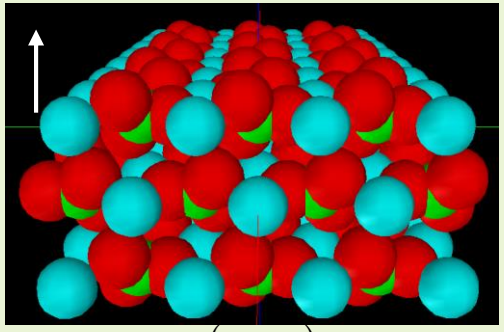
- FemAFMでは試料形状の大きな変化を扱うことができない。
- CG/MDで扱うには系のサイズが大きすぎる； 1000 nmものスケールを扱うのは現実的に不可能。
- 試料の一部が探針にくっついて剥がれることは想定していない。

【CG】方解石(calcite, $CaCO_3$)の周波数シフトAFM像

Simulation

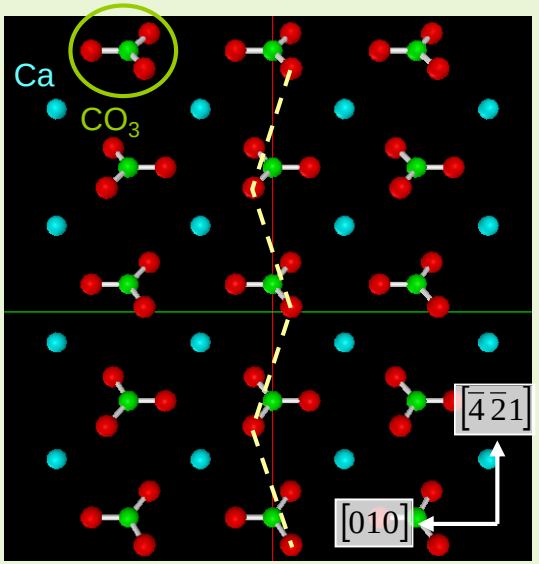
探針：シリコンモデル (Si_4H_{10})





試料：Calcite $(10\bar{1}4)$ 面モデル

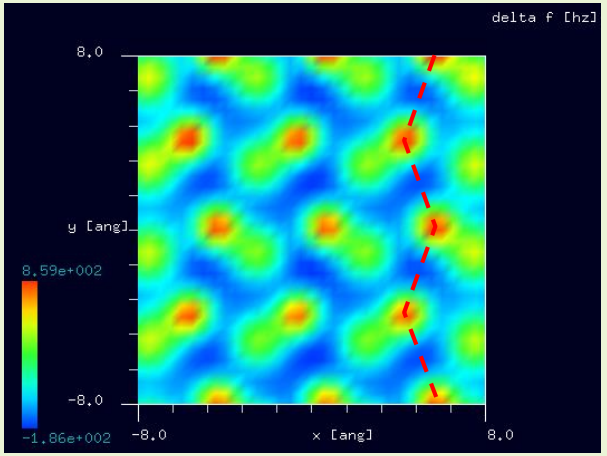
Calcite $(10\bar{1}4)$ 面の第1層を上から見た図



点線のように、ジグザグ状に酸素原子が突き出ている。

カンチレバー
ばね定数：40 N/m
周波数：160 kHz
振幅：6 Å
計算した高さの範囲：
　試料表面から測り1.8 ～ 4.8 Å

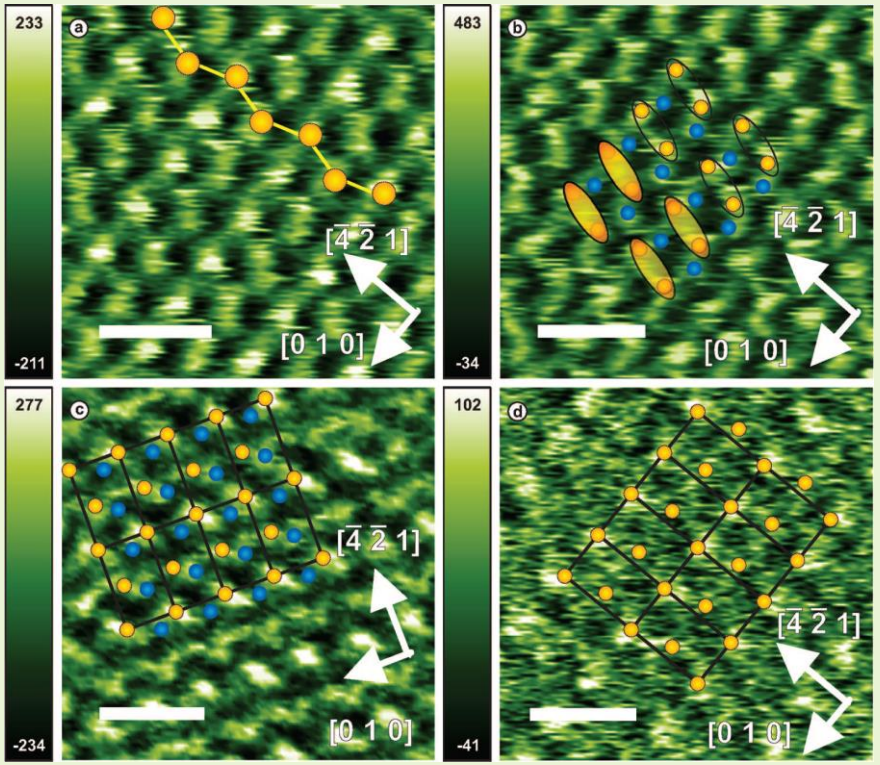
真空中計算
高さ一定・周波数シフト像モード



周波数シフト像

Experiment

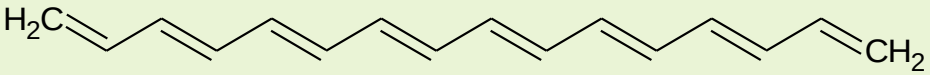
FM-AFM of calcite (1 0 -1 4) in 1 M KCl solution.



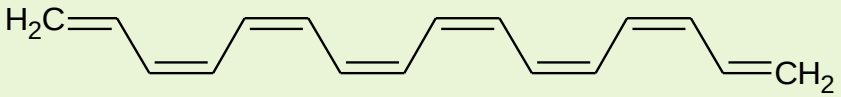
S. Rode, N. Oyabu, K. Kobayashi, H. Yamada, and A. Kuhnle, Langmuir **25**, 2850 (2009).

赤色の点は酸素原子の位置であり、これらを縦に結ぶと酸素原子のジグザグ構造が現れる。
黄色の点はCa原子の位置であり、長方形の格子を形成している。

【CG】ポリアセチレン分子の周波数シフトAFM像

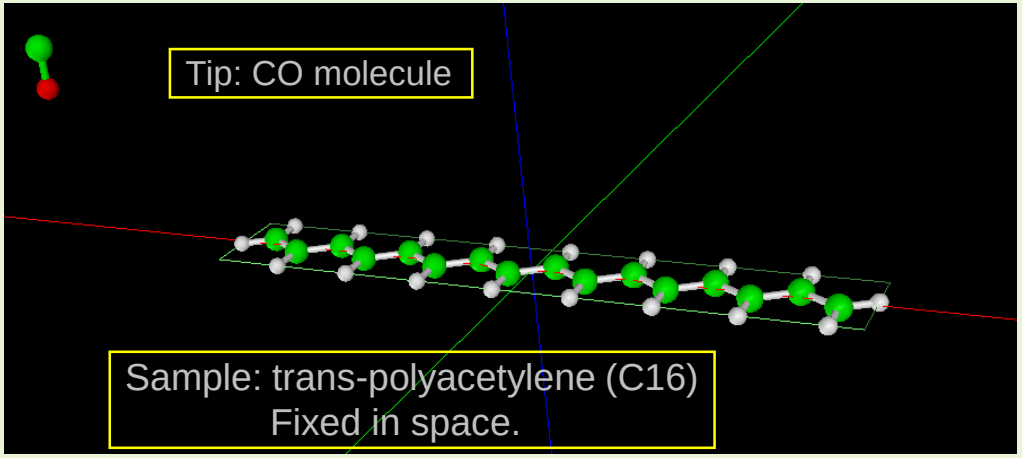


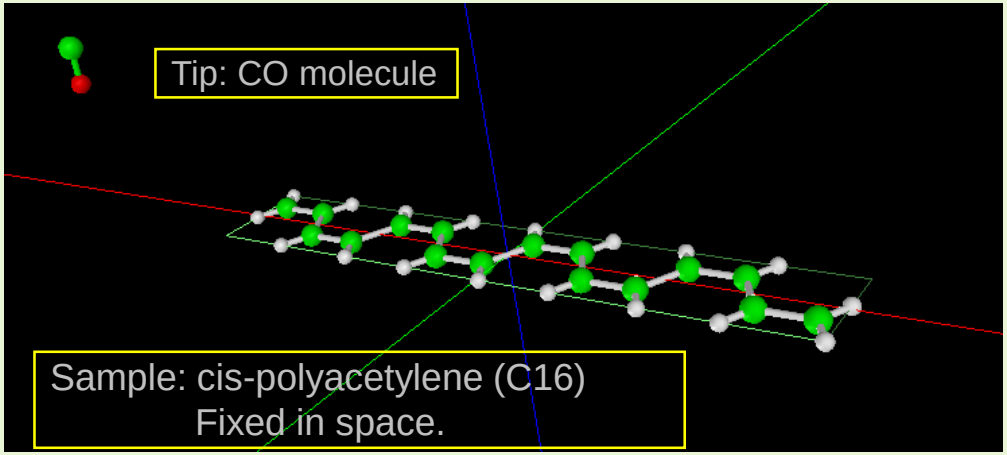
trans-polyacetylene (C16)



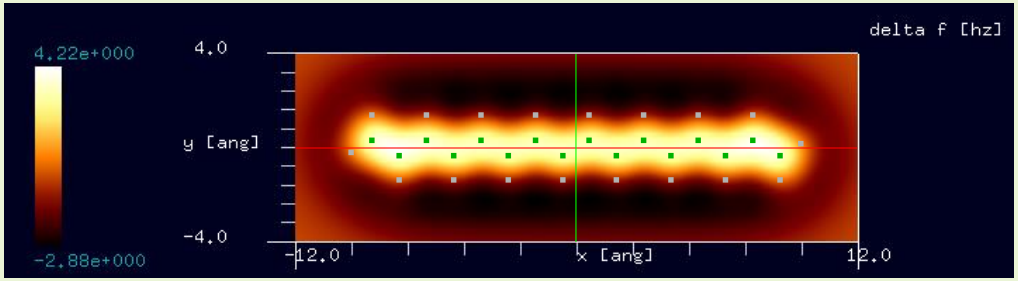
cis-polyacetylene (C16)

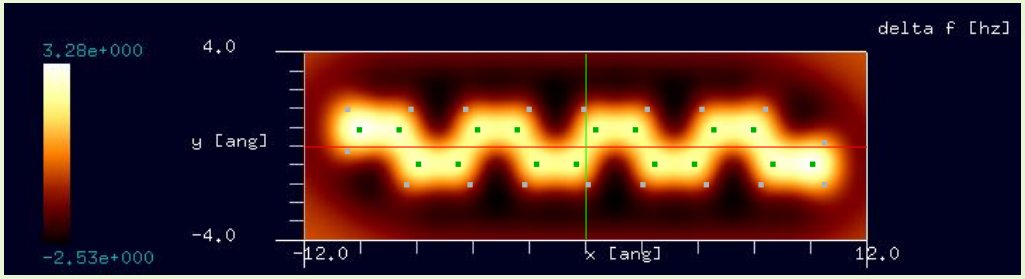
(We assumed the same C-C bond lengths for both model.)





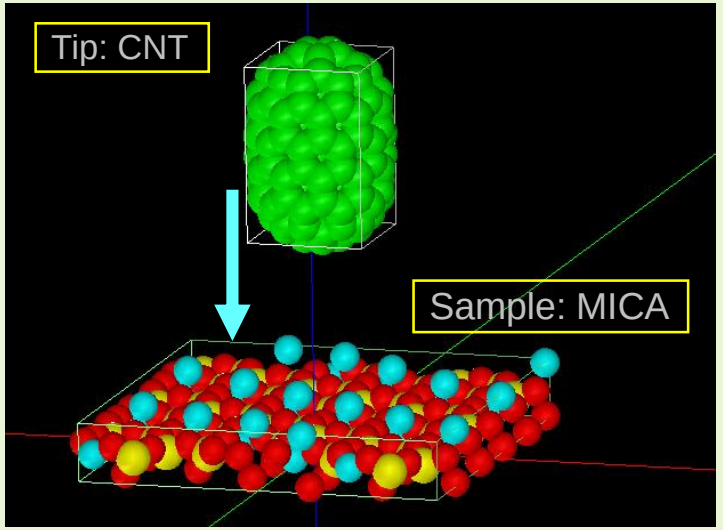
Setup configurations



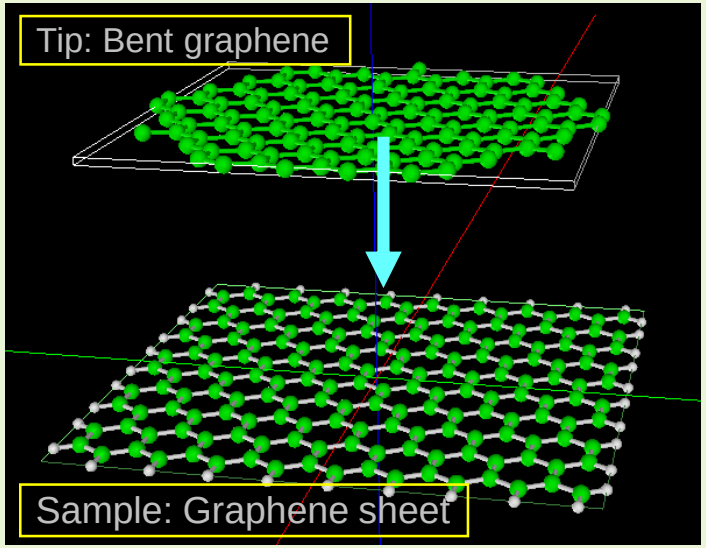


Simulated frequency shift AFM image

【CG-RISM】水中のフォースカーブシミュレーション

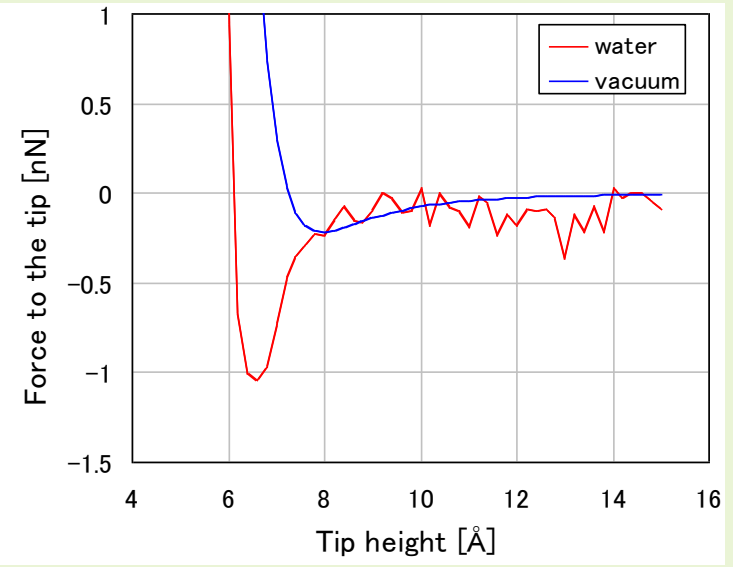


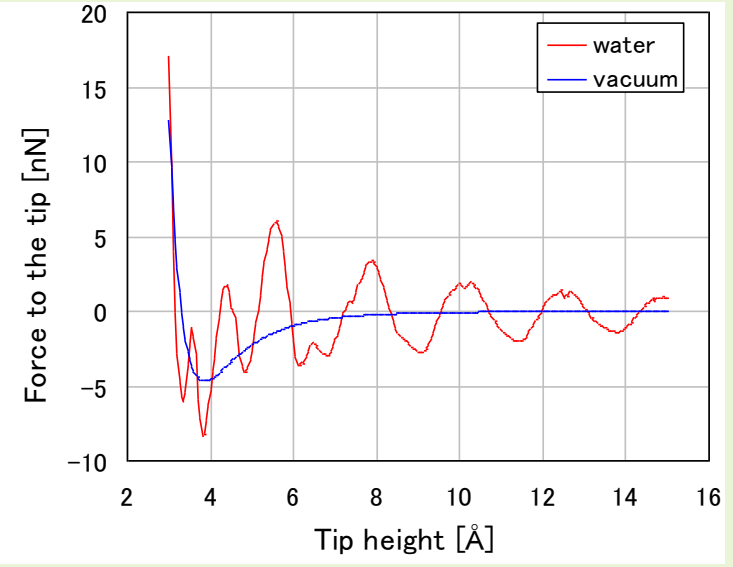
CNT tip approaches a mica in water



Bent graphene approaches a graphene sheet in water

Simulated force curve





水中の場合、水和構造による振動的振舞いが現れる。

（参考）MICAのフォースカーブ

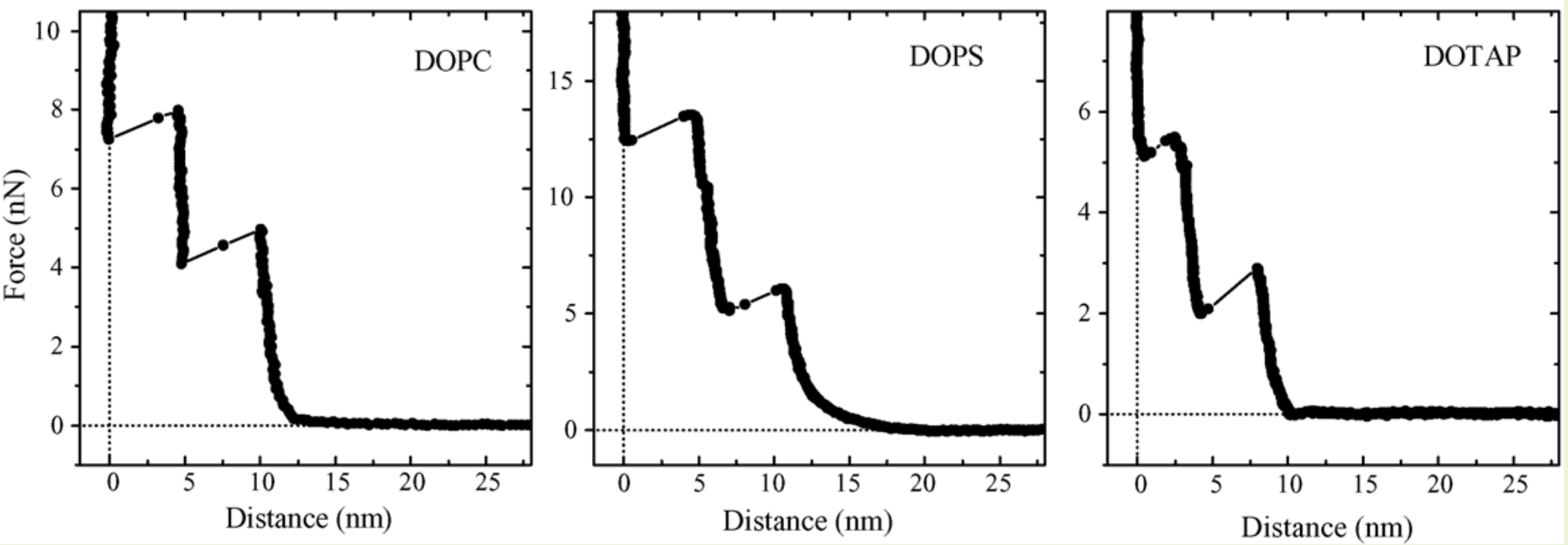
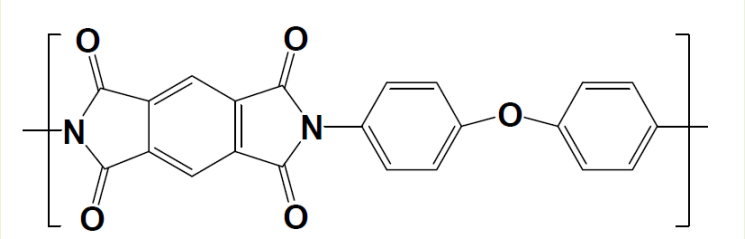


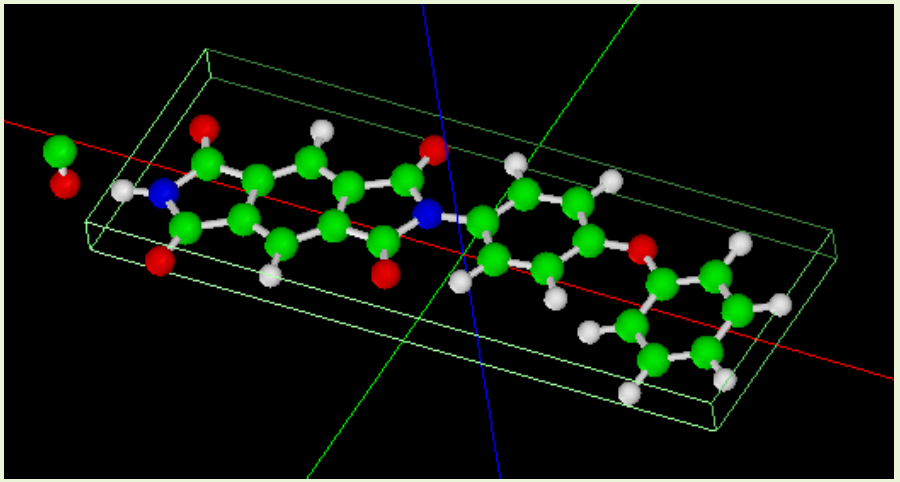
Fig. 36. Typical force-vs.-distance curve measured on a planar mica surface in buffer after exposure to 1,2-dioleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DOPC), 1,2-dioleoyl-sn-glycero-3-phospho-L-serine (DOPS), and 1,2-dioleoyl-3-trimethylammonium-propanechloride (DOTAP) vesicles. The AFM tips were first coated with chromium and gold and then with a monolayer of mercapto undecanol ($HS(CH_2)_{11}OH$). For details see Ref. [738].

Hans-Ju¨rgen Butt et. al, Surface Science Reports 59 (2005) 1–152.
Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications

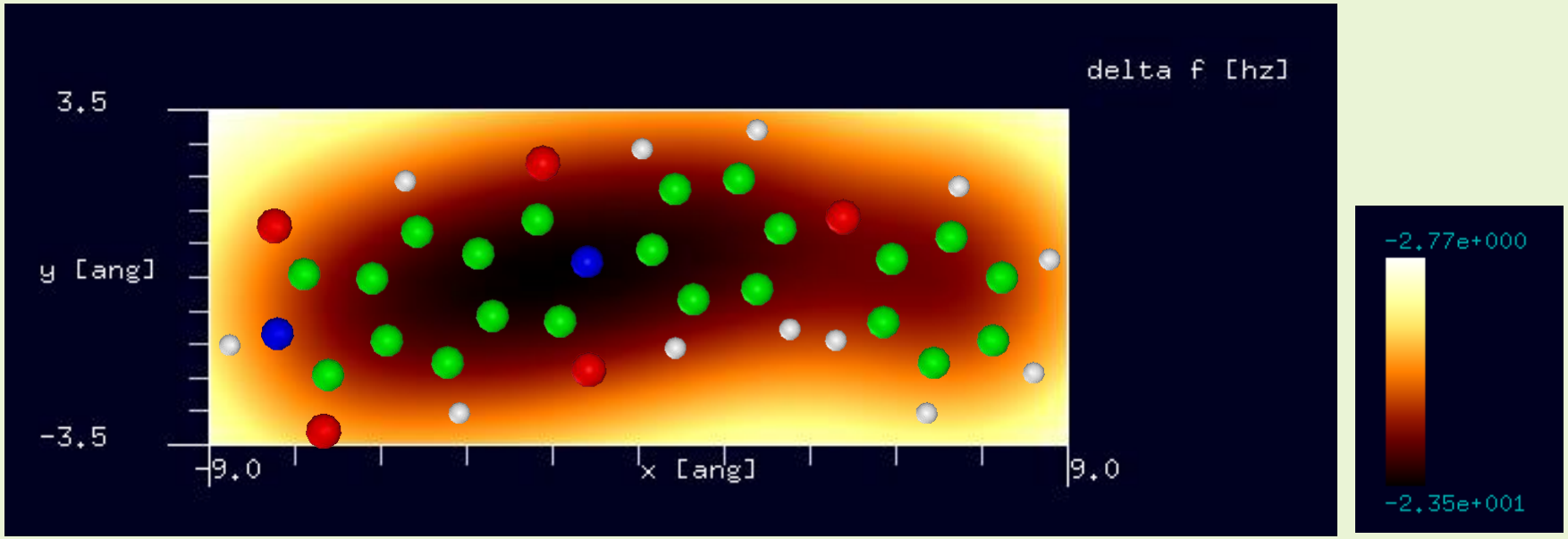
【CG】カプトン(Kapton)[ポリイミド(polyimide)の一種]



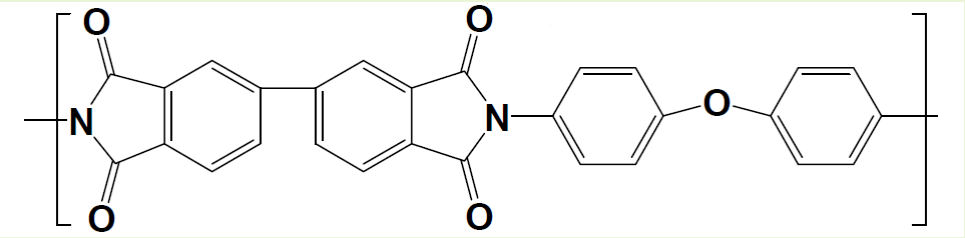
CO探針を使用
モノマーで計算

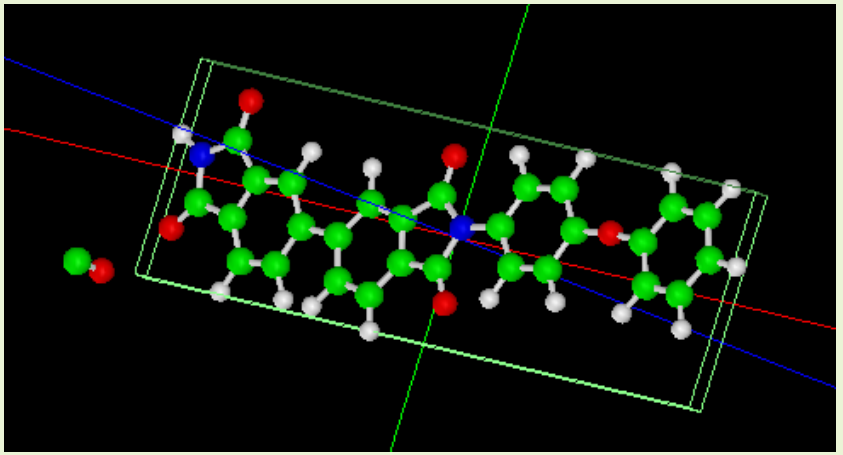


周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.5 Å
周波数のずれは -2.35×10^{1} Hzから -2.77 Hz



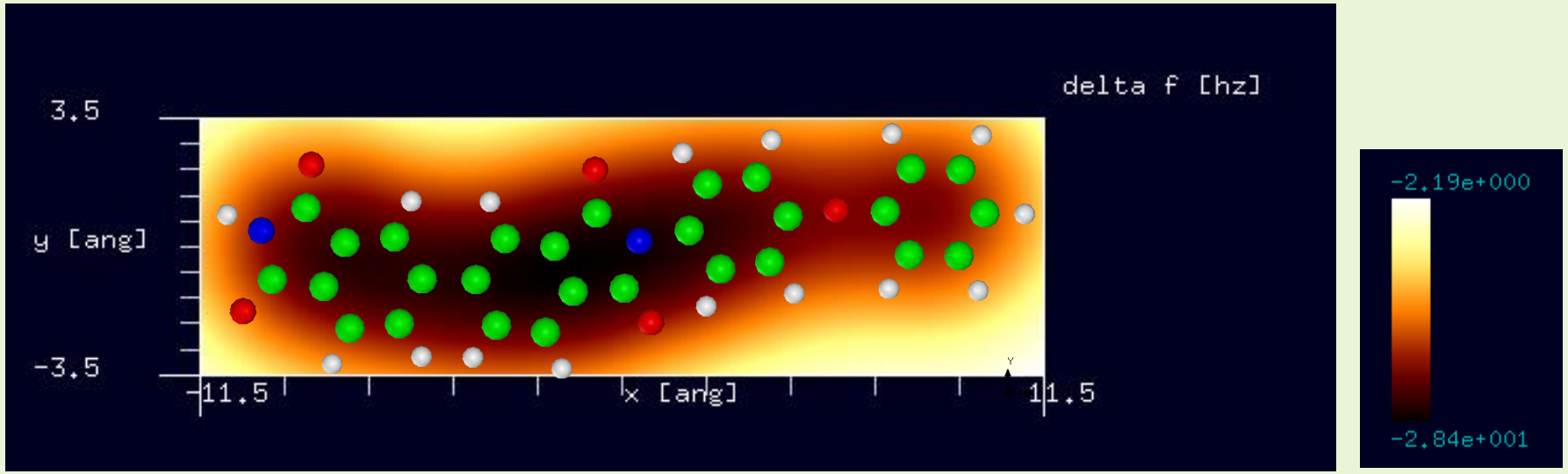
【CG】ユーピレックス-RN(Upilex-RN)[ポリイミド(polyimide)の一種]



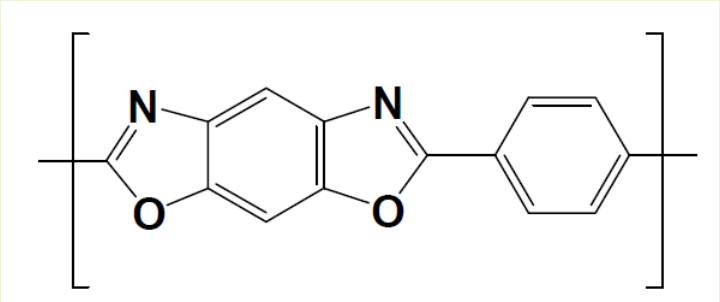


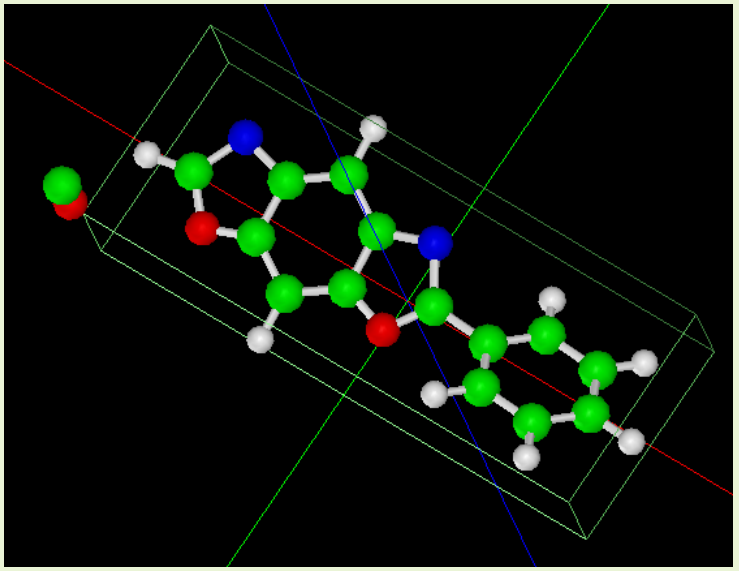
CO探針を使用
モノマーで計算

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.5 Å
周波数のずれは -2.84×10^{1} Hzから -2.19 Hz



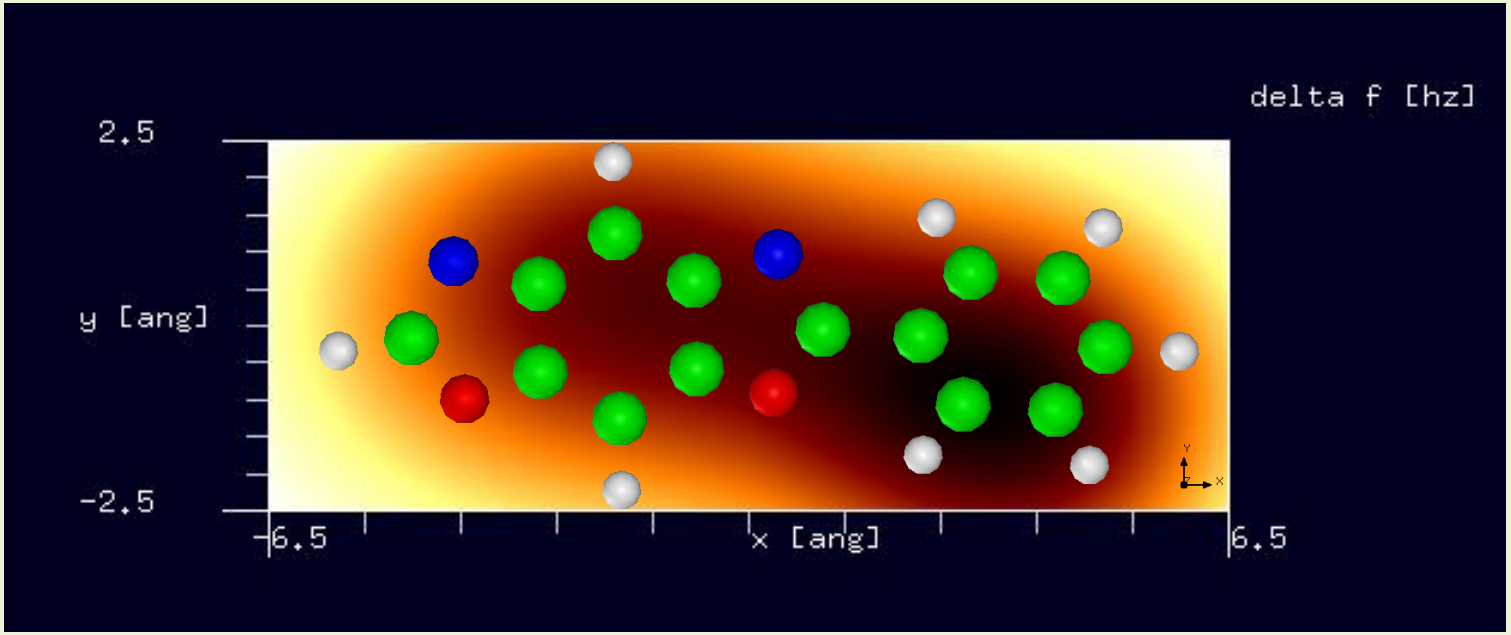
【CG】ザイロン(Zylon)[合成繊維の一種]

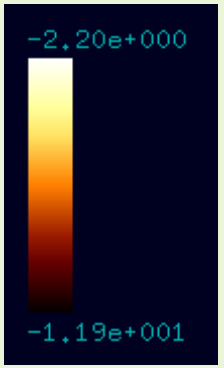




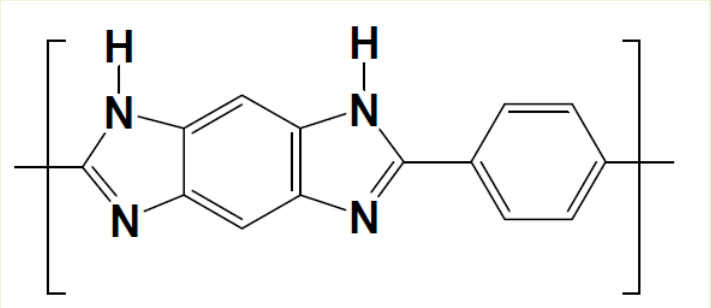
CO探針を使用
モノマーで計算

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.5 Å
周波数のずれは -1.19×10^{1} Hzから -2.20 Hz

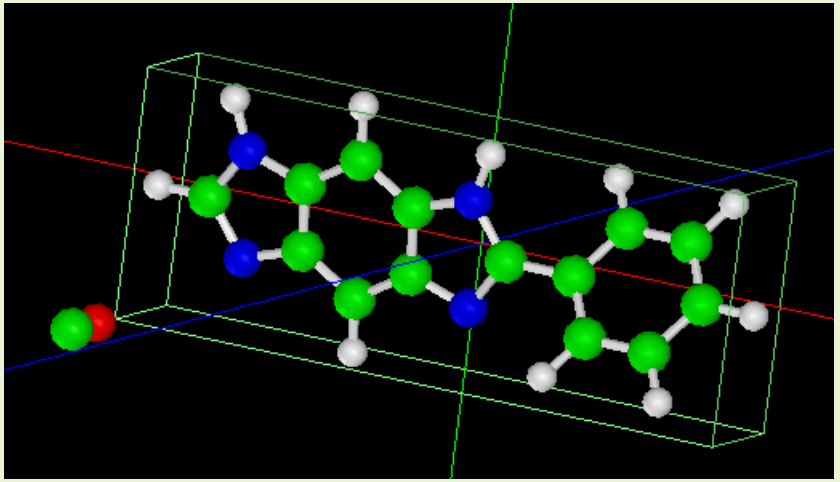




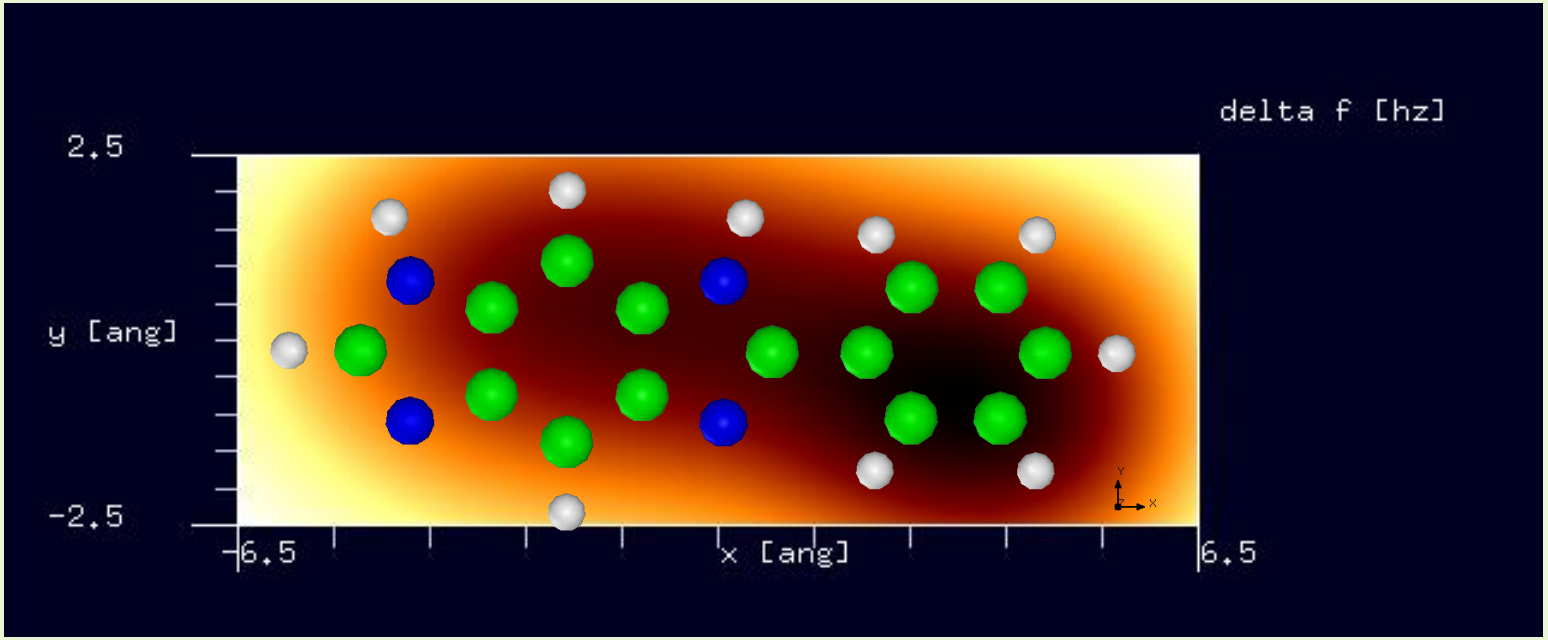
【CG】ポリベンゾイミダゾール(PBI)[合成繊維の一種]

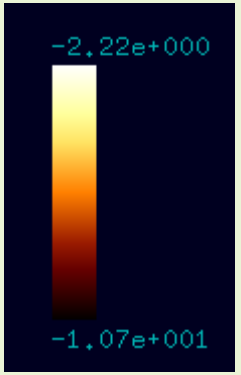


CO探針を使用
モノマーで計算

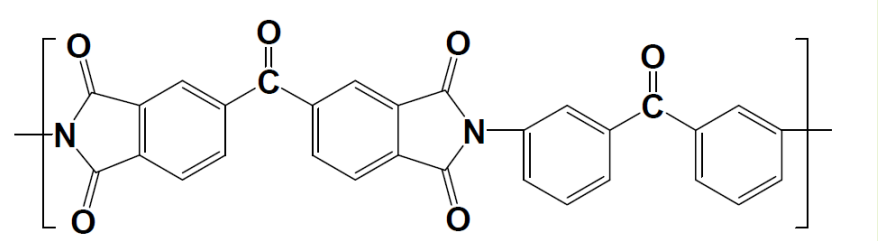


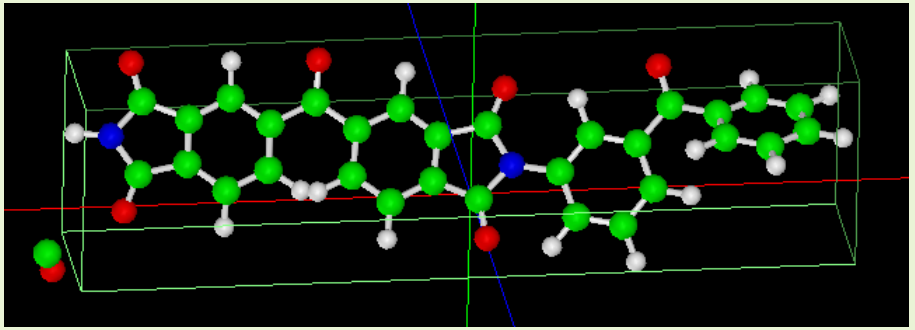
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.7 Å
周波数のずれは -1.07×10^{1} Hzから -2.22 Hz





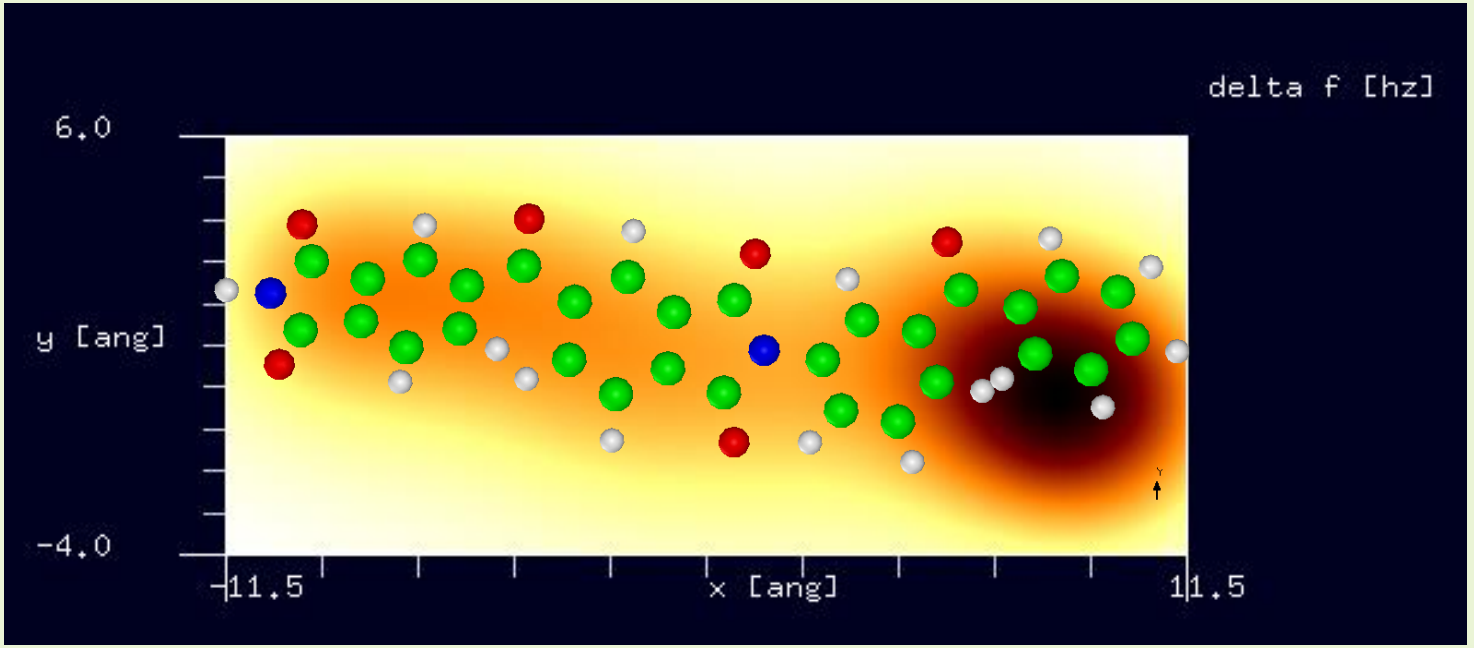
【CG】高耐熱性ポリイミド接着剤Larc-TPI

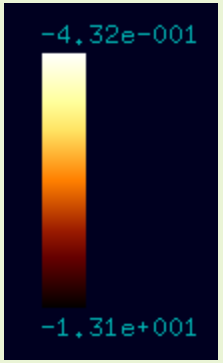




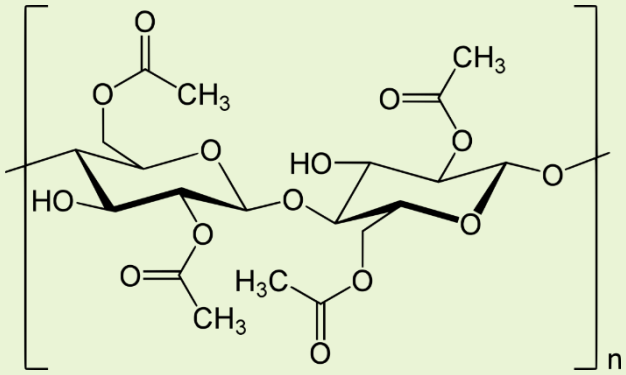
CO探針を使用
モノマーで計算

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.3 Å
周波数のずれは -1.31×10^{1} Hzから -4.32×10^{-1} Hz

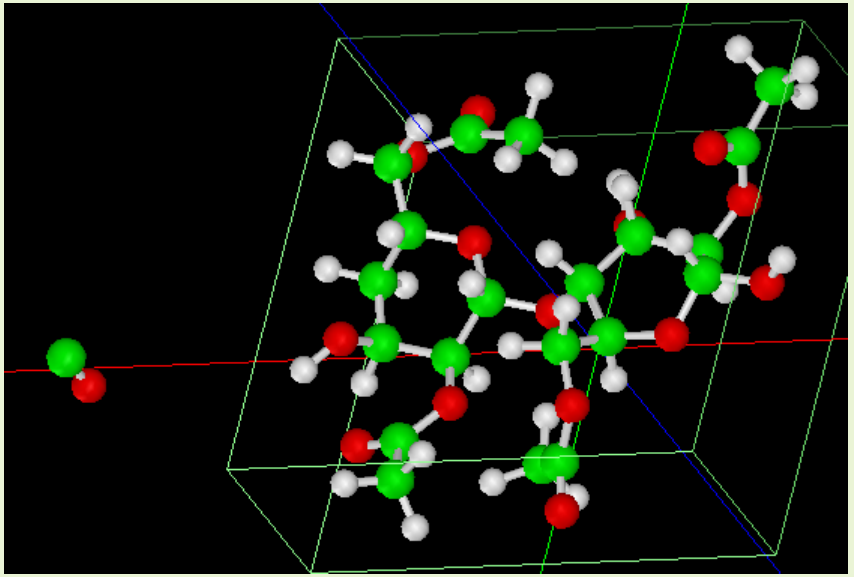




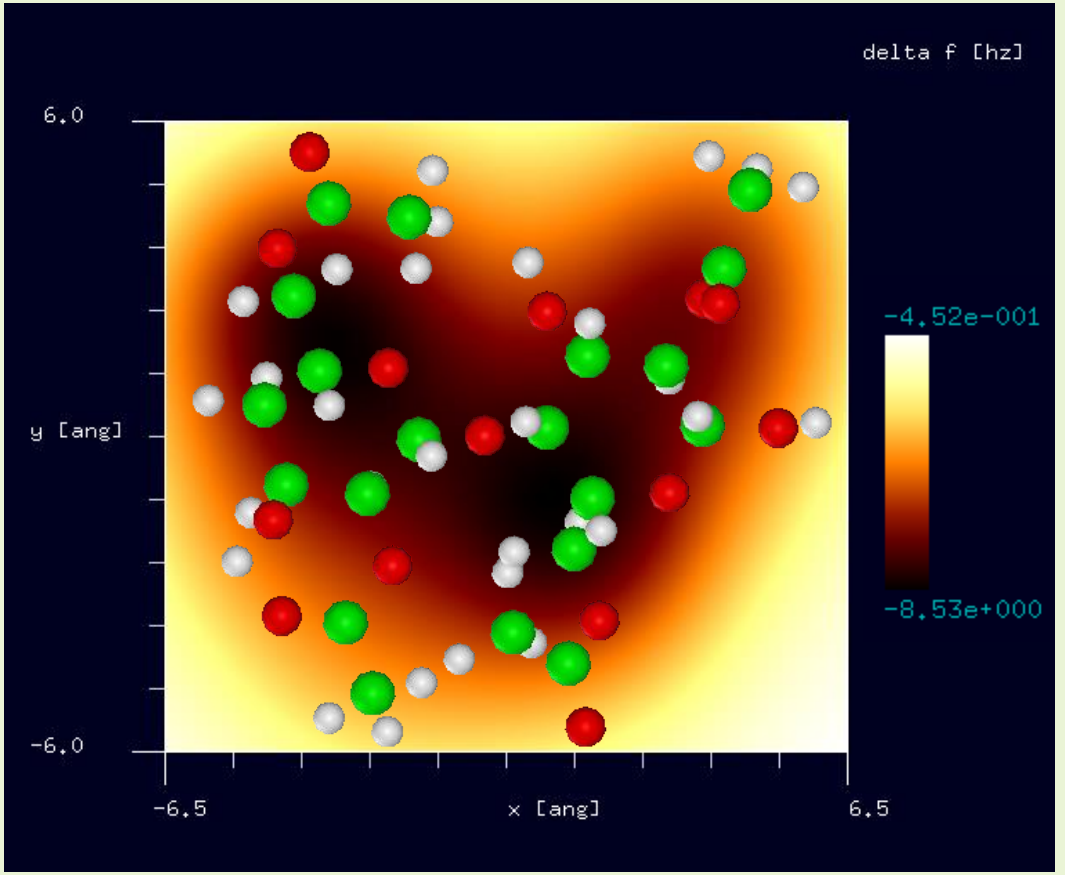
【CG】ジアセテート(diacetate)[アセテート繊維の一種]



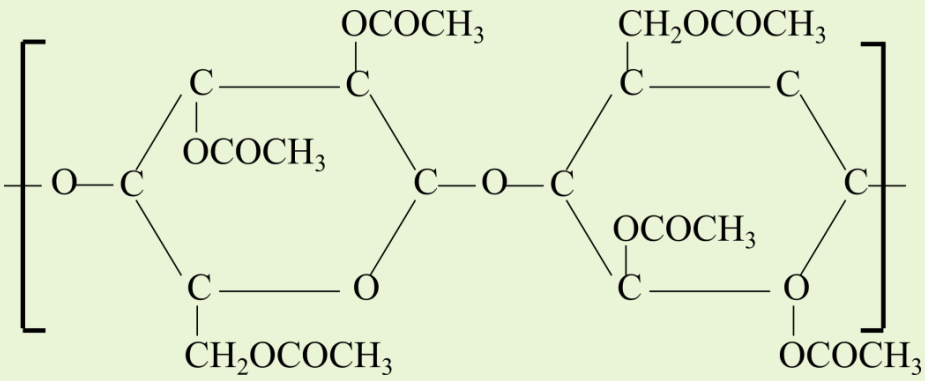
CO探針を使用
モノマーで計算



周波数シフトAFM画像:
探針振動の共鳴周波数25kHz,
探針と試料の最短距離4.6 Å
周波数のずれは -8.53 Hzから -4.52×10^{-1} Hz

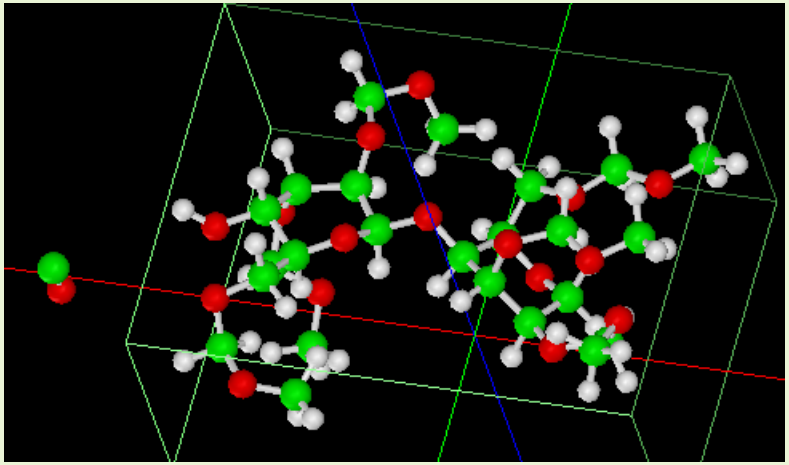


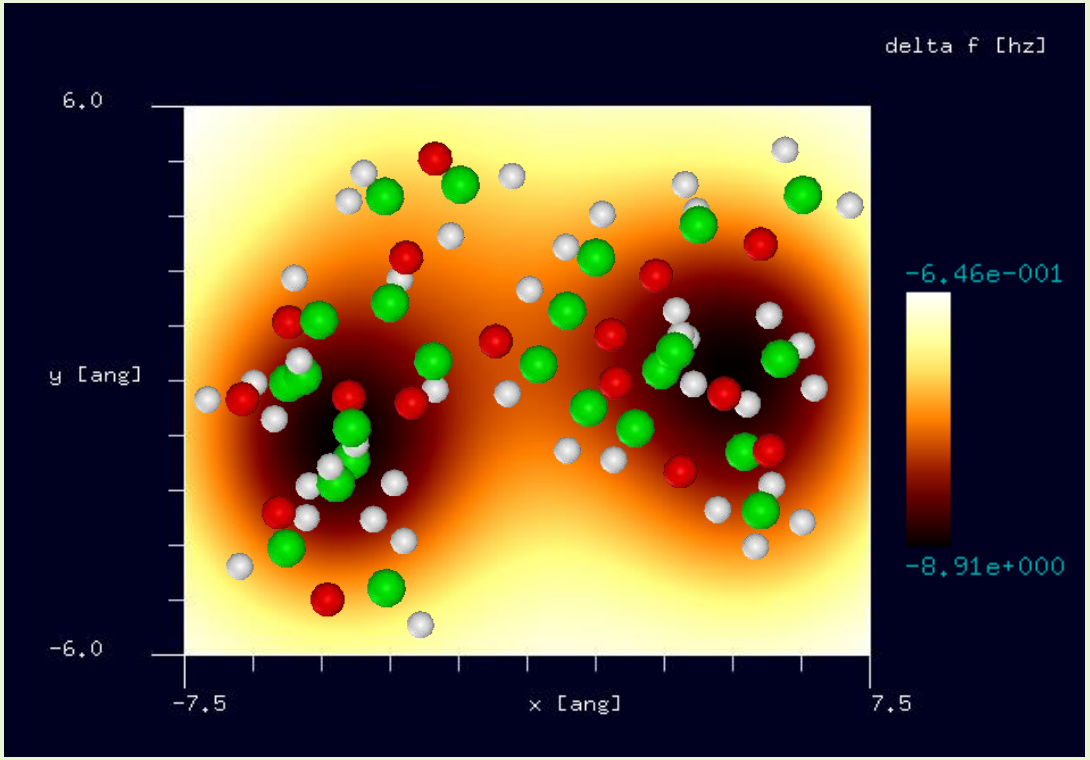
【CG】トリアセテート(triacetate)[アセテート繊維の一種]



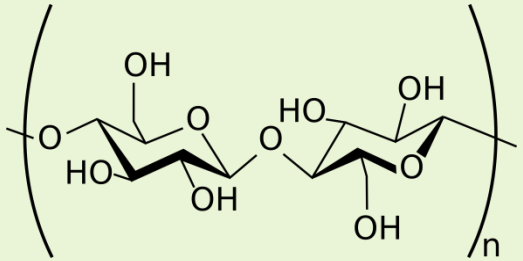
周波数シフトAFM画像:
探針振動の共鳴周波数25kHz,
探針と試料の最短距離4.3 Å
周波数のずれは -8.91 Hzから -6.46×10^{-1} Hz

水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算

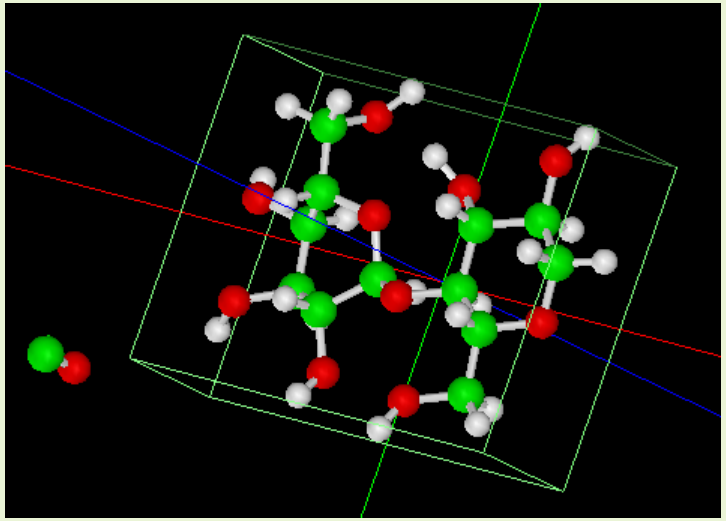




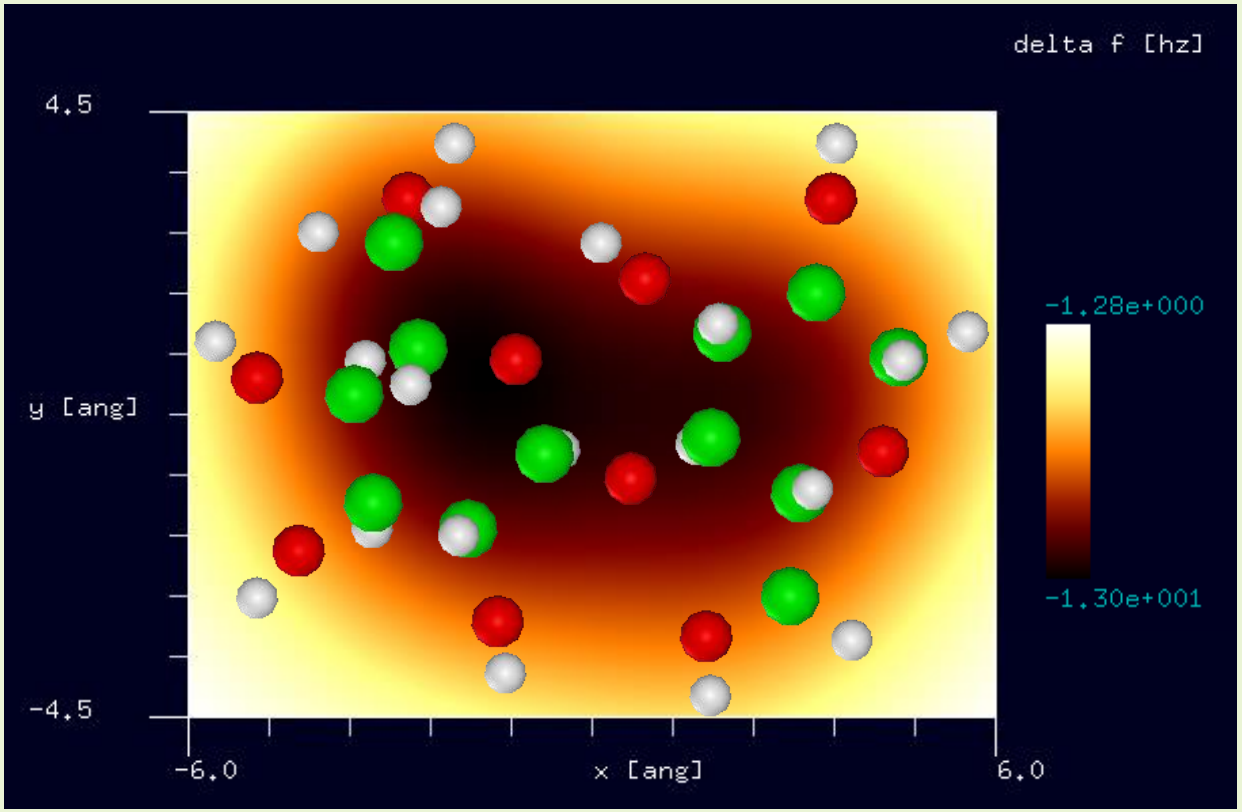
【CG】セルロース(cellulose)[アセテート繊維の一種]



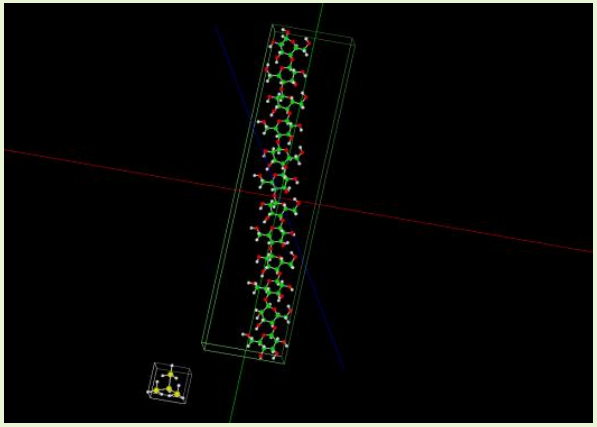
CO探針を使用
モノマーで計算



周波数シフトAFM画像:
探針振動の共鳴周波数25kHz,
探針と試料の最短距離4.4 Å
周波数のずれは -1.30×10^{1} Hzから1.28 Hz

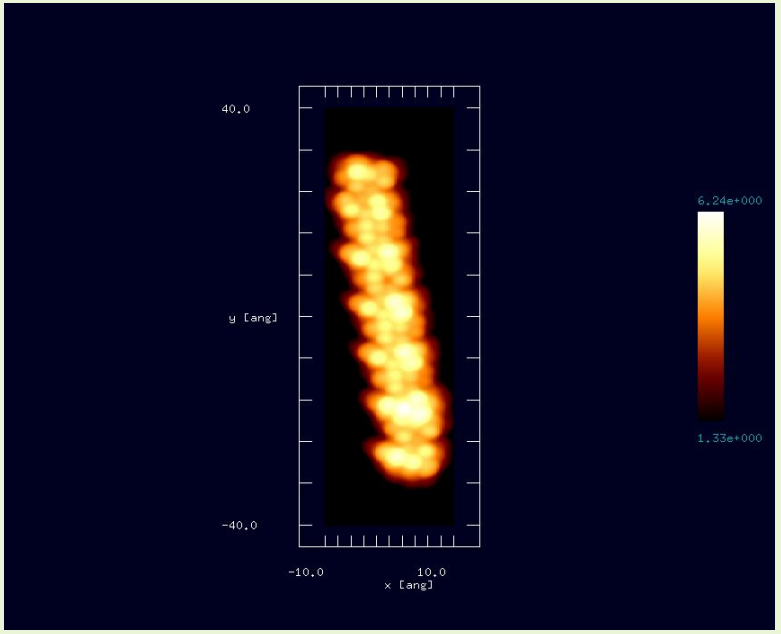


【CG】セルロースのカー定モードAFM像

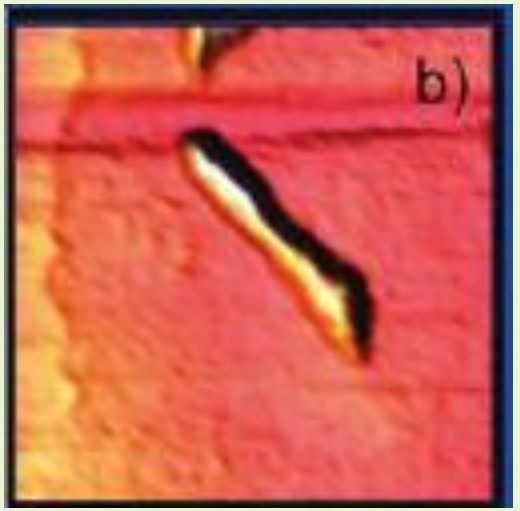


セルロース試料
シリコン探針

CGソルバー
カー定モードAFM像



実験例

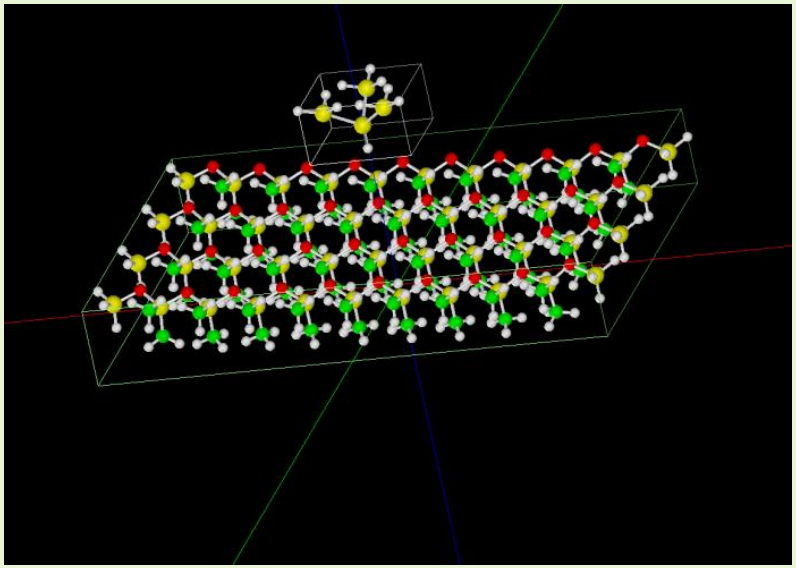


langmuir 26, 6, 4480 (2010)

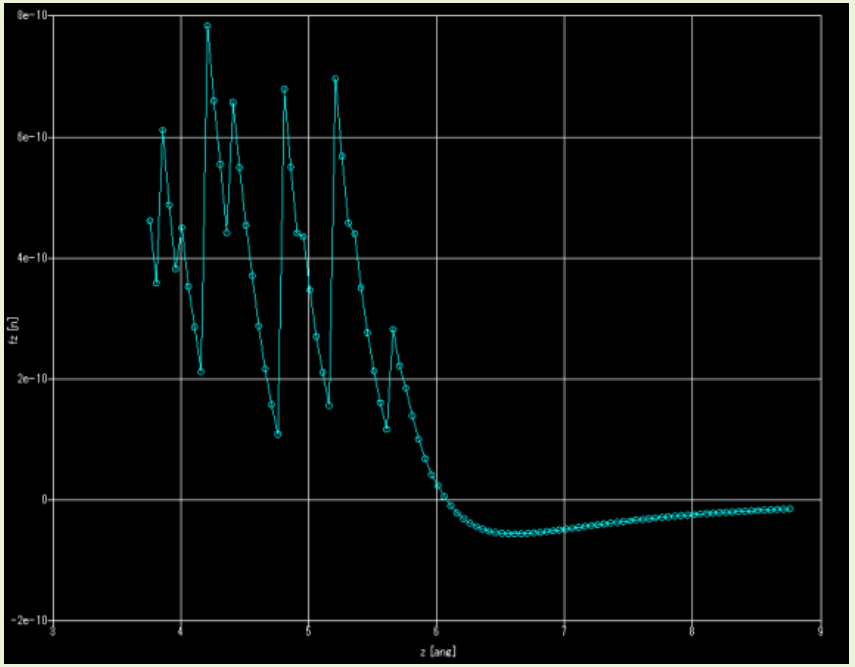
Tappingモード

【CG】シリコンゴムのフォースカーブ

試料: シリコンゴム
探針: シリコン



CGソルバー
フォースカーブ



【MD】原子分子ナノ材料AFM像シミュレータの活用事例

MD

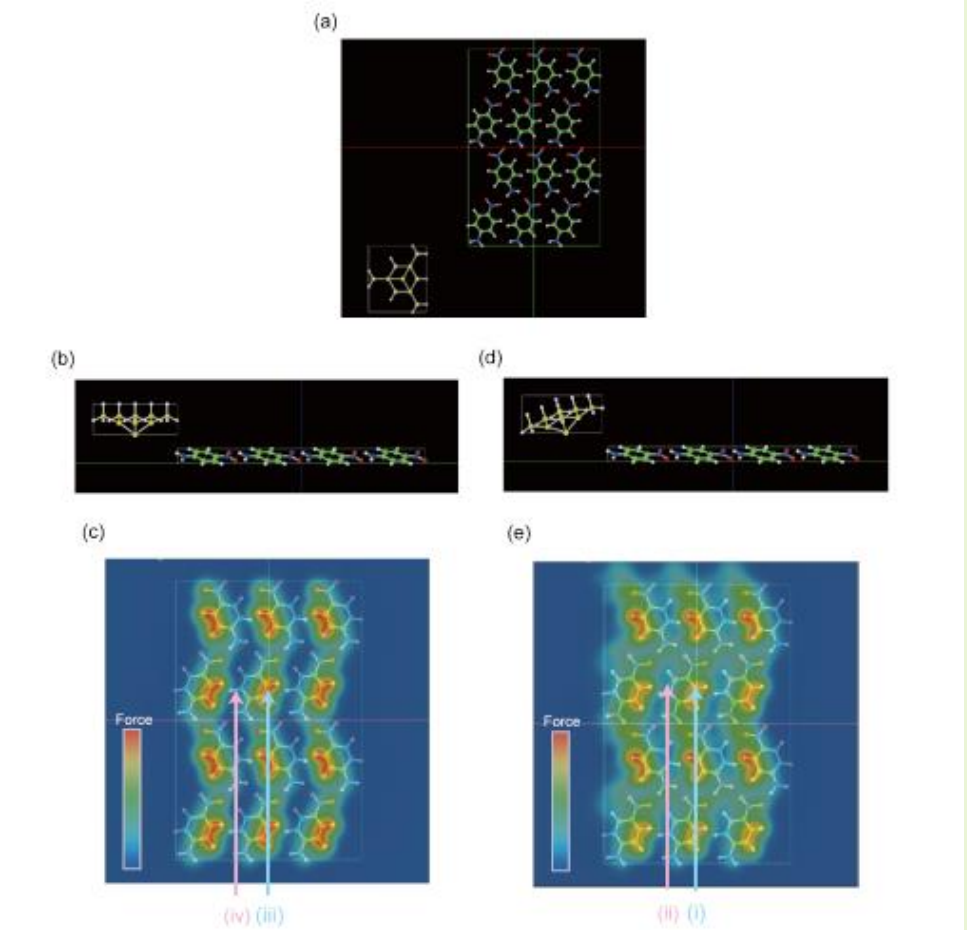


Figure S1. *p*-Nitroaniline (101) surface and Si_{10} tip. Top and side views of the symmetric tip are shown in panels a and b. The simulated tip-surface force distribution is in panel c. The tip was tilted by 17° as shown in panel d and the force simulated with the tilted tip is shown in panel e.

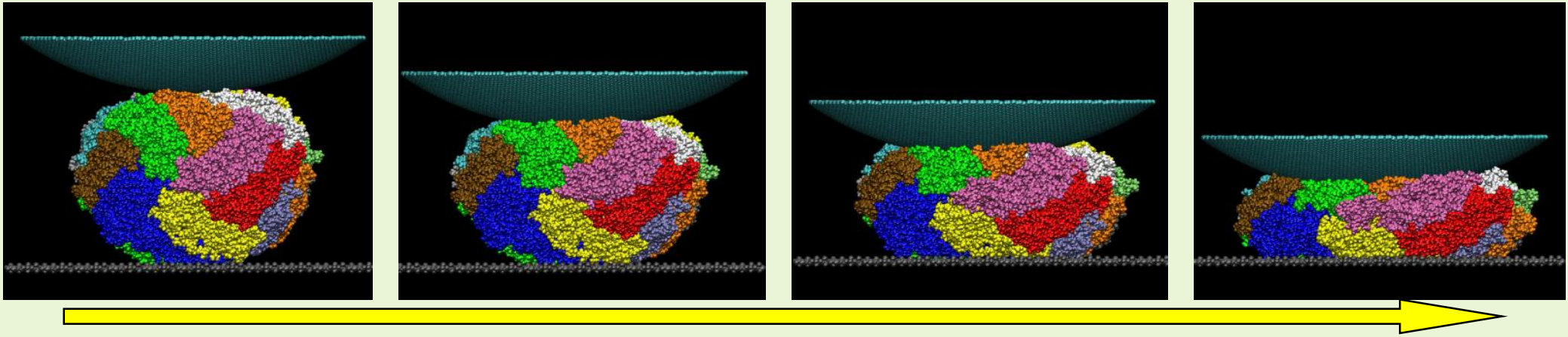
神戸大学大学院理学研究科化学専攻
大西・木村研究室にて活用
（Nishioka et al., J. Phys. Chem. C **117**, 2939-2943 (2013).）

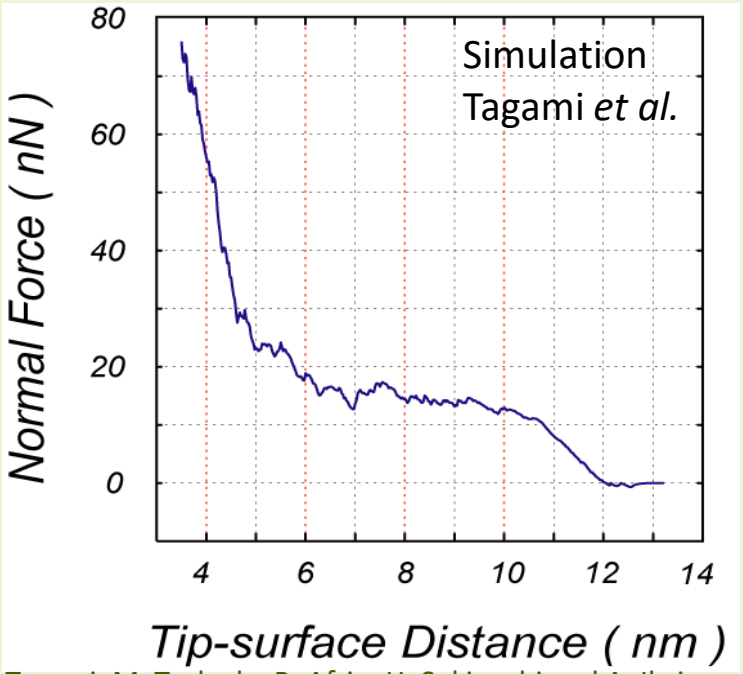
左下：弊社「分子動力学AFM像シミュレータ」による、p-ニトロアニリン結晶表面のフォースマップ
（上記論文のSupporting Informationに掲載）

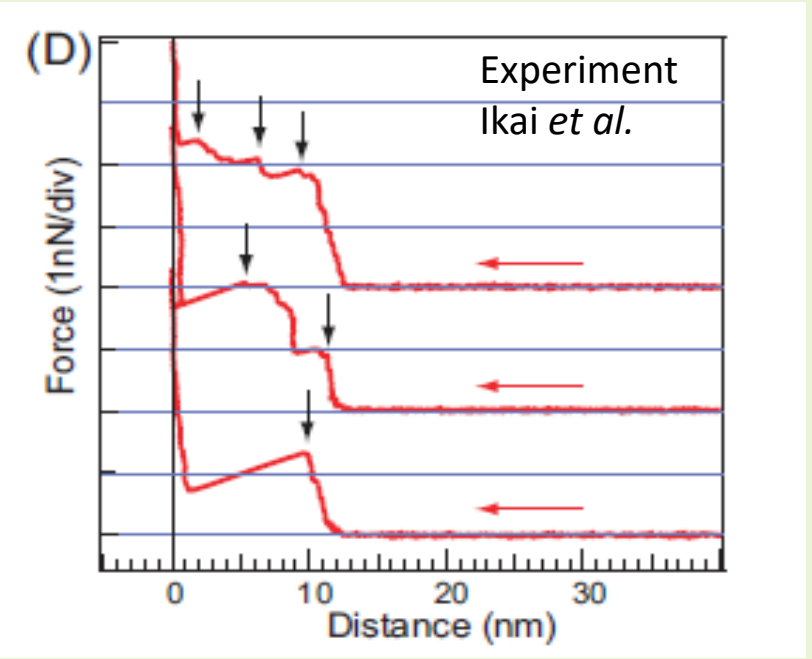
測定された一定周波数シフト形状像の解釈を行う場面で用いられ、形状像を大きく変える主な原因が探針先端の傾きによるものであるという考察に理論的な支持を与えた

【MD】apo-ferritinの圧縮実験

MD **たんぱく質分子に関するナノ力学実験**







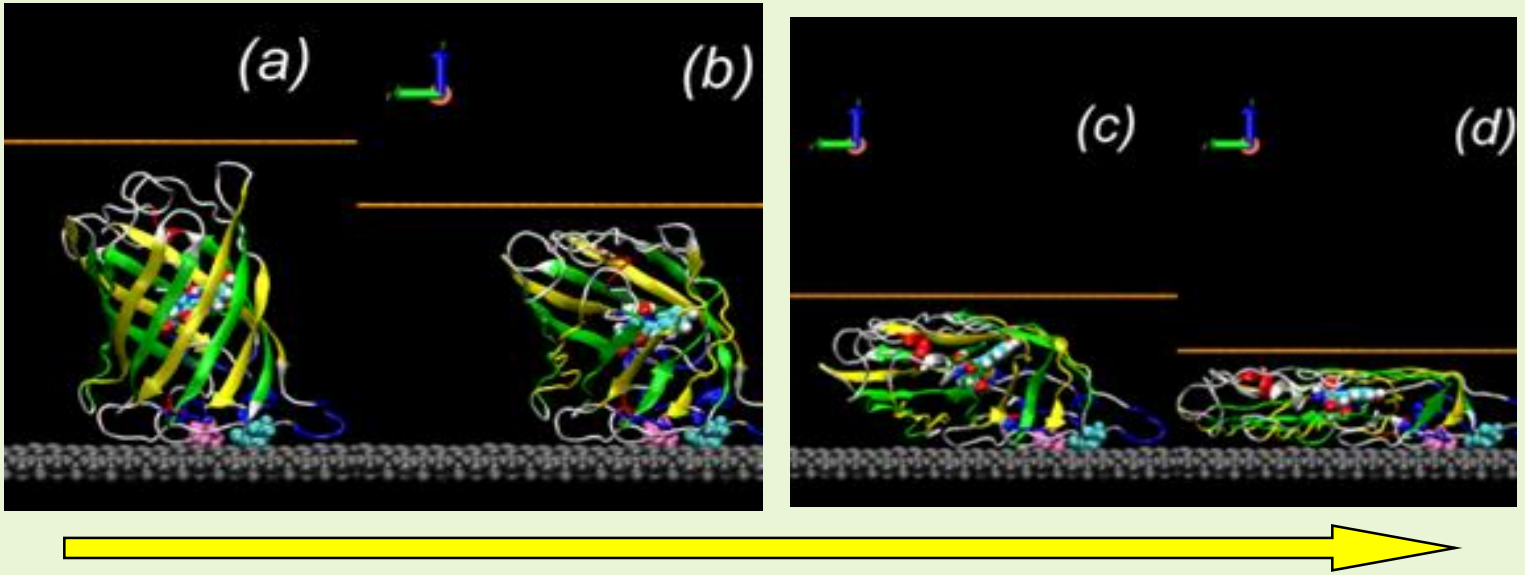
K. Tagami, M. Tsukada, R. Afrin, H. Sekiguchi and A. Ikai,
e-J. Surf. Sci. Nanotech. 4, 552-558 (2006).

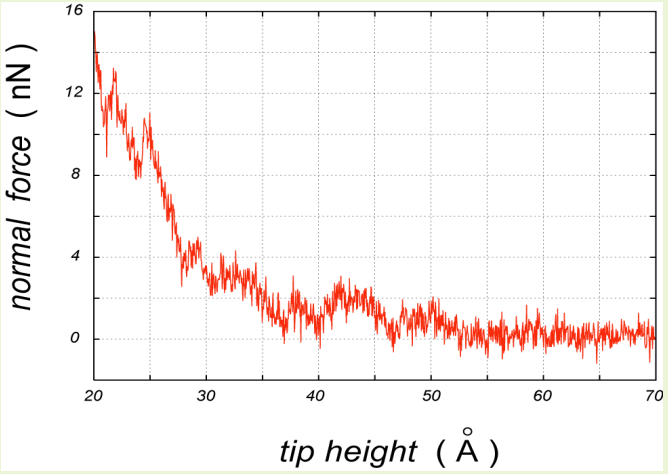
【MD】GFPの圧縮実験

MD **たんぱく質分子に関するナノ力学実験**

GFP = Green Fluorescent Protein

圧縮のMDシミュレーション

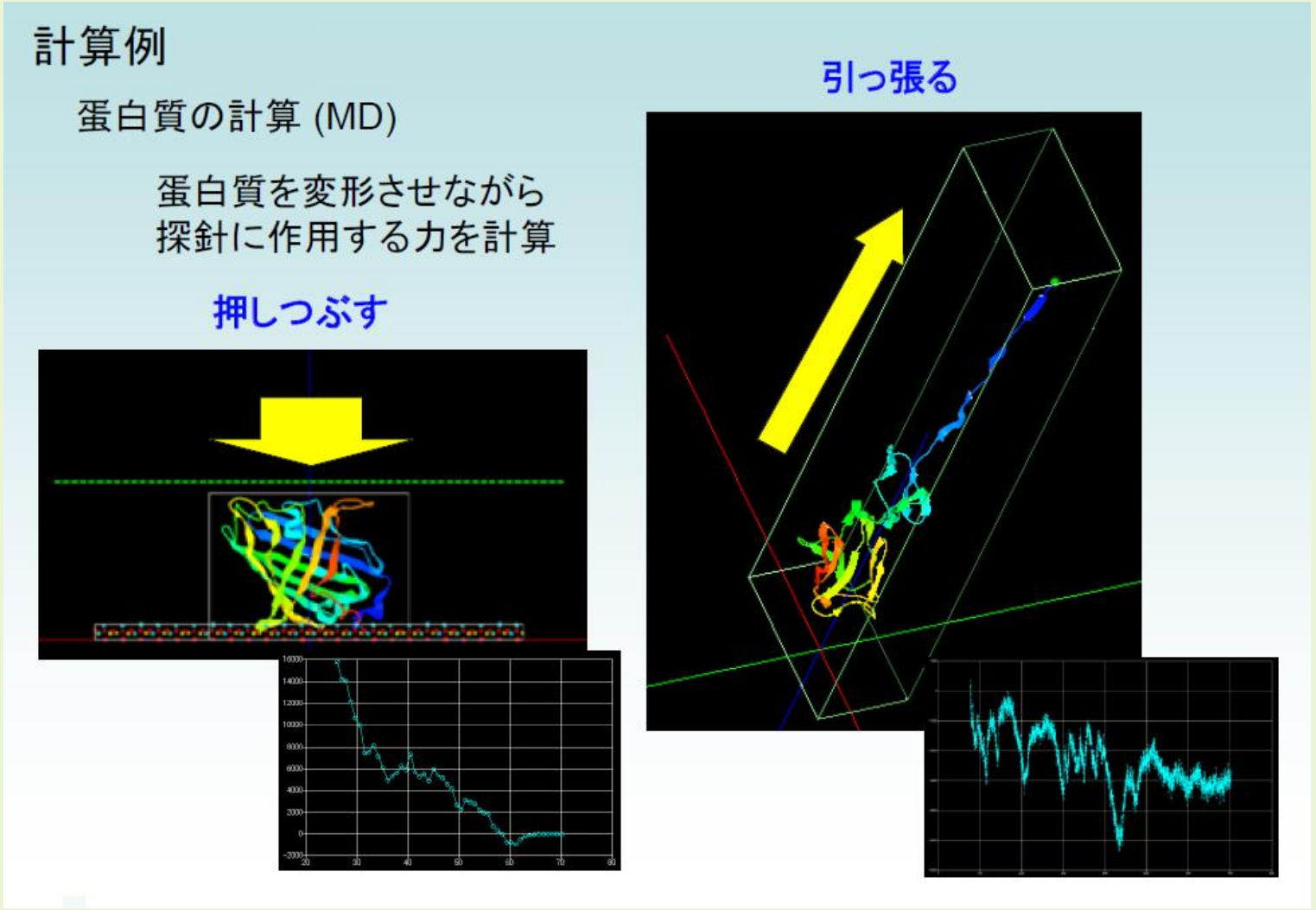




Q. Gao, K. Tagami, M. Fujihira and M. Tsukada, Jpn. J. Appl. Phys., 45, L929 (2006).

【MD】MD法によるタンパク質分子の圧縮･伸長実験

MD **たんぱく質分子に関するナノ力学実験**

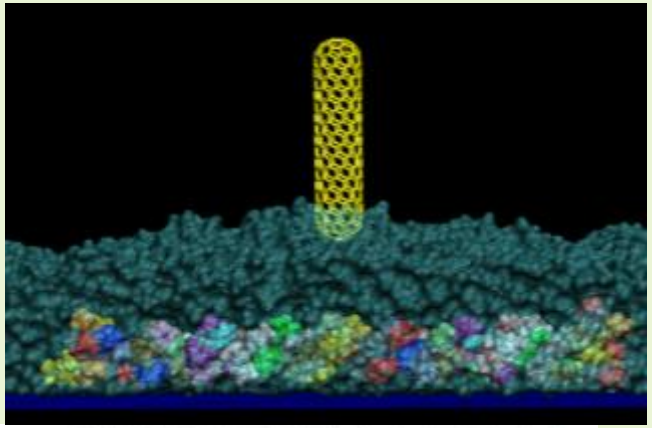


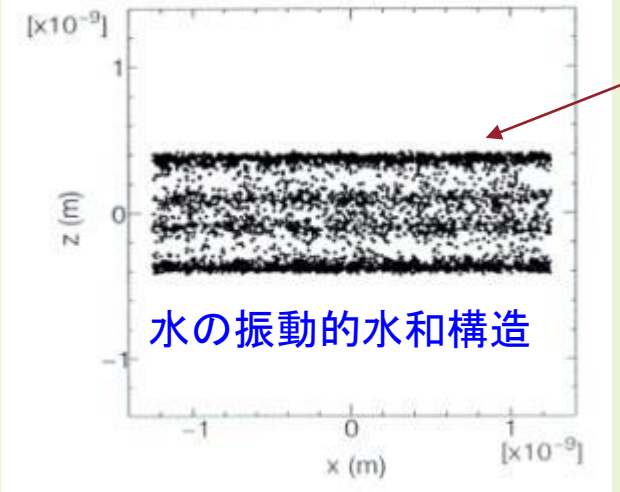
MD法によって、タンパク質分子の探針（グラファイト）による押しつぶし、および引き延ばしをシミュレートしたときのフォースカーブを計算できる。

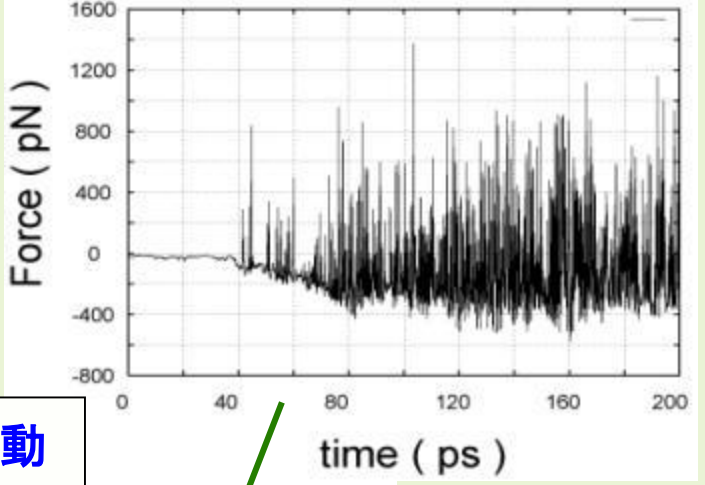
【MD】物体近傍での水の微視的構造

MD **コラーゲン@グラファイトの場合**

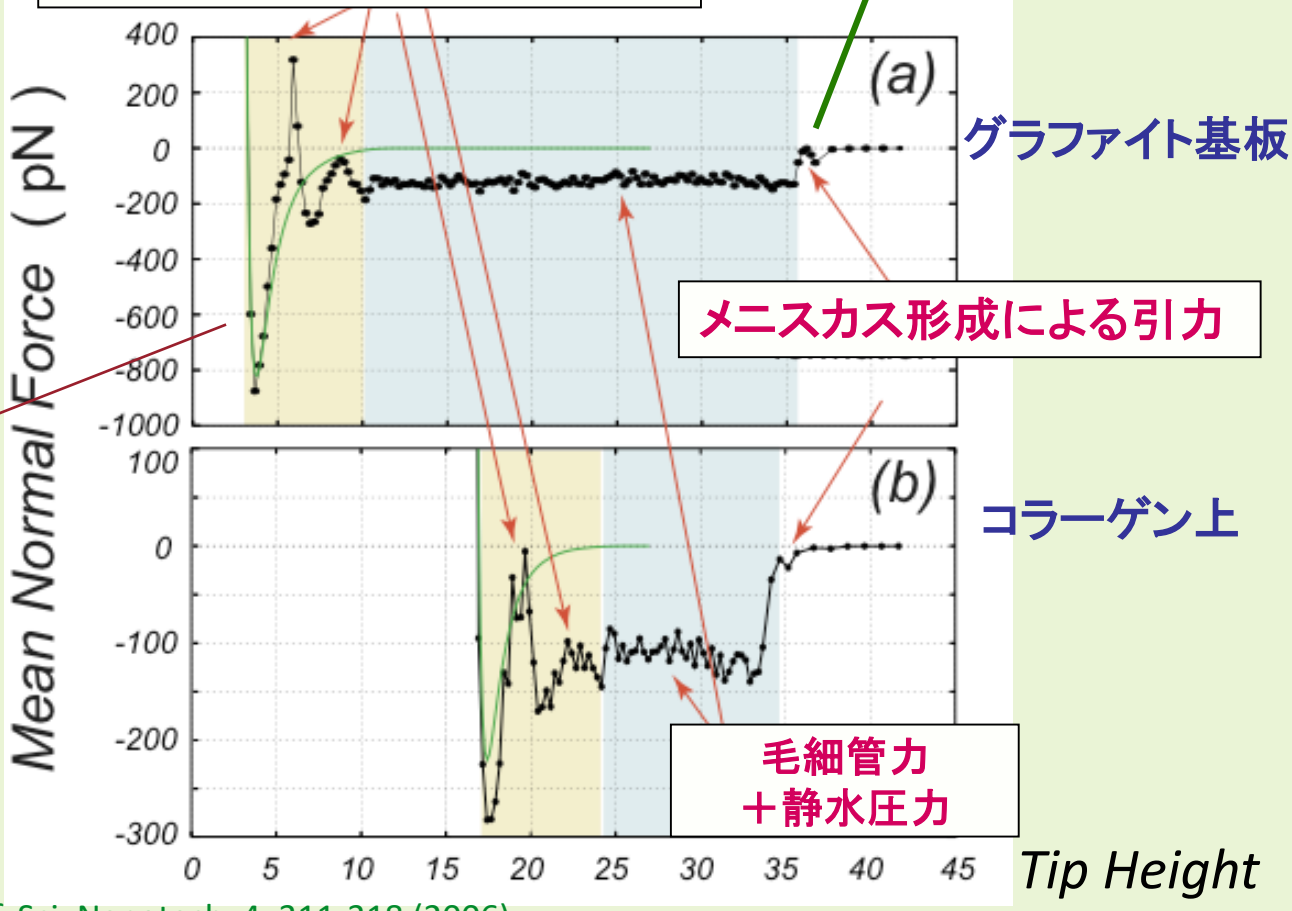
古典分子動力学法によるAFMシミュレーション（CNT探針）







水和構造を反映した力の振動



グラファイト基板上

メニスカス形成による引力

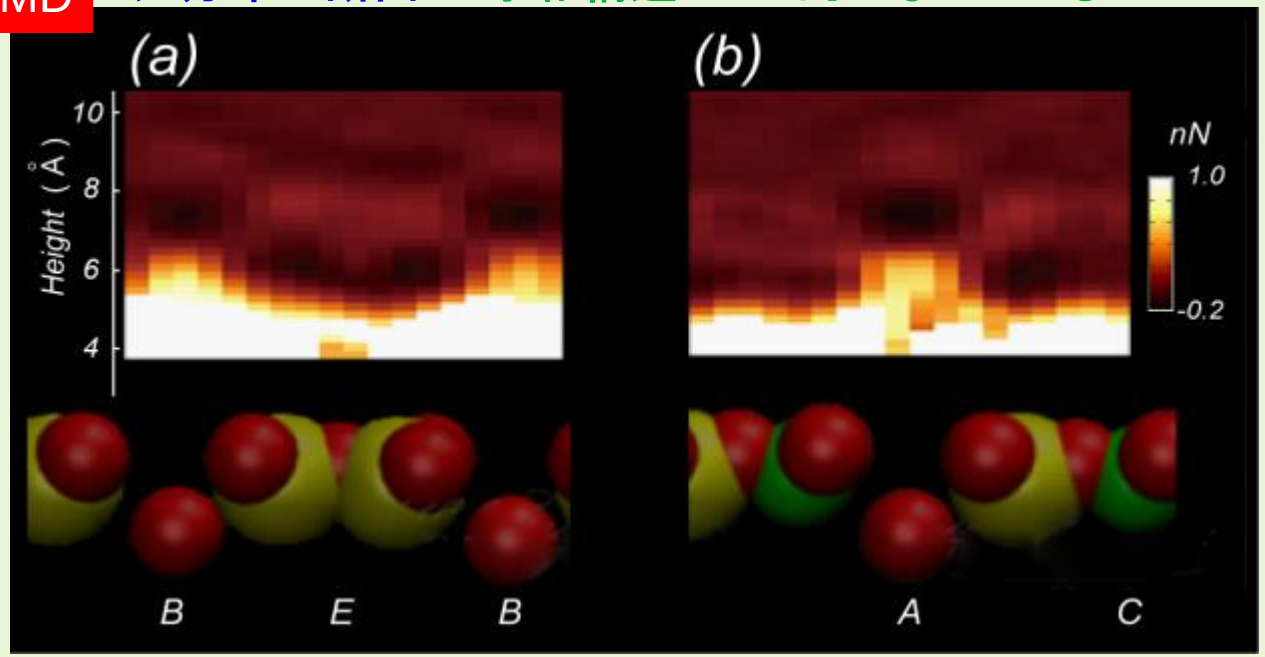
コラーゲン上

毛細管力
＋静水圧力

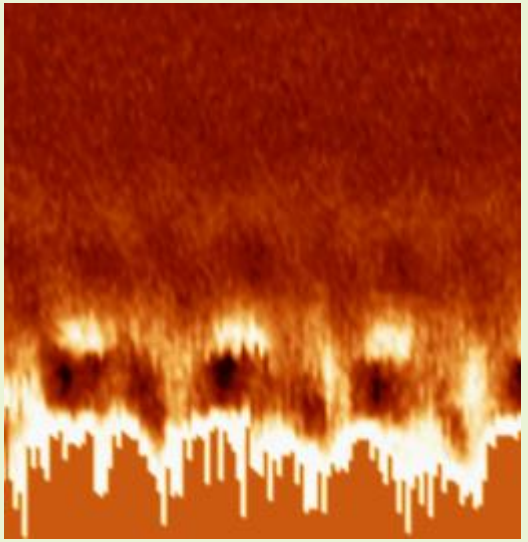
K. Tagami and M. Tsukada, e-J. Surf. Sci. Nanotech. 4, 311-318 (2006).

【MD】水とマイカ表面の界面構造

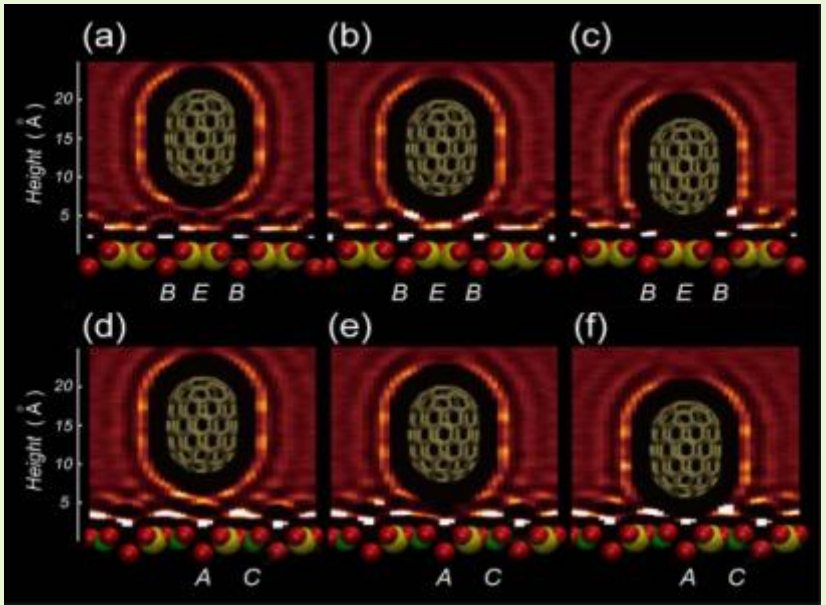
MD　力分布の断面　水和構造が3D的になっている



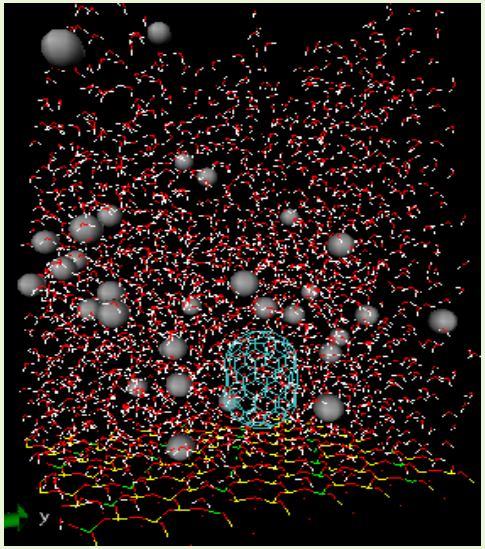
AFM実験　京大山田教授



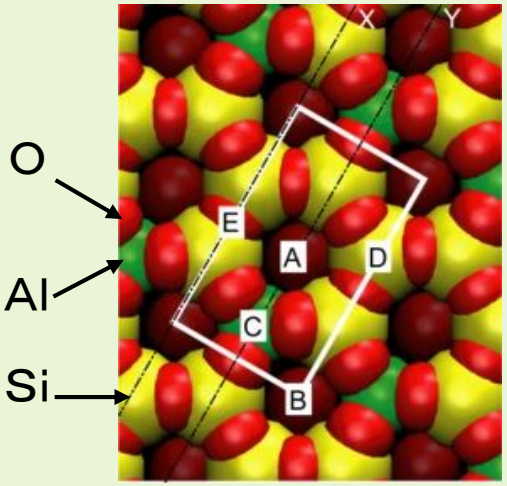
水分子の分布



MD中のスナップショット



マイカ試料モデル

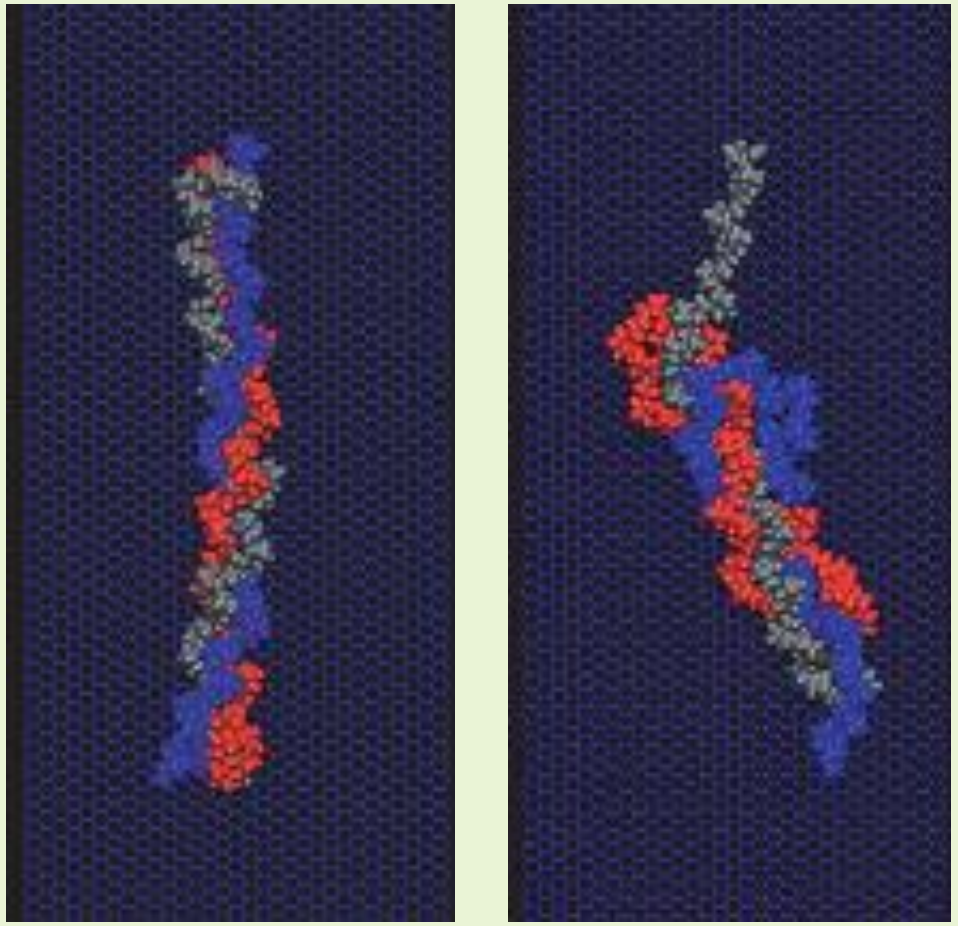


【MD】HOPG基板上のコラーゲンのAFMシミュレーション

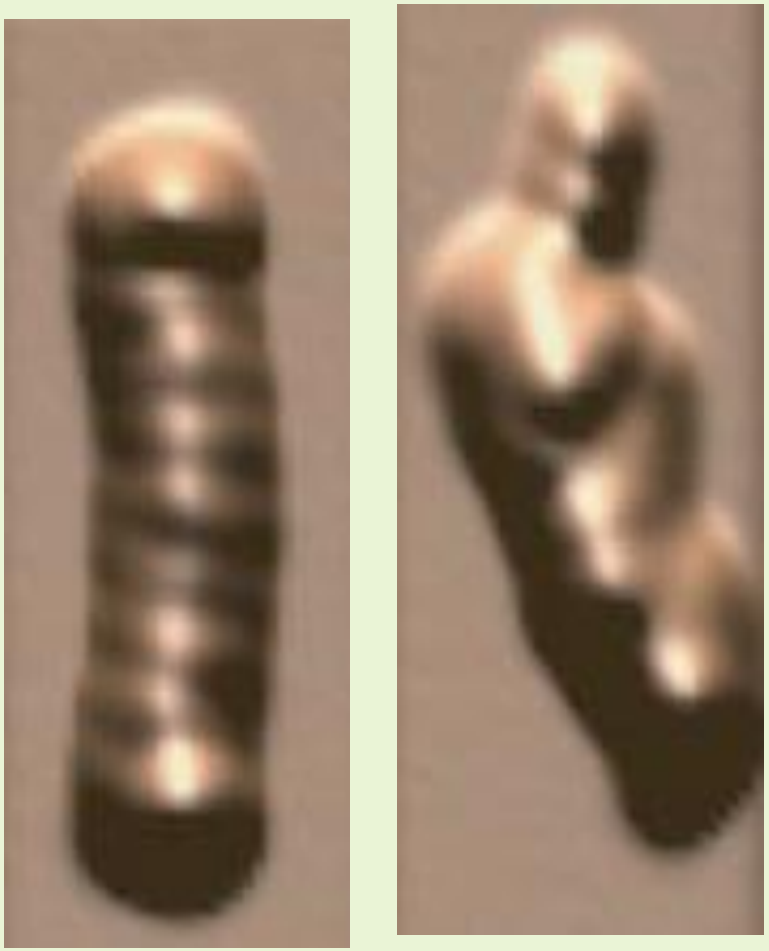
Example of AFM imaging simulation

AFM imaging of collagen adsorbed to the HOPG substrate

Molecular model



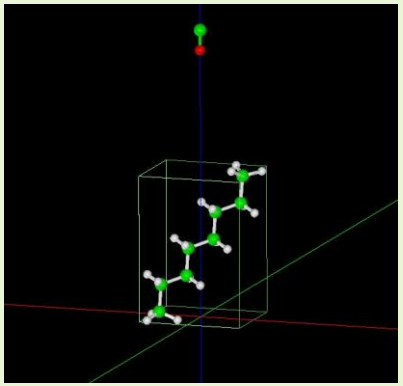
Simulation result

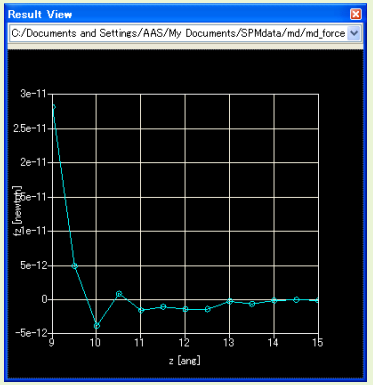


Katsunori Tagami and Masaru Tsukada, e-J. Surf. Sci. Nanotech. Vol. 4 (2006) 294-298.

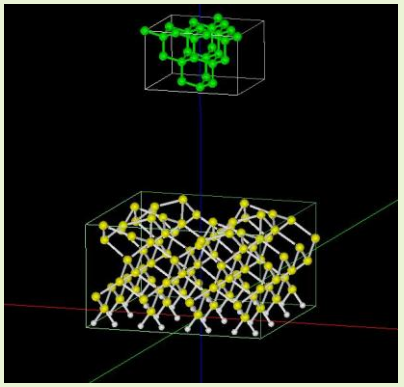
【MD】フォースカーブ測定モード

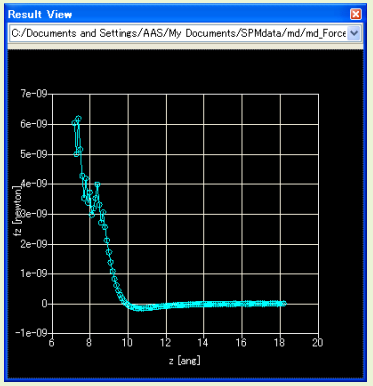
MD あるxy位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します。



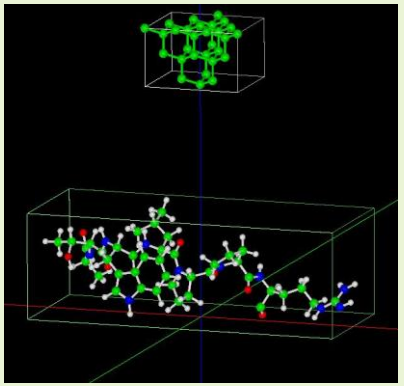


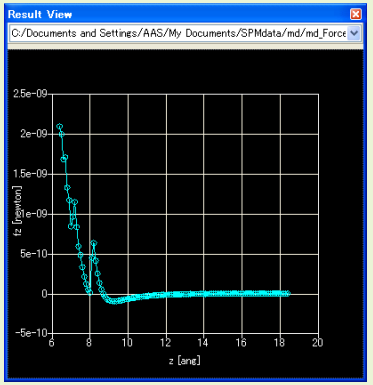
オクタン分子のフォースカーブ





Si(001)表面のフォースカーブ

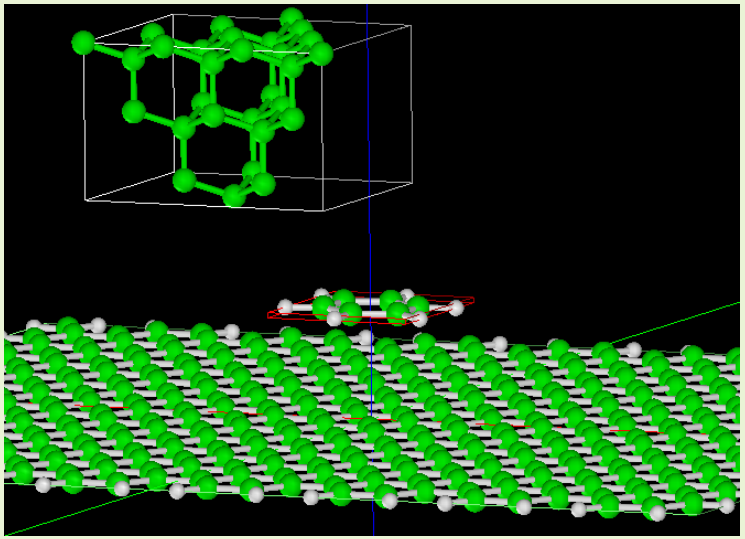


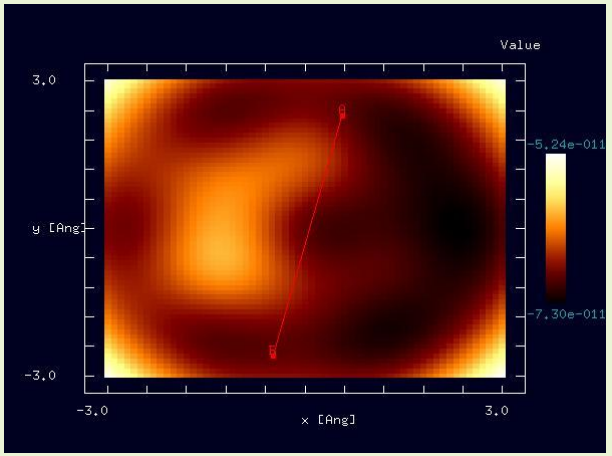


抗血管新生ペプチドのフォースカーブ

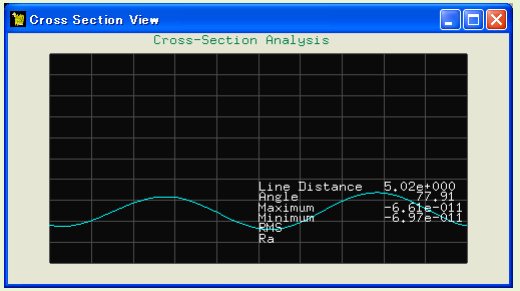
【MD】高さ一定モード

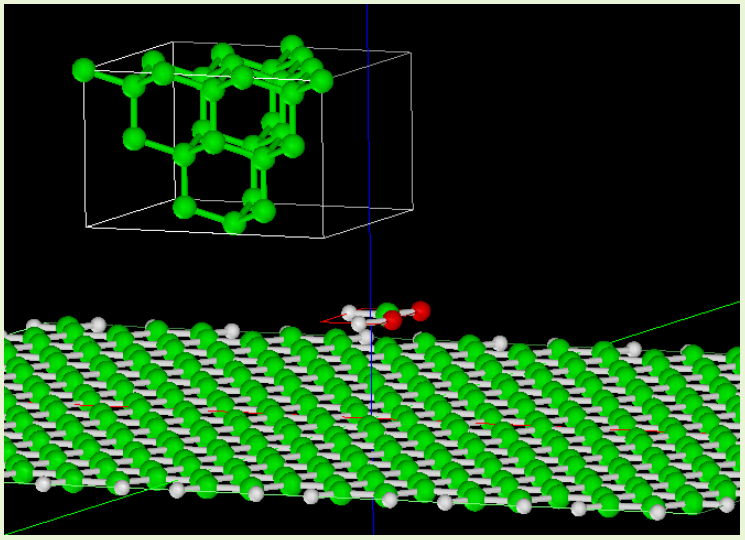
MD　探針を高さ一定で平面上を走査し、探針に作用する力を計算します。

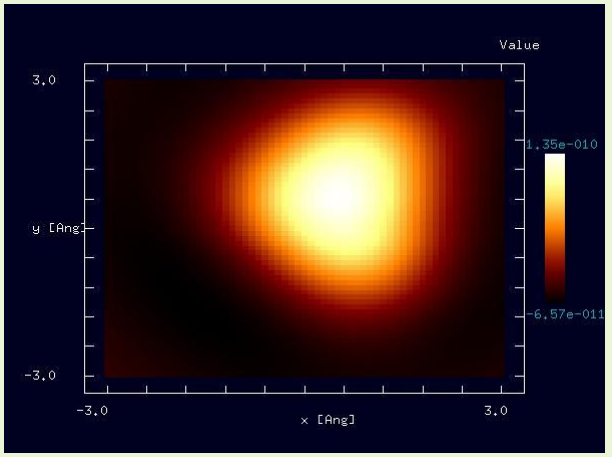




高さ一定モードでHOPG基板上のベンゼンを走査し、探針に作用する力を計算します。



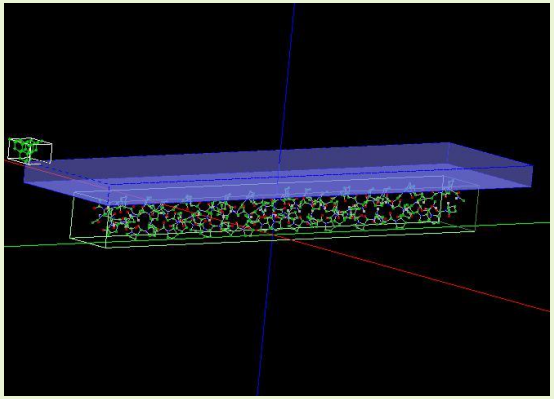


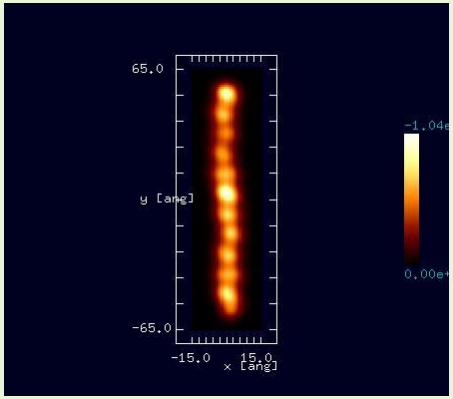


高さ一定モードでHOPG基板上の蟻酸を走査し、探針に作用する力を計算します。

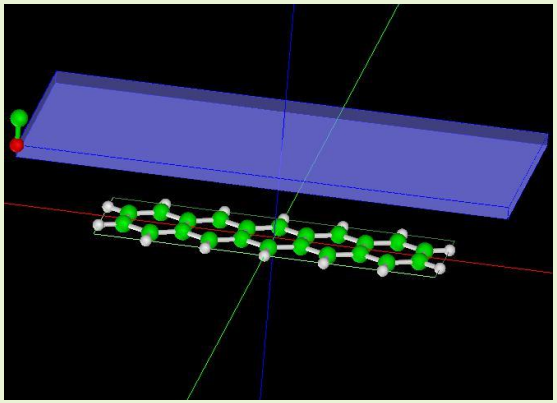
【MD】高さ一定・ノンコンタクトモード

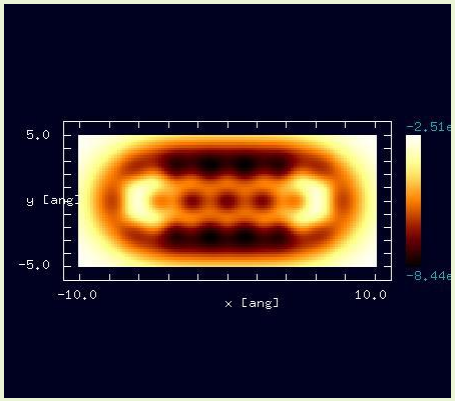
MD　探針を振動させながら高さ一定で平面上を走査し、周波数シフトを計算します。



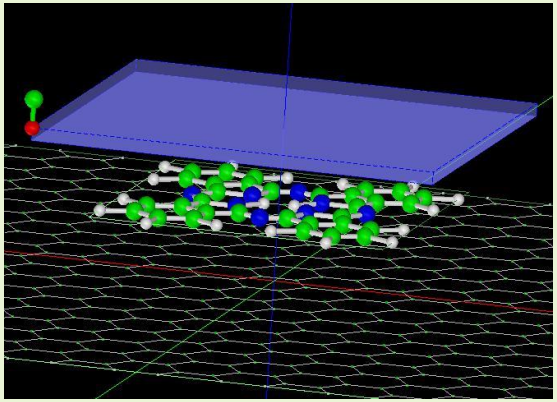


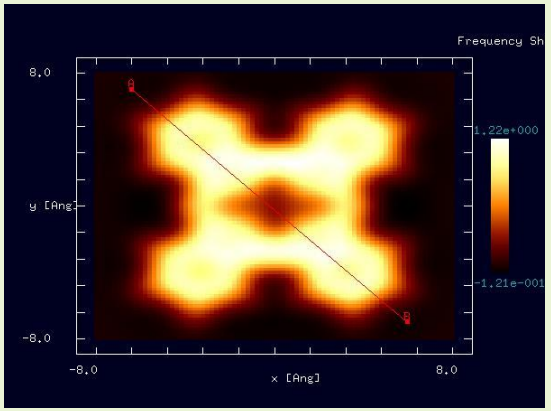
ノンコンタクトモードでコラーゲン分子を走査したときの、周波数シフト像を計算します。



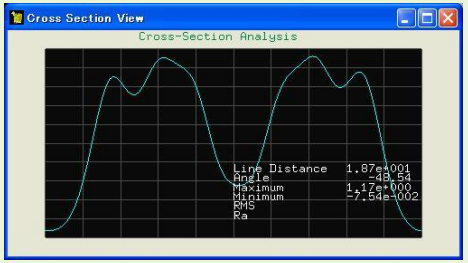


ノンコンタクトモードでペンタセン分子を走査したときの、周波数シフト像を計算します。



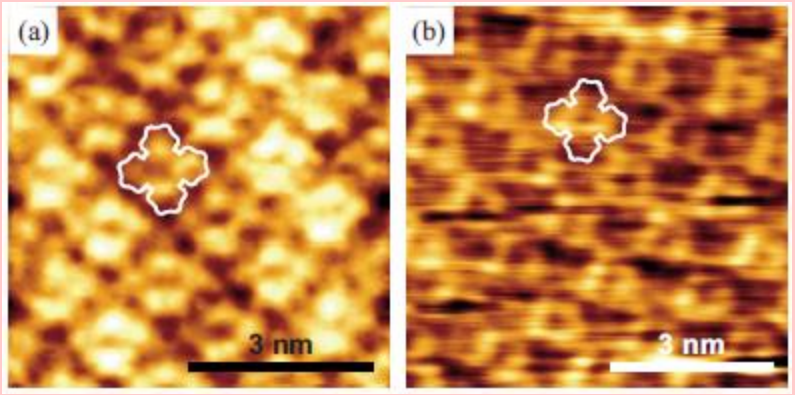


ノンコンタクトモードでフタロシアニン分子を走査したときの、周波数シフト像を計算します。



【MD】高さ一定・ノンコンタクトモード（参考）

cf. Experiment



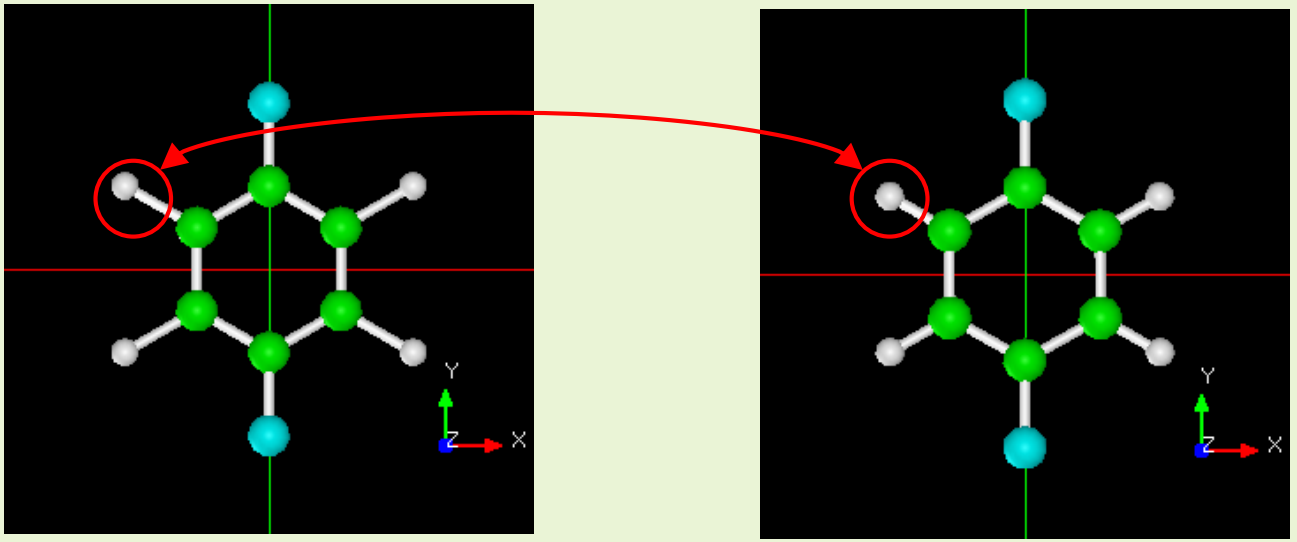
Topographic images of CuPc monolayers on Au(111) surfaces obtained by FM-AFM. (a) 6x6 nm2, Δf =-450 Hz. (b) 7x7 nm^2, Δ f =-134 Hz.

T. Ichii et al, Journal of Applied Physics 107, 024315 (2010).

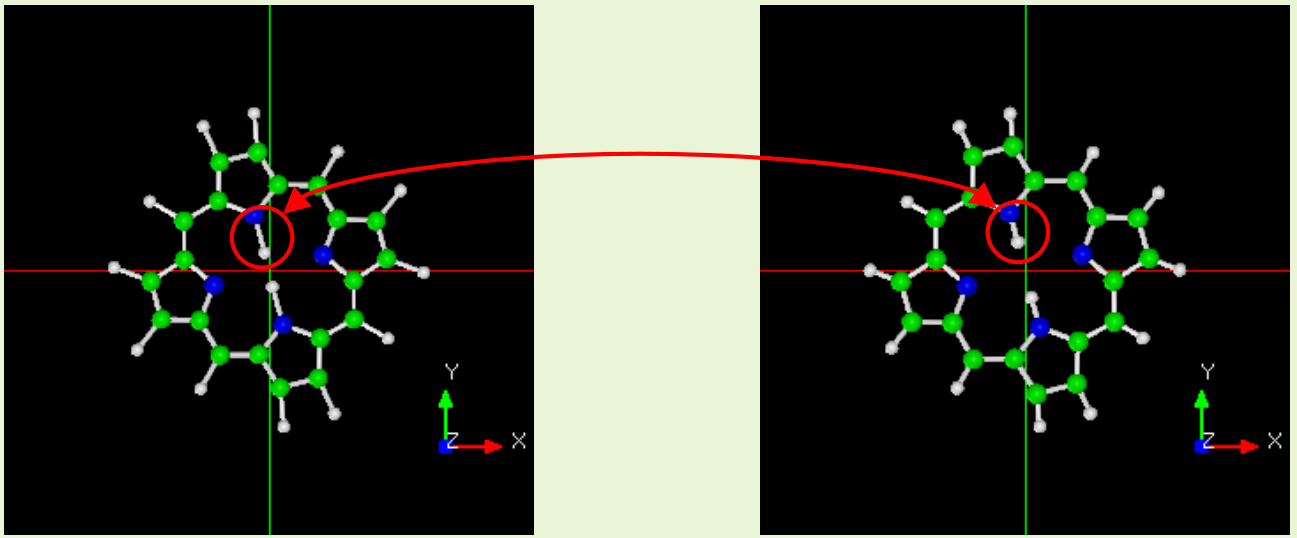
【MD】緩和計算

MD　シミュレーションの前準備として試料分子の構造の緩和計算を行います。

緩和計算前　　緩和計算後

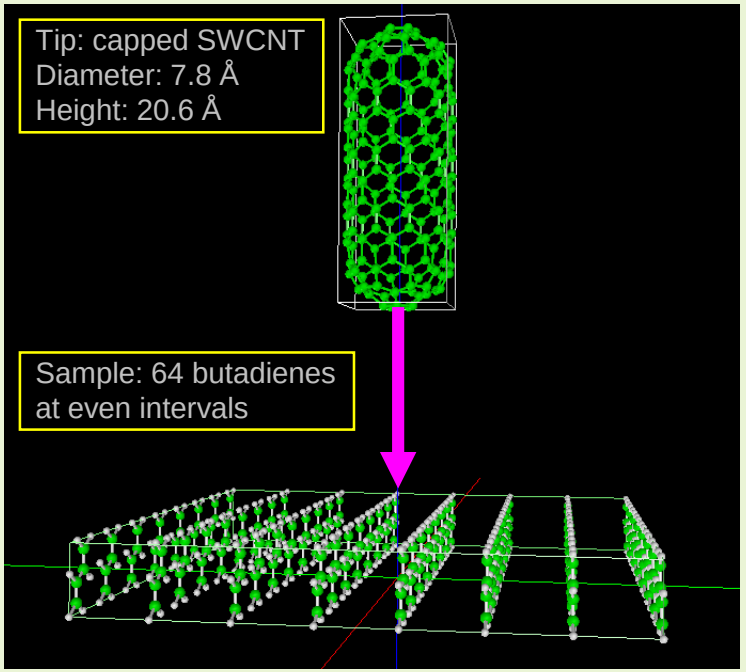


ジクロロベンゼン

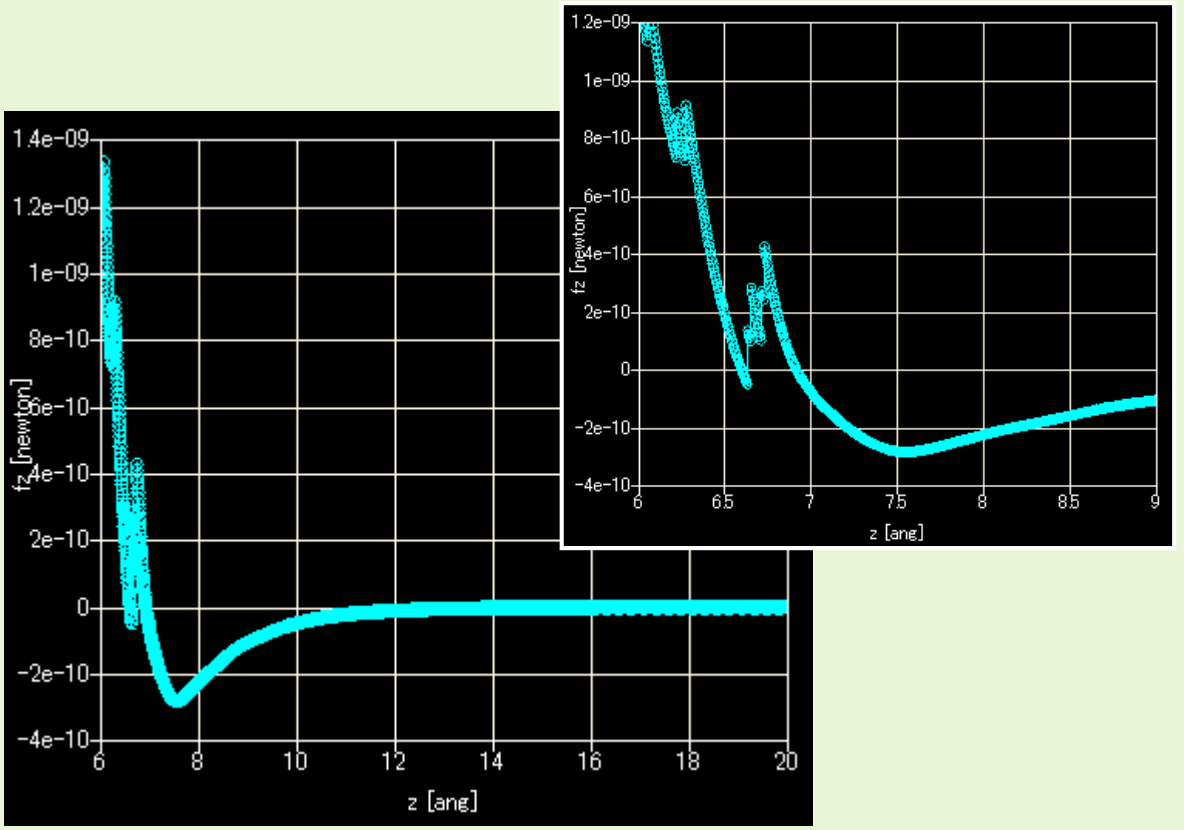


ポルフィリン

【MD】ブタジエン分子を基板上に並べ、CNT探針を接近させてフォース・カーブを測定



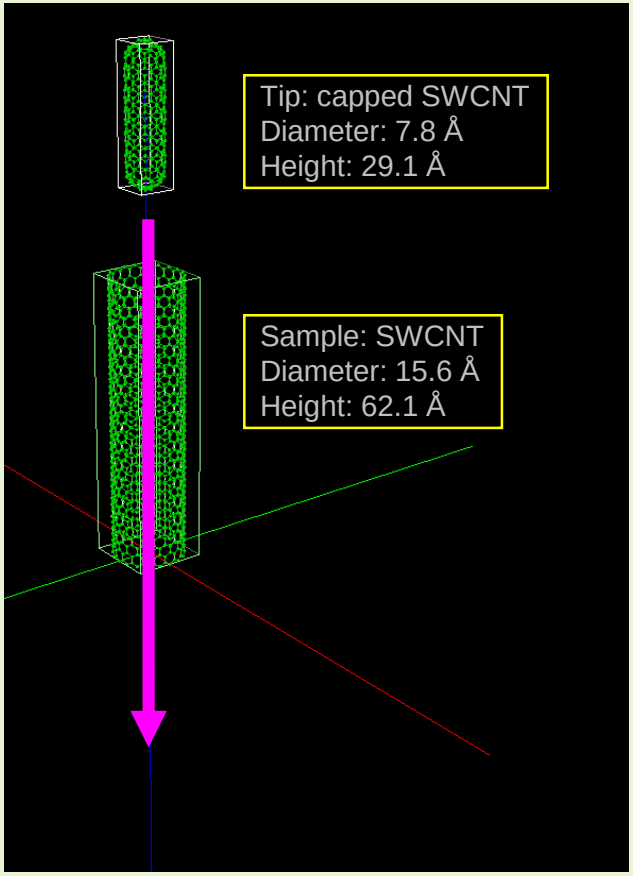
Temperature: 300 K

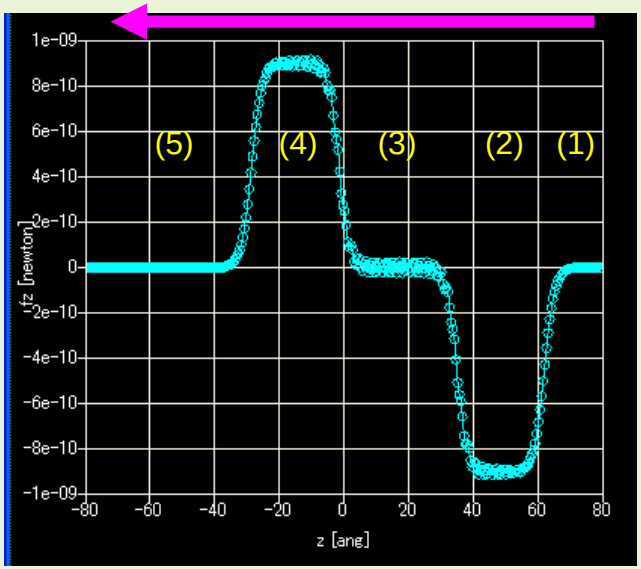


フォースカーブの計算結果。右上は拡大図。
横軸は探針モデルの底部のz座標、縦軸はz軸上向きを正として探針が受ける力を表す。

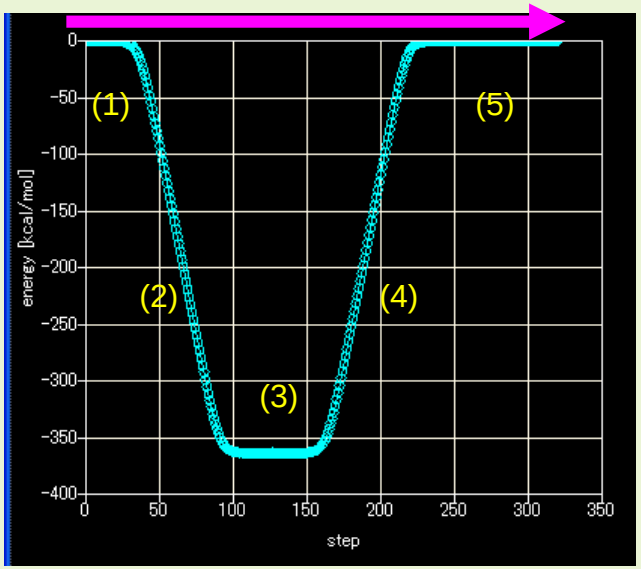
探針の高さが7.5 Å付近で最も引力が高くなるようなフォースカーブが得られた。さらに接近させると探針ー試料間の斥力が強くなっていく。所々にその斥力が急激に弱くなる箇所が見られる。これは、探針からの強い斥力によって試料の分子構造が変形したためと考えられる。

【MD】細いCNT探針を太いCNT試料の内部に差し込んで、フォース・カーブを測定する





フォースカーブ。
横軸は探針モデルの底部のz座標、縦軸はz軸上向きを正として探針が受ける力を表す。



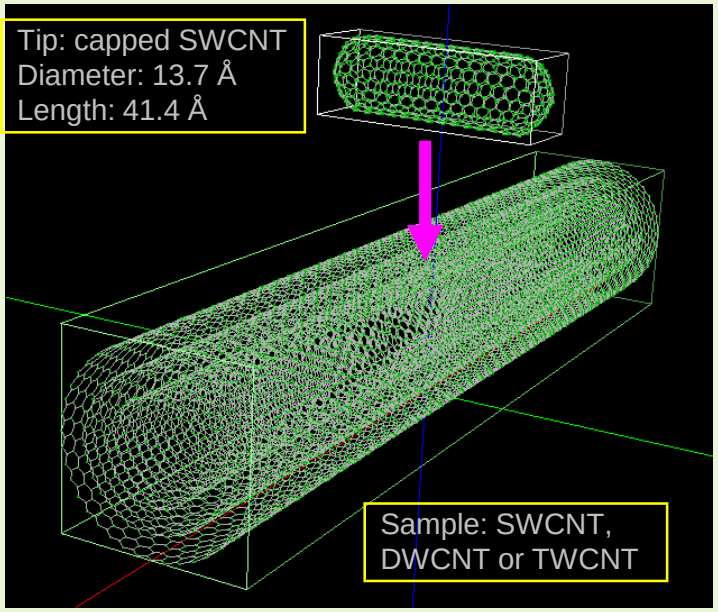
エネルギーの変化。
横軸はシミュレーションのステップ数、縦軸は系のエネルギーを表す。

（1）細いCNTと太いCNTとの間に相互作用がない領域。
（2）細いCNTが太いCNTに入り込んでいく領域。
（3）細いCNTが太いCNTに完全に包まれ、筒の内部を移動している領域。
（4）細いCNTが太いCNTから出て行く領域。
（5）細いCNTと太いCNTとの間に相互作用がない領域。

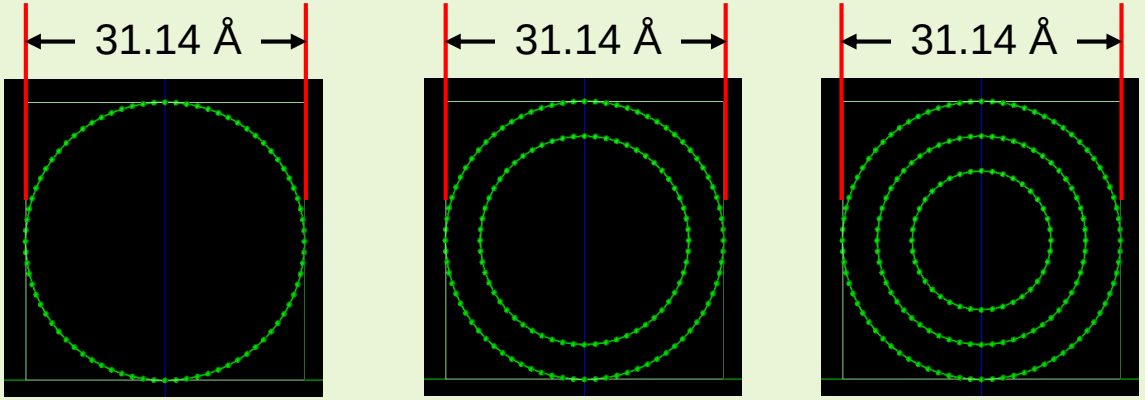
（2）と（4）では力の向きが逆転している。どちらの場合も細いCNTを太いCNTへ引き入れようとする力が働いている。つまり、細いCNTが太いCNTの内部に存在するほうがエネルギー的に安定であることを意味している。

（3）の領域では、細いCNTが筒の内部を移動している間、探針が受けるz方向の力が非常に小さい。つまり、筒の内部にいる限りz方向には自由に動きやすいことを意味している。

【MD】1層、2層、3層カーボンナノチューブの側面を押し込んでフォース・カーブを測定(1/2)



Cross section of sample models



SWCNT model　DWCNT model　TWCNT model

Interlayer distance = 3.89 Å(*1).

The sample models can be deformed,
but the atoms at both edges can not.
The tip model can not be deformed.

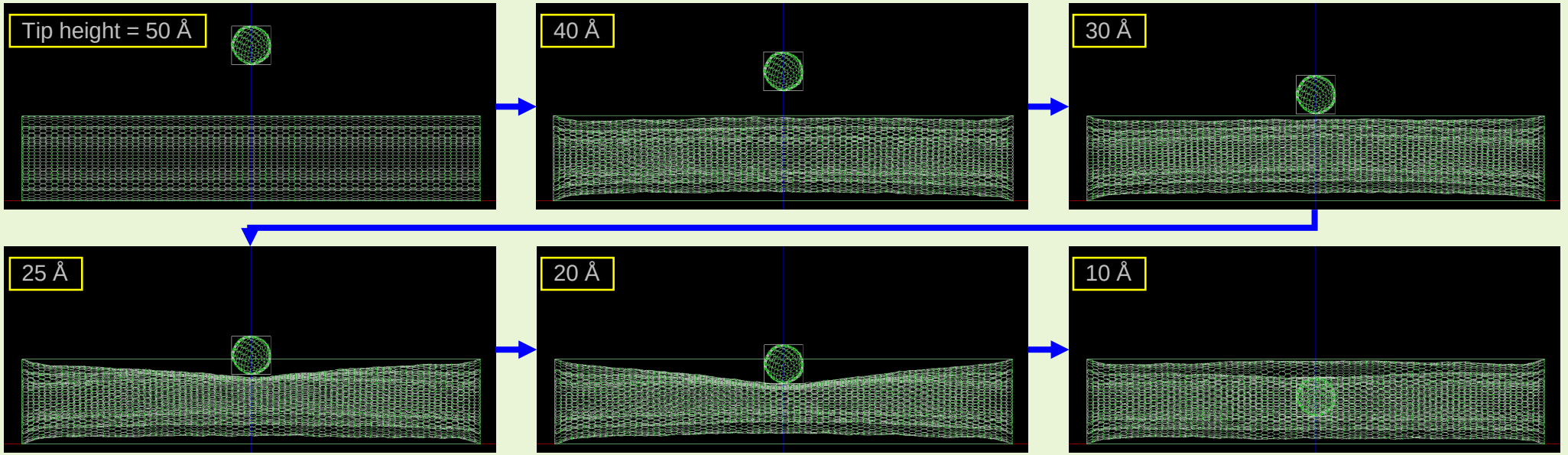
MM3 force field parameter
Atom ID 2 (C_{sp2} alkene) was assigned.

	Chiral Vector	Diameter(Å)	Length (Å)
1st CNT (Outermost)	(40, 0)	31.14 Å	168.03 Å
2nd CNT	(30, 0)	23.35 Å	168.03 Å
3rd CNT (Innermost)	(20, 0)	15.57 Å	168.03 Å

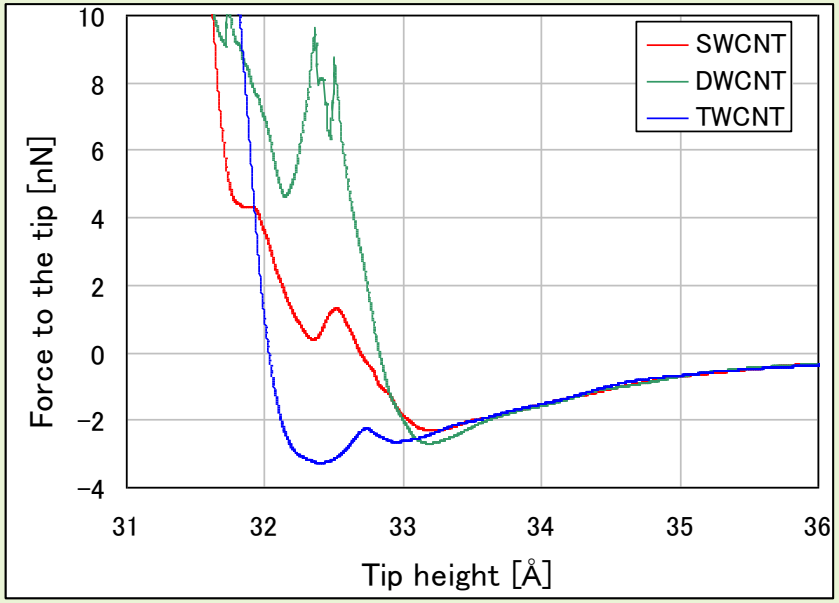
(*1) A little larger than the mesured distance 3.4 Å [1].

[1] Sumio Iijima, Nature 354 (1991) 56.

【MD】1層、2層、3層カーボンナノチューブの側面を押し込んでフォース・カーブを測定(2/2)



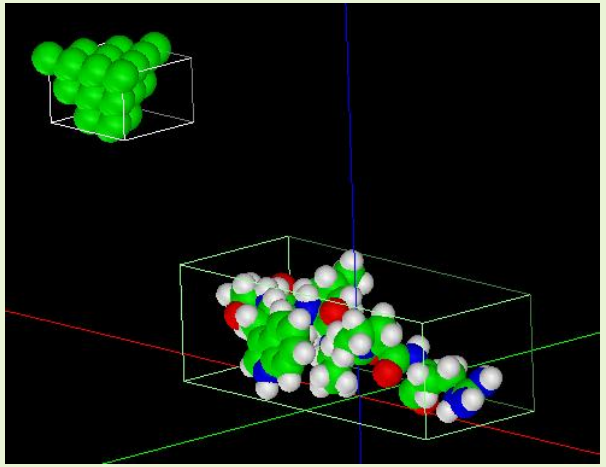
Bankrupted



探針が試料に近づくと、探針が受ける力は引力から斥力に転じる。斥力のカーブがSWCNTでは緩やかなのに対してDWCNT, TWCNTでは急激に立ち上がる。つまり、SWCNTは横から押し込まれると弱く反発するのに対して、DWCNTやTWCNTは強く反発する。内側にあるCNTが支えとなって反発力を強めていると推察される。

【MD】抗血管新生ペプチドのAFM像シミュレーション

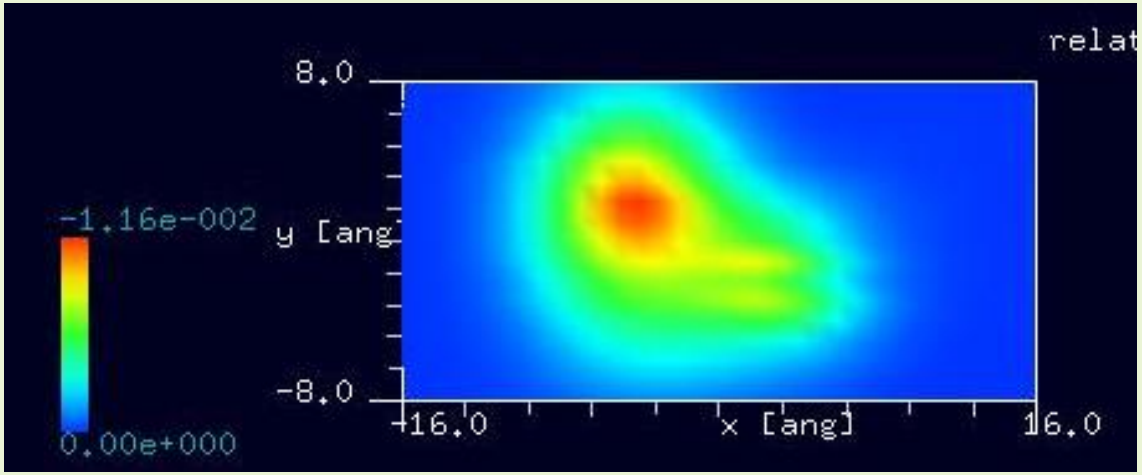
シミュレートモデル



探針：ダイヤモンド探針
試料：ペプチドATWLPPR
(PDB: 2jp5)
スキャンエリア：32 Å x 16 Å x 5 Å

分子の変形を考慮に入れた、
周波数シフトAFM像シミュレーション

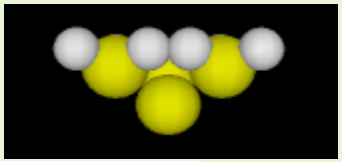
N端側のA, T残基を固定。他は変形可。



【DFTB】Bardeenの摂動法とDFTB法によるSTM像のシミュレーション

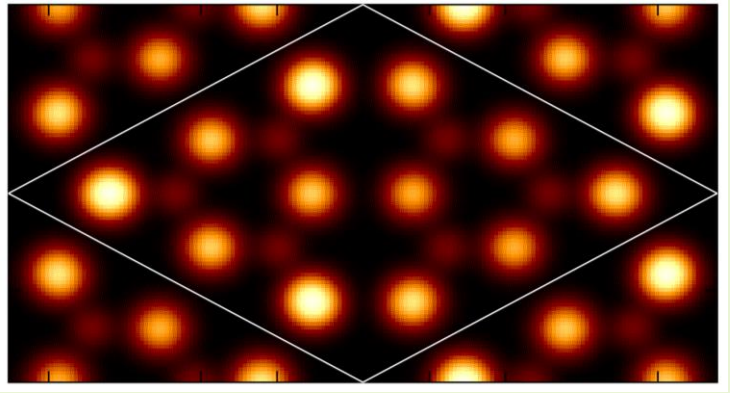
-トンネル電流の計算-

DFTB **STMシミュレーション**



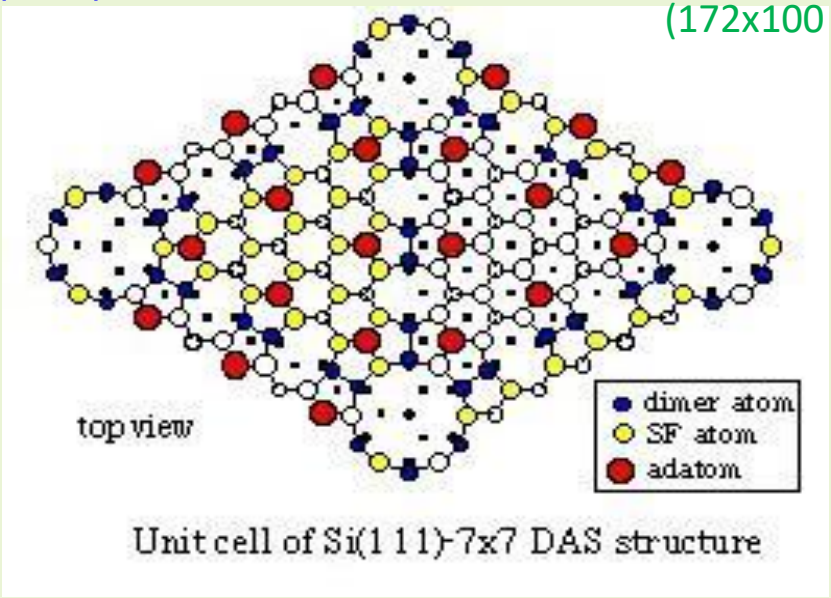
Si_4H_9 tip; 探針高さ = 4.0 Å

$$I(\mathbf{R},V)=\frac{2\pi e}{\hbar}\int_{E_F^L}^{E_F^R}\sum_{ii'jj'}G_{ii'}^{S}(E)J_{i'j'}(\mathbf{R})G_{j'j}^{T}(E+eV)J_{ji}(\mathbf{R})dE$$



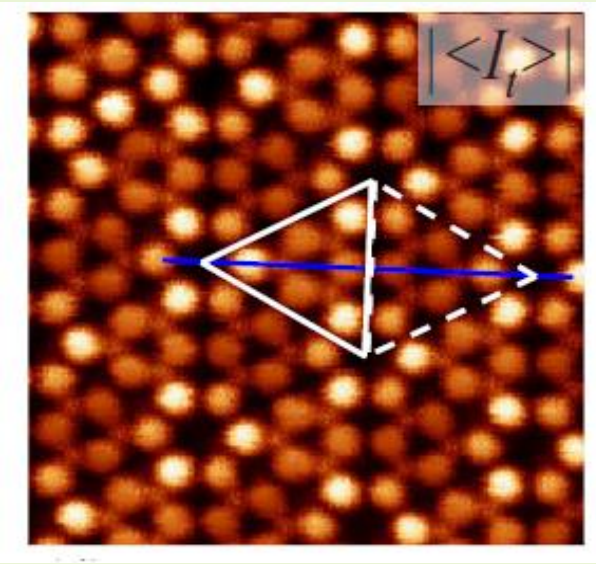
Si(111)-7x7 DAS 構造

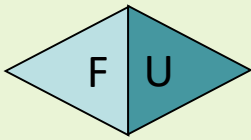
計算時間　1.5 時間
(172x100 pixels)



Unit cell of Si(111)-7x7 DAS structure

実験 by Sawada et al. (2009)

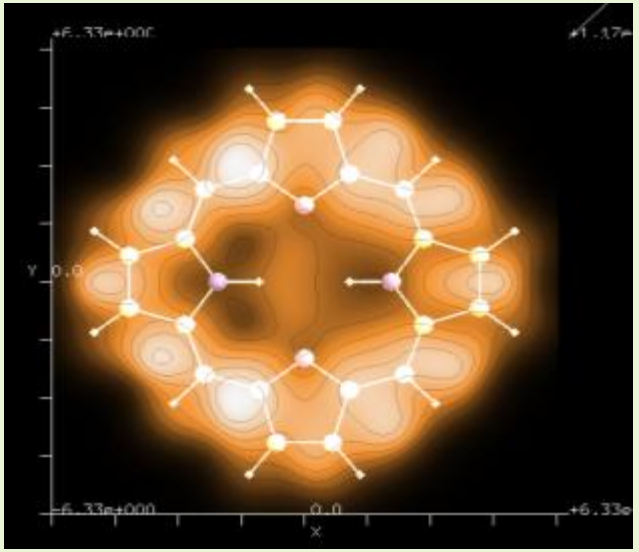


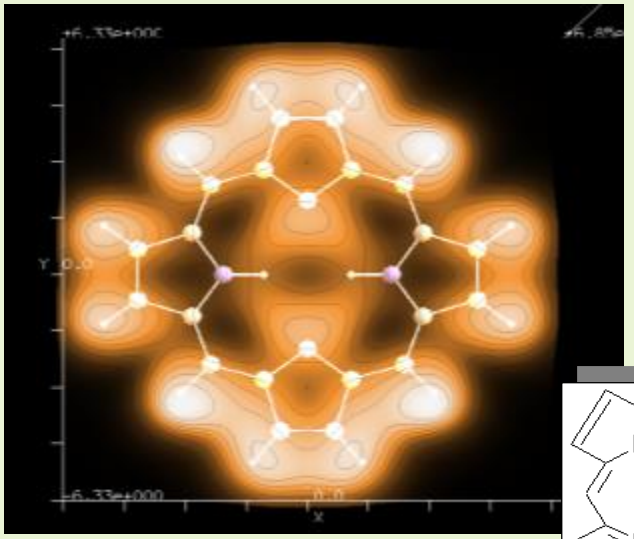


F領域とU領域の明るさの違いを再現
レストアトムがわずかに見えることを再現

【DFTB】ポルフィリンのSTM像

DFTB (W tip : 6s,5d orbitals)





(W tip: 6s orbital)

STM 像のシミュレーション

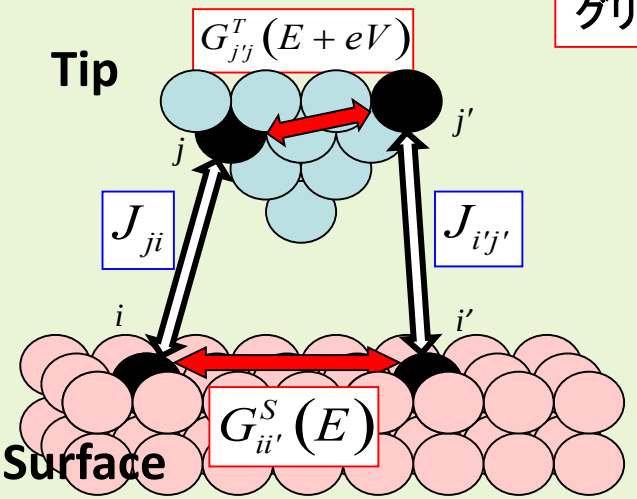
$$I(\mathbf{R},V)=\frac{2\pi e}{\hbar}\int_{E_F^L}^{E_F^R}\sum_{ii'jj'}G_{ii'}^{S}(E)\,J_{i'j'}(\mathbf{R})\,G_{j'j}^{T}(E+eV)\,J_{ji}(\mathbf{R})\,dE$$

グリーン関数　　トンネル行列要素

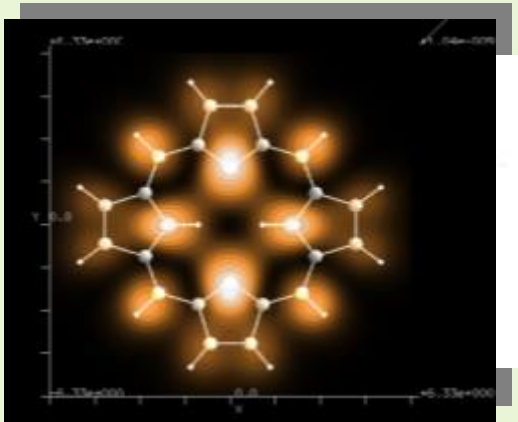
DFTB計算

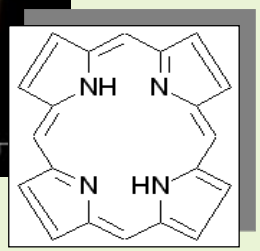
$$G_{ii'}^{S}(E)=\sum_{\nu}C_{\nu}{}^{S}C_{\nu}^{S*}\delta(E-E_{\nu})$$

$$G_{j'j}^{T}(E)=\sum_{\mu}C_{j'}{}^{T}C_{j}^{T*}\delta(E-E_{\mu})$$

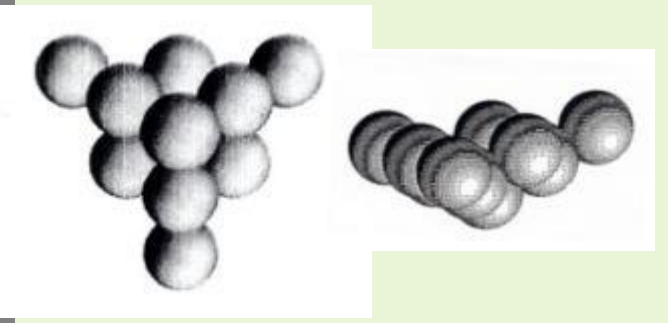


LDOS



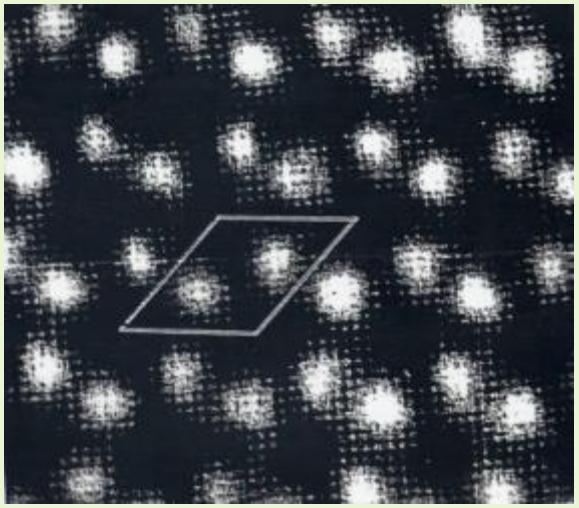


W_{10}[111] 探針模型

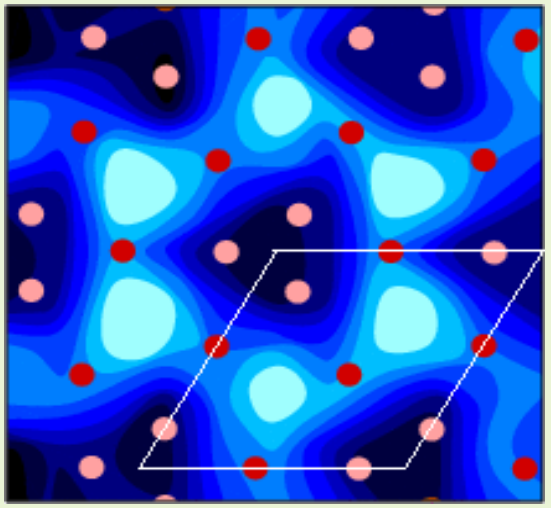


【DFTB】SPMは対象の何をどう見るのか？　Si √3 ×√3-Ag 表面の場合

STM 実験



STM 理論

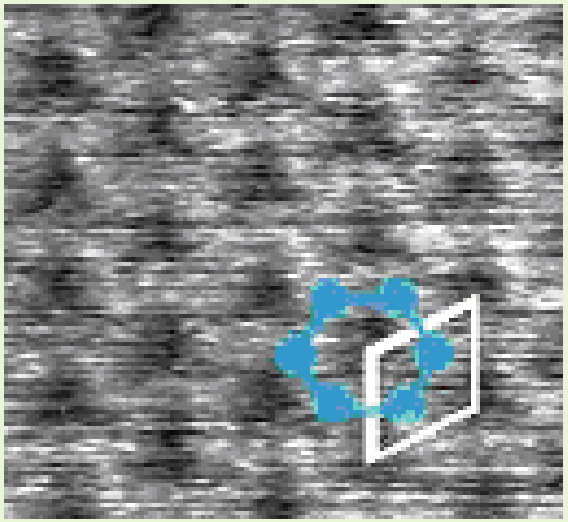


S. Watanabe, M. Aono and M. Tsukada,
Phys. Rev. B. 44, 8330 (1991)

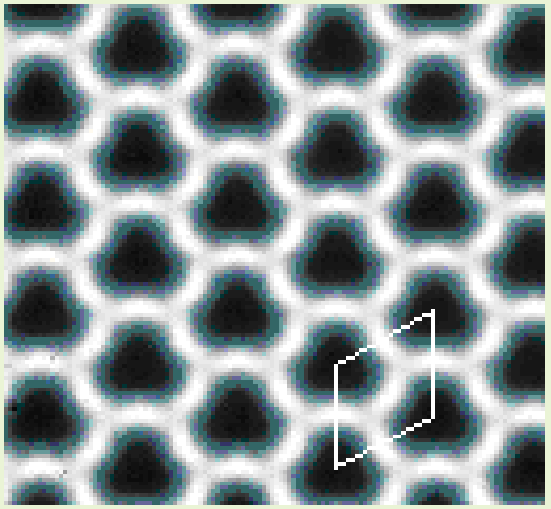
**同じ表面だが
STM像とAFM像は
全く異なる？？**

STM 像は、非占有波動関数の振幅を見ている。

ncAFM 実験



ncAFM 理論

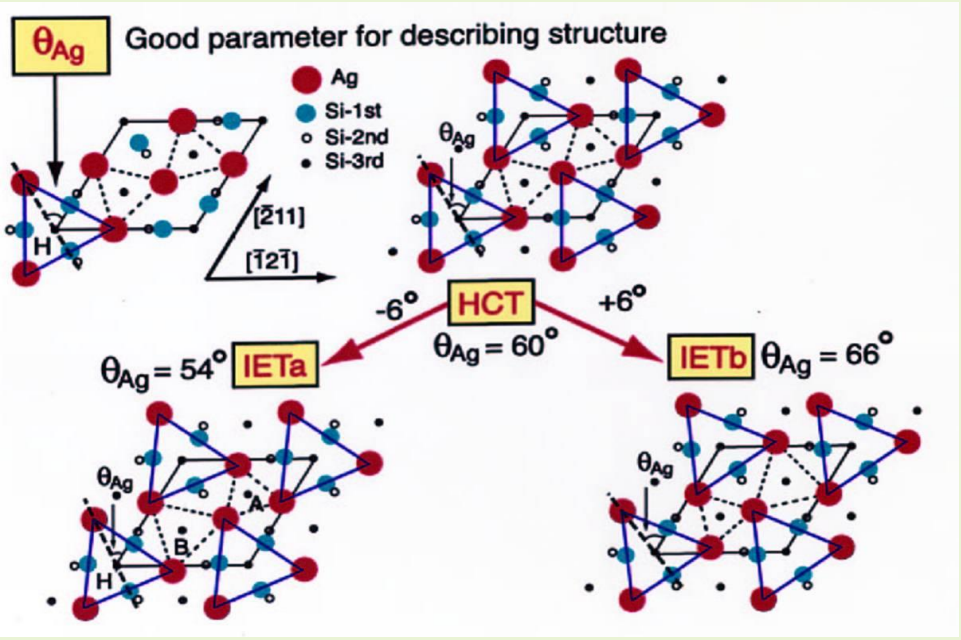


N. Sasaki, S. Watanabe, M. Tsukada,
Phys. Rev. Lett. 88, 046106 (2002).

AFM像の再現は、理論計算によって再現されるが・・・・・

【DFTB】Si(111)√3×√3表面のncAFM像の温度依存性

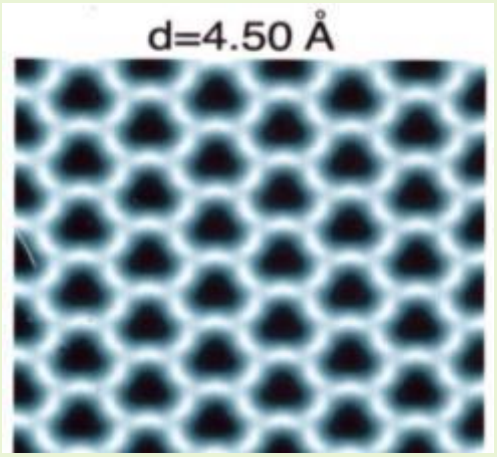
N. Sasaki, S. Watanabe, M. Tsukada,
Phys. Rev. Lett. 88, 046106 (2002).



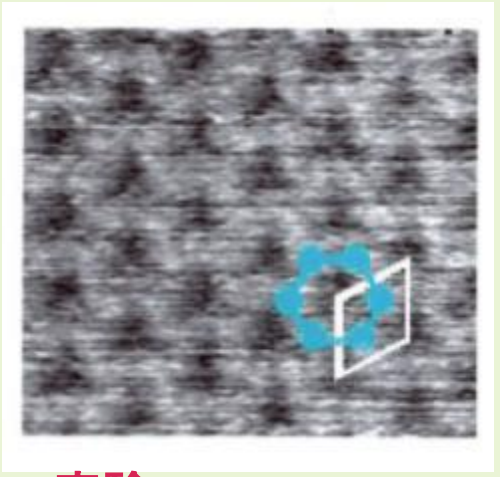
温度依存性は最外層銀原子の構造揺らぎによって説明できる。

実験と理論の良い一致が見られた。

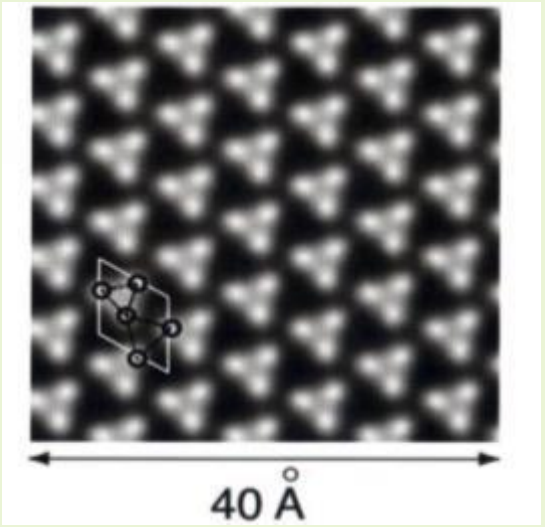
理論



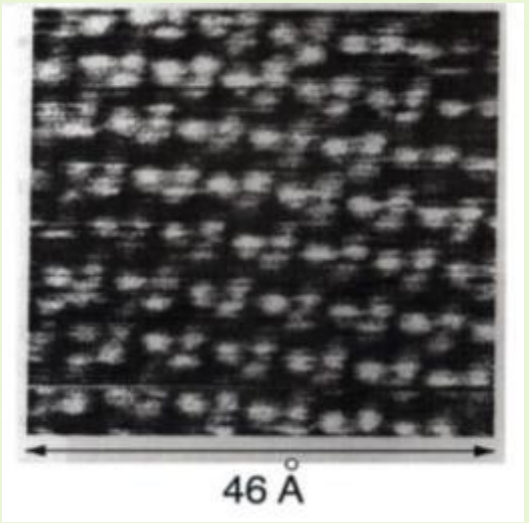
実験
By Prof. Morita ***T=300K***



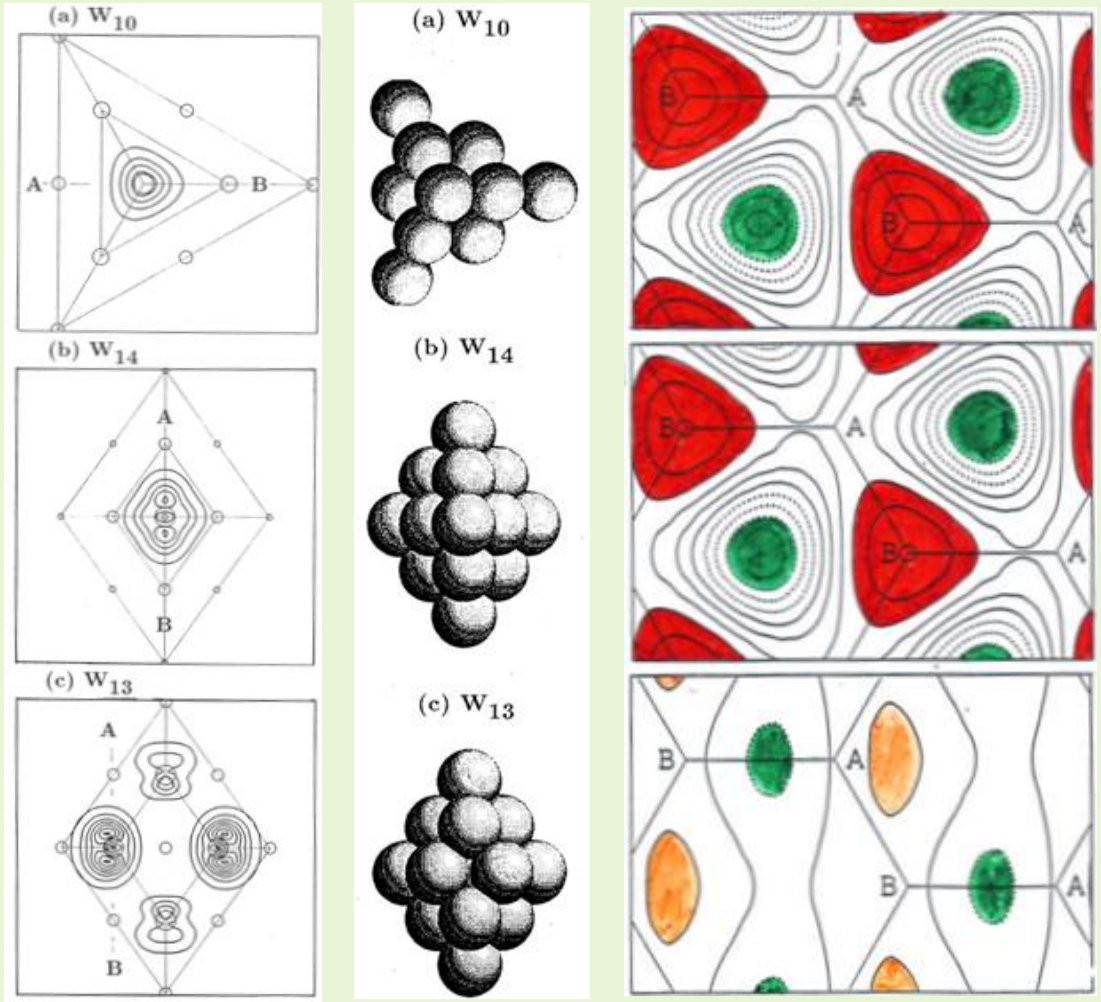
理論



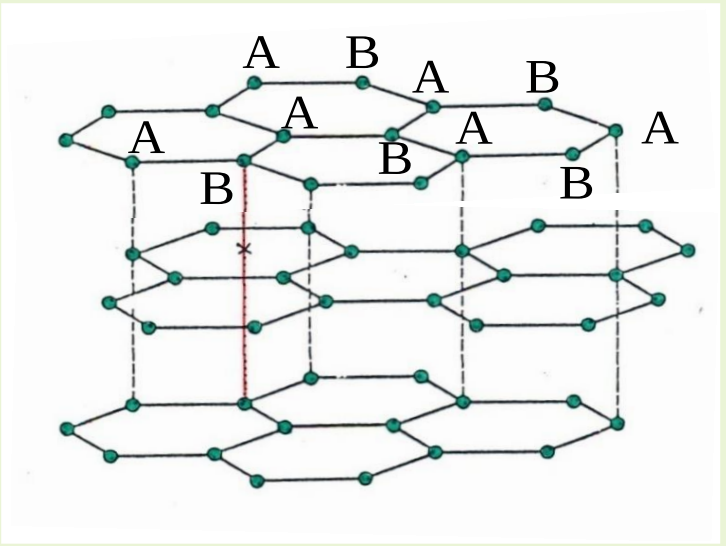
実験
By Prof. Morita ***T=6.2K***



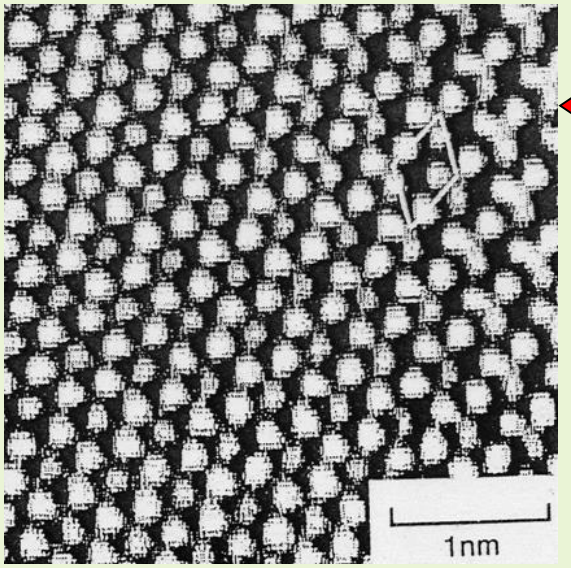
【DFTB】探針形状の効果　グラファイトのSTM像の場合



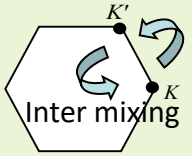
N. Isshiki, K. Kobayashi, M. Tsukada,
J. Vac. Sci. Technol. B 9(2), 475 (1991).



Nakagawa et al., Proc. Ann. Meeting of
The Phys. Soc. Jpn, (1989) 374



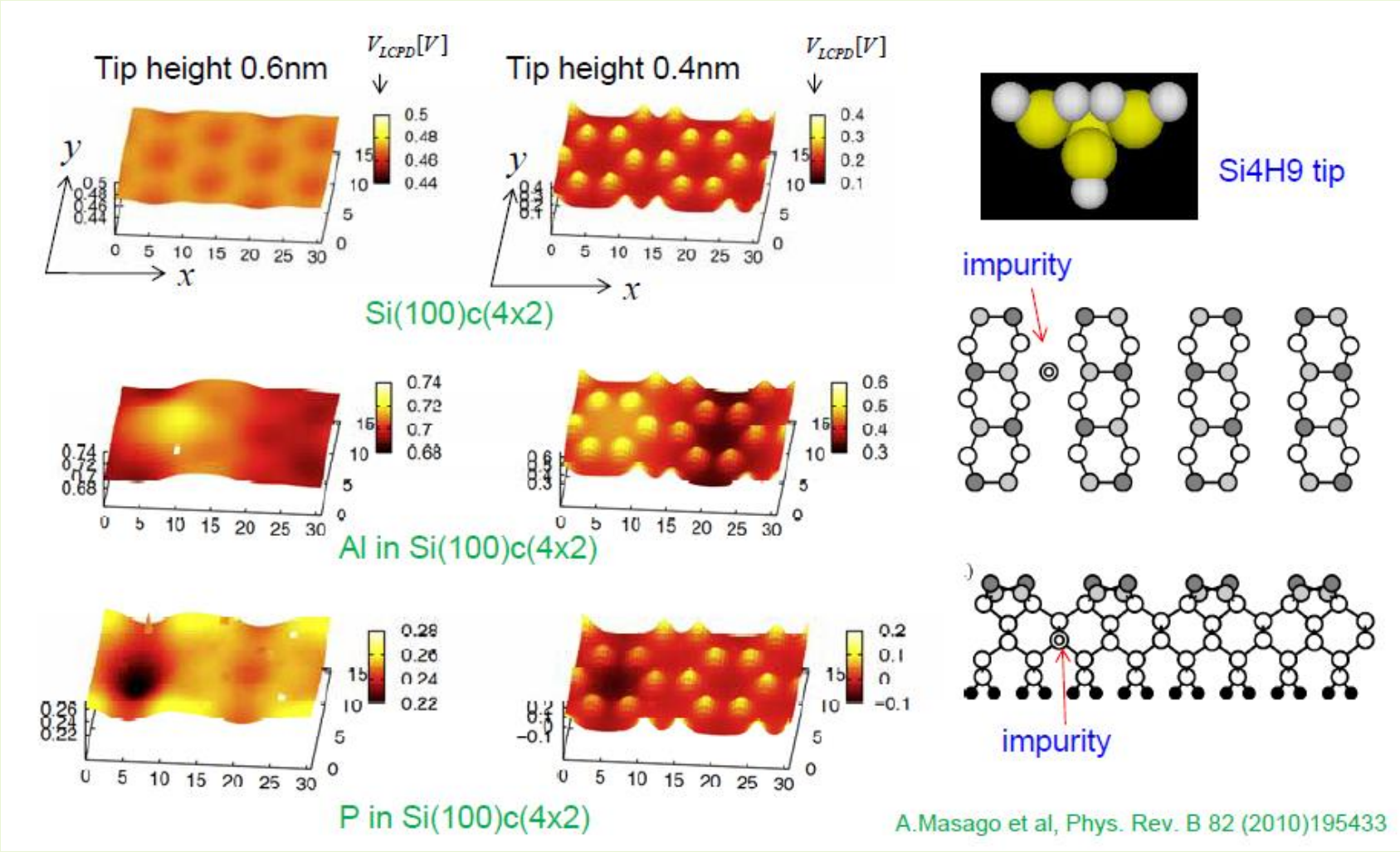
Super structure



Brilliouin Zone

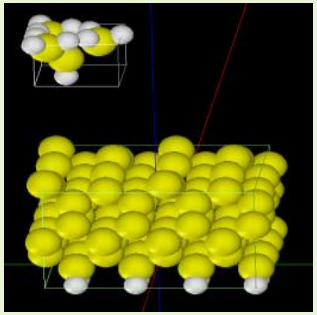
【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像

DFTB　-局所接触電位差の分布像-



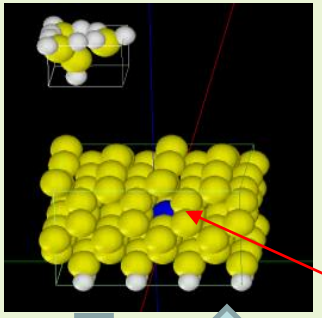
試料表面のごく浅い部分に不純物を持っているとしたシリコン表面を、KPFMで走査したときのシミュレーション結果。不純物の表面位置に原子スケールよりもやや大きいスポットが現れている。また、試料表面の原子によるスポットも確認することができる。

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像



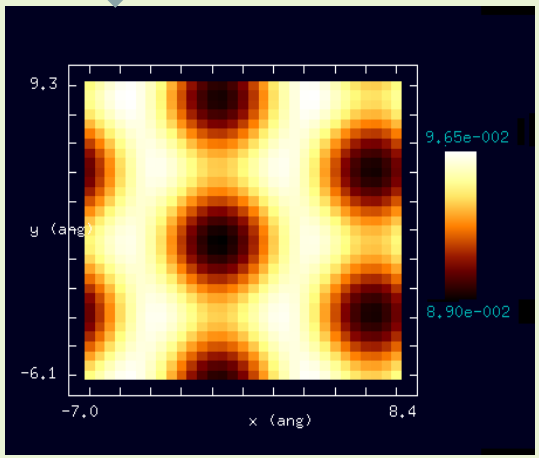
探針: H-Si_4H_{10}
試料表面: Si(001)-c(4x2)

探針-試料間の距離: 6 Å

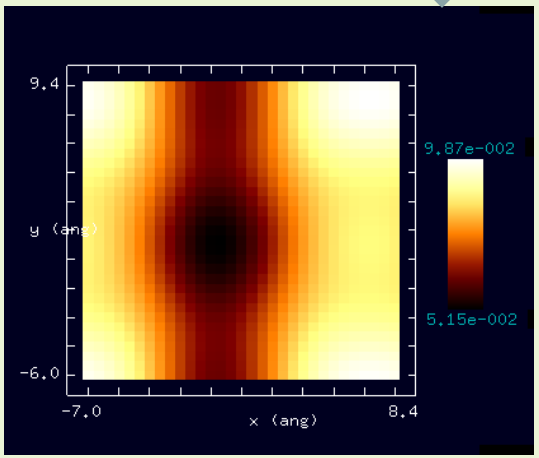


探針: H-Si_4H_{10}
試料表面:
Si(001)-c(4x2)に
窒素原子をドープしたもの

窒素原子

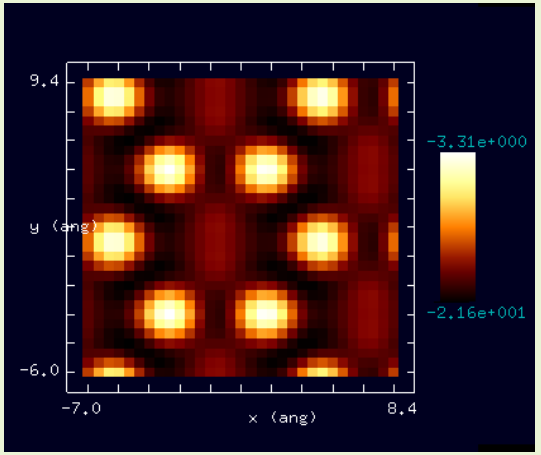


KPFM 局所接触電位差像
窒素原子ドープなし



KPFM 局所接触電位差像
窒素原子ドープあり

窒素をドープすることで、
局所接触電位差が
マイナスにシフトしている。



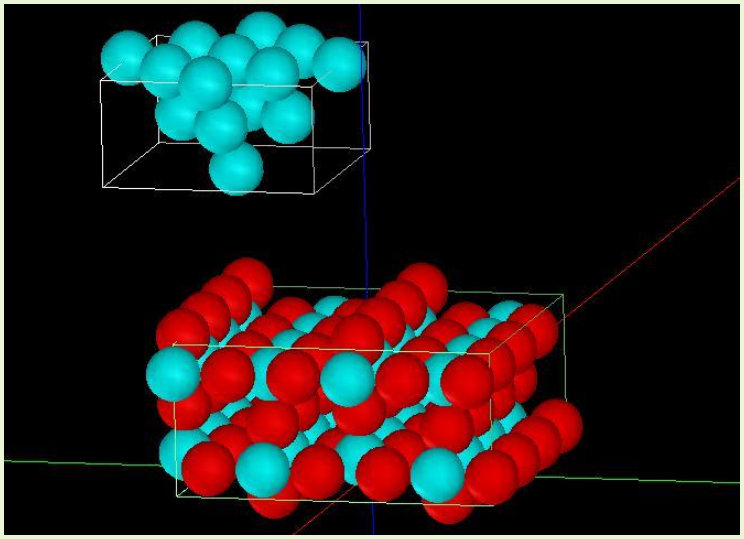
AFM 周波数シフト像
窒素原子ドープあり

周波数シフト像では
原子の高さを反映した像が
得られている。

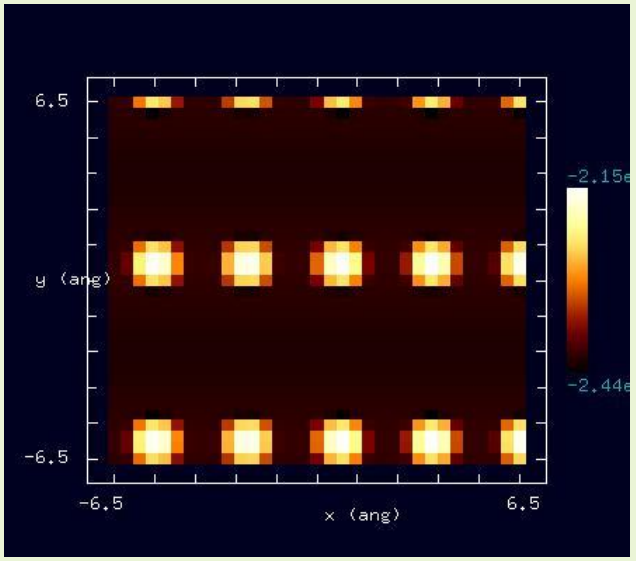
【DFTB】TiO_2(110)表面のLCPD像

DFTB　KPFMを用いて、TiO_2(110)表面のLCPD像を計算

探針:　Pt_{14}
試料表面:　TiO_2(110)



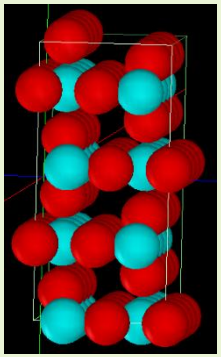
探針・試料モデル



LCPD像のシミュレーション結果

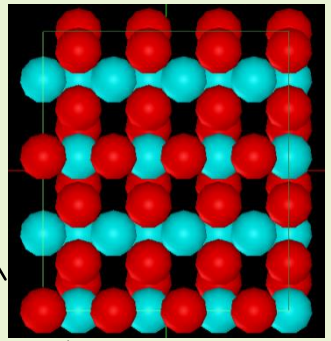
【DFTB】TiO_2(110)面のAFM, KPFM観察とシミュレーション

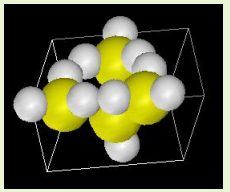
探針: Si_4H_{10}
試料: TiO_2(110)-(1x1)



$TiO_2(110)-(1\times1)$

一番高い位置の酸素

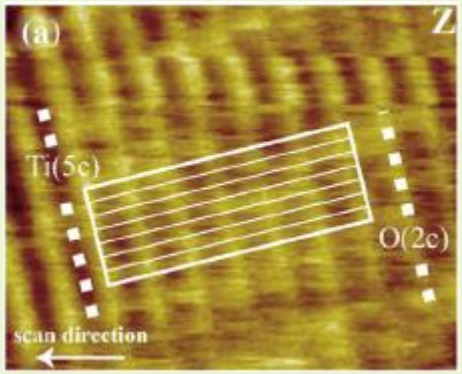




Si_4H_{10}

探針

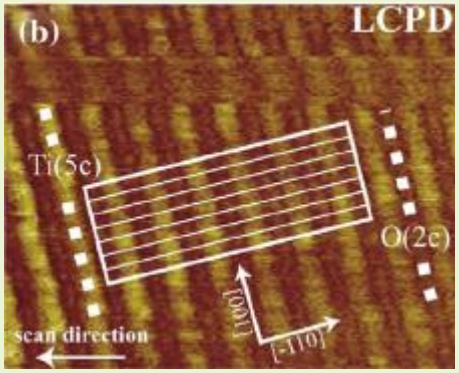
実測画像



AFM

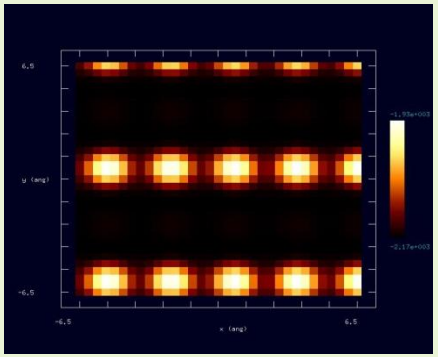
Surface Science Reports, 66, (2011),1-27

KPFM

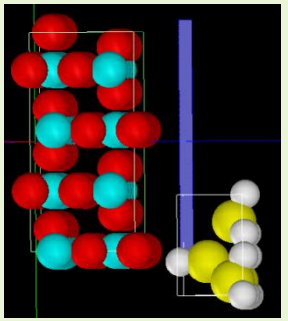


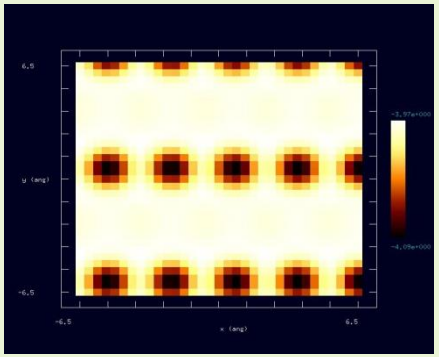
DFTB

シミュレーション結果



AFM 探針-試料間の距離3.5Å



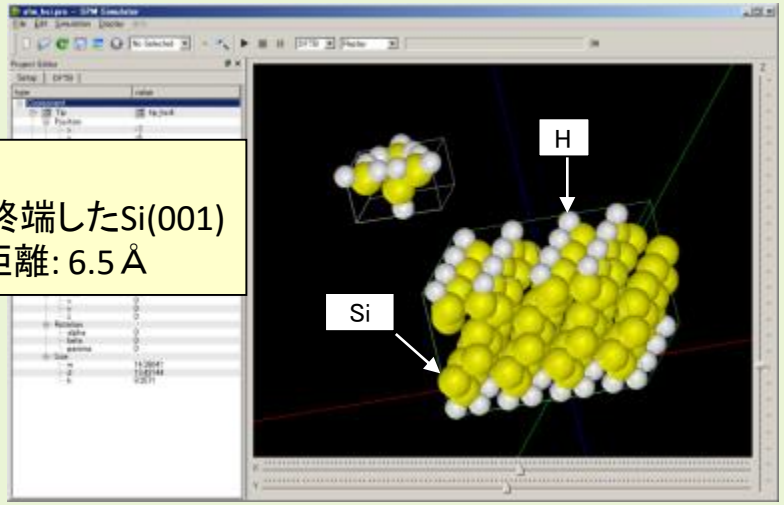


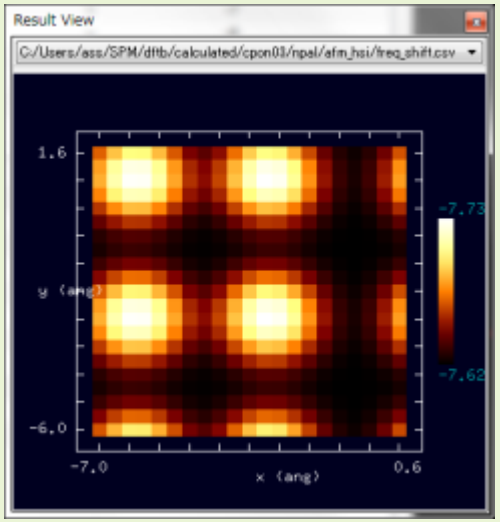
KPFM 探針-試料間の距離2.5Å

【DFTB】周波数シフトAFM像、KPFM像の計算例

DFTB　周波数シフト像のシミュレーション

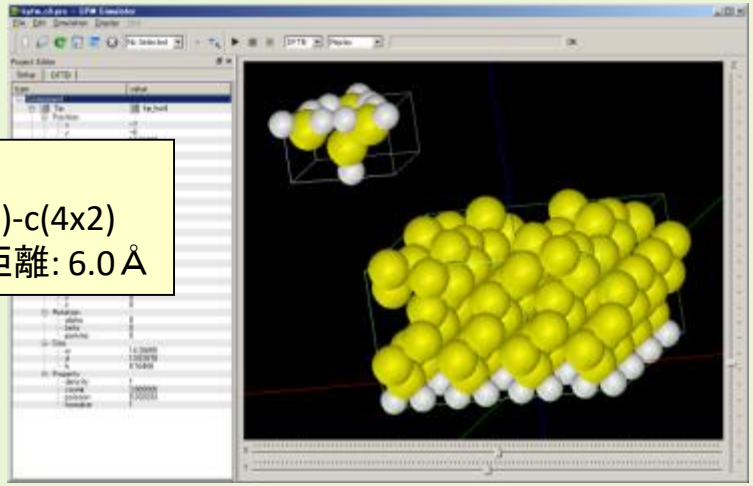
探針: Si_4H_{10}
試料表面: 水素終端したSi(001)
探針-試料間の距離: 6.5 Å

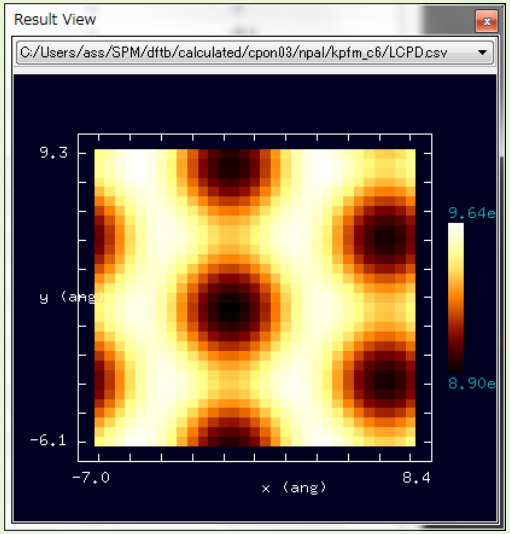




DFTB　接触電位差像のシミュレーション

探針: Si_4H_{10}
試料表面: Si(001)-c(4x2)
探針-試料間の距離: 6.0 Å



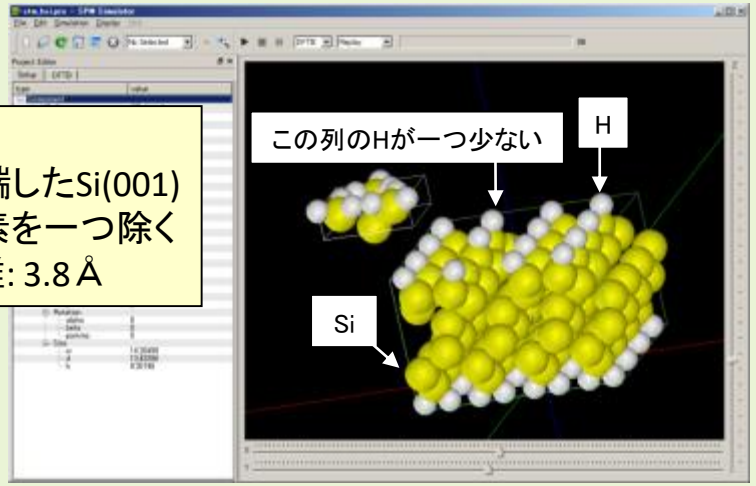


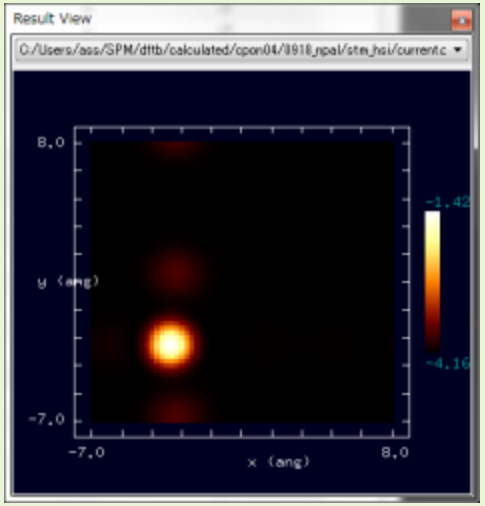
表面のアップダイマーを繋ぐようにした電位差の大きい領域が見られる。

【DFTB】トンネル電流像、トンネル電流スペクトルの計算例

DFTB　トンネル電流像（STM）のシミュレーション

探針: Si_4H_9
試料表面: 水素終端したSi(001)
　　表面から水素を一つ除く
探針-試料間の距離: 3.8 Å

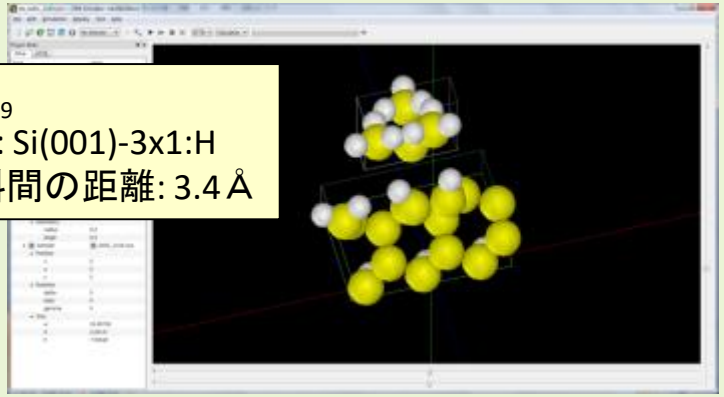


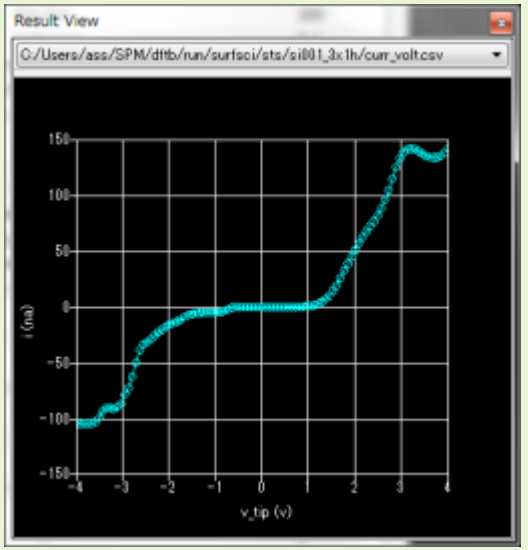


水素が抜けている位置にダングリングボンドが
あることにより、電流値が大きくなることが分かる。

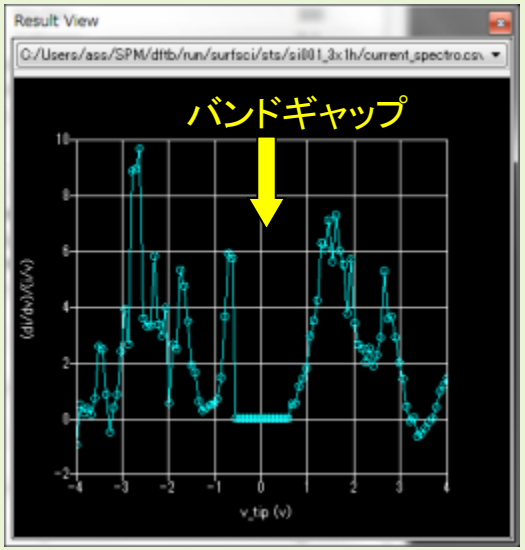
DFTB　トンネル電流スペクトル（STS）の計算

探針: Si_4H_9
試料表面: Si(001)-3x1:H
探針-試料間の距離: 3.4 Å





I-V特性曲線



(dI/dV)/(I/V) vs. V

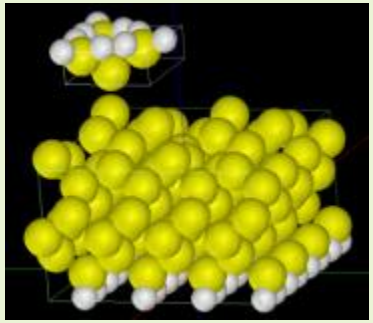
横軸は試料に対する探針の電圧

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション

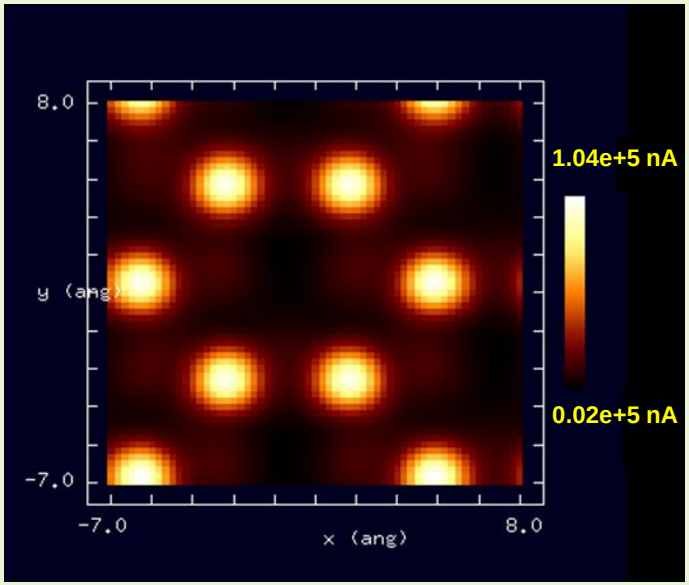
DFTB

探針・試料モデル

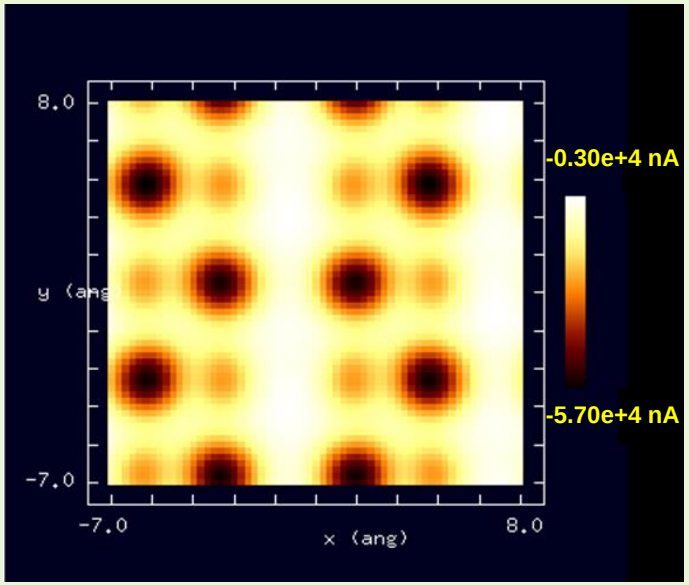
探針: Si_4H_9
試料表面: Si(001)-c(4x2)
探針-試料間の距離: 2.32 Å



STM像の計算結果



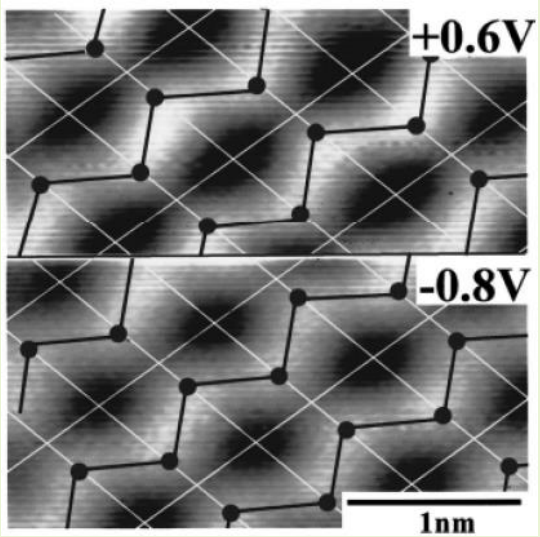
バイアス電圧 +1.0V



バイアス電圧 -1.0V

バイアスによって、蜂の巣構造が反転

実験



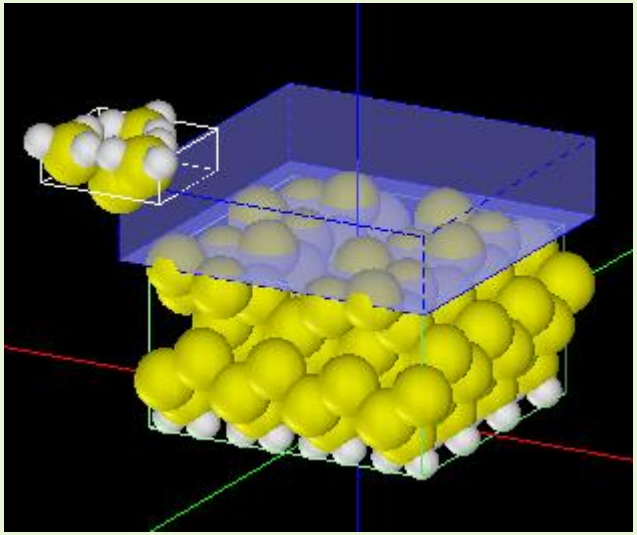
Si(001) 表面のトンネル電流像

バイアスの正負によって蜂の巣構造が反転することが知られている。

K. Hata, S. Yasuda, and H. Shigekawa, Phys. Rev. B **60**, 8164 (1999).

類似

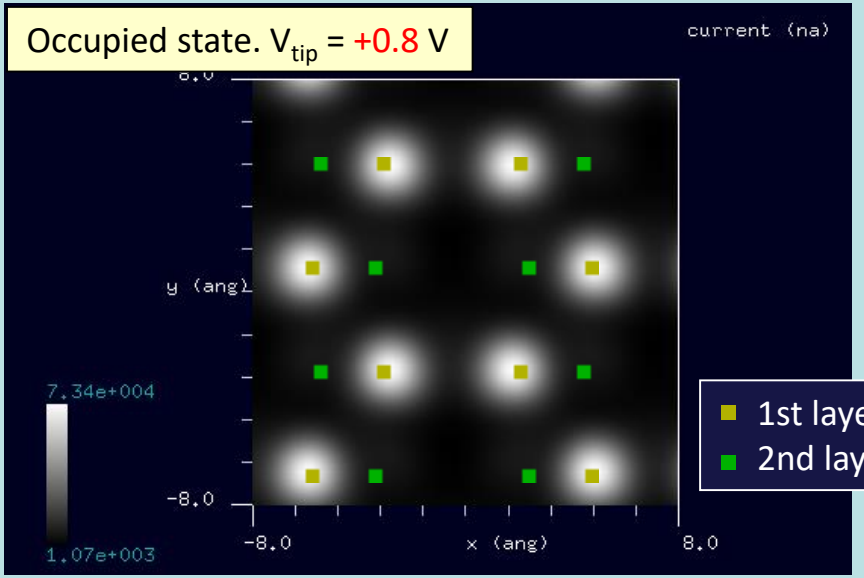
【DFTB】Constant height STM image of Si(001)-c(4x2)

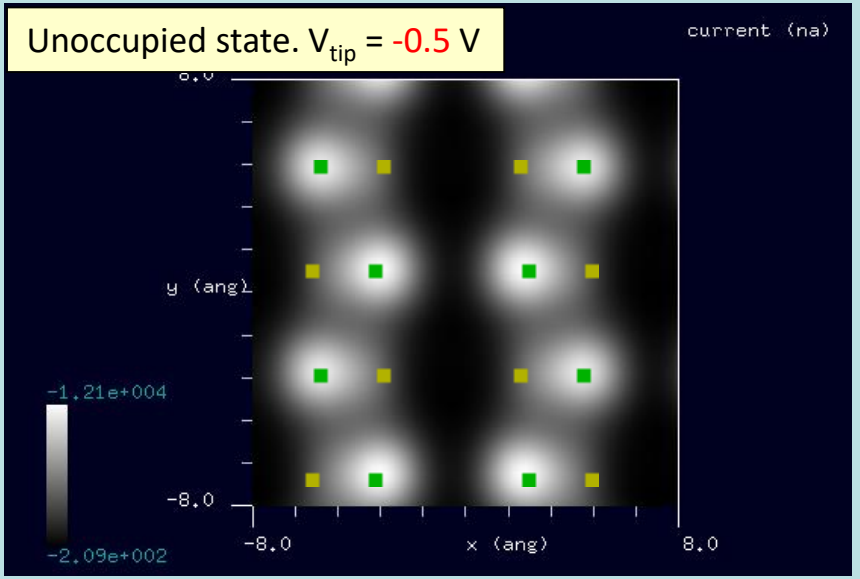


探針: Si_4H_9
試料: Si(001)-c(4x2)結晶表面
探針高さ: 2.6 Å

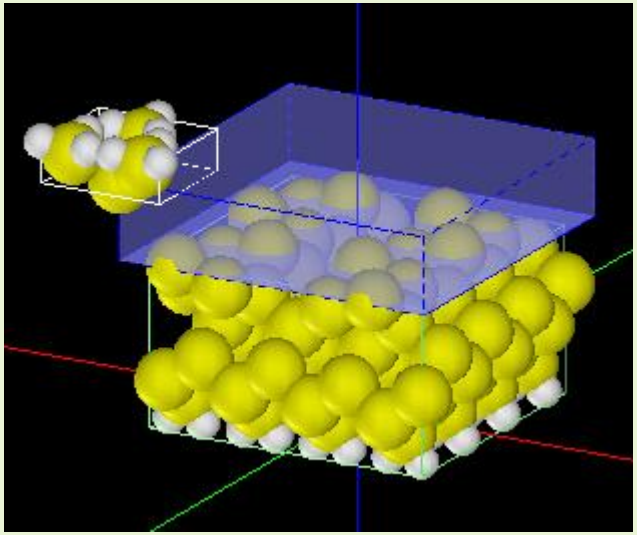
六角形のハニカム構造がバイアスの正負によって反転することを再現した。

Constant height STM. Current map





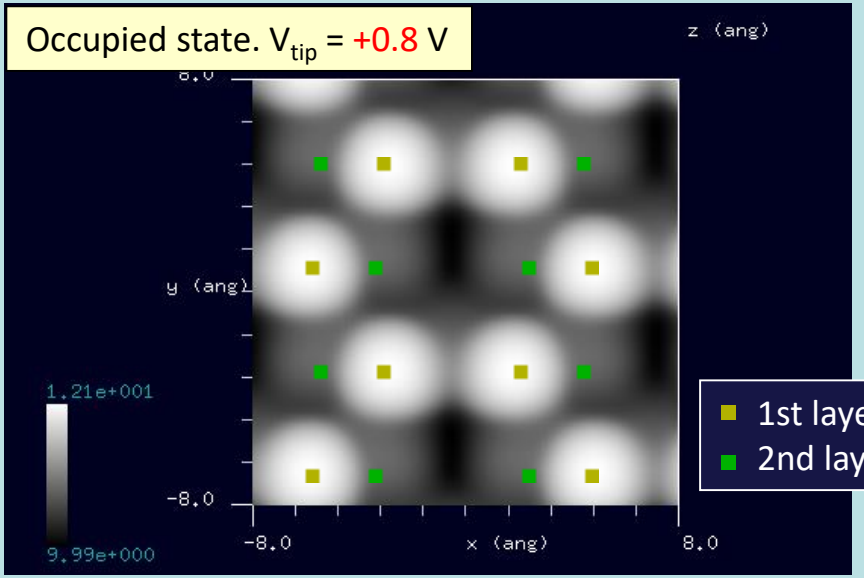
【DFTB】Constant current STM image of Si(001)-c(4x2)

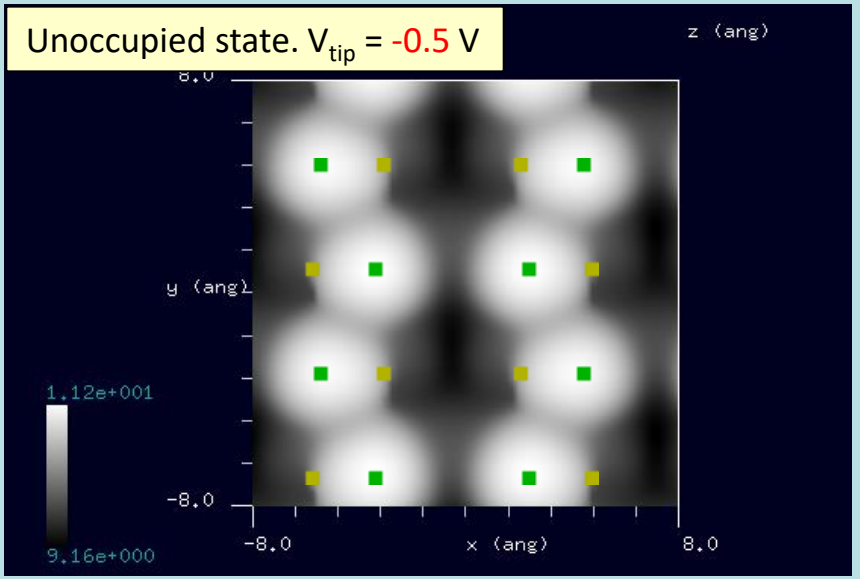


探針: Si_4H_9
試料: Si(001)-c(4x2)結晶表面
Current = 6000 nA
for both calculations

六角形のハニカム構造がバイアスの正負によって反転することを再現した。

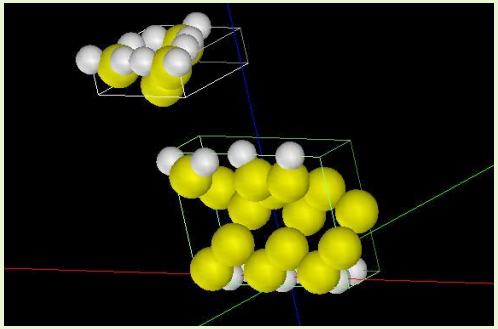
Constant current STM topography

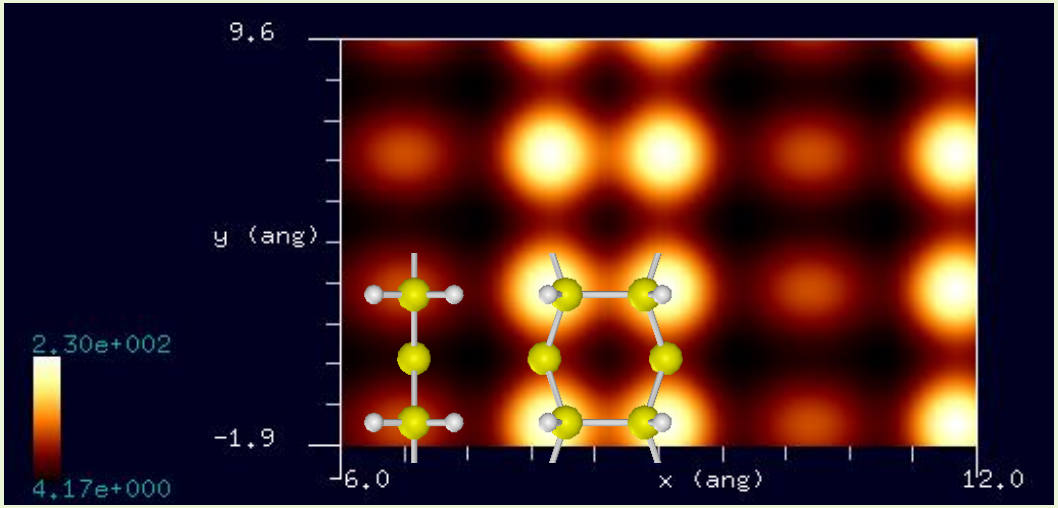




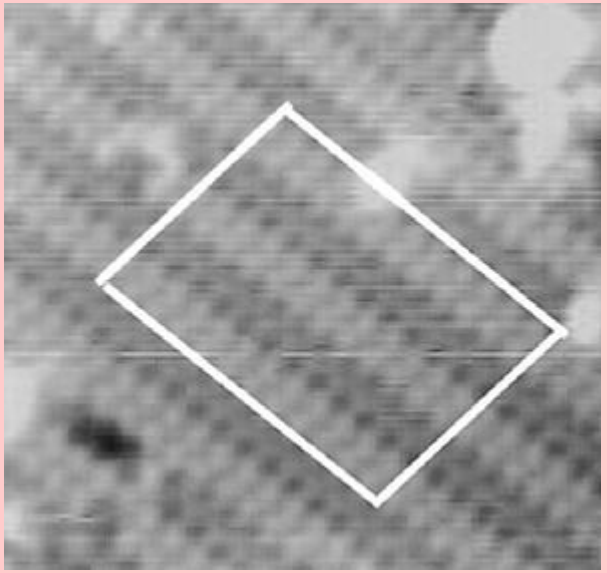
【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant height STM像シミュレーション

探針:	Si_4H_9
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant height STM
探針-試料間の距離:	3.4 Å
探針バイアス:	+2.73 V
スキャンエリア:	18.0 Å x 11.5 Å





cf. Experiment

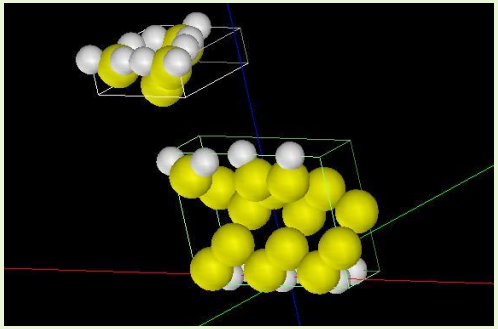


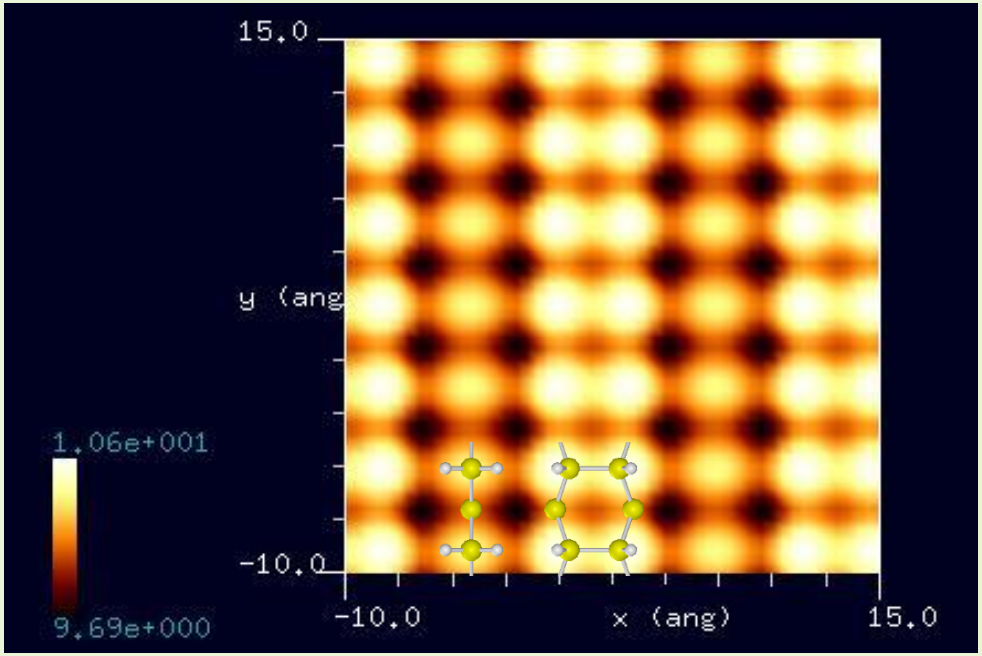
H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

九州工業大学学術機関リポジトリ
Khan, Arifur Rahman,
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

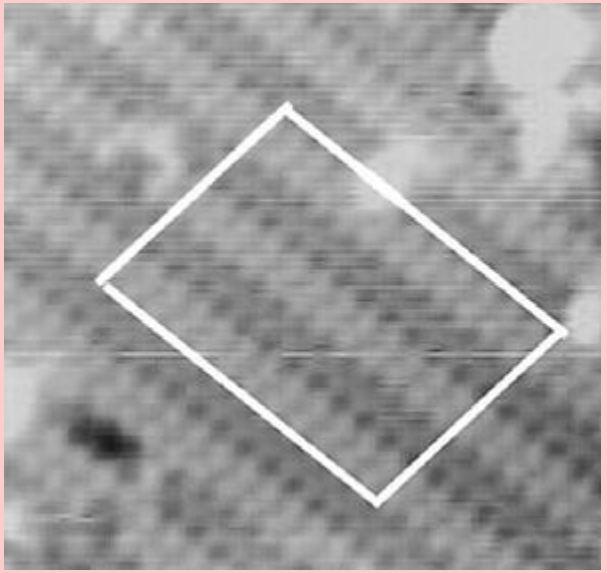
【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si_4H_9
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	+2.73 V
電流値:	1000 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å





cf. Experiment

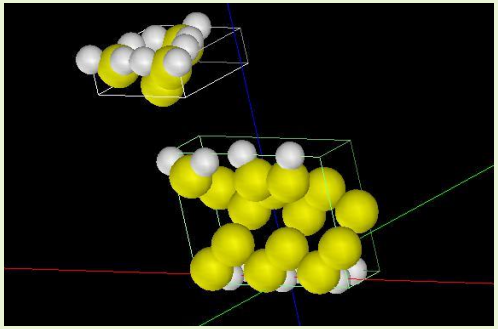


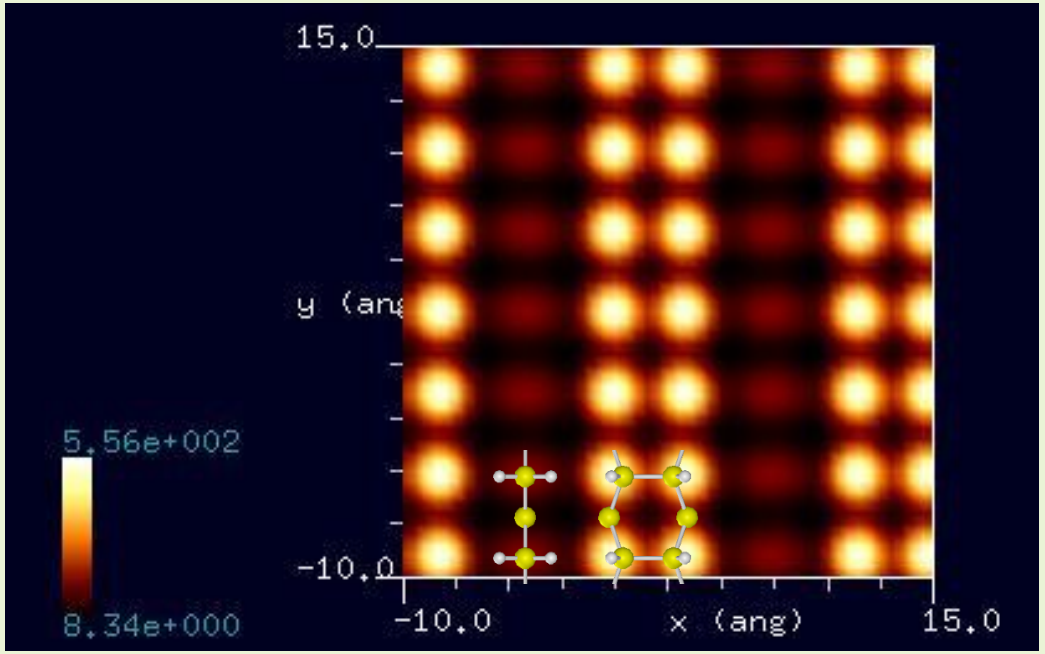
H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

九州工業大学学術機関リポジトリ
Khan, Arifur Rahman,
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

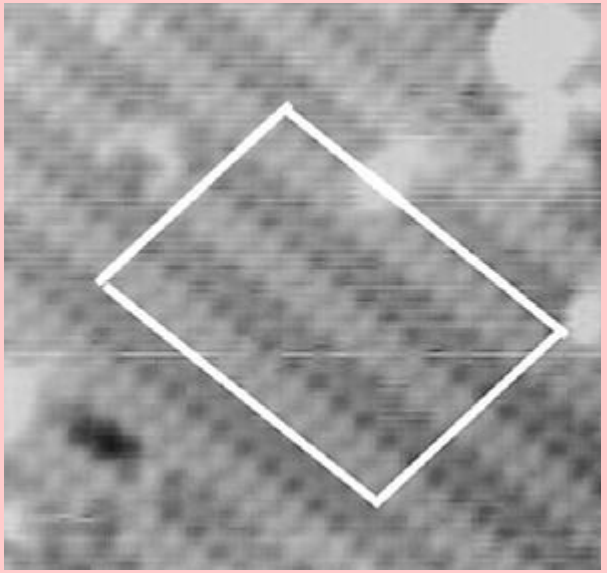
【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant height STM像シミュレーション

探針:	Si_4H_9
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant height STM
探針-試料間の距離:	3.4 Å
探針バイアス:	+3.5 V
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å





cf. Experiment

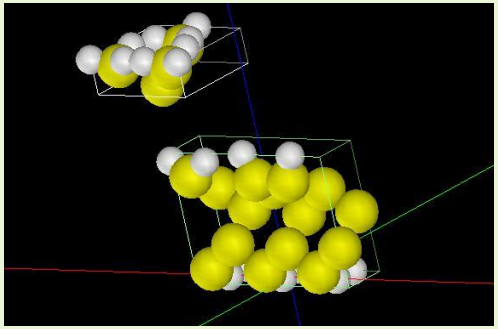


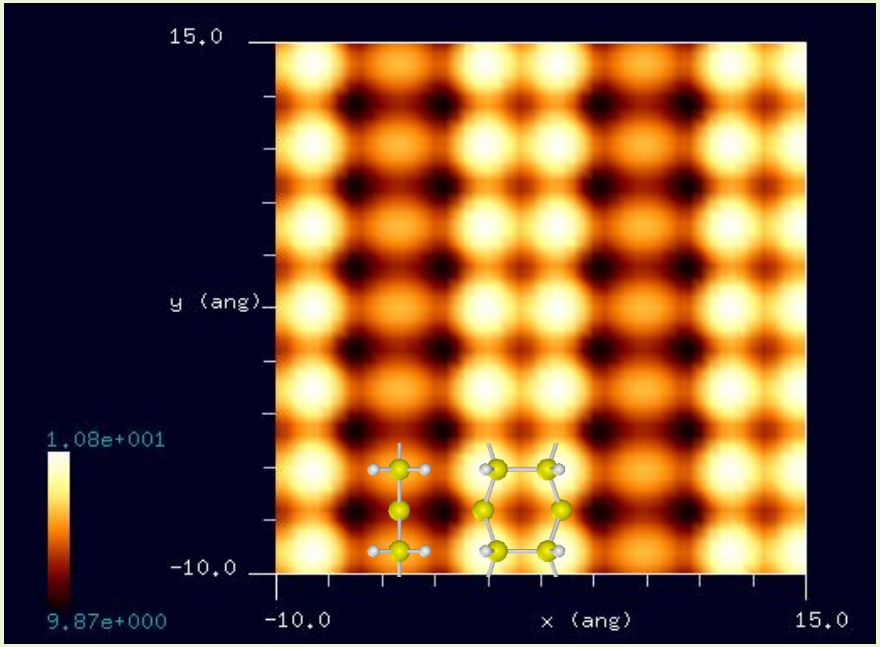
H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

九州工業大学学術機関リポジトリ
Khan, Arifur Rahman,
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

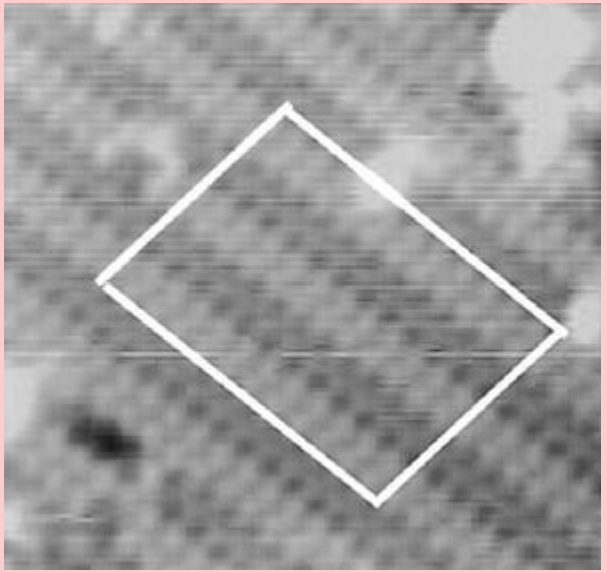
【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si_4H_9
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	+3.5 V
電流値:	1000 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å





cf. Experiment

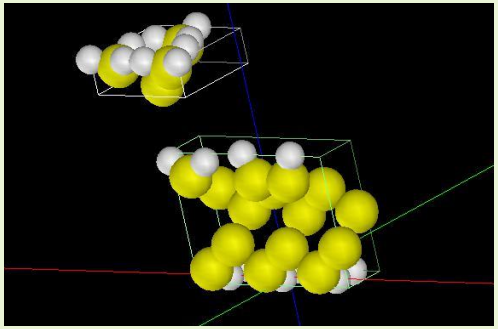


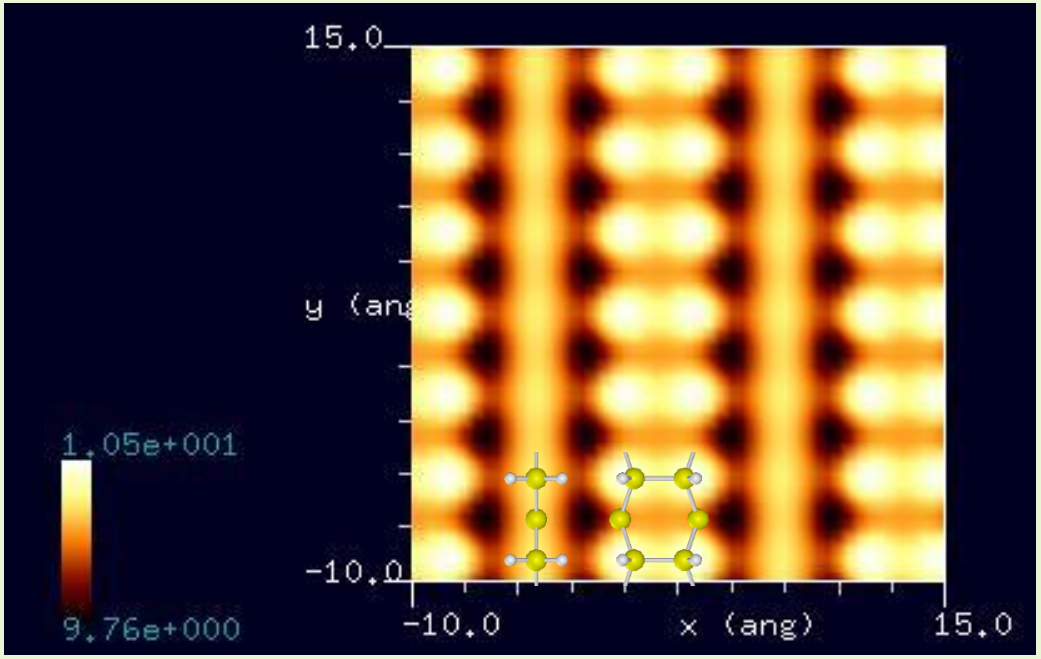
H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

九州工業大学学術機関リポジトリ
Khan, Arifur Rahman,
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

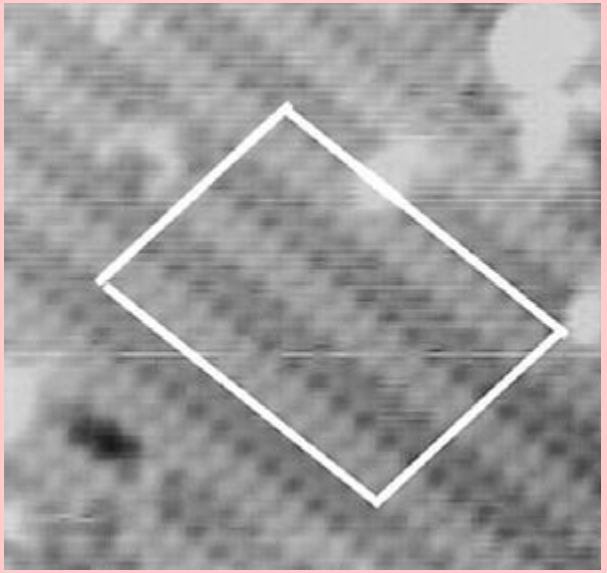
【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si_4H_9
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	-3.5 V
電流値:	1000 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å





cf. Experiment

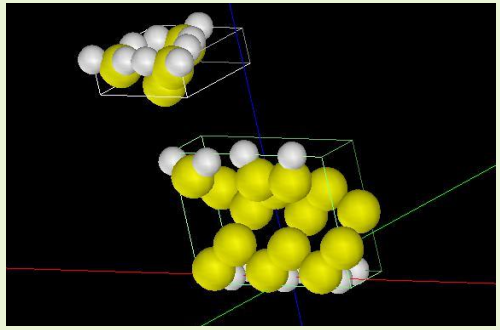


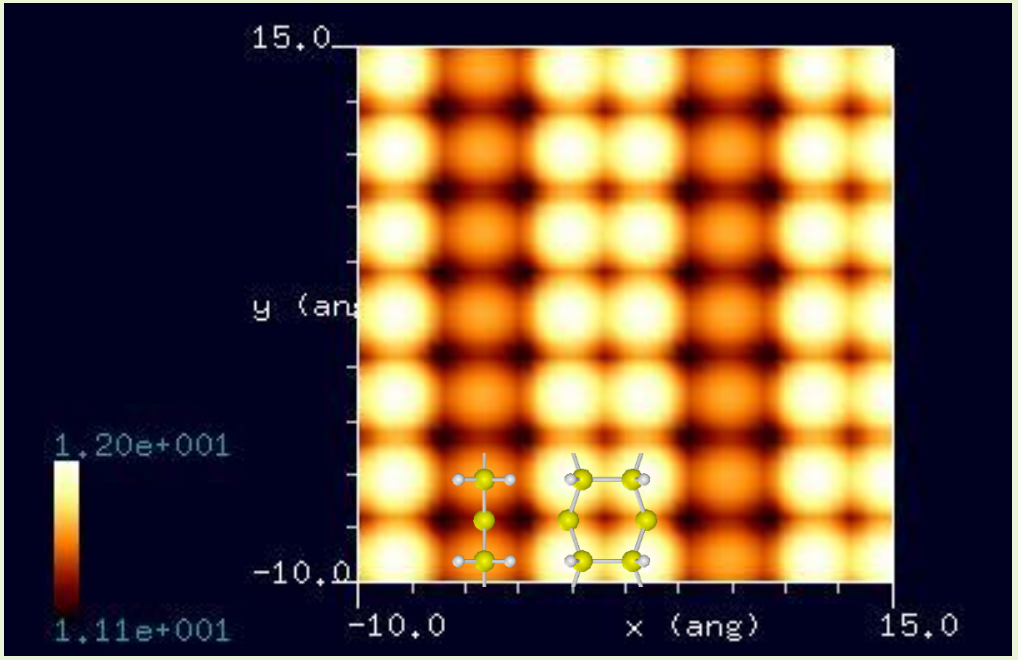
H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

九州工業大学学術機関リポジトリ
Khan, Arifur Rahman,
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

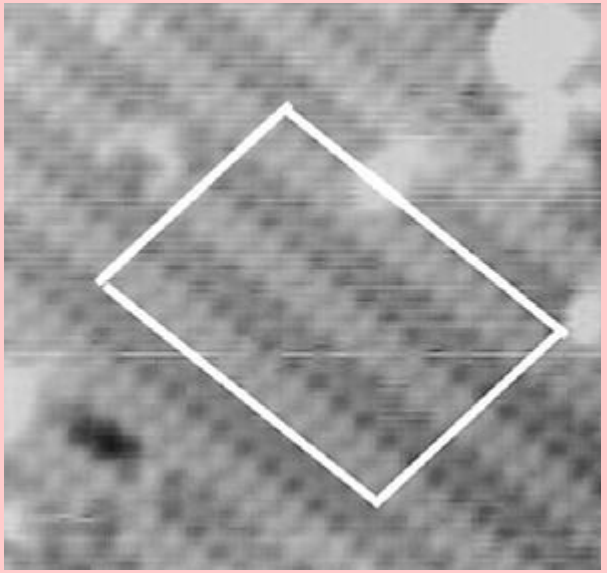
【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si_4H_9
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	-3.5 V
電流値:	1 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å





cf. Experiment



H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

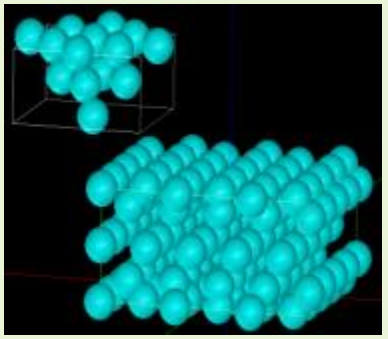
九州工業大学学術機関リポジトリ
Khan, Arifur Rahman,
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

【DFTB】Au(001)再構成表面のSTM観察とシミュレーション

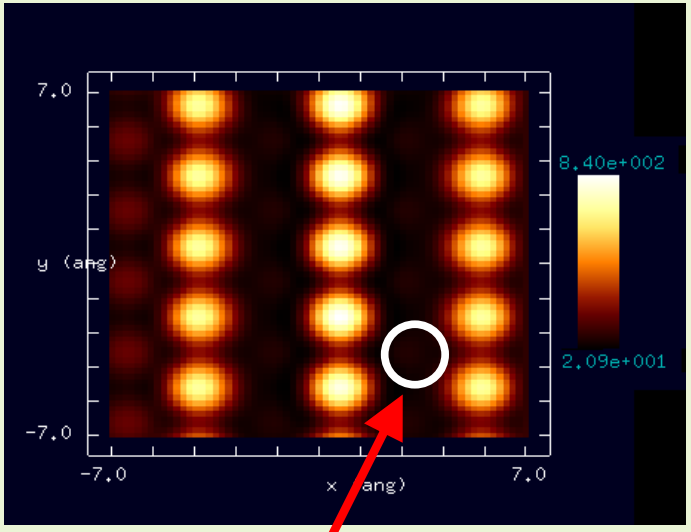
DFTB

探針・試料モデル

探針: Au_{14}
試料表面: Au(001)-5x1 reconstructed
探針-試料間の距離: 4 Å
バイアス電圧(探針の電位): +0.7 V



STM像の計算結果

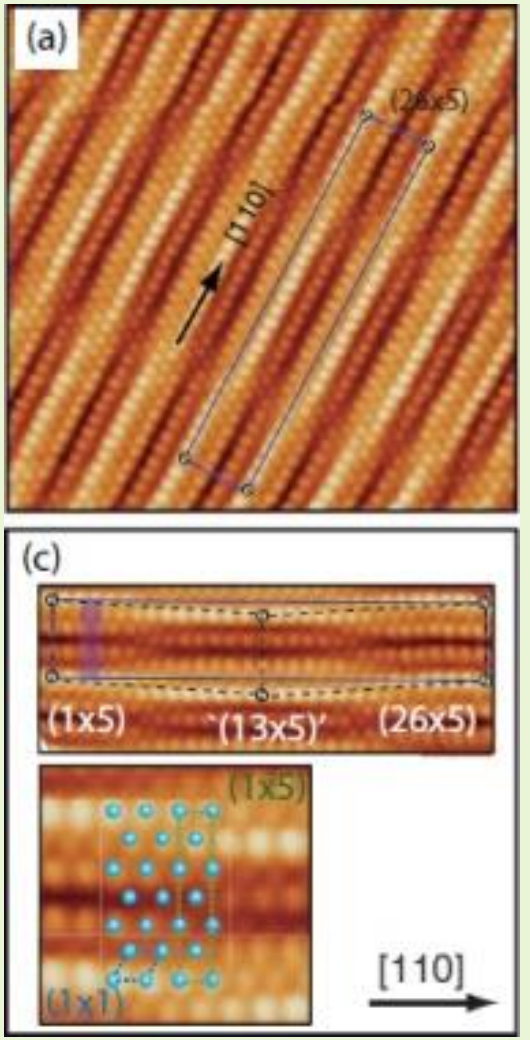


原子は存在するのに、電流があまり流れていない。

電荷の移動が起こっている

類似

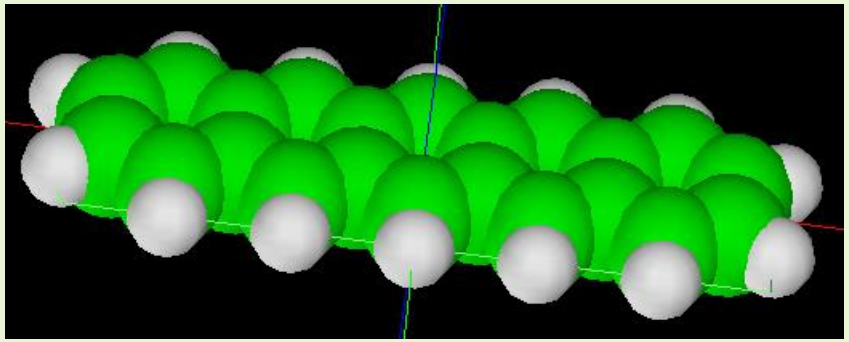
実験



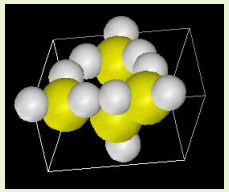
S. Bengió *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 045426 (2012).
Au(100)-26x5 reconstructed

【DFTB】ペンタセン分子のAFM, STM観察とシミュレーション

探針: Si_4H_{10} (AFM, KPFM用)
　　または Si_4H_9 (STM用)
試料: ペンタセン分子

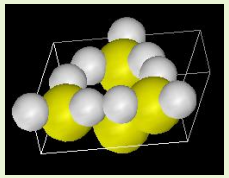


ペンタセン



Si_4H_{10}

AFM, KPFM用探針



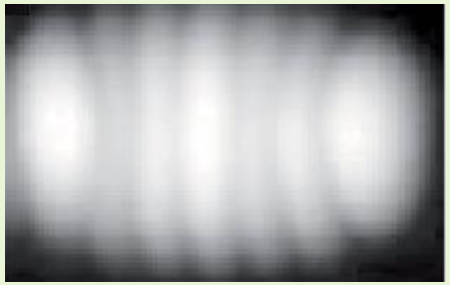
Si_4H_9

STM用探針

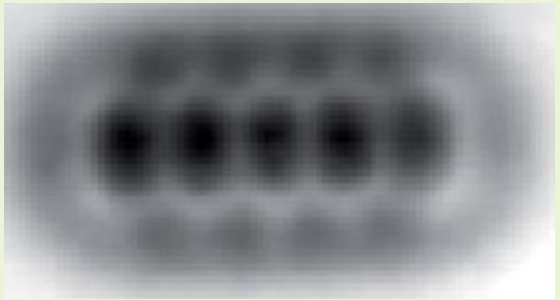
実測画像



STM HOMO
Phys. Rev. Lett. 94, 026803 (2005)



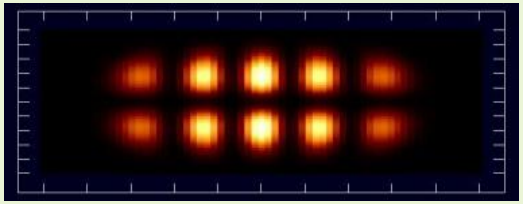
STM LUMO
同左



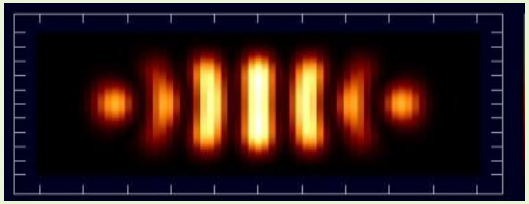
NC-AFM
Science 325, 1110–1114 (2009)

DFTB

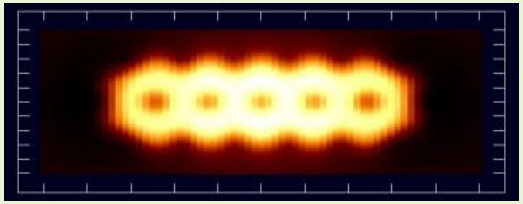
シミュレーション結果



STM 探針-試料間の距離4.0 Å
探針のバイアス+1.0V



STM 探針-試料間の距離4.0 Å
探針のバイアス-1.0V

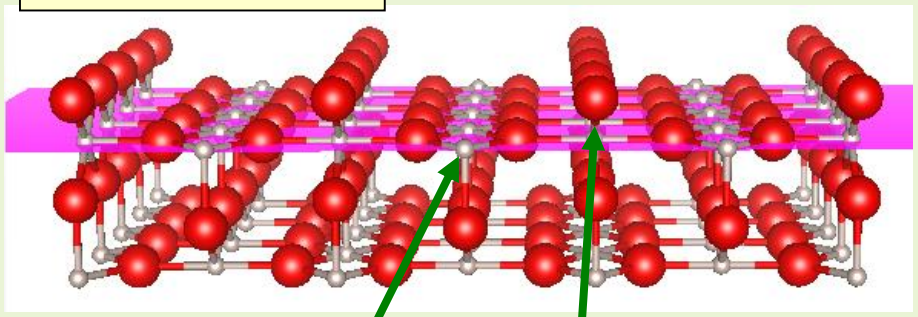


AFM 探針-試料間の距離4.0 Å

【DFTB】高さ一定モードによるRuO_2(110) 表面のトンネル電流像STMシミュレーション

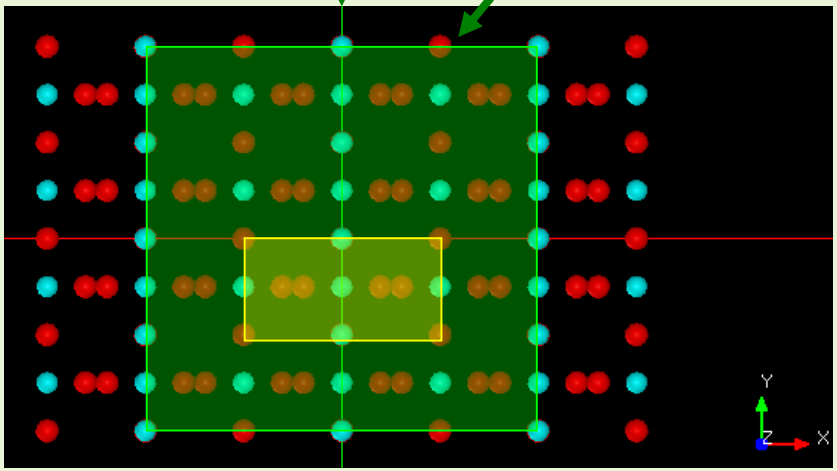
DFTB

試料表面: RuO_2(110)



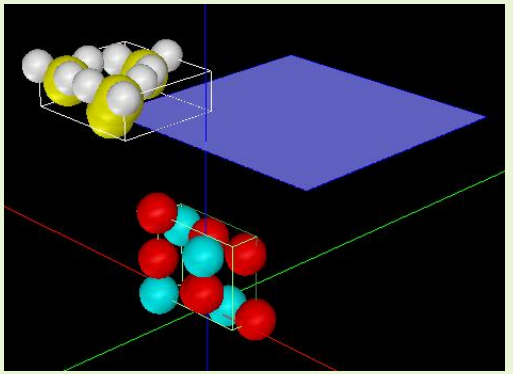
1f-cus-Ru:
(1-fold coordinatively unsaturated sites)

O_{br}: bridging oxygen



並進対称性によって拡張した試料モデルを上から見た図。
黄色の枠が単位格子。緑色の枠がスキャンエリアを表す。

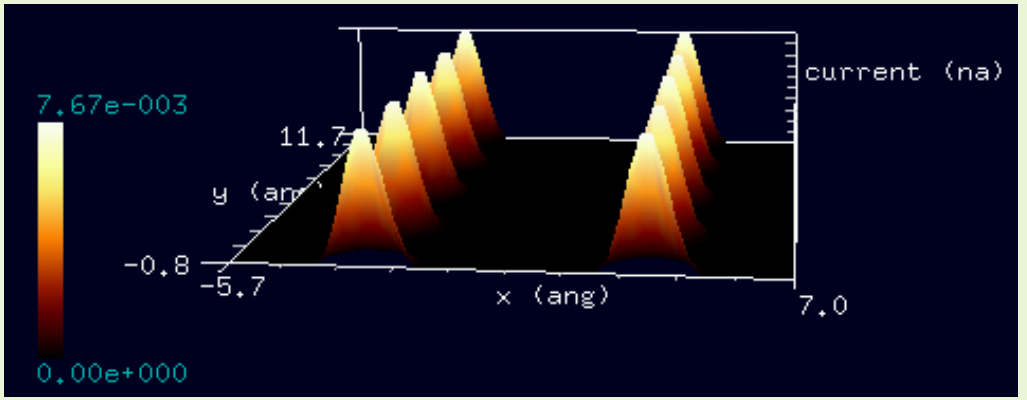
探針・試料モデル



探針: Si_4H_9
試料表面: RuO_2(110)
探針高さ: 8.5 Å
探針バイアス: +0.01 V

試料の原子構造として最小ユニットだけ用意し、
xy方向へは並進ベクトルで自在に拡張する。

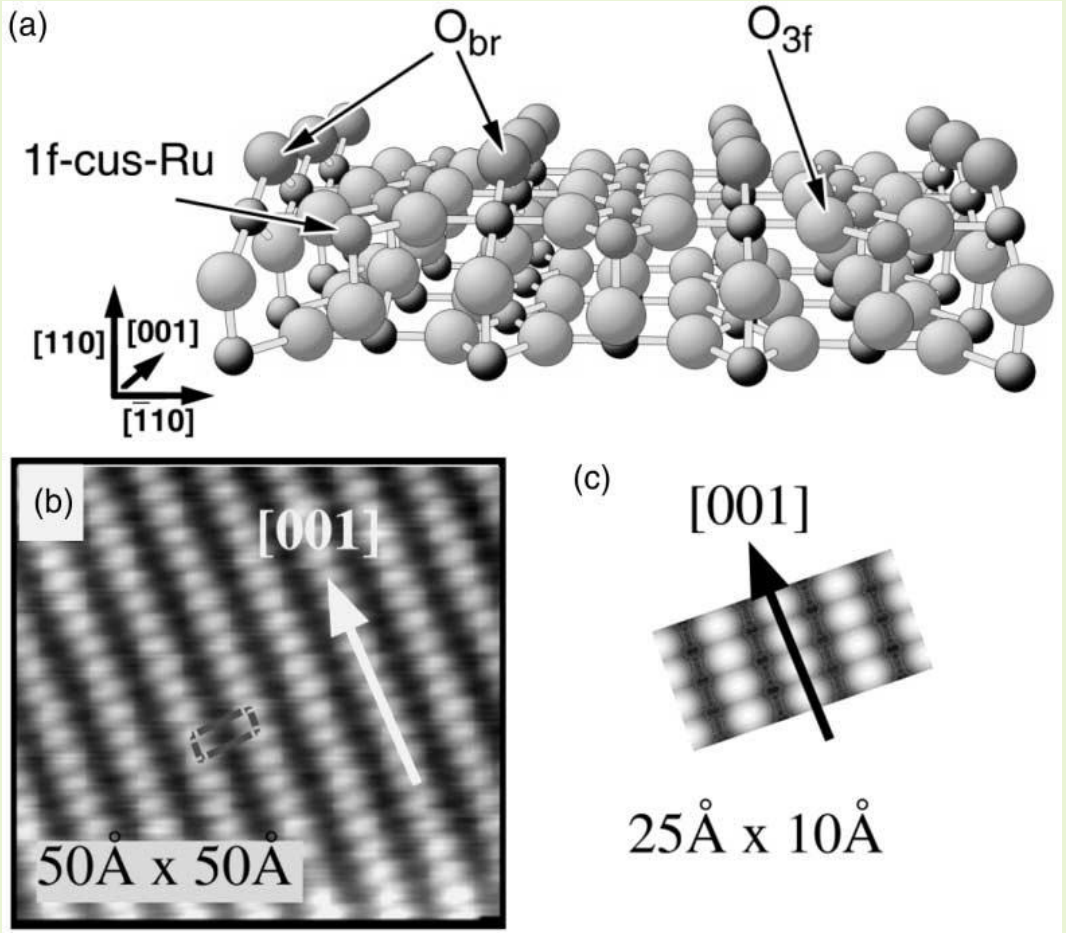
高さ一定モード、トンネル電流像の計算結果



電流値0.0～0.00767 nA

【DFTB】Constant current モードによるRuO_2(110) 表面のSTM観察

Experiment



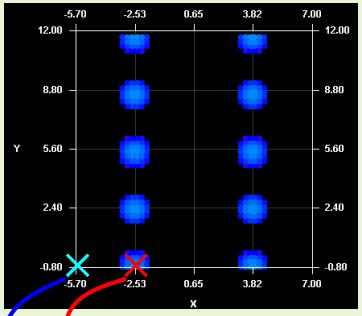
Experimental STM image (constant current mode, taken at RT) of a stoichiometric RuO_2(1 1 0) surface: 50 Å x 50 Å, U = -0.01 V, I = 0.46 nA.

H. Over, A. P. Seitsonen, E. Lundgren, M. Schmid and P. Varga, Surface Science 515 (2002) 143–156.

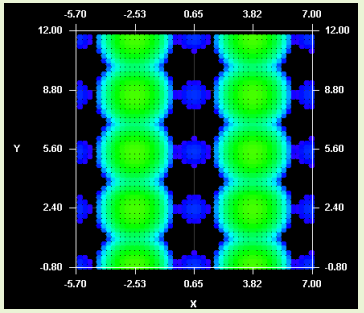
【DFTB】Constant current モードによるRuO_2(110) 表面のSTMシミュレーション

DFTB

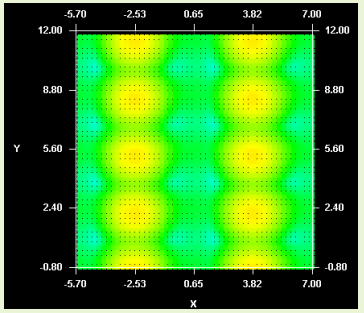
探針高さを8.5 Åから5.0 Åまで0.5 Åずつ変化させながら、バイアス一定 (+0.01 V)、高さ一定モードで得られたトンネル電流像。色の変化は対数スケールに取っており、青が0.001 nA、赤が100.0 nAに対応する。



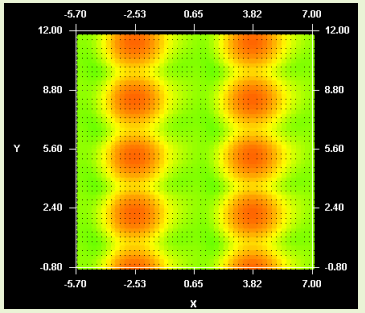
z = 8.5 Å



z = 8.0 Å

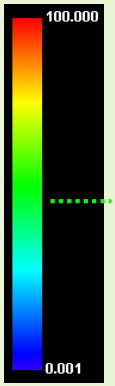


z = 7.5 Å

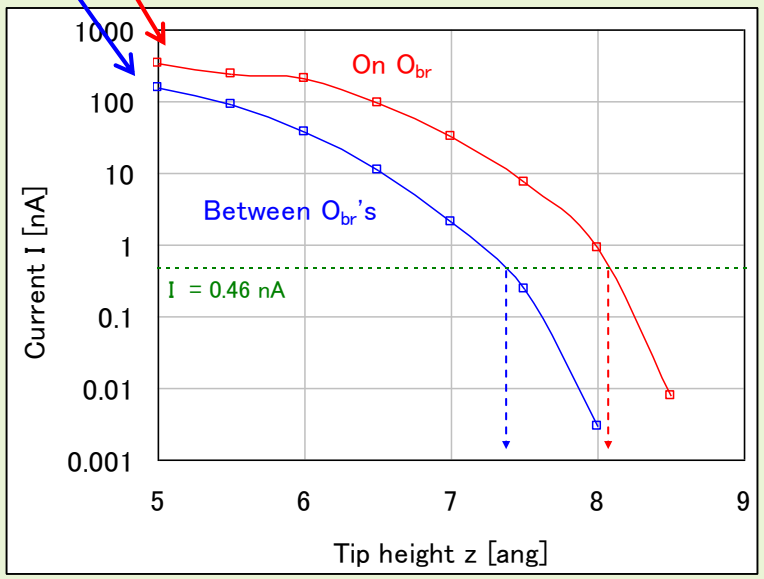


z = 7.0 Å

・・・

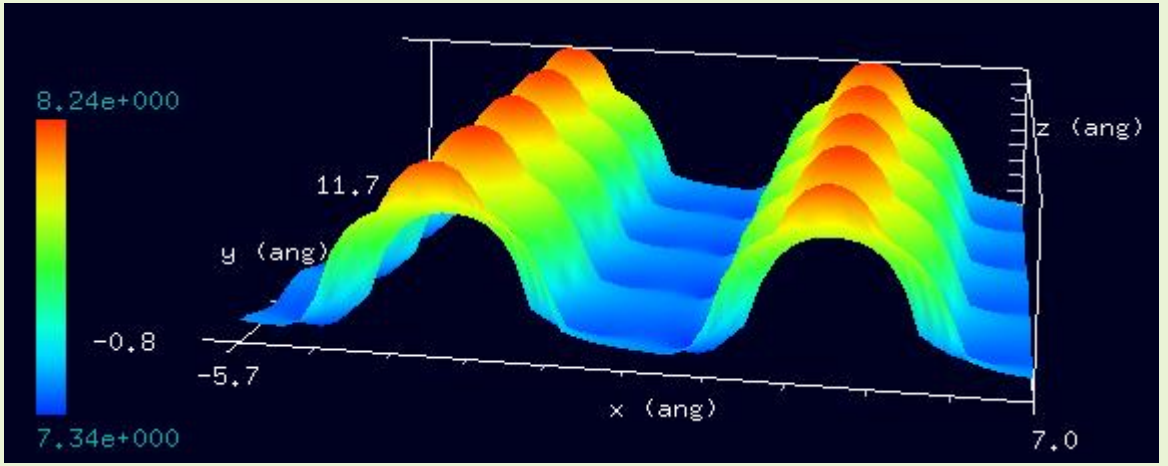


対数スケール



Current vs. tip height

試験的にプログラムを組み、一定の電流 0.46 nAとなる探針高さを求めた。

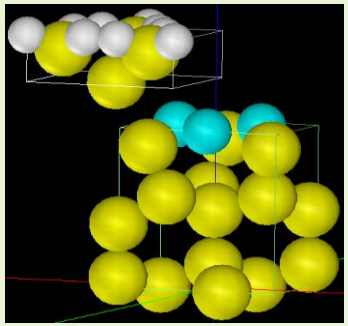


試料形状が直感的に推察できる。

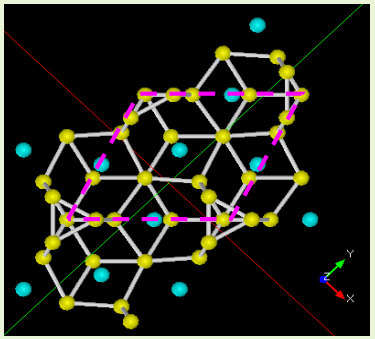
Constant currentモードは今後DFTBソルバーに搭載される予定。

【DFTB】Si(111)√3×√3-AgのSTM像

Si(111)√3×√3-AgのSTM像は、正バイアスか負バイアスかで明るく観察されるサイトが変わる。



探針（Si_4H_9）と試料

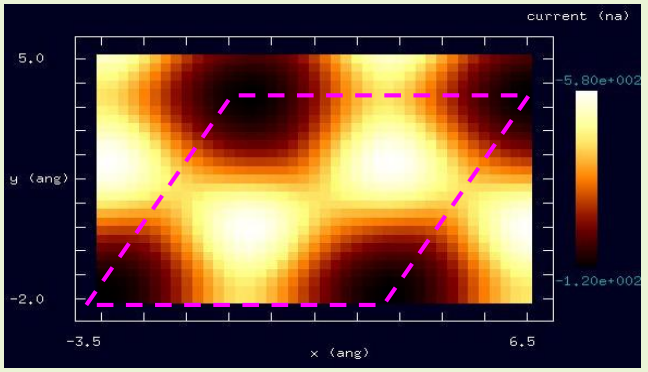


ピンクの菱形が
単位セル

探針の電圧が負の時のSTM像



文献[1]でのSTM像
(empty state)



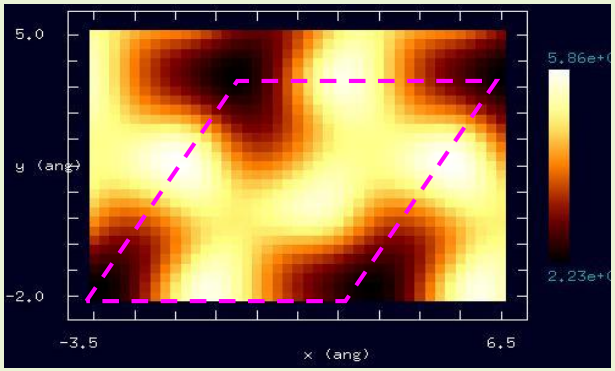
探針電圧:-0.1[V], 探針 - 試料間距離:3.0[Å]での
シミュレーション結果

Ag原子の3量体の成す三角形の中心が明るく観察されている。

探針の電圧が正の時のSTM像



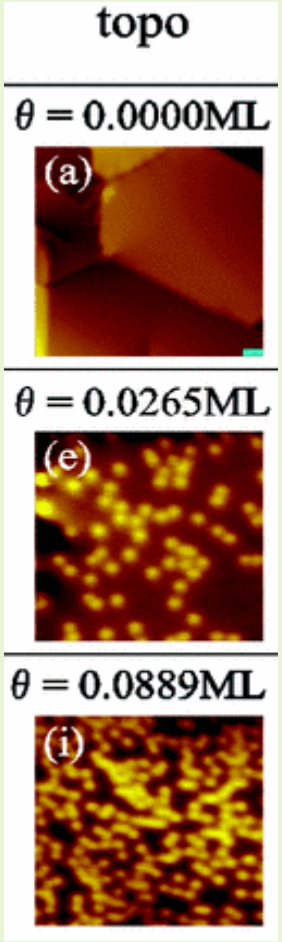
文献[1]でのSTM像
(filled state)



探針電圧:0.3[V], 探針 - 試料間距離:2.0[Å]での
シミュレーション結果

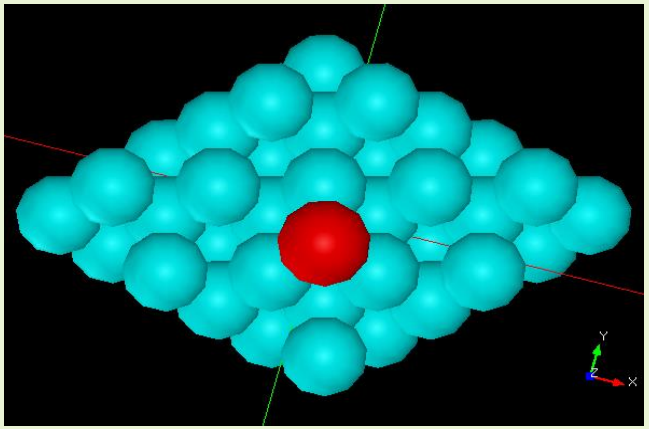
[1]:古橋 隆寿
Ag/Si(111)表面の原子分解能バリアハイトイメージング,
http://topics.libra.titech.ac.jp/en/recordID/catalog.bib/TT00006729

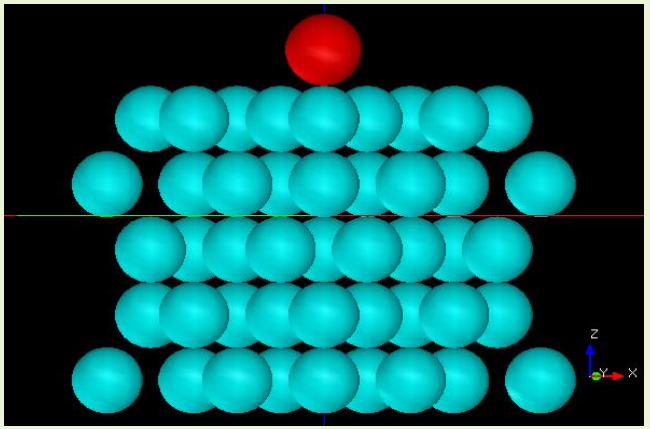
【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(1)



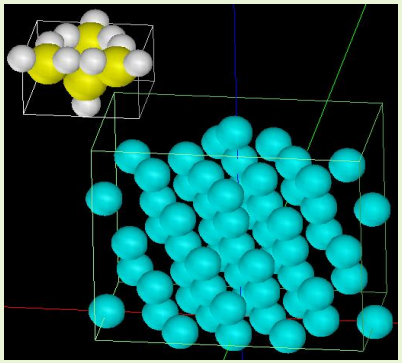
文献[2]でのSTM像
V_s=-0.4[V], I_t=0.3[nA]

√3×√3構造4単位セルに対して1つのBiがある場合
（Ag(111)上に置いた場合）

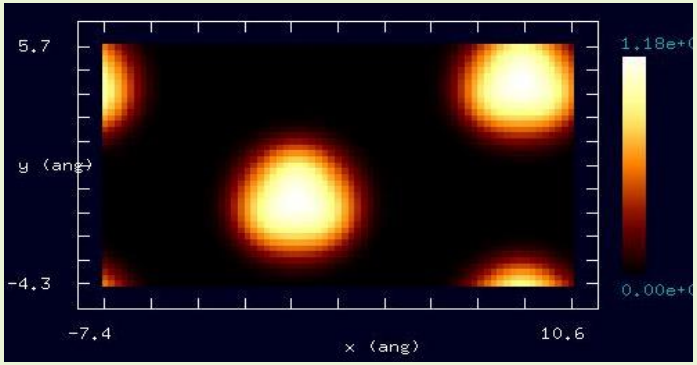




シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



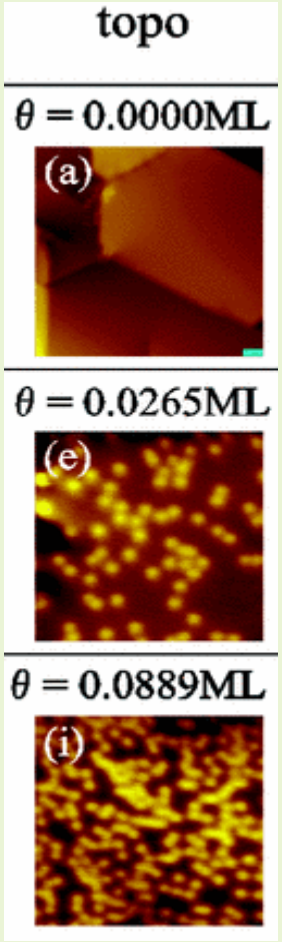
探針(Si_4H_{10})と試料



探針電圧:0.4[V], 探針 - 試料間距離:3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

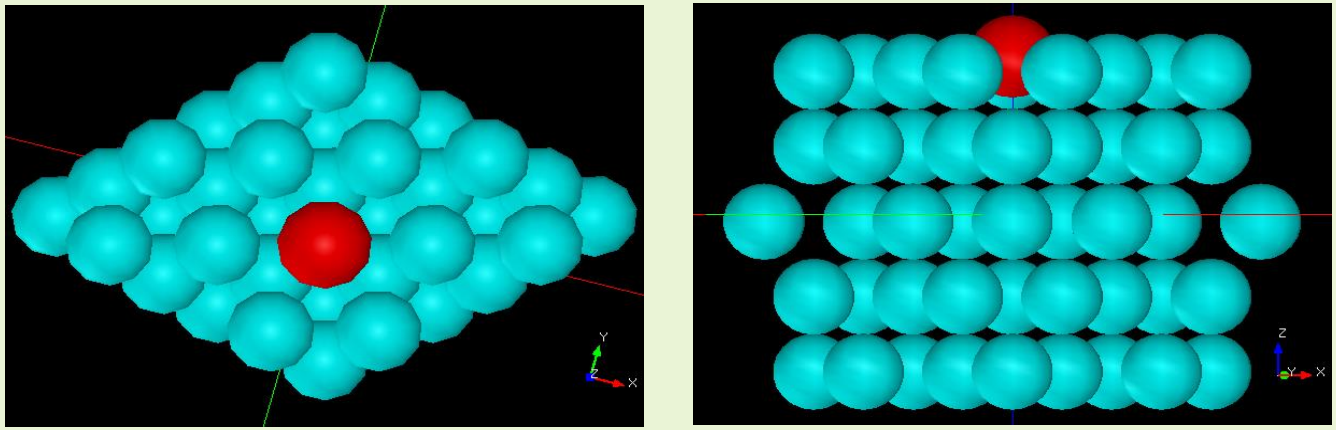
[2]:Hiroyuki Fukumoto, Yuki Aoki, and Hiroyuki Hirayama
Decay of Shockley surface state by randomly adsorbed Bi atoms at Ag(111) surfaces
Phys. Rev. B **86**, 165311 – Published 11 October 2012

【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(2)

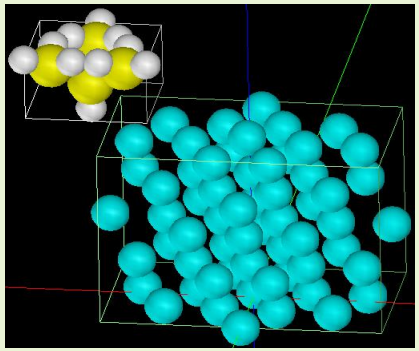


文献[2]でのSTM像
V_s=-0.4[V], I_t=0.3[nA]

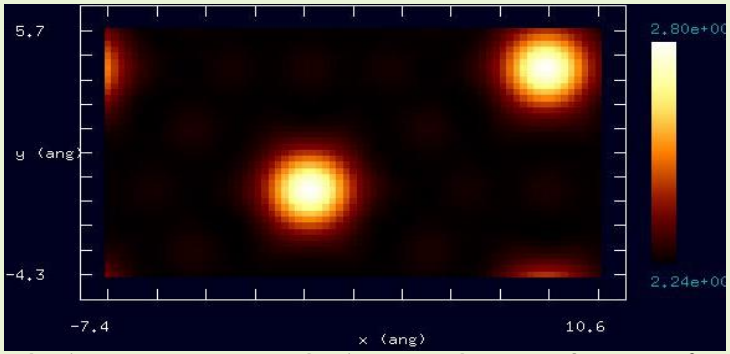
√3×√3構造4単位セルに対して1つのBiがある場合
（表面のAgと置換した場合）



シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



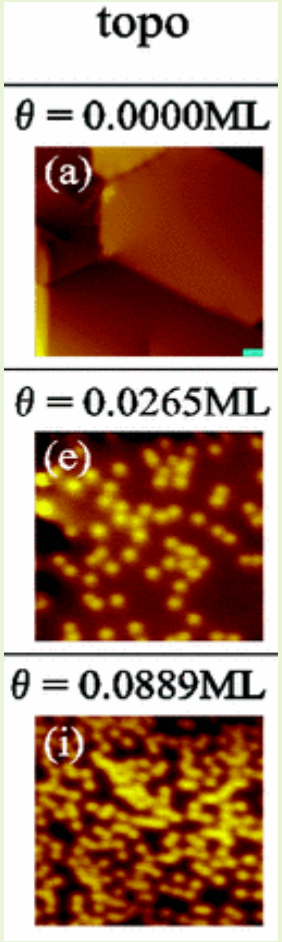
探針(Si_4H_{10})と試料



探針電圧:0.4[V], 探針 - 試料間距離:3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

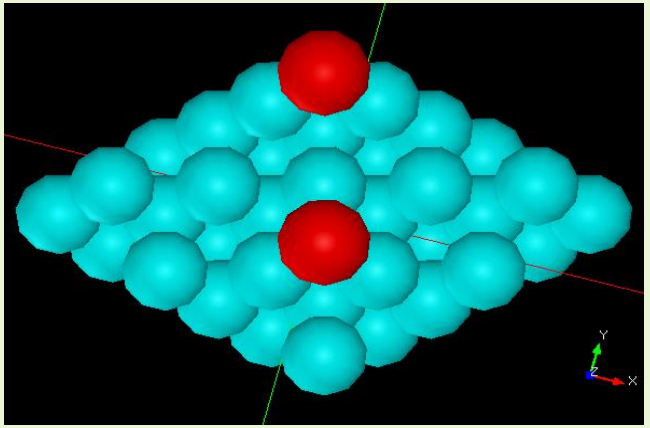
[2]:Hiroyuki Fukumoto, Yuki Aoki, and Hiroyuki Hirayama
Decay of Shockley surface state by randomly adsorbed Bi atoms at Ag(111) surfaces
Phys. Rev. B **86**, 165311 – Published 11 October 2012

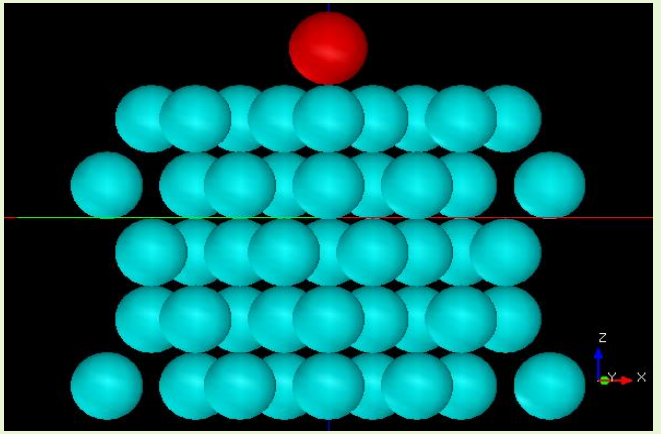
【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(3)



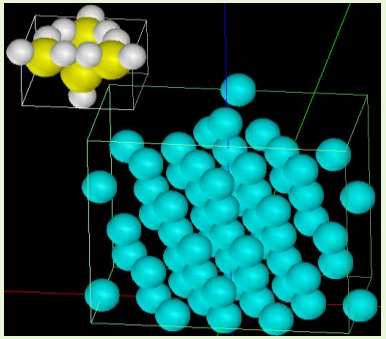
文献[2]でのSTM像
V_s=-0.4[V], I_t=0.3[nA]

√3×√3構造4単位セルに対して2つのBiがある場合
（Ag(111)上に置いた場合）

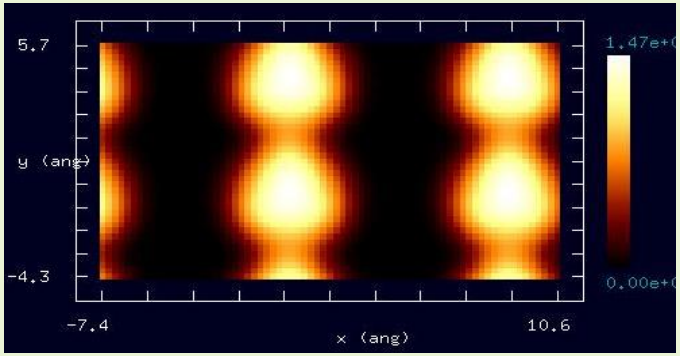




シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



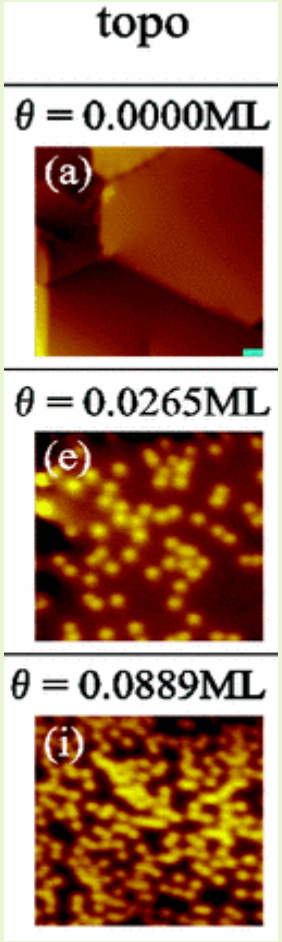
探針(Si_4H_{10})と試料



探針電圧:0.4[V], 探針 - 試料間距離:3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

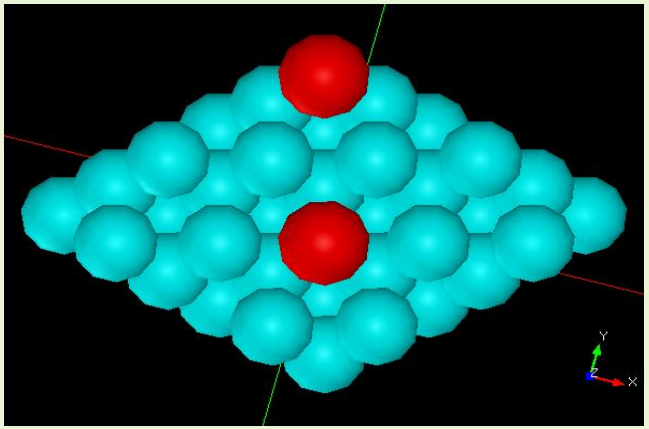
[2]:Hiroyuki Fukumoto, Yuki Aoki, and Hiroyuki Hirayama
Decay of Shockley surface state by randomly adsorbed Bi atoms at Ag(111) surfaces
Phys. Rev. B **86**, 165311 – Published 11 October 2012

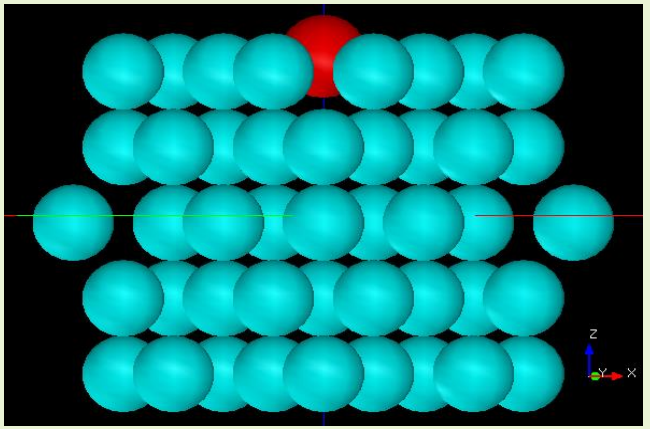
【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(4)



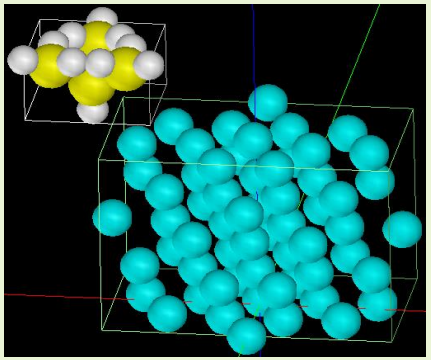
文献[2]でのSTM像
V_s=-0.4[V], I_t=0.3[nA]

√3×√3構造4単位セルに対して2つのBiがある場合
（表面のAgと置換した場合）

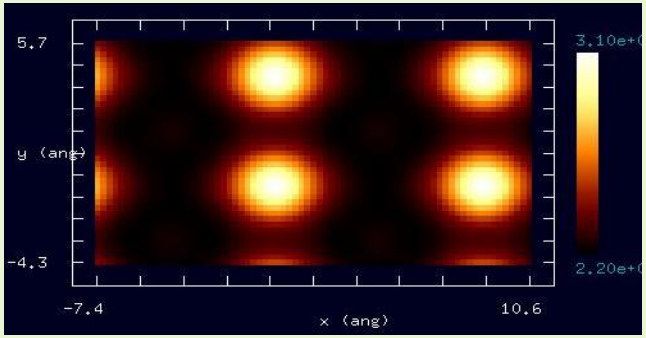




シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



探針(Si_4H_{10})と試料

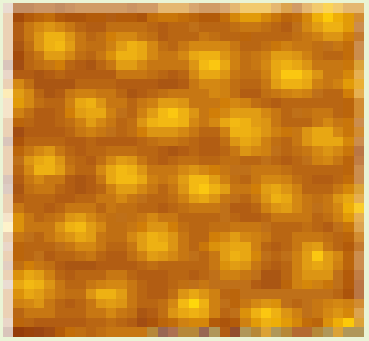


探針電圧:0.4[V], 探針 - 試料間距離:3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

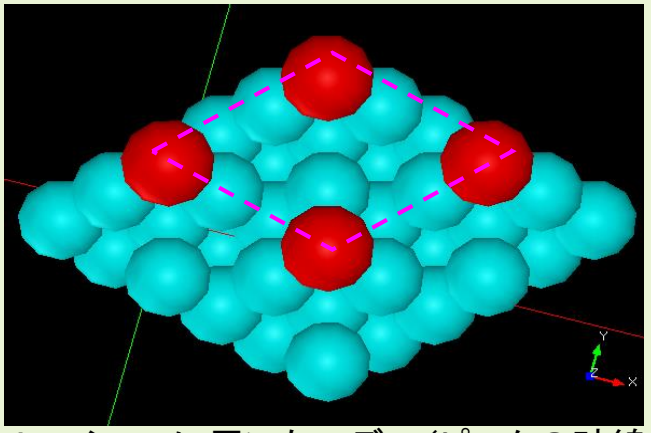
[2]:Hiroyuki Fukumoto, Yuki Aoki, and Hiroyuki Hirayama
Decay of Shockley surface state by randomly adsorbed Bi atoms at Ag(111) surfaces
Phys. Rev. B **86**, 165311 – Published 11 October 2012

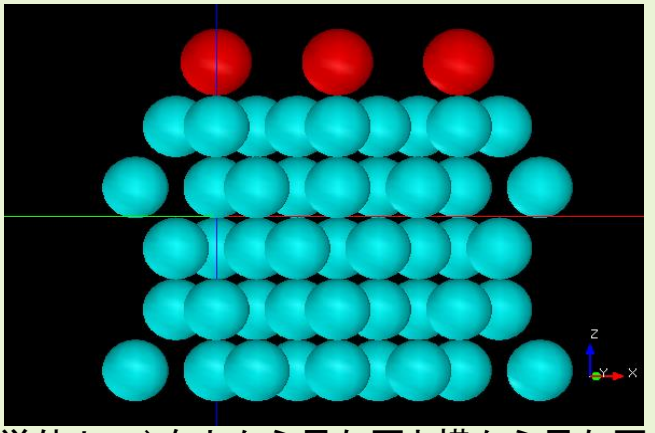
【DFTB】Ag(111)√3×√3-BiのSTM像(1)

Ag(111)上にBiを置いた場合

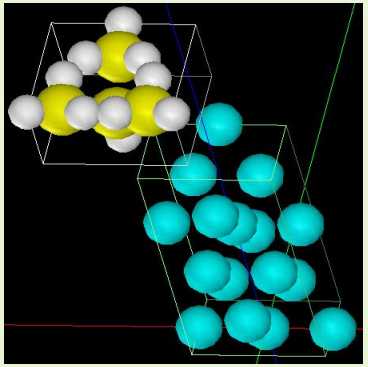


文献[3]でのSTM像
電圧記述なし,
電流0.5[nA]

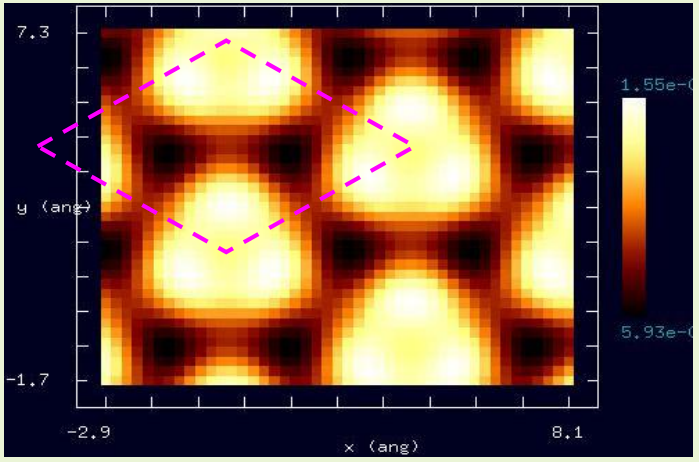




シミュレーションに用いたモデル(ピンクの破線が単位セル)を上から見た図と横から見た図



探針(Si_4H_{10})と試料

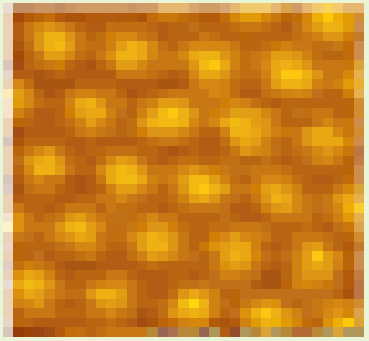


探針電圧:0.003[V],
探針 - 試料間距離:3.0[Å]での
トンネル電流像のシミュレーション結果

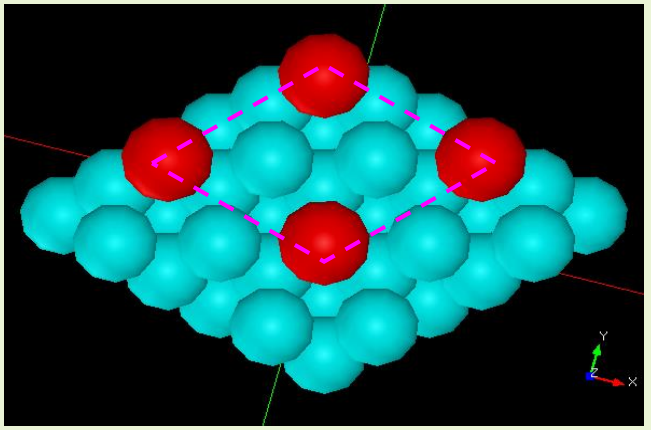
[3]:Hiroyuki Hirayama, Yuki Aoki, and Chiaki Kato
Quantum Interference of Rashba-Type Spin-Split Surface State Electrons
Phys. Rev. Lett. **107**, 027204 – Published 7 July 2011

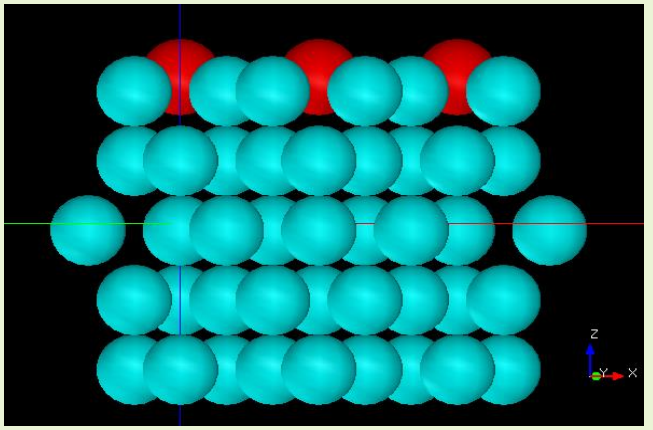
【DFTB】Ag(111)√3×√3-BiのSTM像(2)

表面のAgとBiが置換した場合

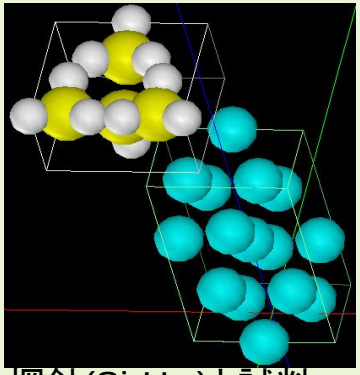


文献[3]でのSTM像
電圧記述なし,
電流0.5[nA]

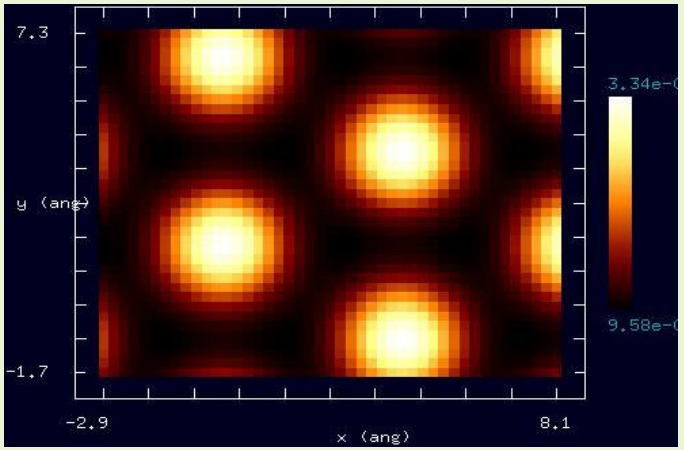




シミュレーションに用いたモデル(ピンクの破線が単位セル)を上から見た図と横から見た図



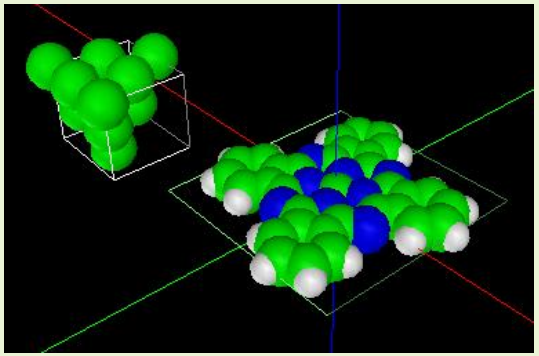
探針(Si_4H_{10})と試料



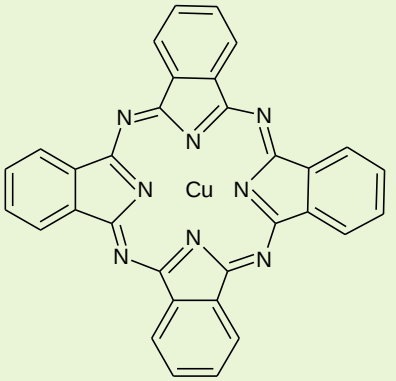
探針電圧:0.003[V],
探針 - 試料間距離:3.0[Å]での
トンネル電流像のシミュレーション結果

[3]:Hiroyuki Hirayama, Yuki Aoki, and Chiaki Kato
Quantum Interference of Rashba-Type Spin-Split Surface State Electrons
Phys. Rev. Lett. **107**, 027204 – Published 7 July 2011

【DFTB】銅フタロシアニンのトンネル電流像シミュレート

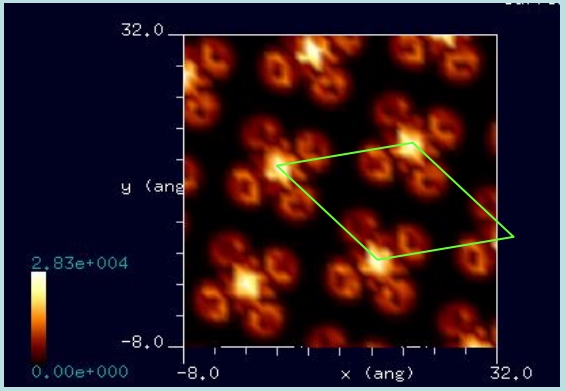


探針: Cu_{10}
試料: Cu Phthalocyanine, $C_{32}H_{16}CuN_8$.
　　基板は無視
手法: 高さ一定STM
探針高さ: 2.8 Å
探針バイアス: +6.0 V

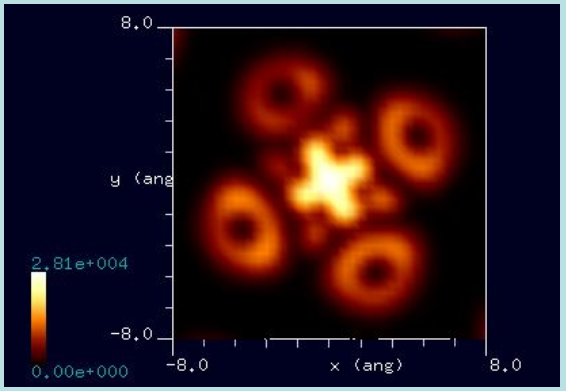


トンネル電流像のシミュレート結果

40 Å x 40 Å

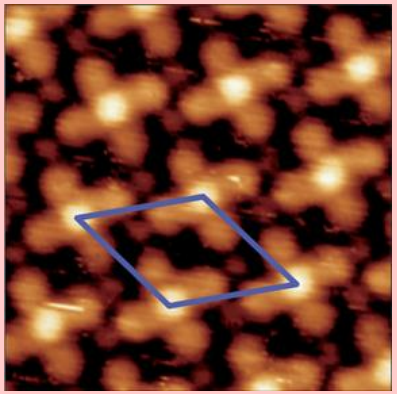


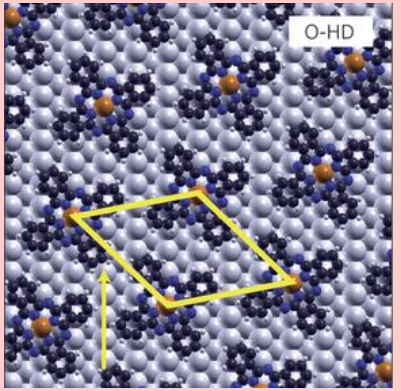
16 Å x 16 Å



cf. Experiment

探針: Pt/Ir
試料: Iron phthalocyanine on Ag (110)
手法: constant current STM



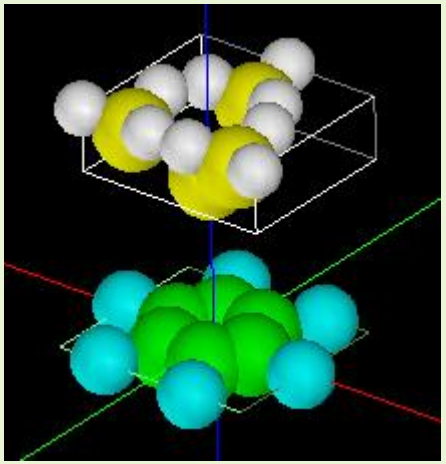


52 Å x 52 Å, V_{sample} = -0.029 V, I = 0.15 nA.

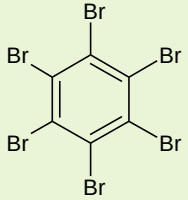
F. Sedona et al., Nature Materials 11, 970–977 (2012).

【DFTB】グラファイト上のC_6Br_6モノレイヤーのSTMシミュレーション

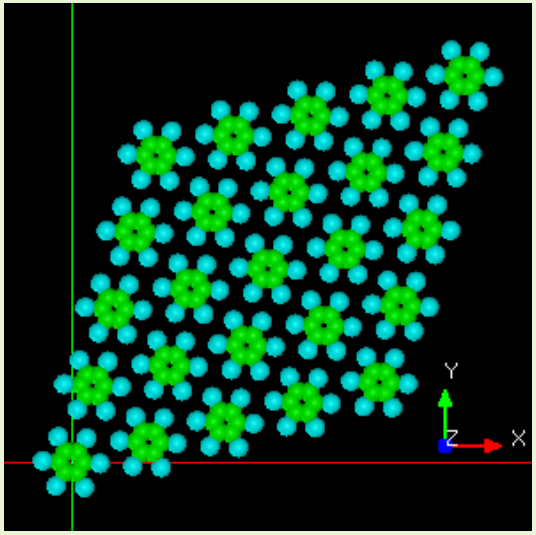
シミュレートに用いた探針・試料モデル



探針: Si_4H_9
試料: C_6Br_6 monolayer
手法: 高さ一定STM および
constant current STM
探針高さ: 2.5 – 5.5 Å
探針バイアス: +2.5 V and -2.5 V



並進対称性を踏まえて拡張した試料モデル

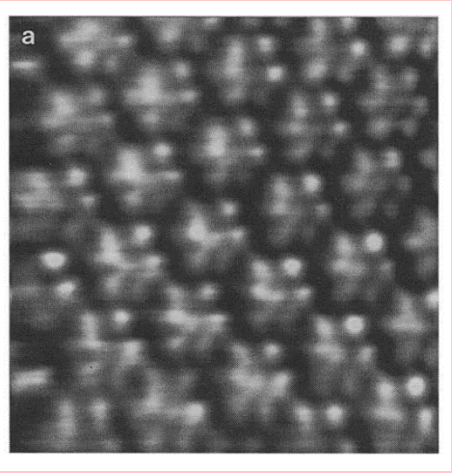


cf. Experiment

探針: Pt/Ir

試料: C_6Br_6 monolayer on graphite

手法: constant current STM



50 Å x 50 Å, V_{sample} = -1.8 V, I = 1.8 nA.

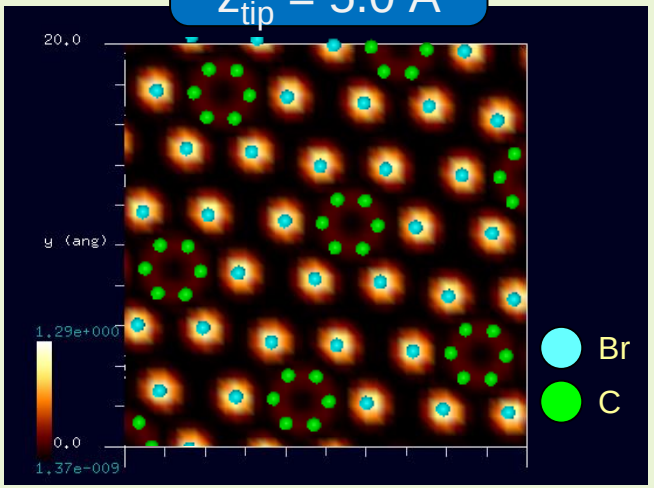
R. Strohmaier et al., Surface Science 318, L1181-L1185 (1994).

計算では基板のグラファイトを除外。Pt/Irの代わりにSi探針を使用。
Constant current モードは開発予定。ここではconstant height STM像を複数枚用意して、数値処理によってconstant current STM像を計算した。

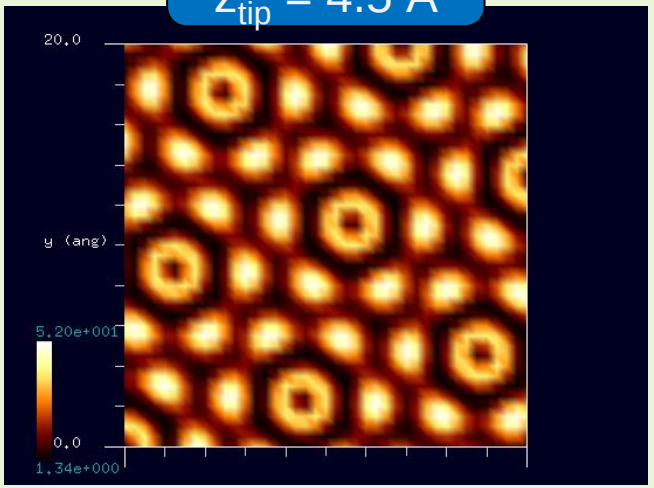
【DFTB】グラファイト上のC_6Br_6モノレイヤーのconstant height STMシミュレーション

V_{tip} = +2.5 V、高さ一定モード、トンネル電流像の計算結果。

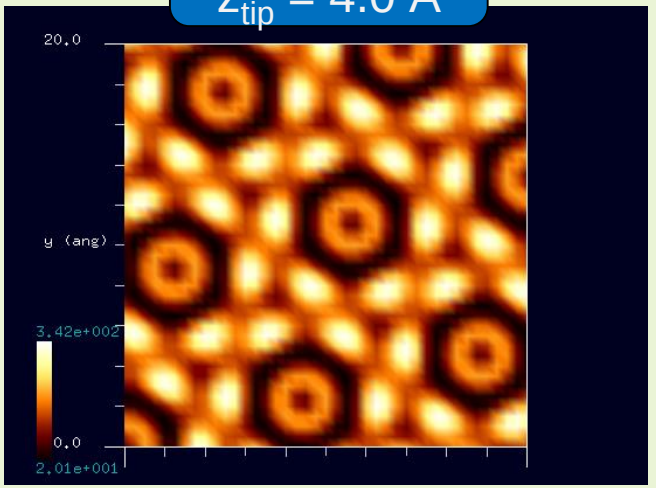
z_{tip} = 5.0 Å



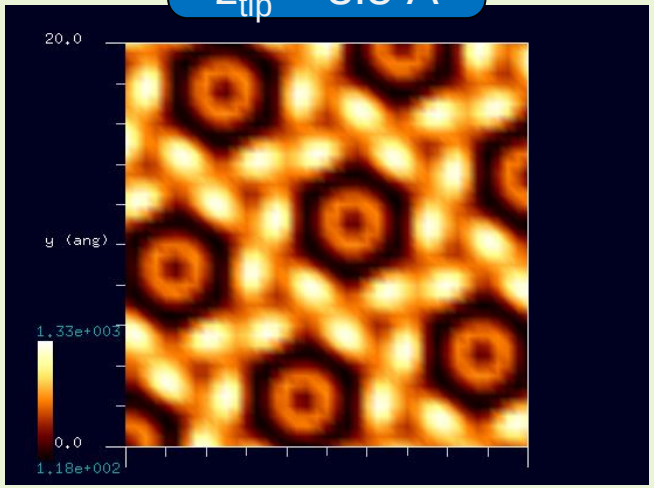
z_{tip} = 4.5 Å



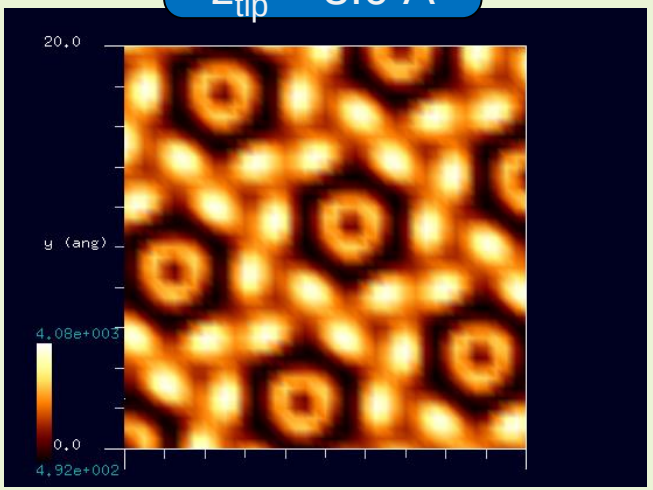
z_{tip} = 4.0 Å



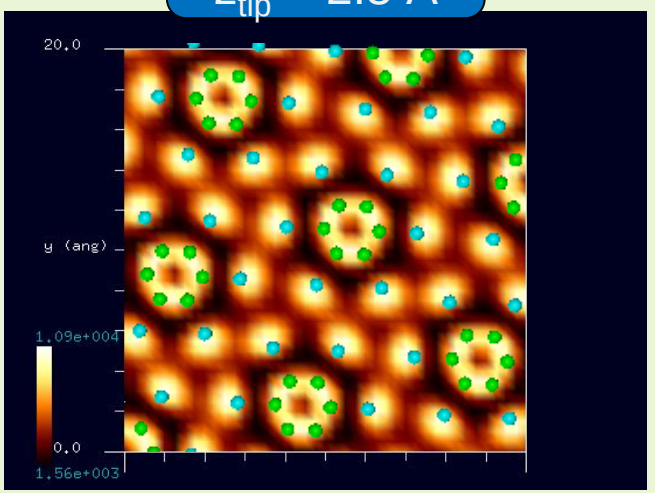
z_{tip} = 3.5 Å



z_{tip} = 3.0 Å



z_{tip} = 2.5 Å

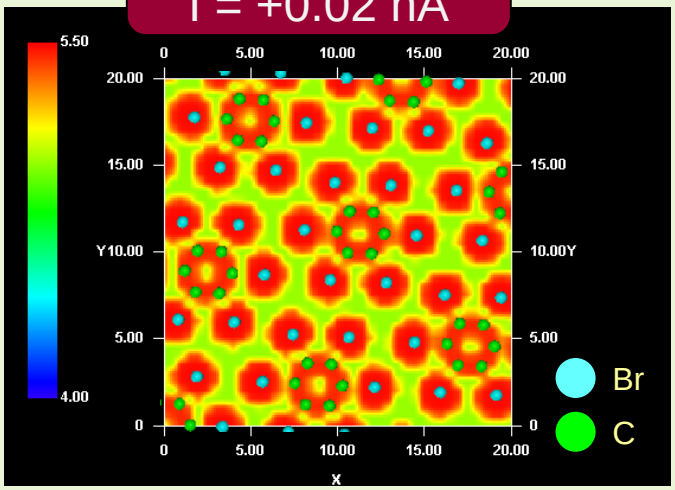


電流の単位 nA. 明るいほど電流の絶対値が大きい。

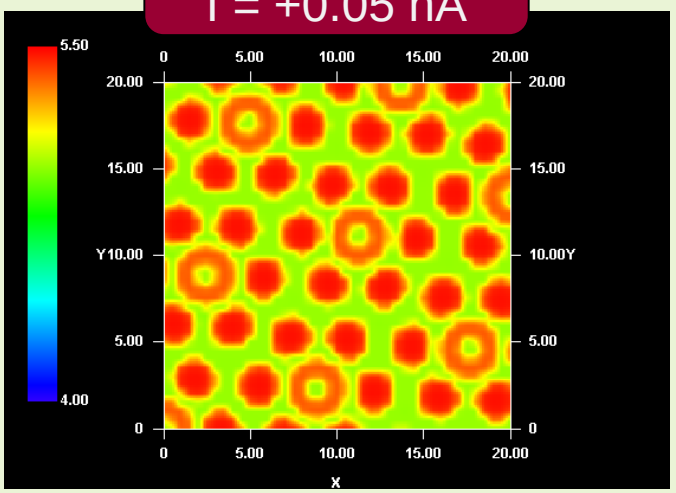
【DFTB】グラファイト上のC_6Br_6モノレイヤーのconstant current STMシミュレーション

V_{tip} = +2.5 Vのとき、電流値をいくつか選んでconstant current STM像を計算した。

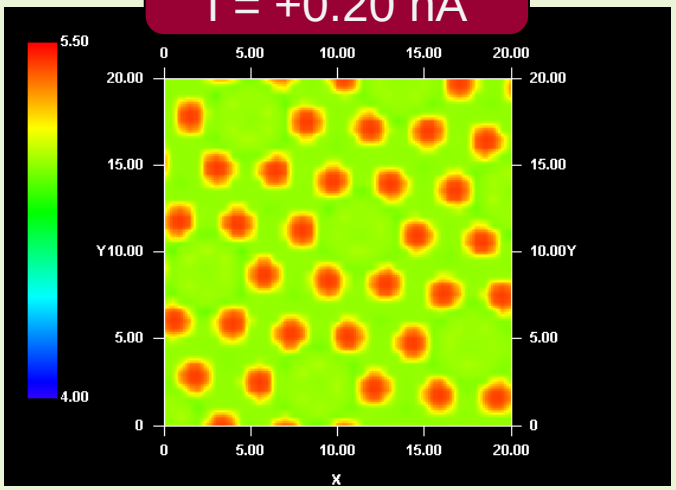
I = +0.02 nA



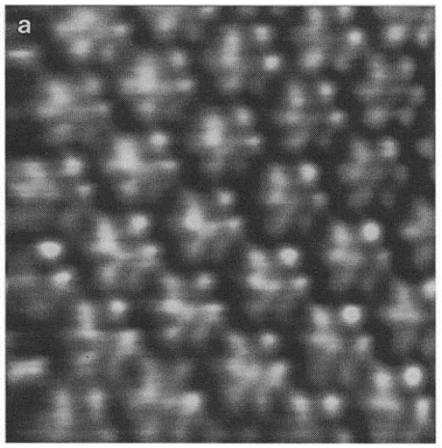
I = +0.05 nA



I = +0.20 nA



cf. Experiment



50 Å x 50 Å, V_{sample} = -1.8 V, I = 1.8 nA。

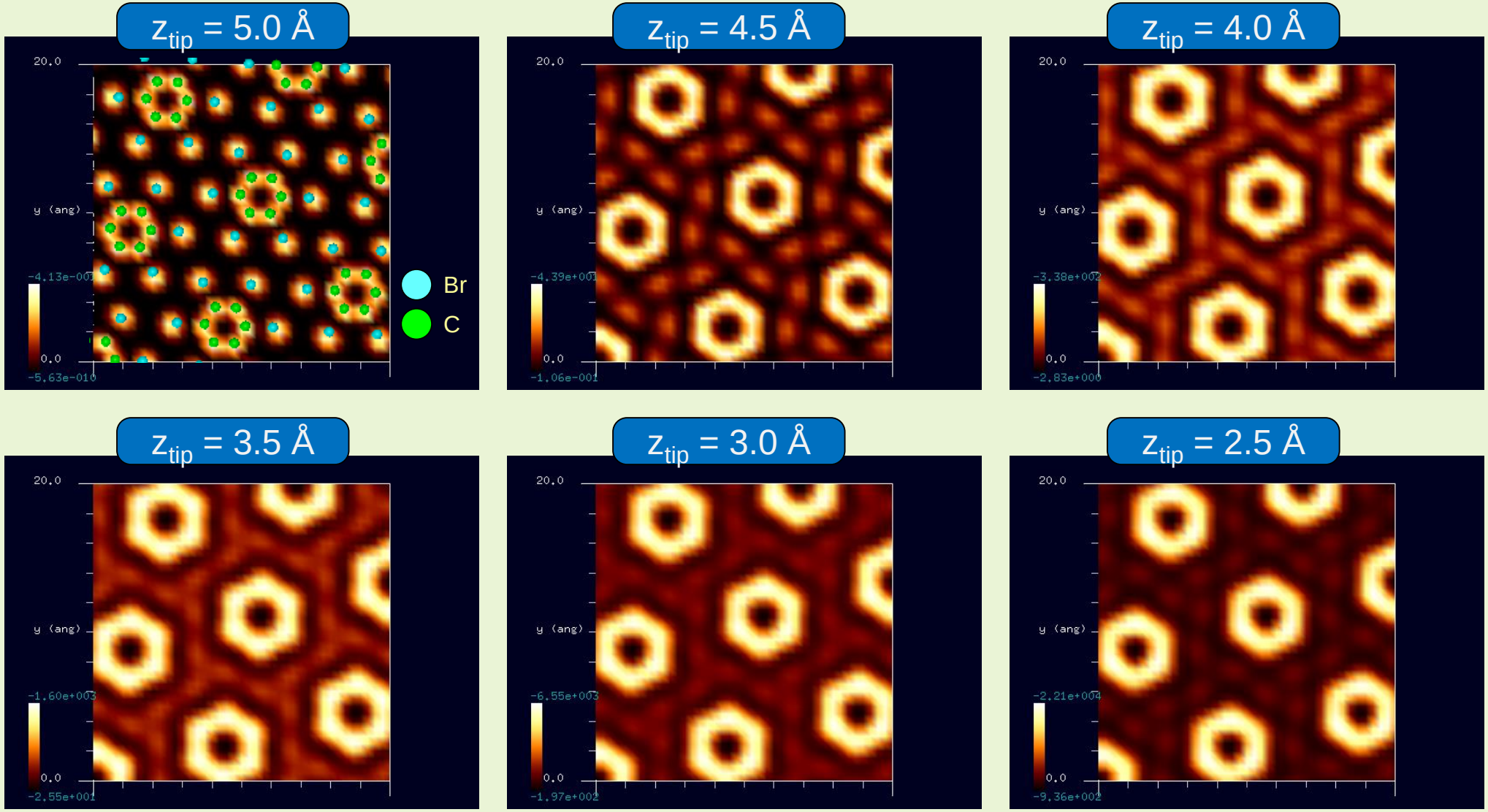
R. Strohmaier et al., Surface Science 318, L1181-L1185 (1994).

小さな電流値を選んだ場合は分子の形状が現れた。

電流値を大きく選ぶとBr原子が強調された。

【DFTB】グラファイト上のC_6Br_6モノレイヤーのconstant height STMシミュレーション

V_{tip} = -2.5 V、高さ一定モード、トンネル電流像の計算結果。

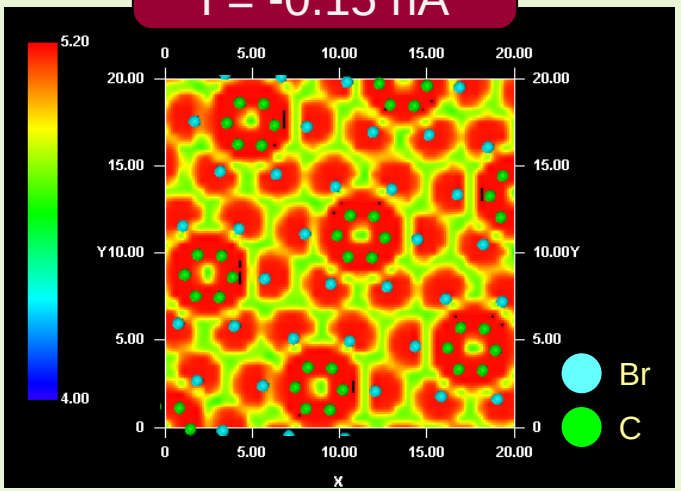


電流の単位 nA. 明るいほど電流の絶対値が大きい。

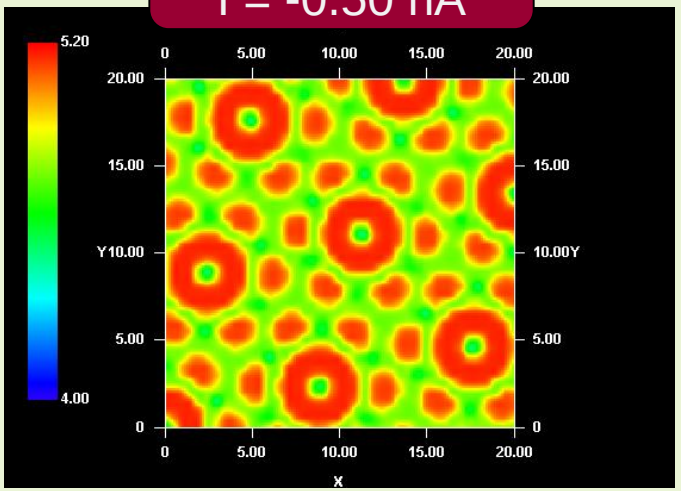
【DFTB】グラファイト上のC_6Br_6モノレイヤーのconstant current STMシミュレーション

V_{tip} = -2.5 Vのとき、電流値をいくつか選んでconstant current STM像を計算した。

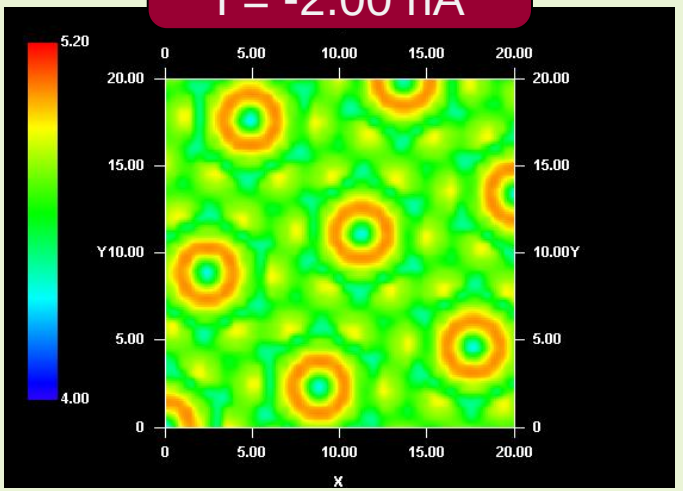
I = -0.15 nA



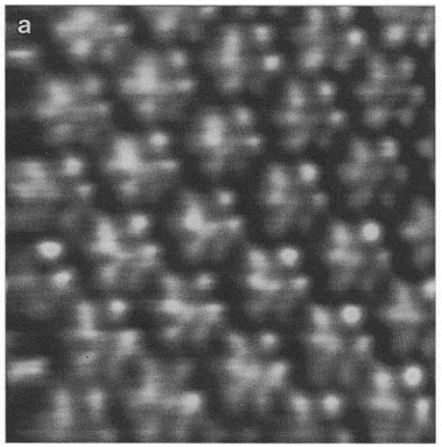
I = -0.50 nA



I = -2.00 nA



cf. Experiment



50 Å x 50 Å, V_{sample} = -1.8 V, I = 1.8 nA。

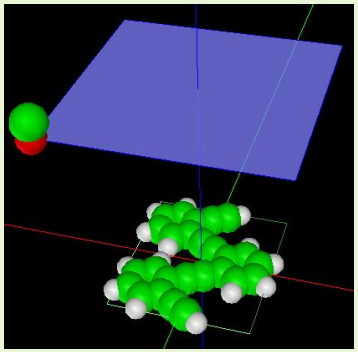
R. Strohmaier et al., Surface Science 318, L1181-L1185 (1994).

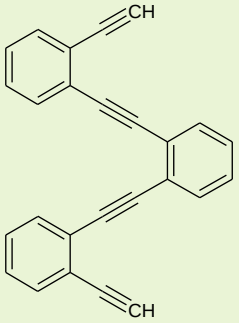
小さな電流値を選んだ場合は分子の形状が現れた。

電流値を大きく選ぶとC原子の環が強調された。

【DFTB】炭化水素$C_{26}H_{14}$のSTMシミュレーション

$C_{26}H_{14}$, 1,2-bis[2-(2-ethynylphenyl)ethynyl]benzene

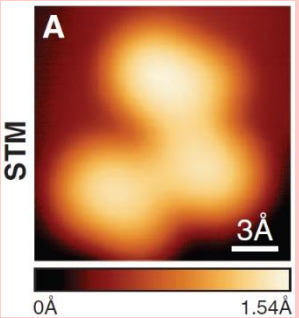


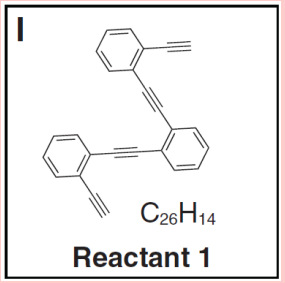


探針: CO
試料: $C_{26}H_{14}$ molecule
　　基板は無視
探針高さ: 2.5 – 5.0 Å
探針バイアス: +3.0 V and -3.0 V

cf. Experiment

Constant current STM, I = 25 pA, V = 0.1 V

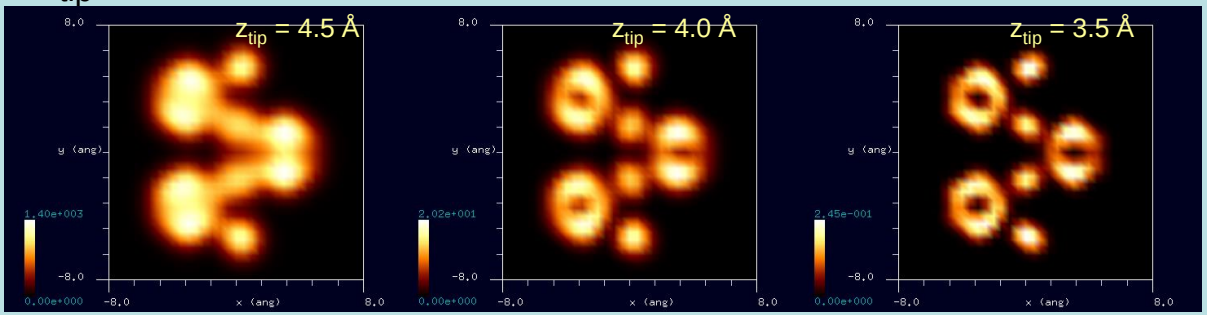




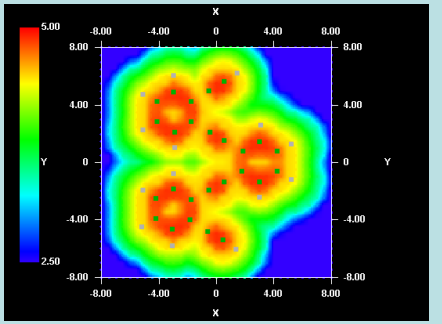
D.G. Oteyza et al., Science 340, 1434-1437 (2013).

Tunneling current images and constant current STM images for positive and negative biases.

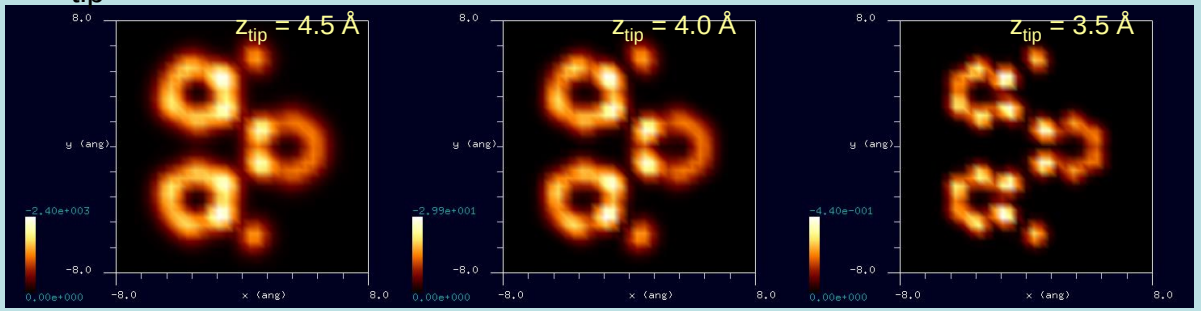
V_{tip} = +3.0 V



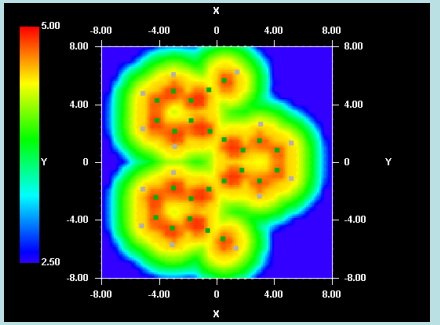
cc-STM for I = +0.05 nA



V_{tip} = -3.0 V

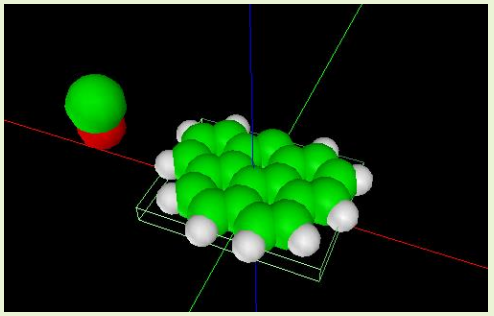


cc-STM for I = -0.10 nA

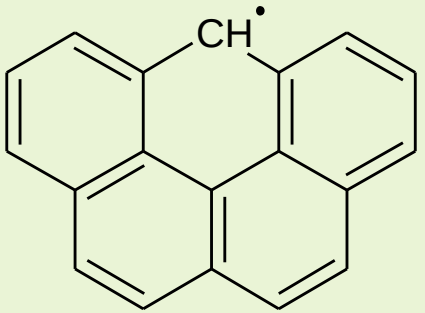


【DFTB】Olympiceneの周波数シフトAFMシミュレーション

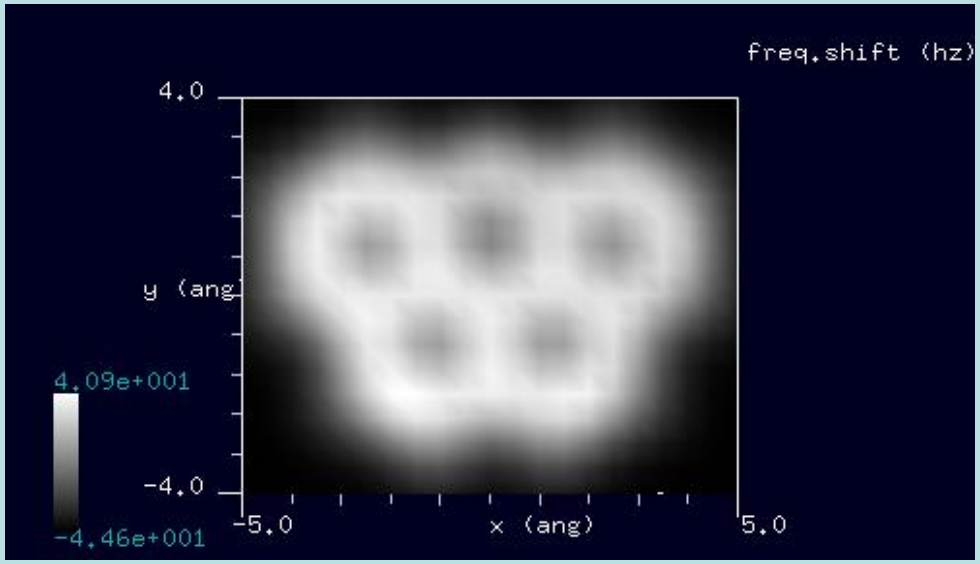
nc-AFM simulation of an Olympicene radical, $C_{19}H_{12}$



探針: CO
試料: Olympicene radical, $C_{19}H_{11}$
　　基板は無視
手法: 周波数シフトAFM
探針高さ: 3.4 – 6.4 Å
カンチレバーの振幅: 150 Å
ばね定数: 10 N/m
共鳴周波数: 200 kHz

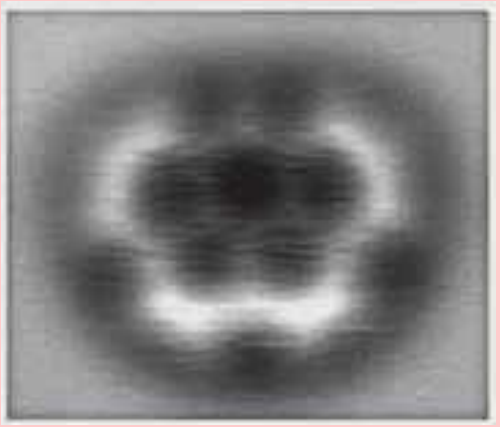


Simulated result



cf. Experiment

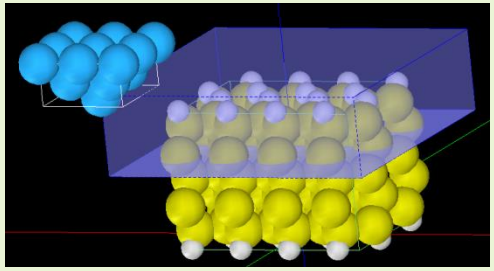
nc-AFM, Olympicene on Cu(111)



Experiment by Leo Gross et al.

Ed. by Jon Edwards, RSC NEWS, JUNE 2012,
RSC News editorial office, Thomas Graham House

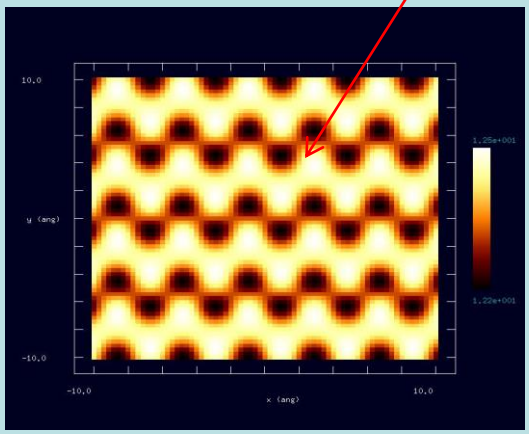
【DFTB】Constant current STM image of Si(110):H



探針: W_{14}
試料:水素終端されたSi(110)
手法:constant current STM

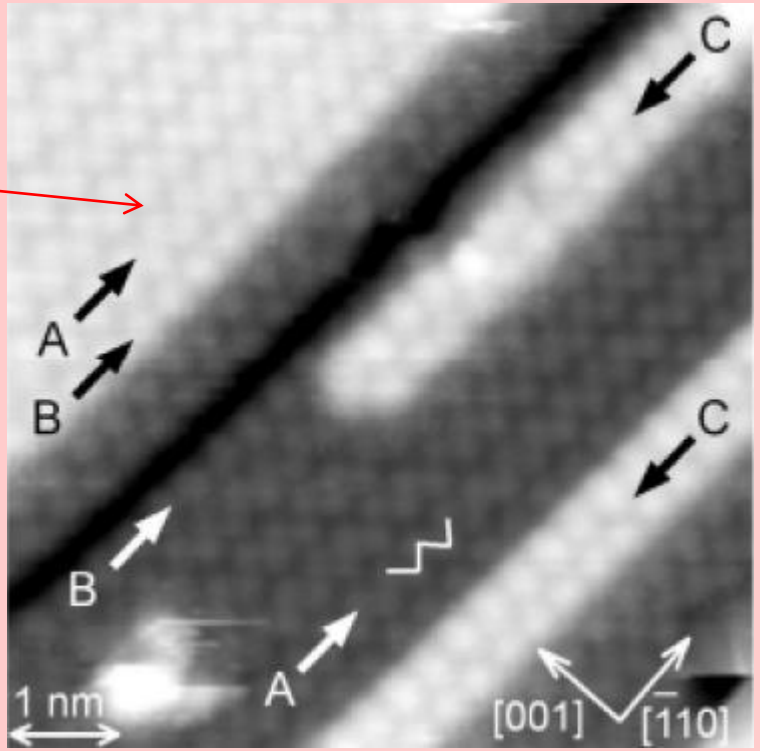
ジグザグの鎖状
構造を再現

Simulated result



探針バイアス+2.0V、電流 2000nA

cf. Experiment

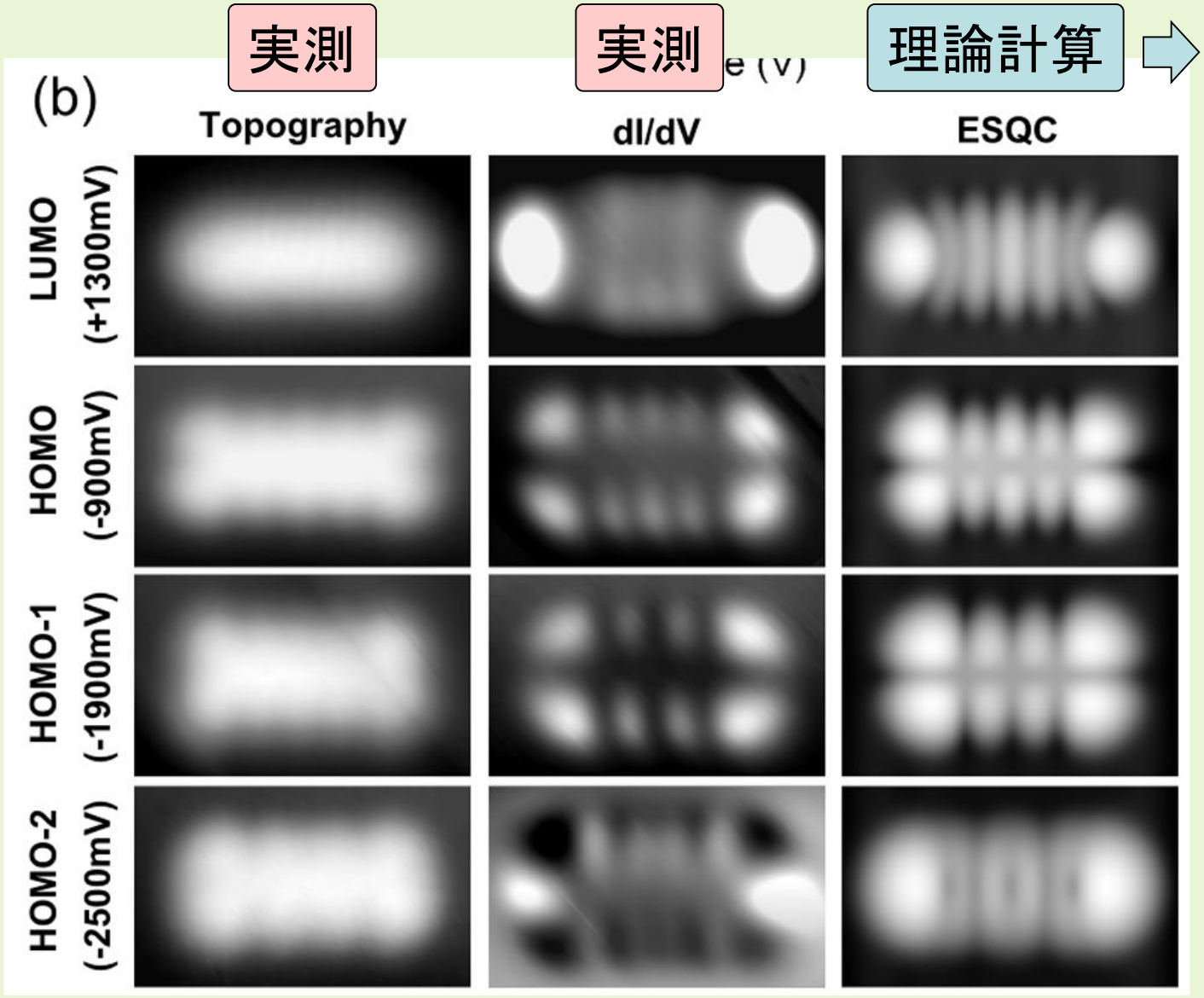


Appl. Phys. Lett. 85, 6254 (2004)

試料バイアス-2.0V、電流 0.3nA

【DFTB】Constant current STM image of pentacene

文献より、Pentacene on Au(111)のSTM topography像およびdI/dV像



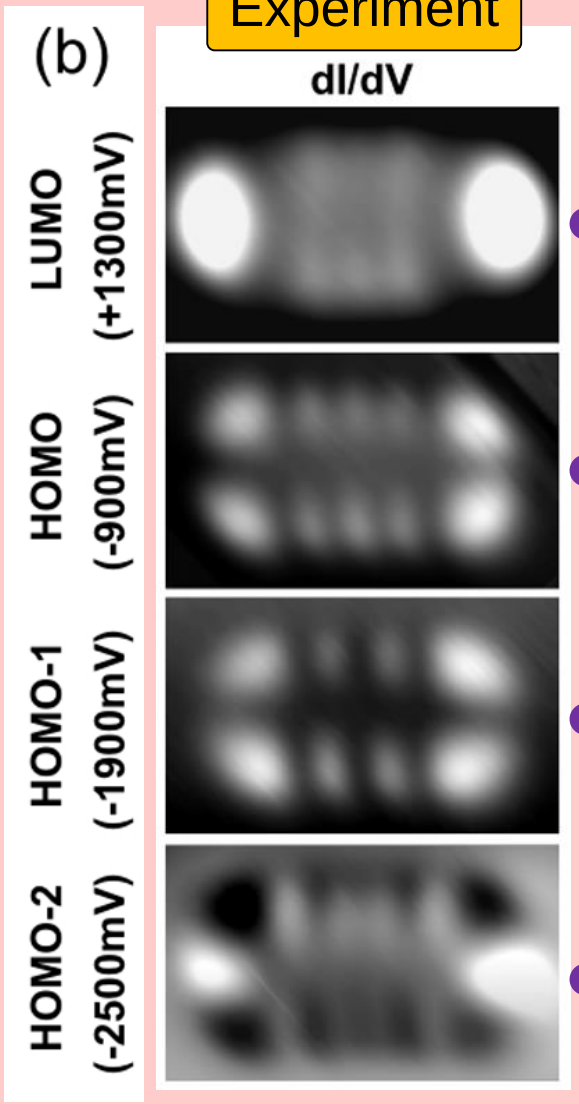
STM-elastic scattering quantum chemistry (ESQC)
分子軌道を使ったconstant current topography 計算。
探針効果を含めると実測像と一致する。

W.-H. Soe *et al.*, PRL 102, 176102 (2009).

【DFTB】Constant current STM image of pentacene

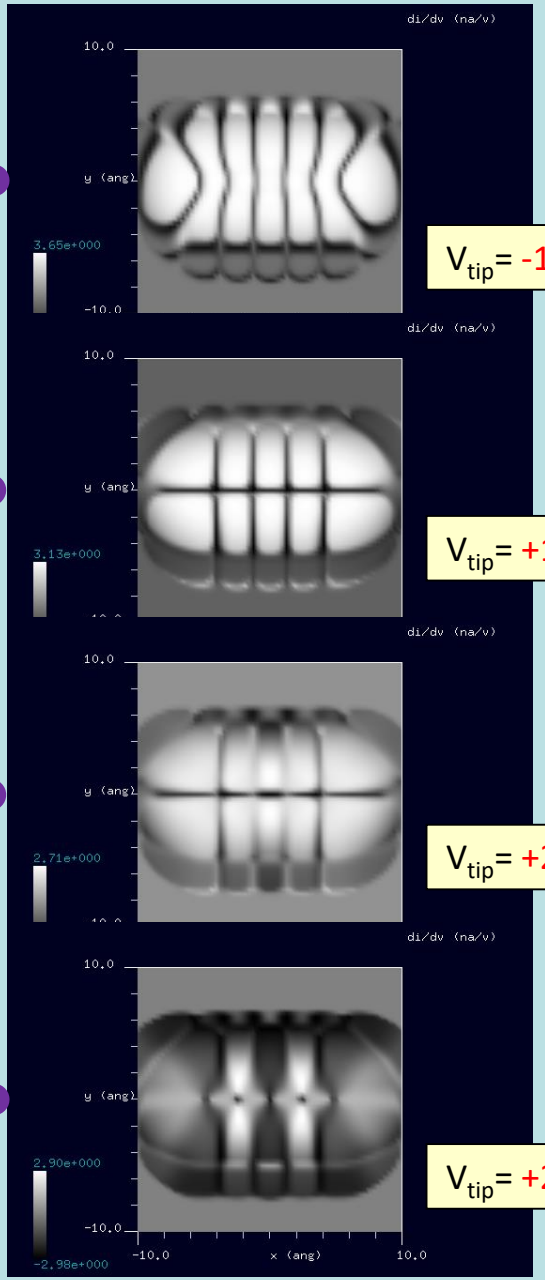
Ref. Pentacene on Au(111)

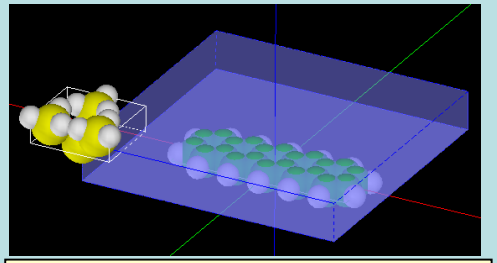
Experiment



W.-H. Soe *et al.*, PRL 102, 176102 (2009).

DFTB dI/dV map

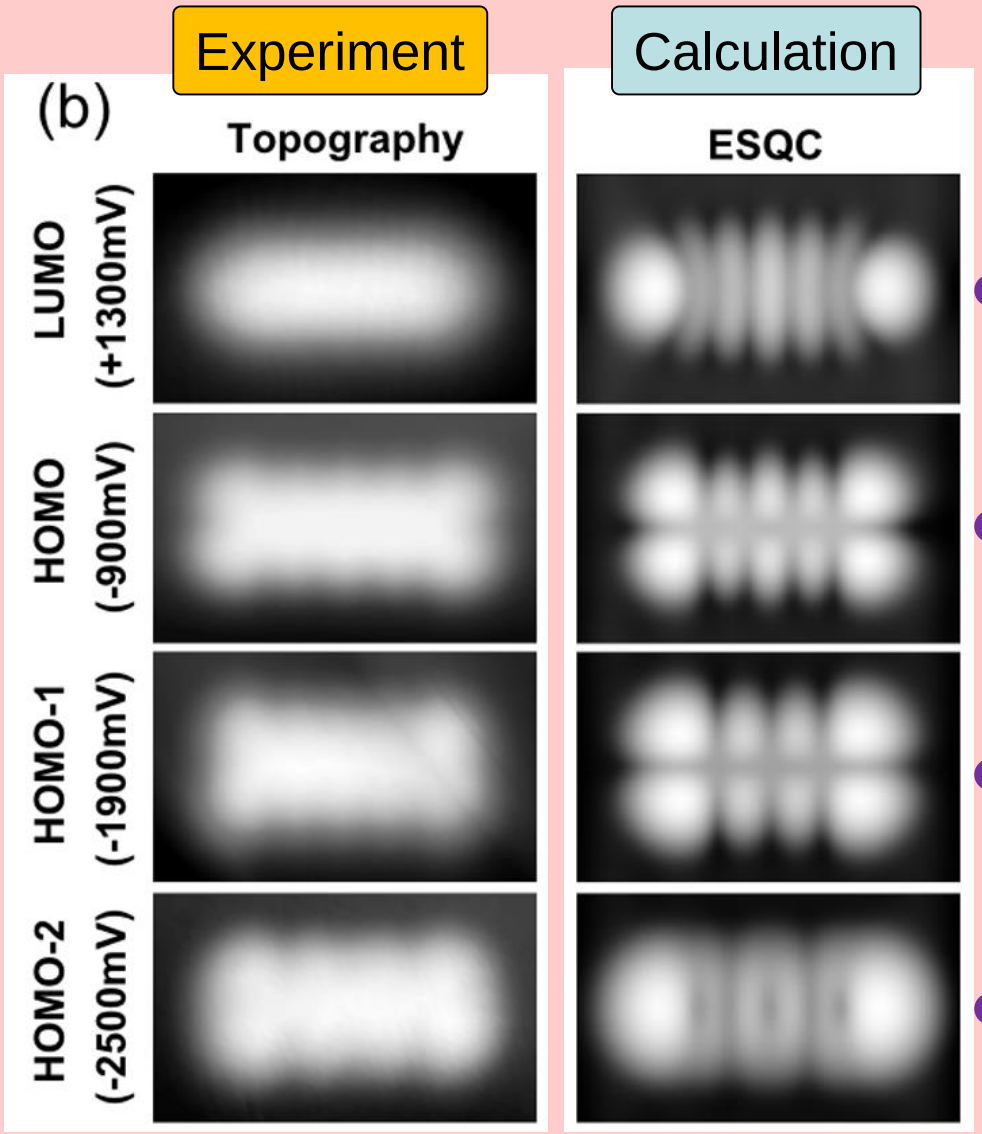




探針: Si_4H_9
試料: Pentacene molecule.
Without substrate.
Current = 5 nA
for all calculations

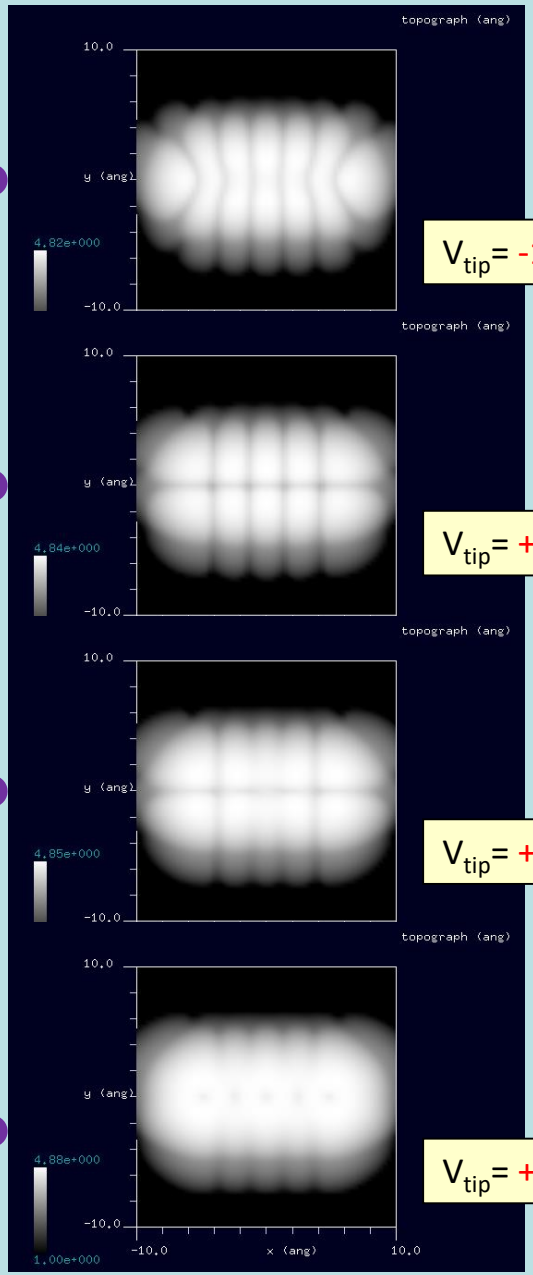
【DFTB】Constant current STM image of pentacene

Ref. Pentacene on Au(111)

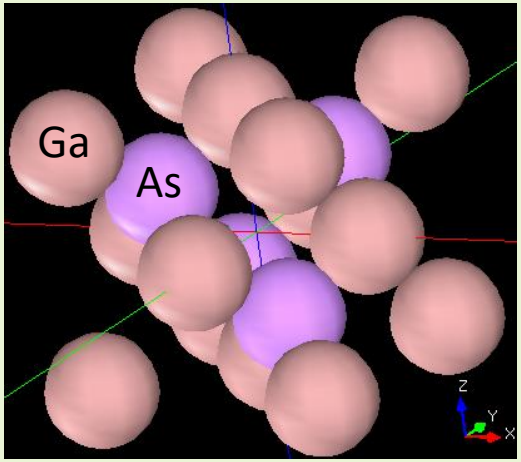


W.-H. Soe *et al.*, PRL 102, 176102 (2009).

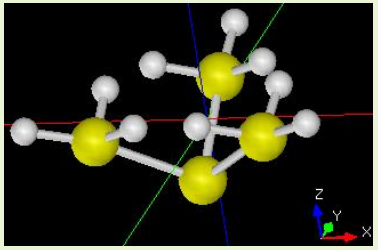
DFTB constant current topography



【DFTB】GaAs(100)表面のSTMシミュレーション

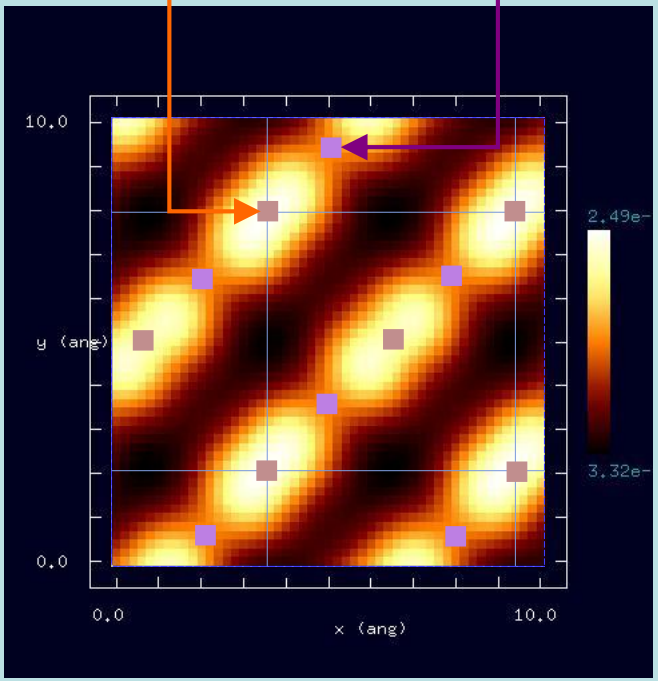


試料:GaAs(100)の単位格子



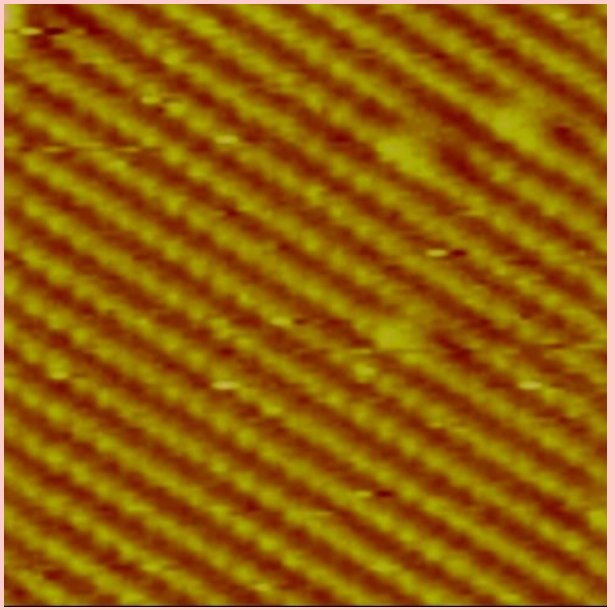
探針:Si_4H_9

Ga (1st layer)　As (2nd layer)



シミュレーション結果
探針 - 試料間の距離:　3.0[Å]
探針バイアス:　+2.0[V]
高さ一定STM計算

cf. Experiment



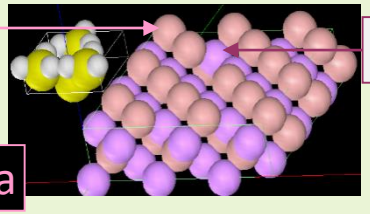
GaAs (100) surface cleaved in UHV (7.2 nm x 7.2 nm) (STM).

http://info.ifpan.edu.pl/~wawro/subframes/Surfaces.htm

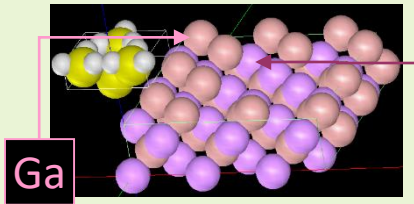
探針の種類、スキャンモード、バイアス、電流の情報なし。

第2層目のAsの影響で電流値の高い領域が斜めになった。

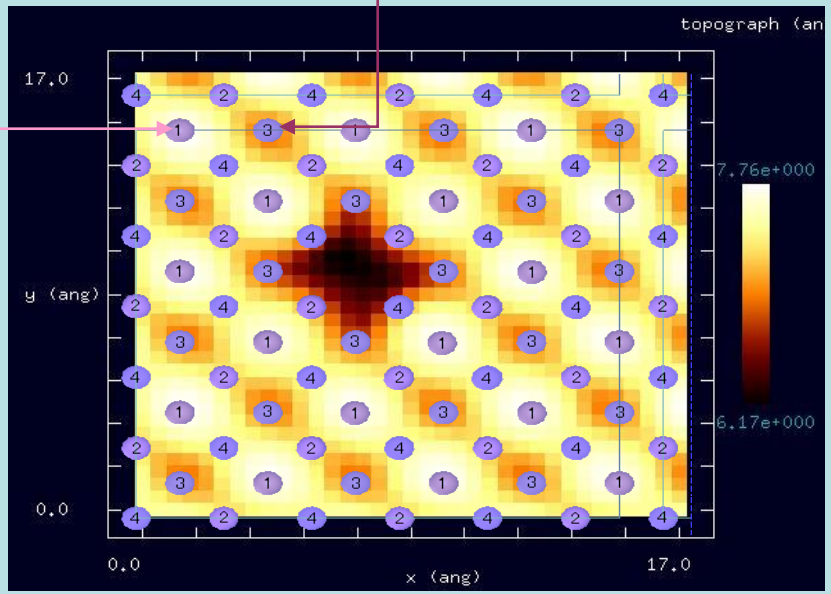
【DFTB】GaAs(100)結晶表面の欠陥のconstant current STMシミュレーション

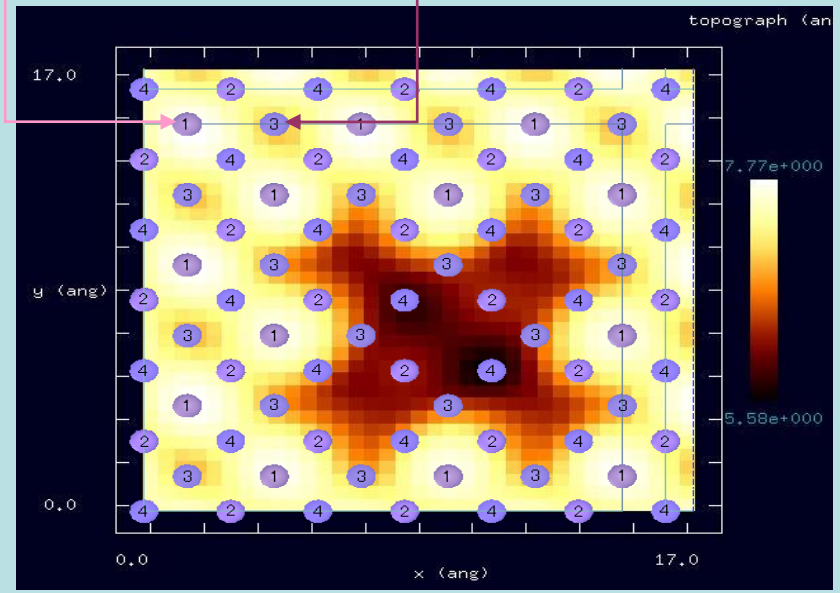


探針:Si_4H_9
試料:GaAs(100)表面の
最表面からGa原子を
1つ除去したモデル



探針:Si_4H_9
試料:GaAs(100)表面の
最表面からGa原子を
5つ除去したモデル



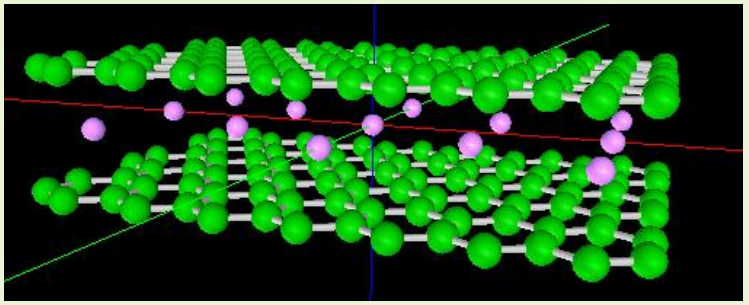


シミュレーション結果
constant current モード
電流値: 10,000[nA]
探針バイアス: 1.0[V]
範囲:17.0[Å]×17.0[Å]

最表面からGa原子を5つ除去すると、第2層目のAs原子の凹凸が見える

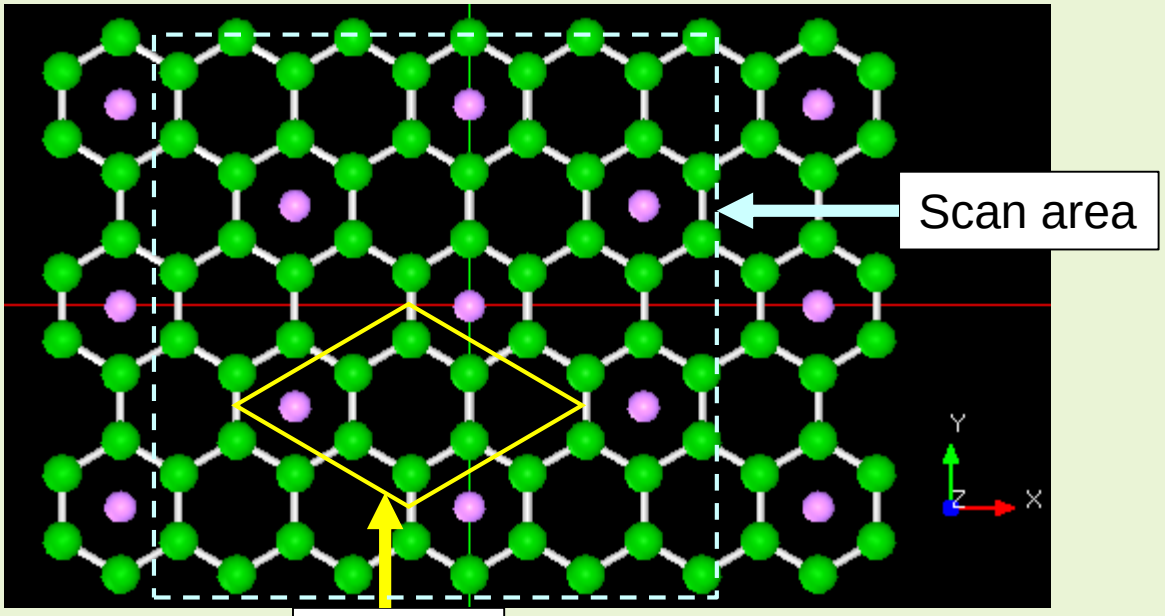
【DFTB】Li-GICのSTM像シミュレーション

Li-GIC: Liイオンのグラファイト層間化合物

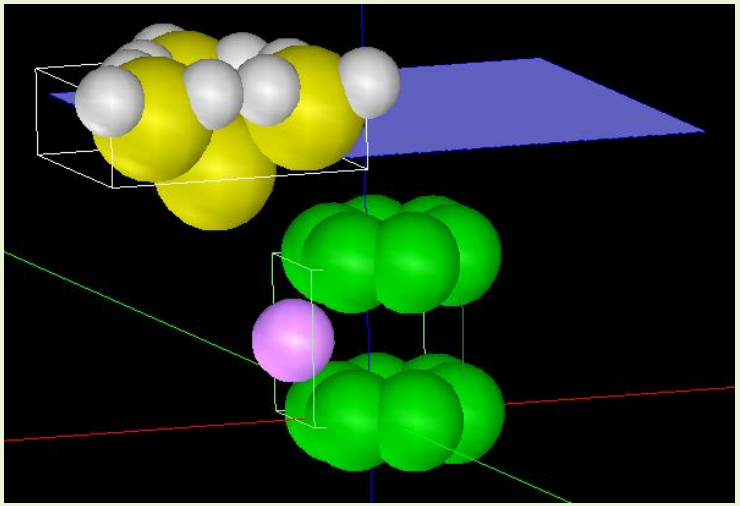


2層のグラフェンシート内に Li 原子を配置
層間距離 3.70 Å

上から見た図



シミュレートモデル

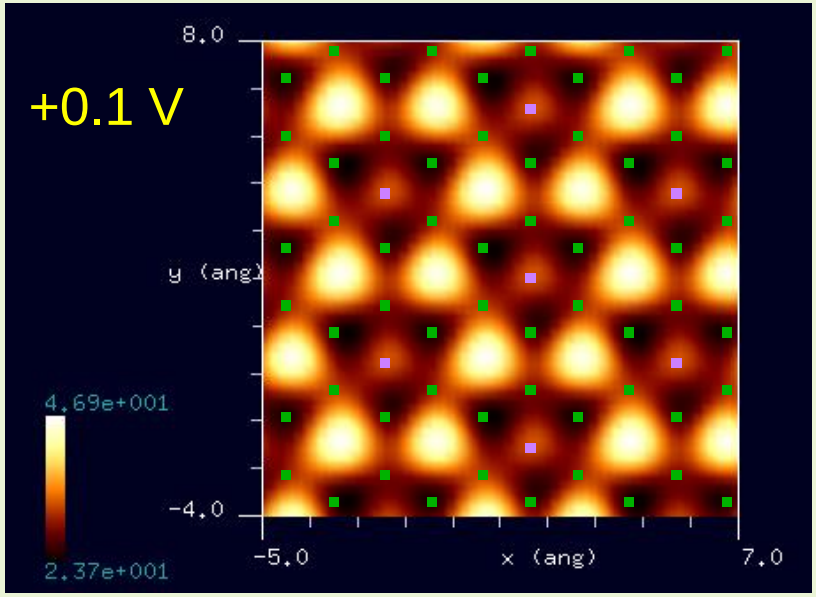


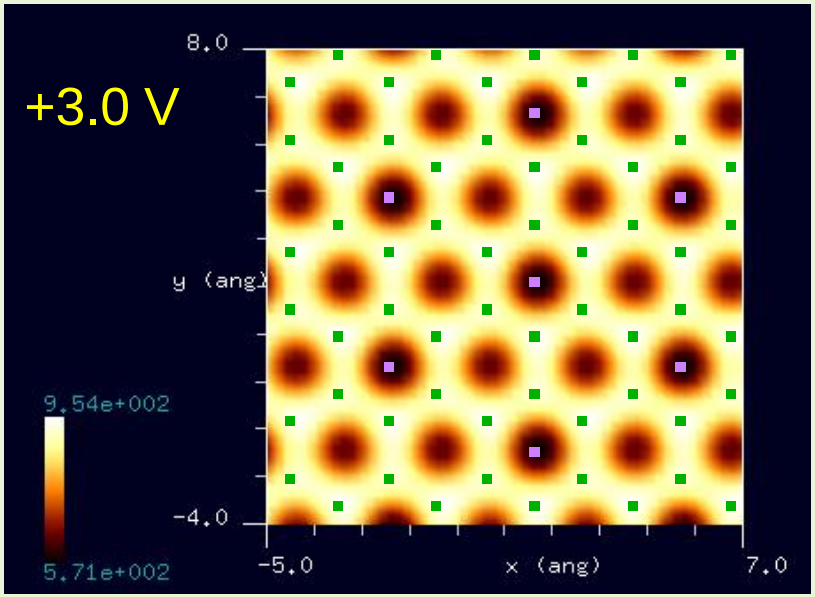
探針: Si_4H_9
試料: Li-GIC
探針高さ: 3.0 Å
スキャンエリア: 12 Å x 12 Å

探針のバイアスをいくつか選び、
高さ一定STM像をシミュレート

【DFTB】Li-GICのSTM像シミュレーション

探針バイアス



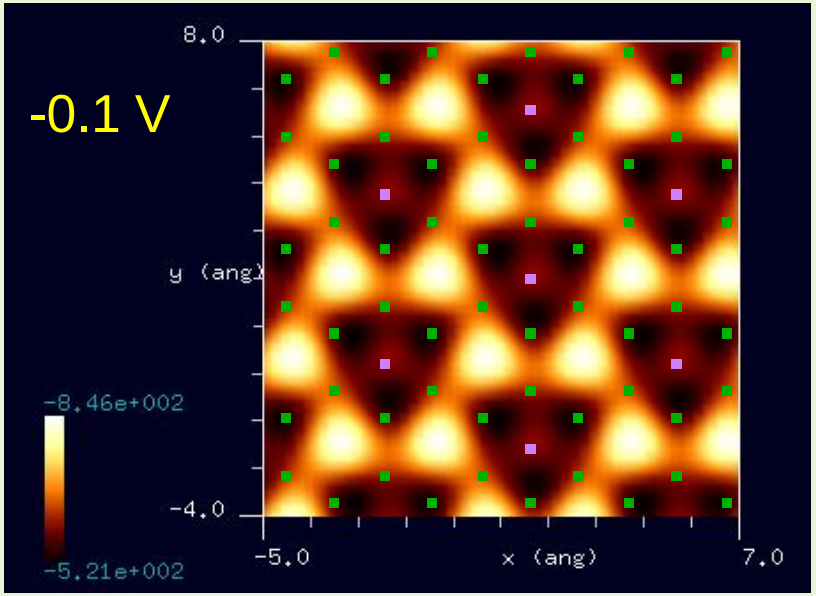


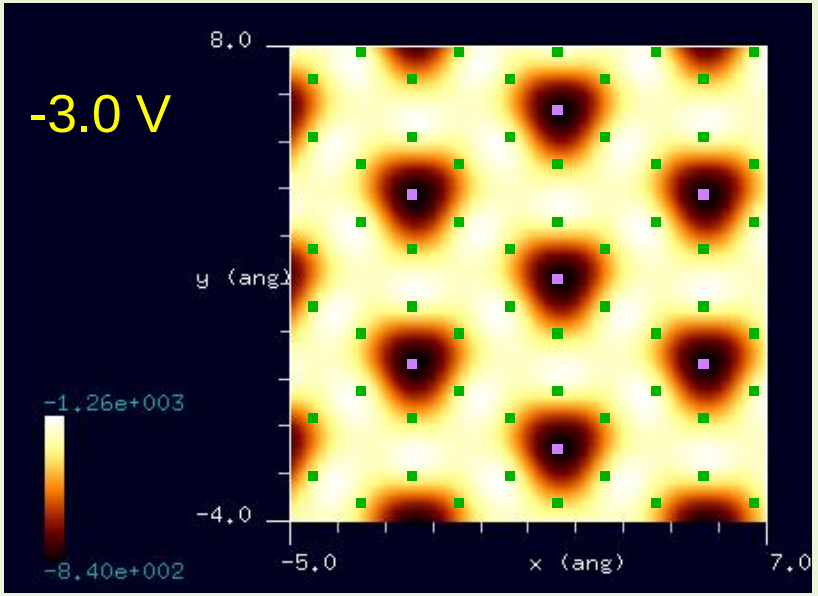
電流値

強

弱

探針バイアス





電流値

強

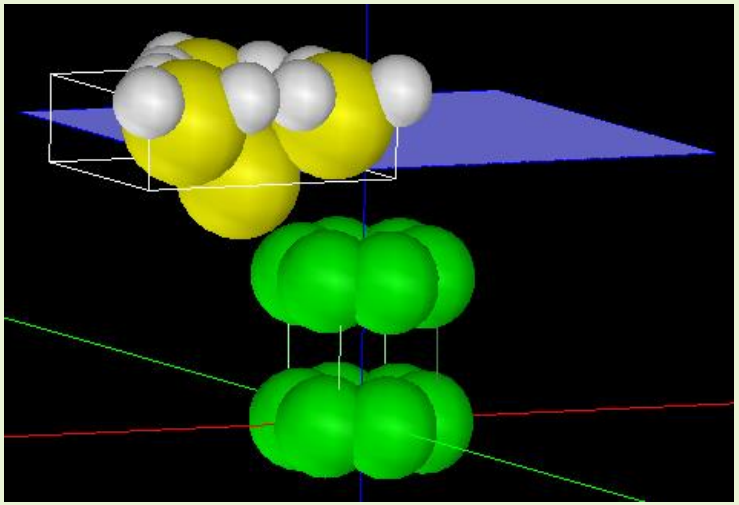
弱

表面から2層目にあるLi原子の位置を敏感に反映したSTM像となった。

【DFTB】Li-GICのSTM像シミュレーション

比較のため、グラフェンシートのみのモデルでSTM像を計算した。

シミュレートモデル

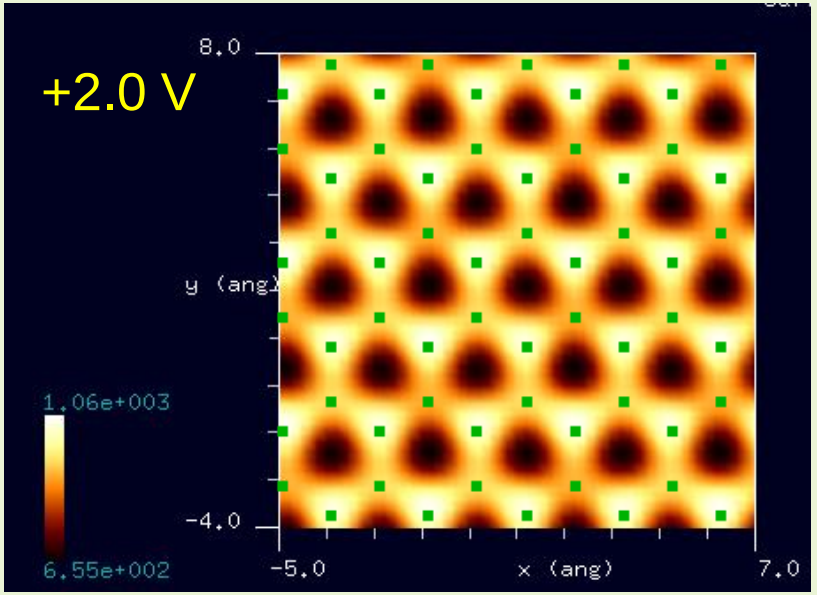


探針：Si_4H_9
試料：2 graphene sheets
層間距離：3.34 Å
探針高さ：3.0 Å
スキャンエリア：12 Å x 12 Å

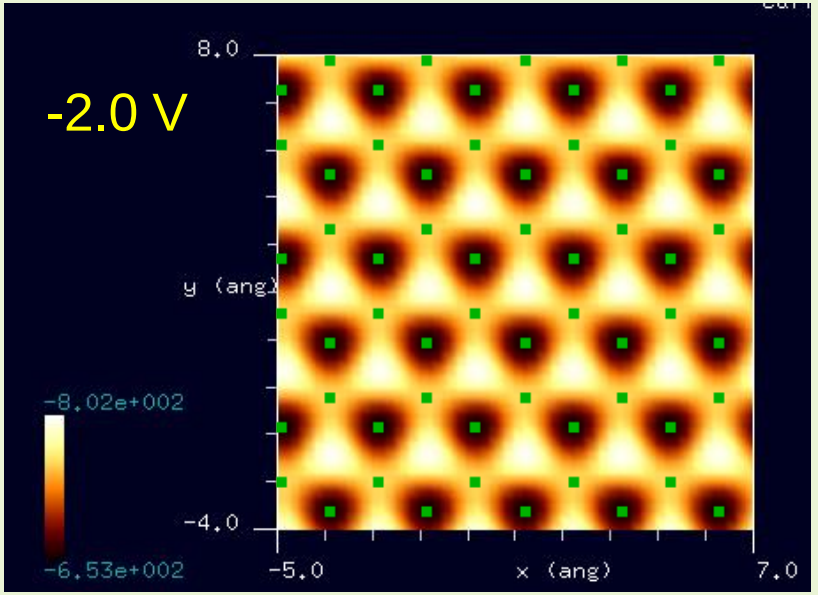
探探針のバイアスをいくつか選び、高さ一定STM像をシミュレート

探針バイアス

電流値
強
弱



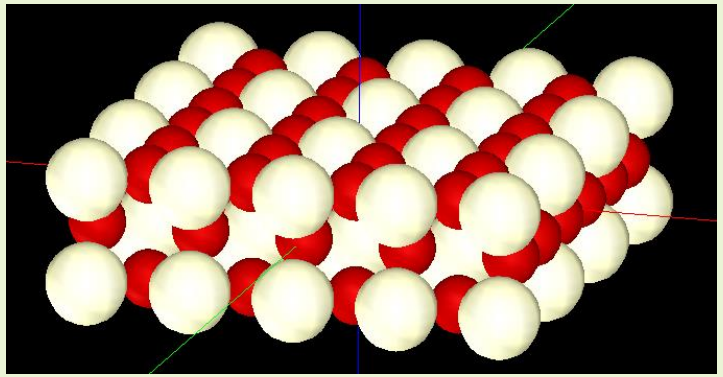
電流値
強
弱



ハニカム構造を反映したSTM像となった。バイアスの正負で電流値の強度が逆転した。

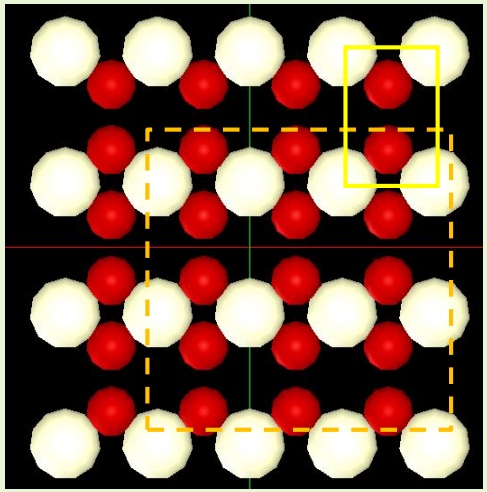
【DFTB】CeO_2 (110) 表面のSTM像シミュレーション

CeO_2 (110) 表面の構造

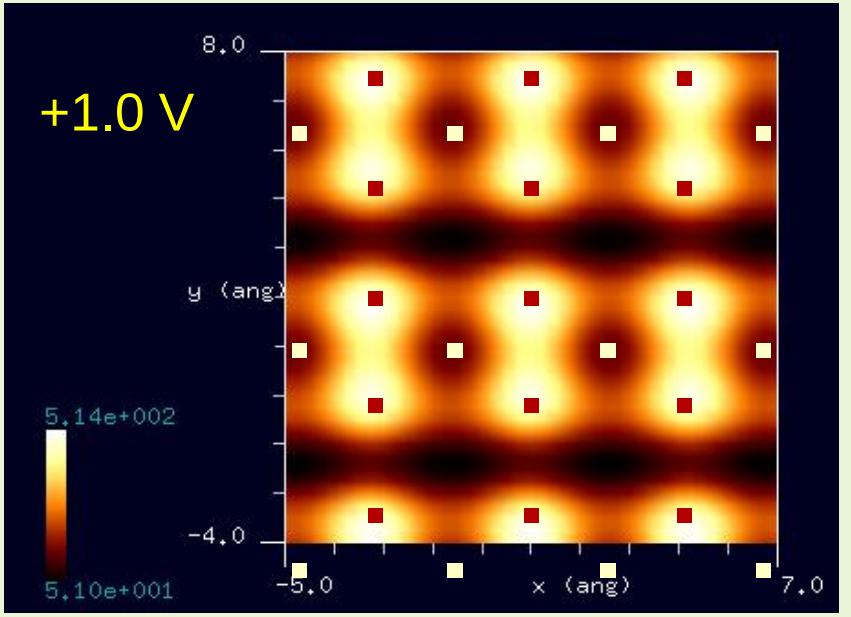


赤＝酸素原子。白＝Ce原子。

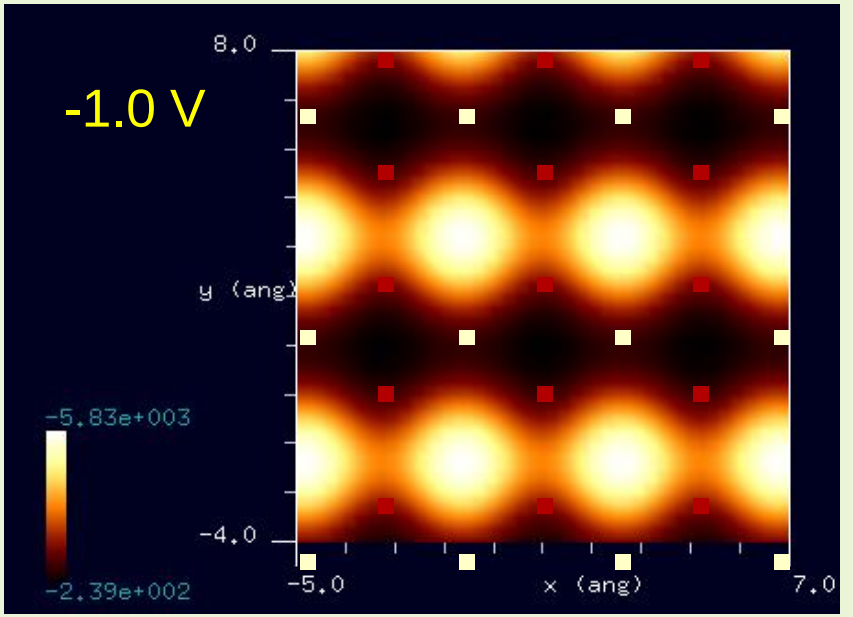
最表面の原子配置



探針バイアス



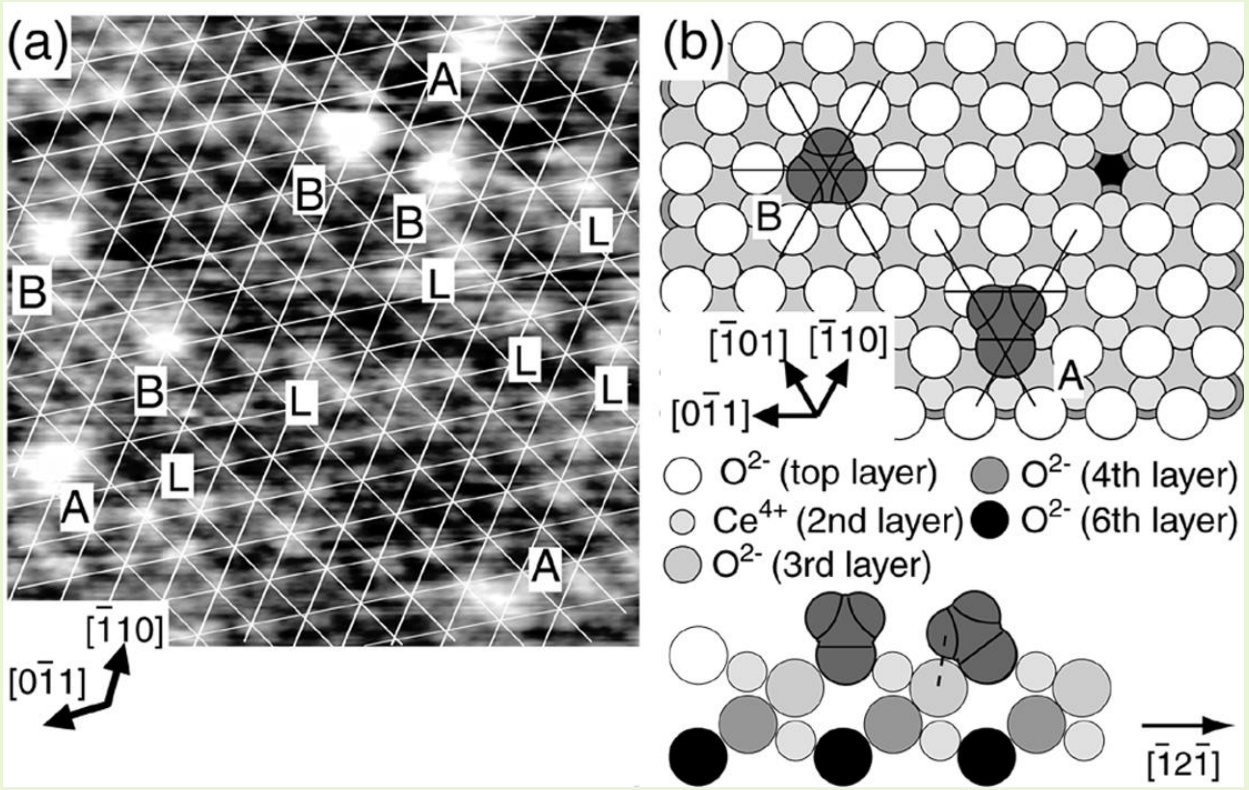
電流値 強 ↑ 弱



電流値 強 ↑ 弱

バイアスの正負によって、趣の全く異なるSTM像が得られた。

【DFTB】CeO_2 (111) 表面のnc-AFM像（参考）

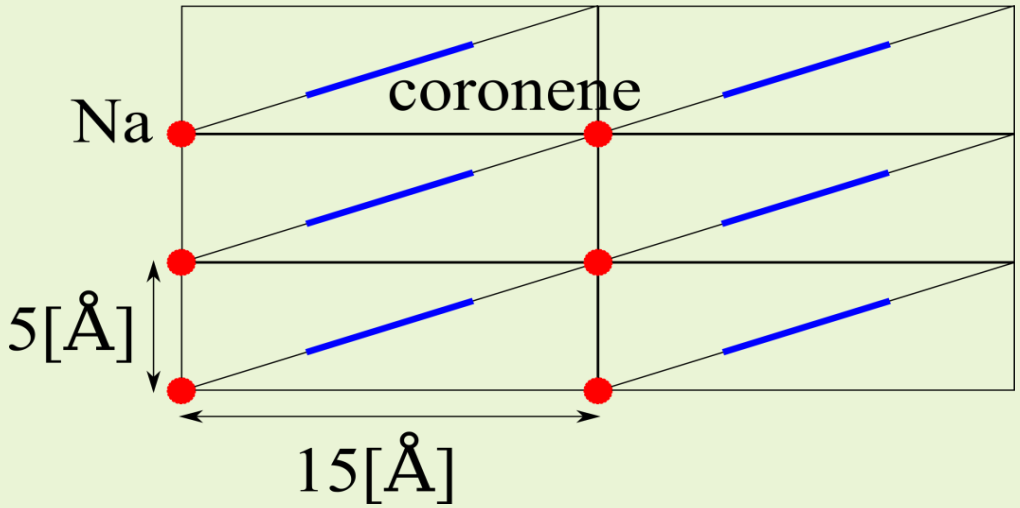


(a)CeO2(111)表面に室温で4.5 L メタノールを露出した後に観察された原子分解能NC-AFM 像。(5.3 × 5.3 nm2, ΔA ~ 6 nm, Vs= -0.677 V, Δf ~ 194 Hz) (b)メトキシ種の吸着サイトのモデル。

分子構造総合討論会2004講演要旨集
3B01 NC-AFM 及び STM による CeO2(111)表面での吸着サイト・吸着分子構造及び新規反応機構に関する研究
(東大院理) ○生井 勝康，田澤 俊樹，岩澤 康裕

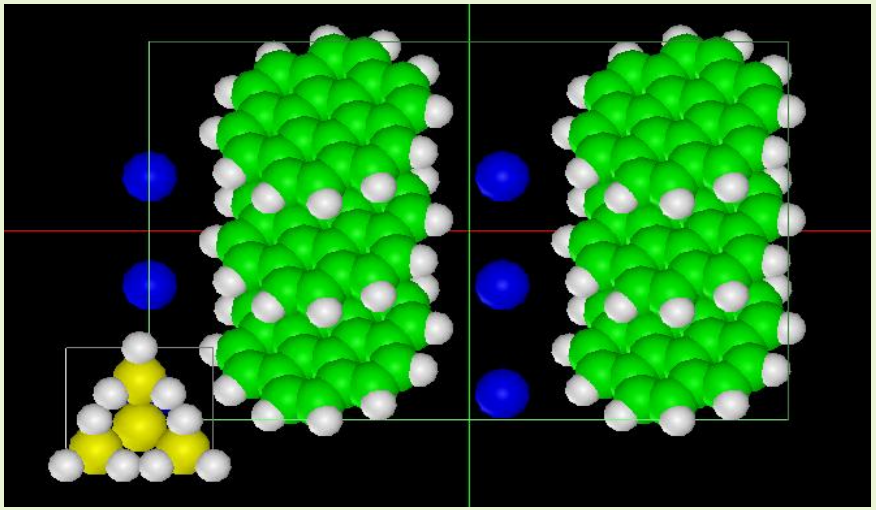
【DFTB】Au(111)面上でのcoronene分子吸着構造のSTMシミュレーション

Coronene分子およびNa原子の位置関係

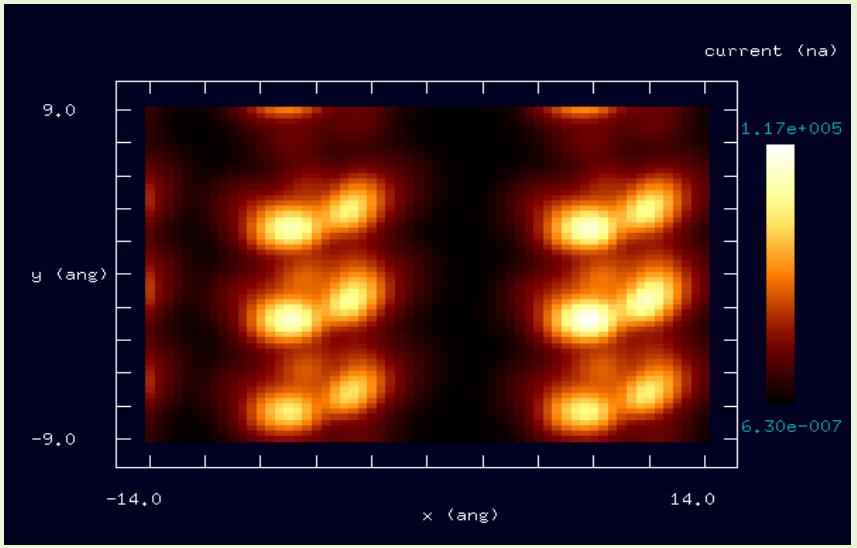


Coronene分子は、Au(111)面に対して40°傾いているとする

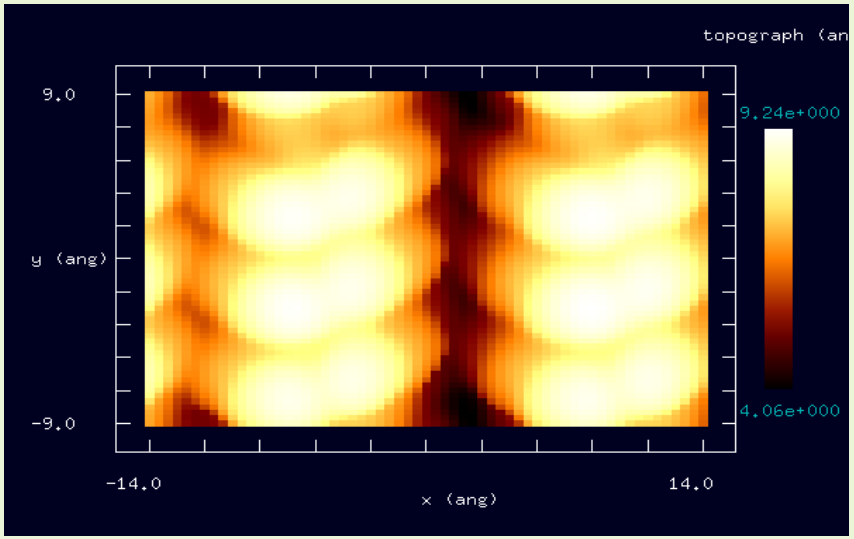
このような条件下でDFTBによりSTMシミュレーションを行う



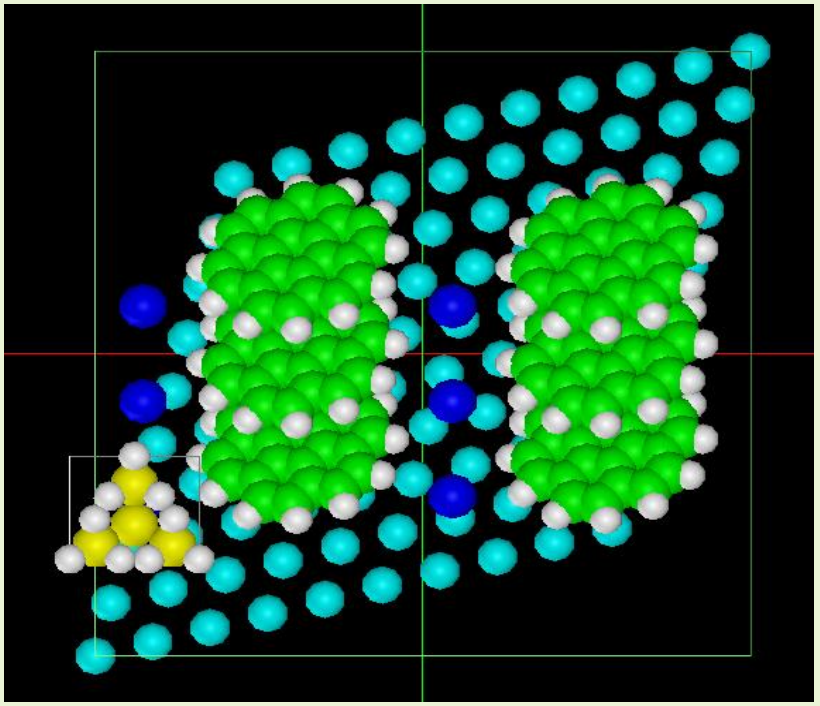
Coronene分子、Na原子を配置した図：
Au(111)面は考慮に入れずSTMシミュレーションを実行するとする。
H原子で終端されたSi探針を使用する。



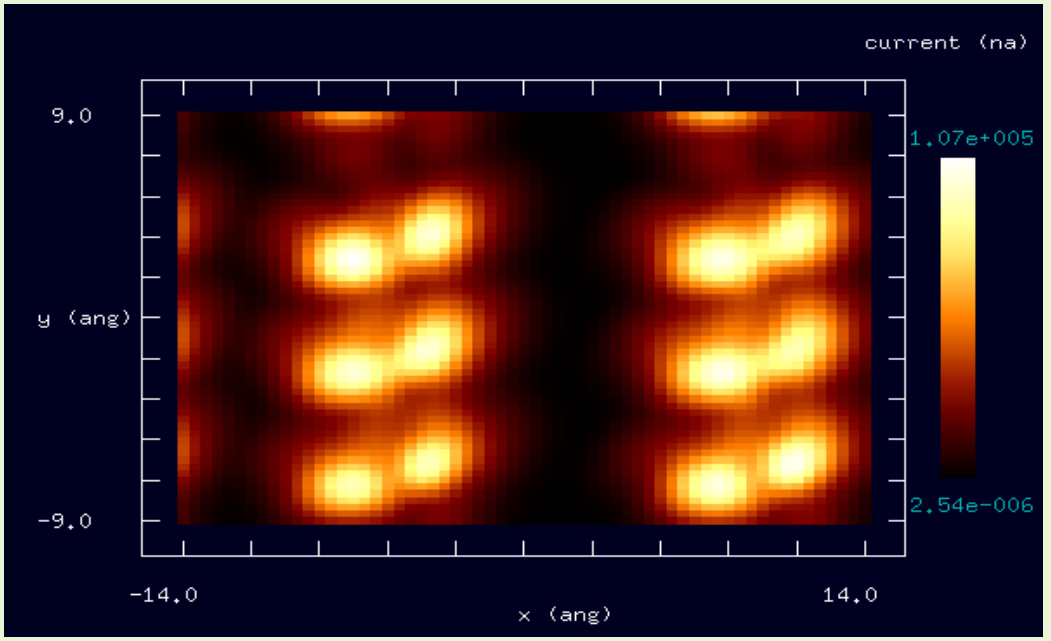
高さ一定モードでのSTMシミュレーション画像



トンネル電流値一定モードでのSTMシミュレーション画像

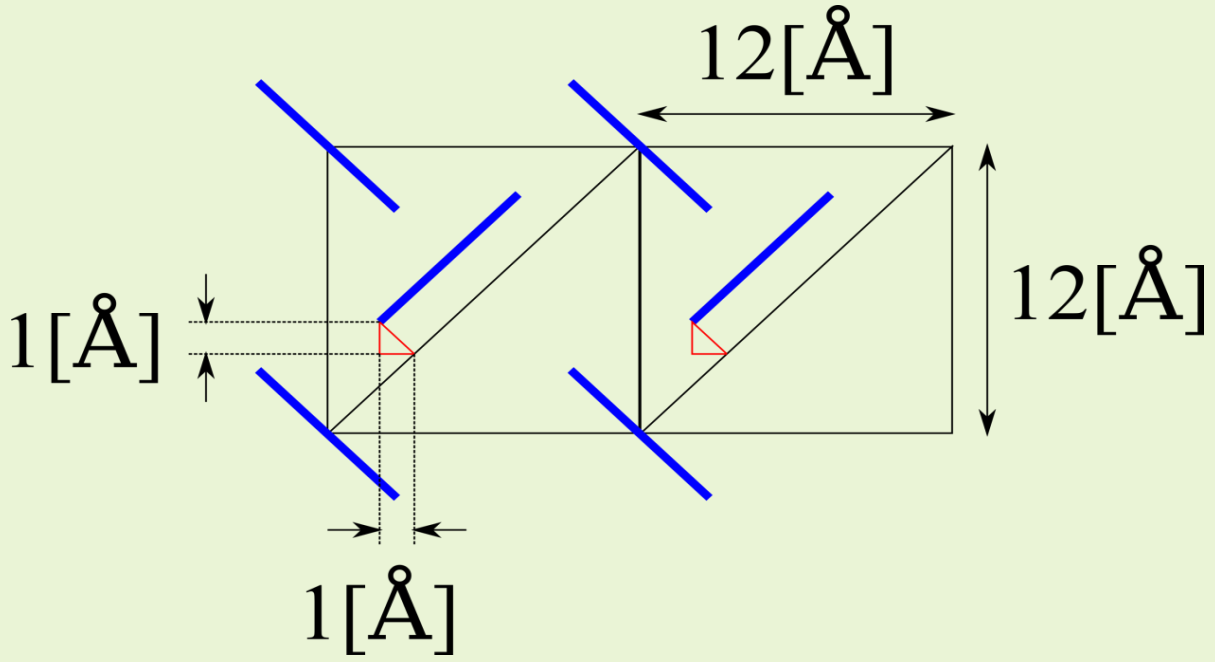


Au(111)面上にCoronene分子、Na原子を配置した図：
H原子で終端されたSi探針を使ってSTMシミュレーションを実行するとする



高さ一定モードでのSTMシミュレーション画像

Coronene分子の位置関係

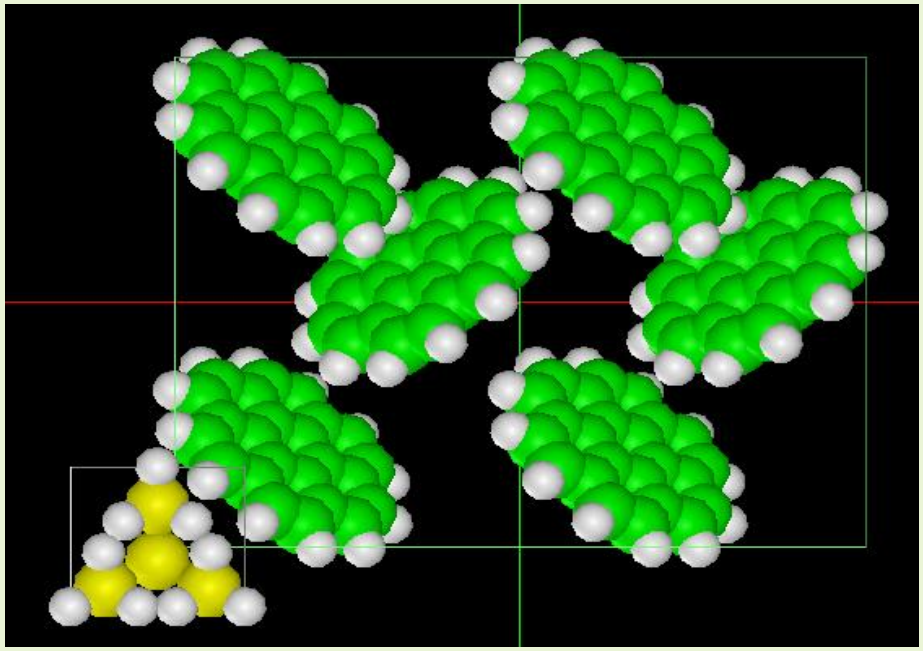


Coronene分子は、Au(111)面に対して40°傾いているとする。Coronene分子の下にアルカリ金属原子が配置されているとする。

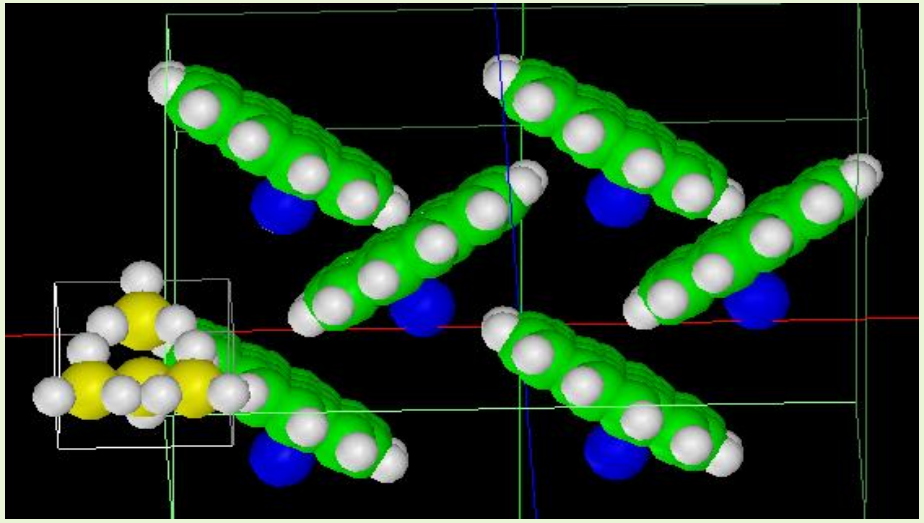
このような条件下でDFTBによりSTMシミュレーションを行う

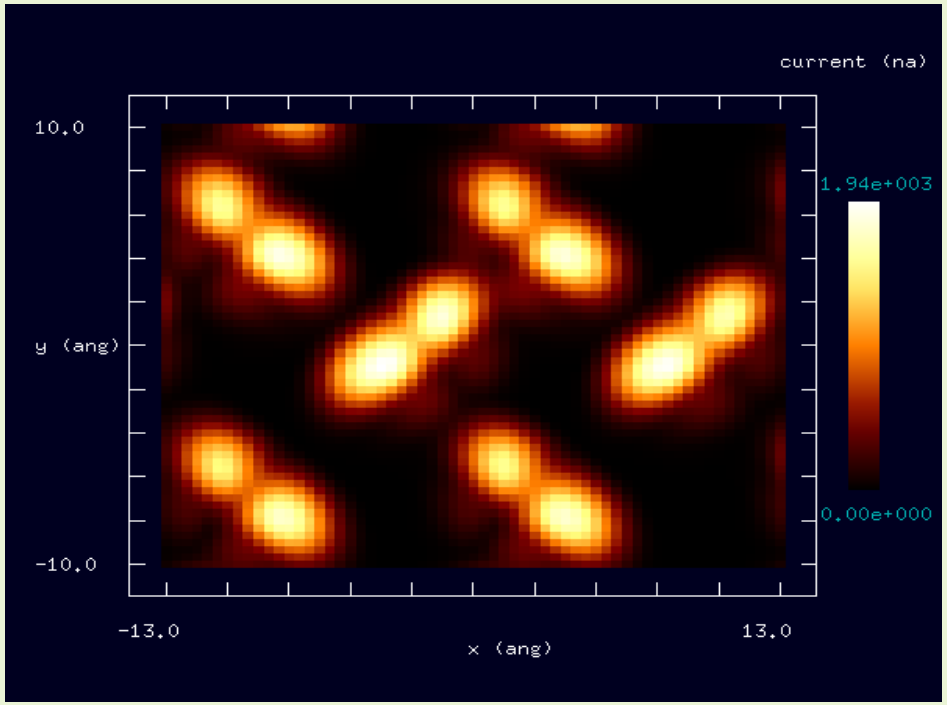
Coronene分子、Na原子を配置した図：
Au(111)面は考慮に入れずSTMシミュレーションを実行するとする。
H原子で終端されたSi探針を使用する。

真上から見た図

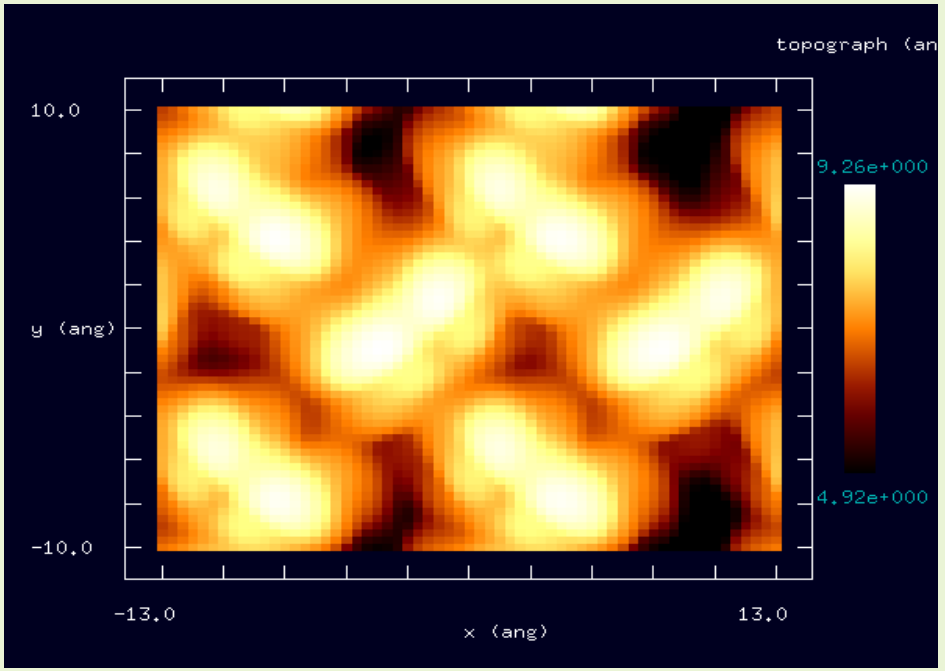


斜めから見た図
Coronene分子の下にNa原子が見えている





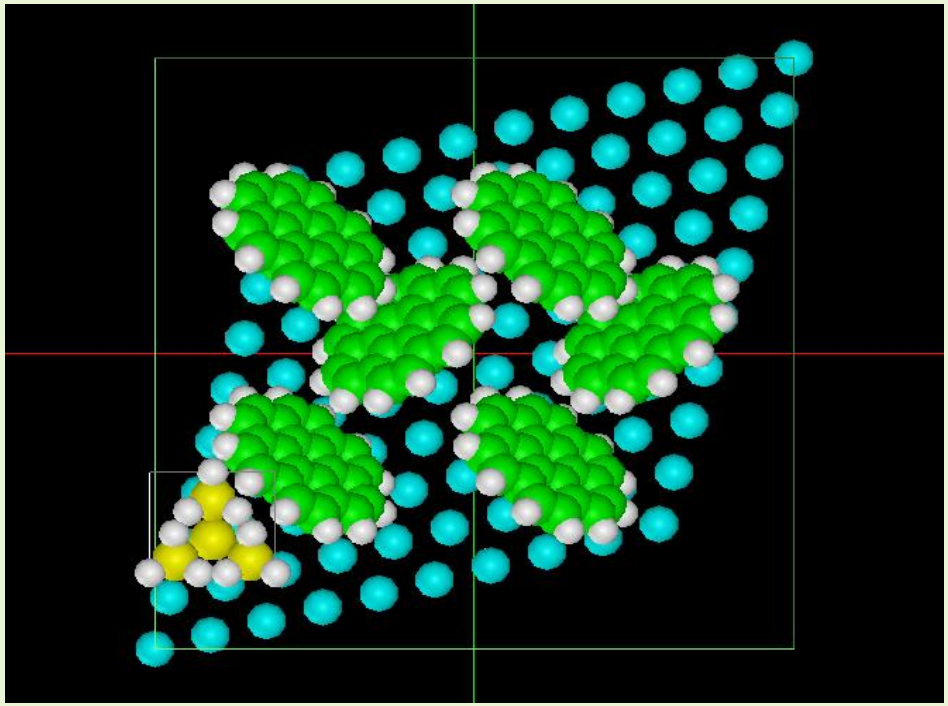
高さ一定モードでのSTMシミュレーション画像



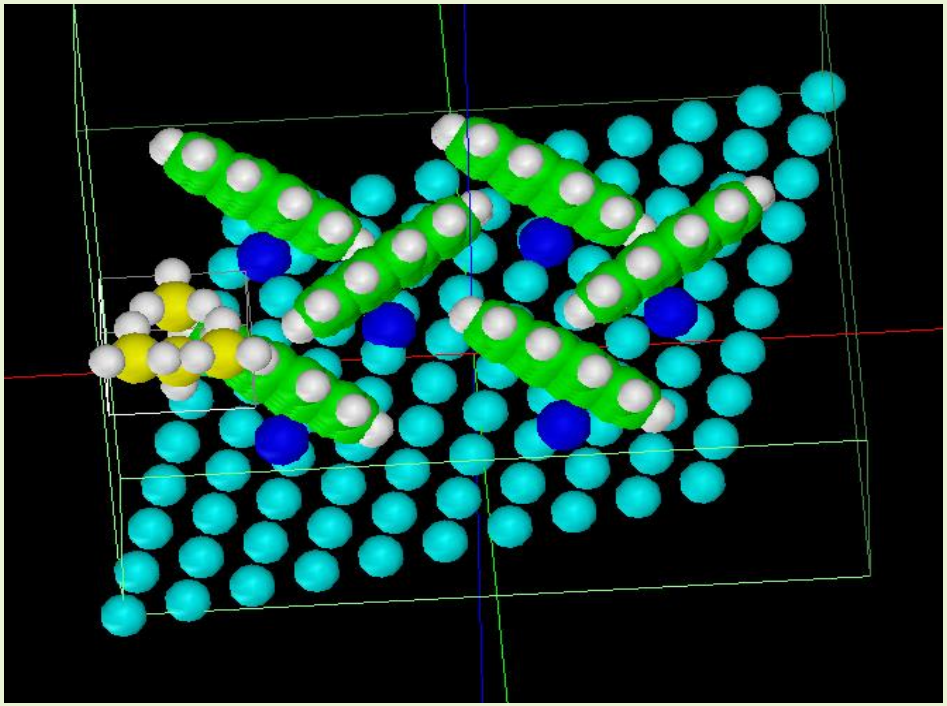
トンネル電流値一定モードでのSTMシミュレーション画像

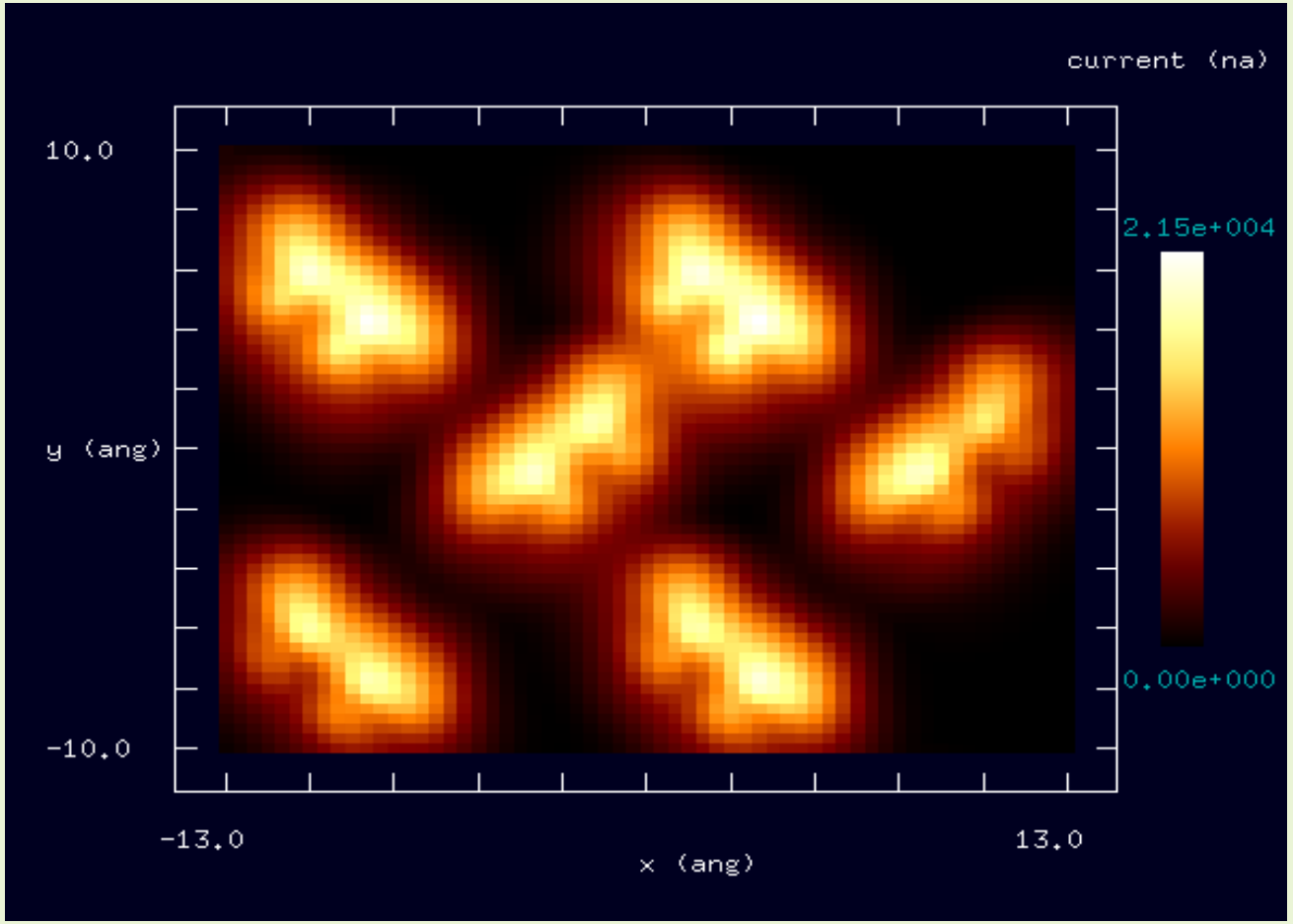
Au(111)面上にCoronene分子、Na原子を配置した図：
H原子で終端されたSi探針を使ってSTMシミュレーションを実行するとする

真上から見た図



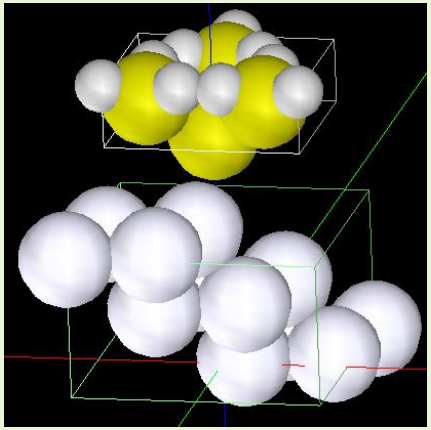
斜めから見た図
Coronene分子の下にNa原子が見えている



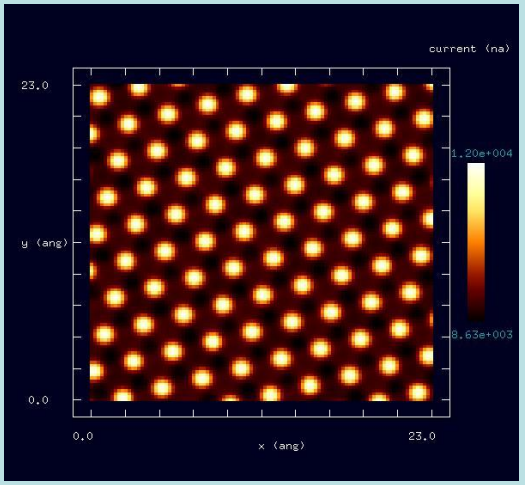


高さ一定モードでのSTMシミュレーション画像

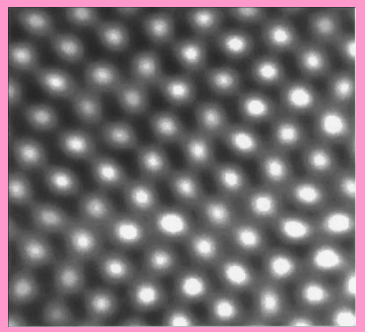
【DFTB】Pt(111)表面のconstant height STMシミュレーション



探針（Si_4H_9）と試料（Pt(111)）



シミュレーション結果
高さ一定モード
探針 - 試料間の距離 : 3.0[Å]
探針バイアス : 1.0[V]
範囲: 23.0[Å] ×23.0[Å]

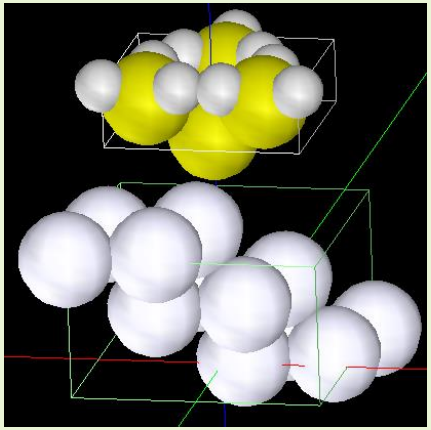


実験結果
constant current STM
電流値: 1.0[nA]
範囲: 23.0[Å] ×23.0[Å]
sample bias voltages within ±1 V

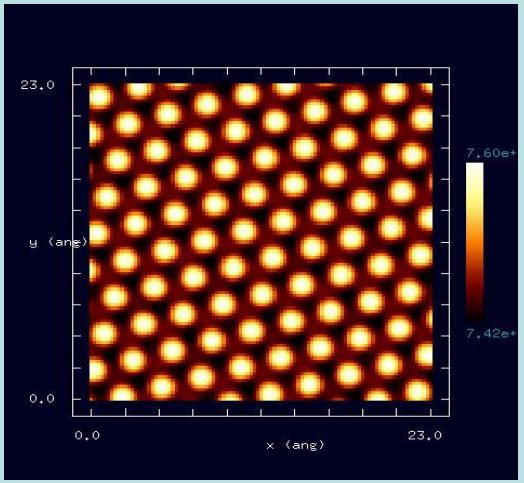
The structure and corrosion chemistry of bromine on Pt(111)
H. Xu, R. Yuro, I. Harrison
Surface Science 411 (1998) 303–315

実験結果と良く一致した

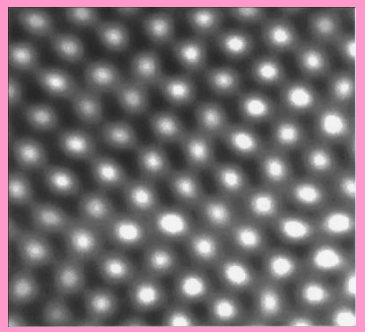
【DFTB】Pt(111)表面のconstant current STMシミュレーション



探針（Si_4H_9）と試料（Pt(111)）



シミュレーション結果
constant current モード
電流値: 10000[nA]
探針バイアス: 1.0[V]
範囲: 23.0[Å] ×23.0[Å]

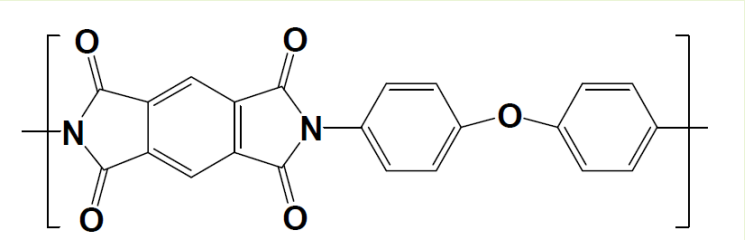


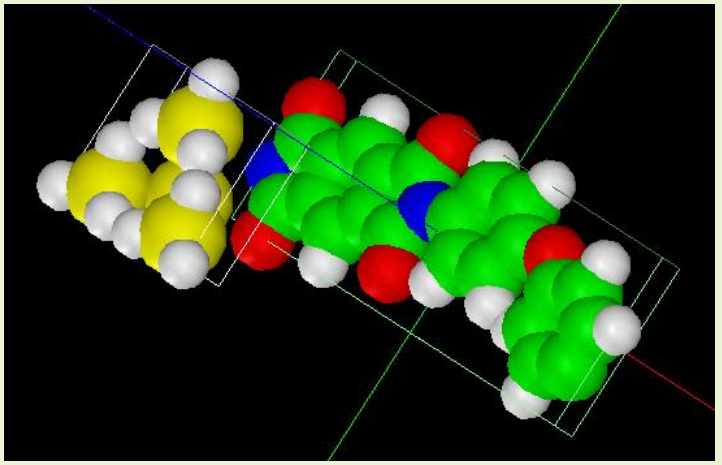
実験結果
constant current STM
電流値: 1.0[nA]
範囲: 23.0[Å] ×23.0[Å]
sample bias voltages within ±1 V

The structure and corrosion chemistry of bromine on Pt(111)
H. Xu, R. Yuro, I. Harrison
Surface Science 411 (1998) 303–315

実験結果と良く一致した

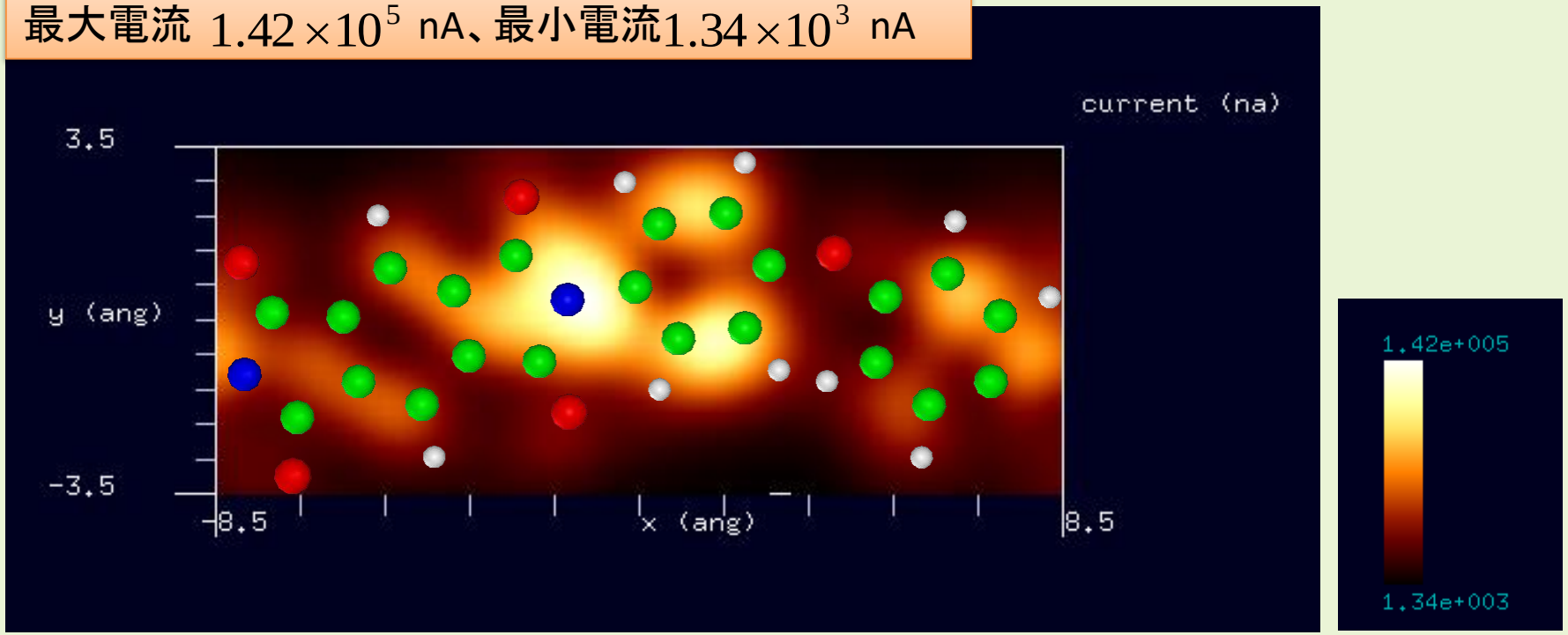
【DFTB】カプトン(Kapton)[ポリイミド(polyimide)の一種]



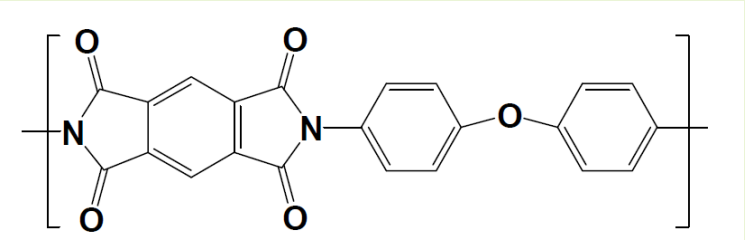


水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

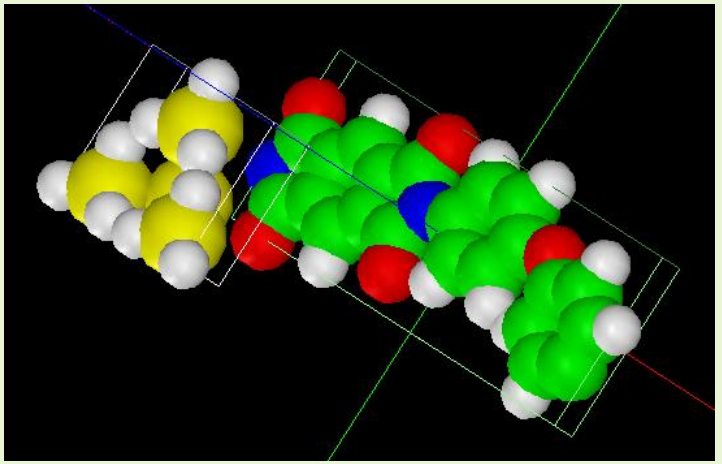
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離2.0 Å
最大電流 1.42×10^{5} nA、最小電流1.34×10^{3} nA



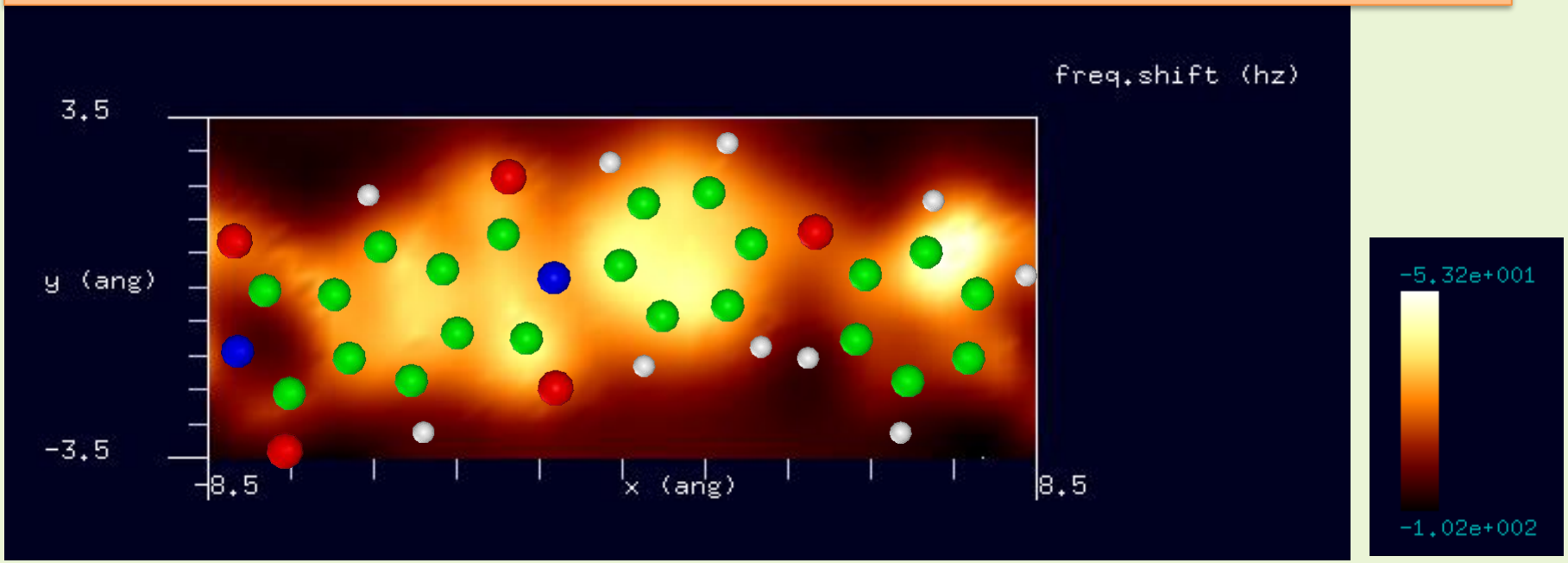
【DFTB】カプトン(Kapton)[ポリイミド(polyimide)の一種]



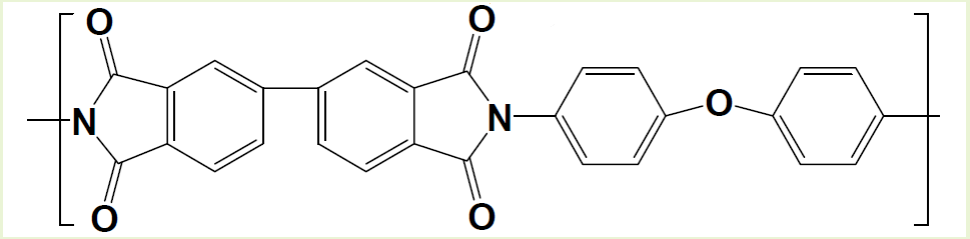
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

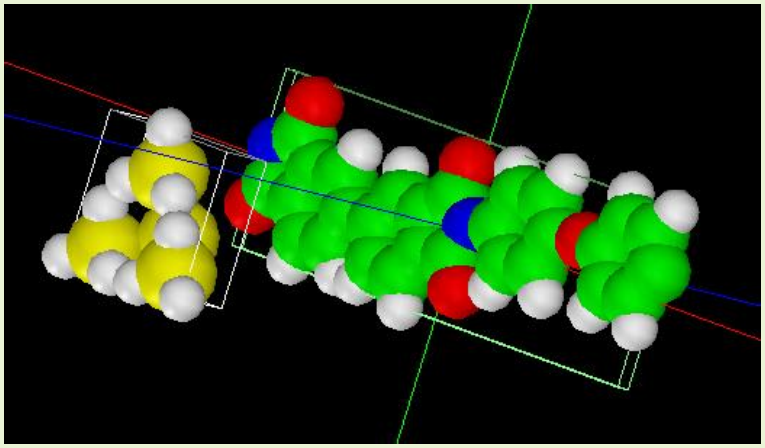


周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離6.0 Å
周波数のずれは -1.02×10^{2} Hzから-5.32×10^{1} Hz



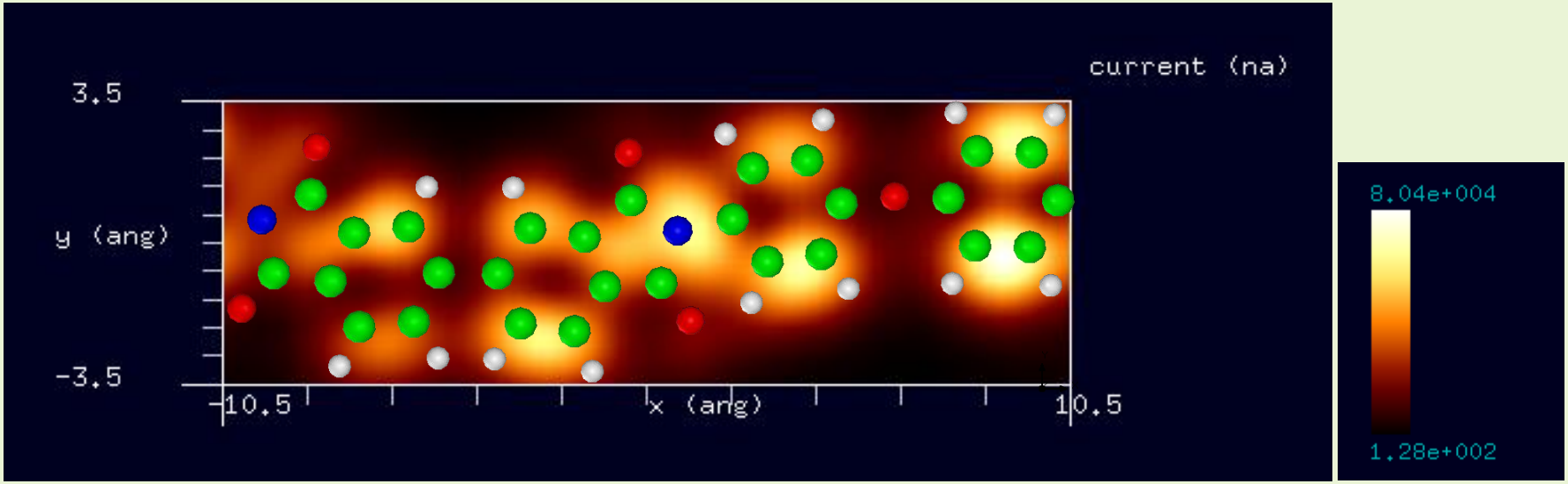
【DFTB】ユーピレックス-RN(Upilex-RN)[ポリイミド(polyimide)の一種]



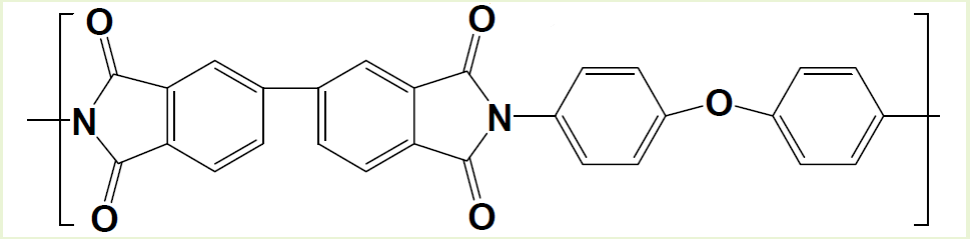


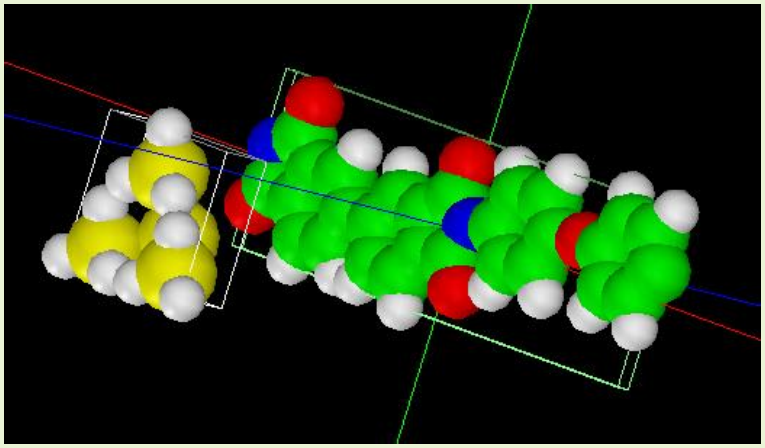
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離2.5 Å
最大電流 8.04×10^{4} nA、最小電流1.28×10^{2} nA



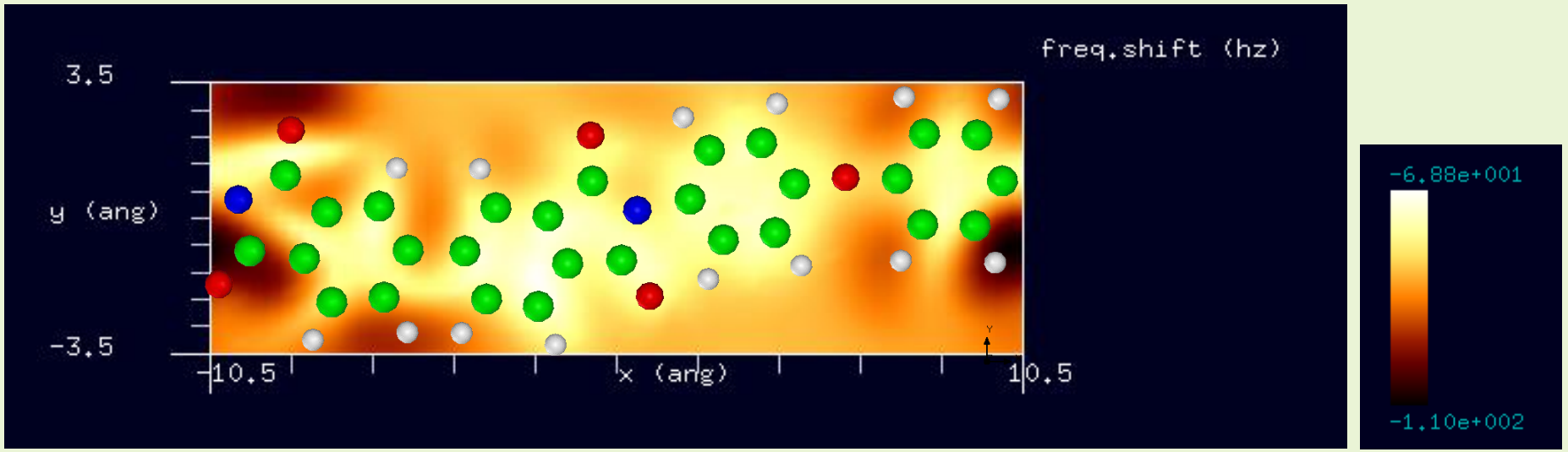
【DFTB】ユーピレックス-RN(Upilex-RN)[ポリイミド(polyimide)の一種]



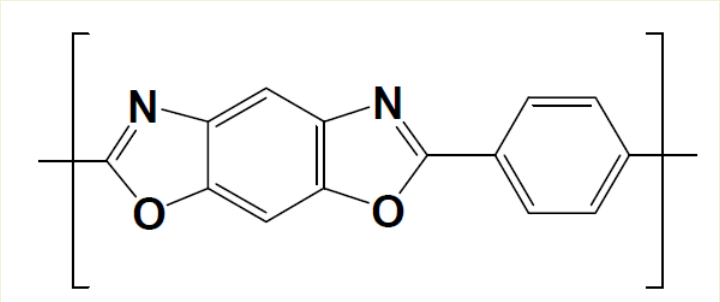


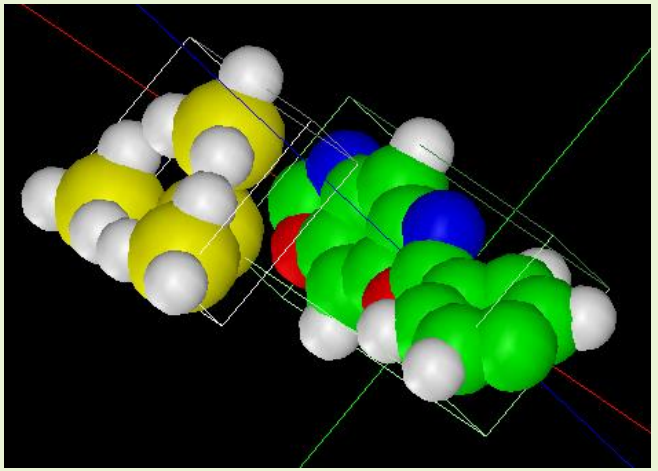
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離6.5 Å
周波数のずれは -1.10×10^{2} Hzから -6.88×10^{1} Hz



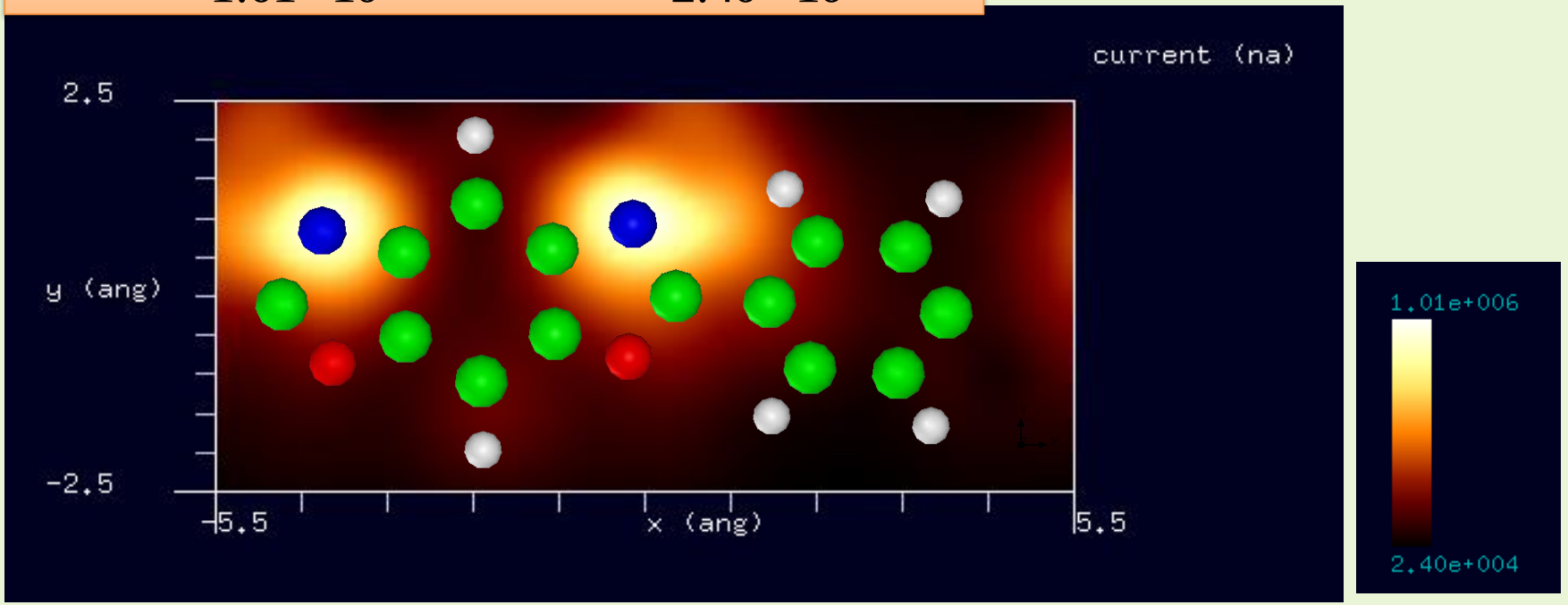
【DFTB】ザイロン(Zylon)[合成繊維の一種]



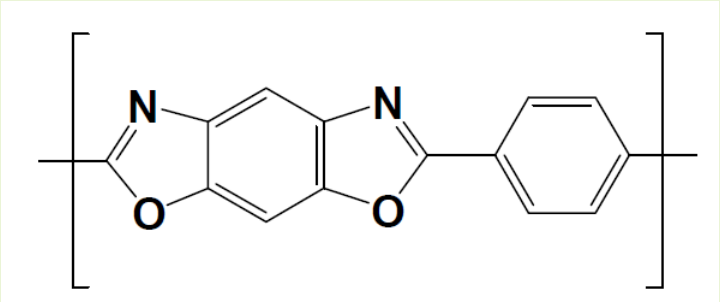


水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

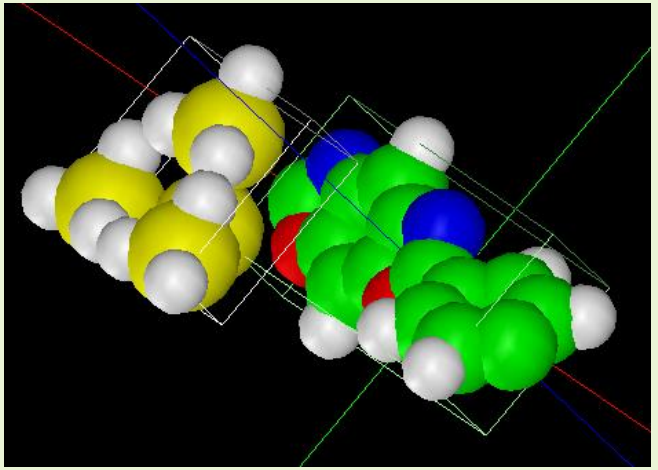
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.5 Å
最大電流 1.01×10^{6} nA、最小電流2.40×10^{4} nA



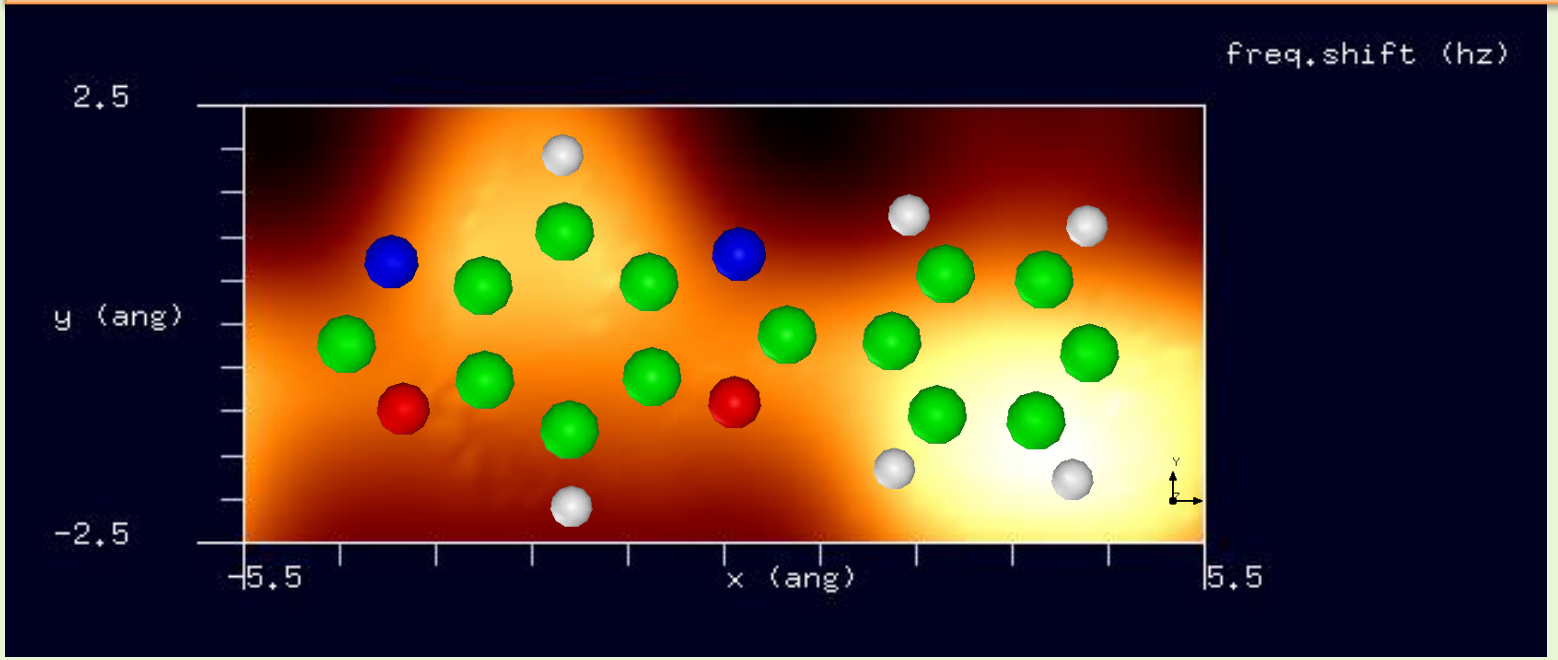
【DFTB】ザイロン(Zylon)[合成繊維の一種]



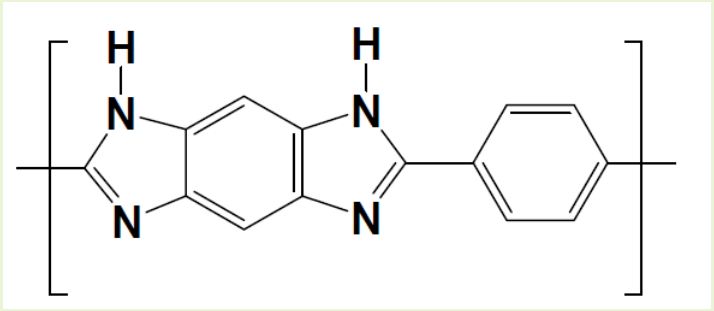
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

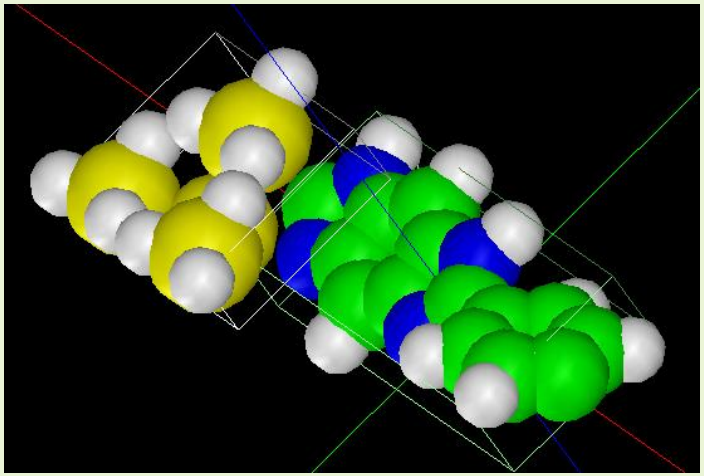


周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.5 Å
周波数のずれは -2.09×10^{2} Hzから 1.05×10^{2} Hz



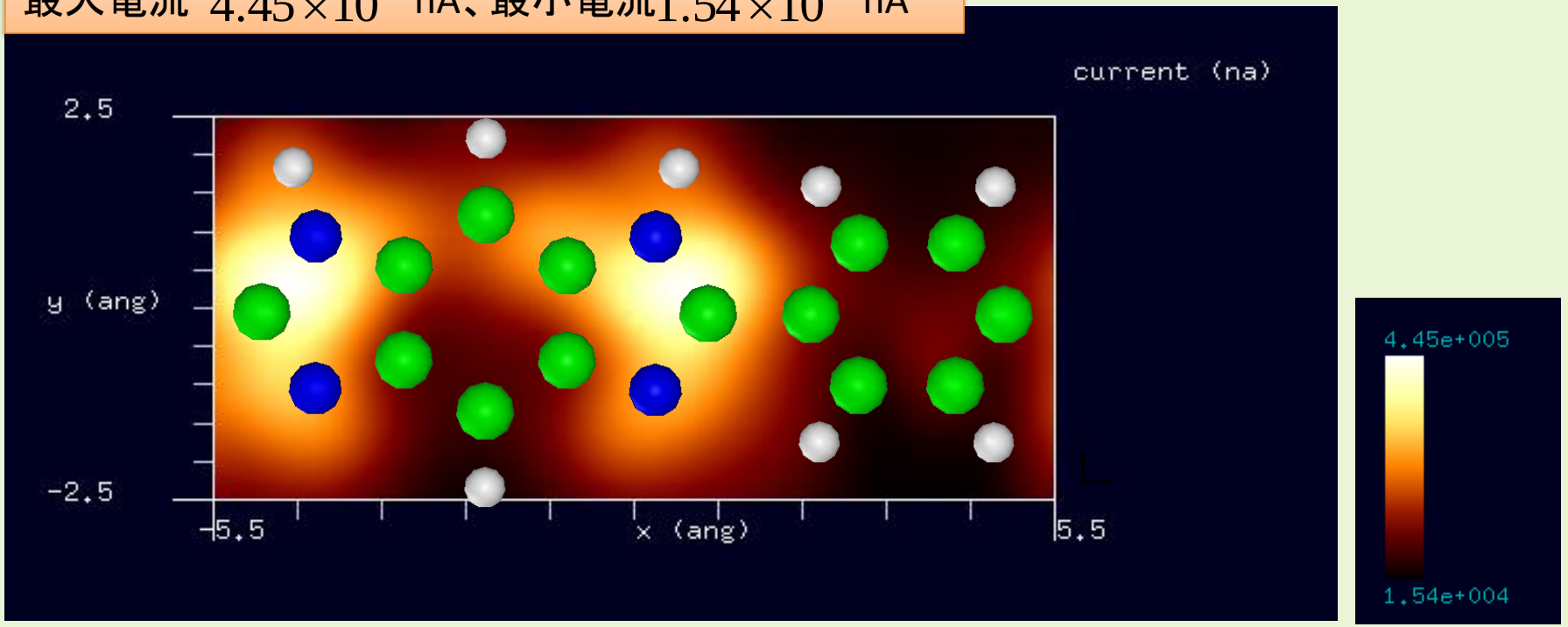
【DFTB】ポリベンゾイミダゾール(PBI)[合成繊維の一種]



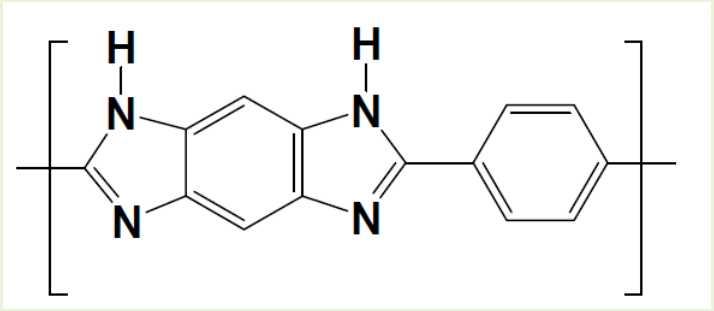


水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

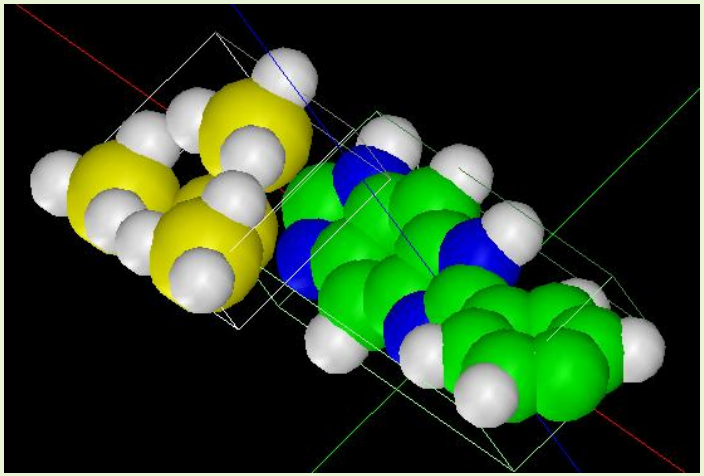
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.7 Å
最大電流 4.45×10^{5} nA、最小電流1.54×10^{4} nA



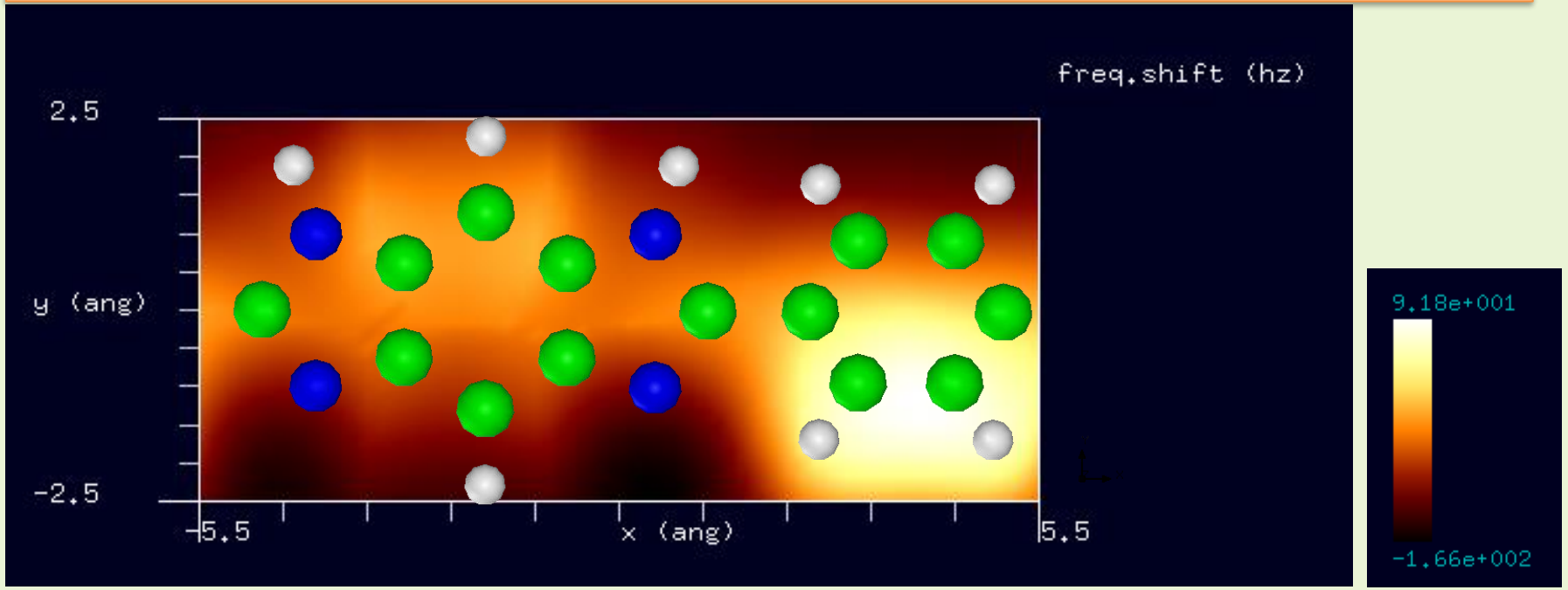
【DFTB】ポリベンゾイミダゾール(PBI)[合成繊維の一種]



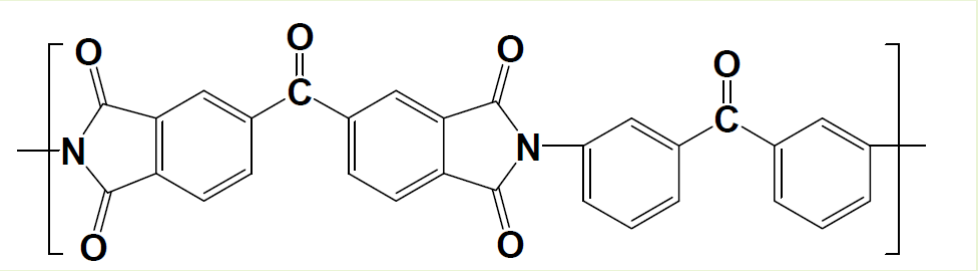
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

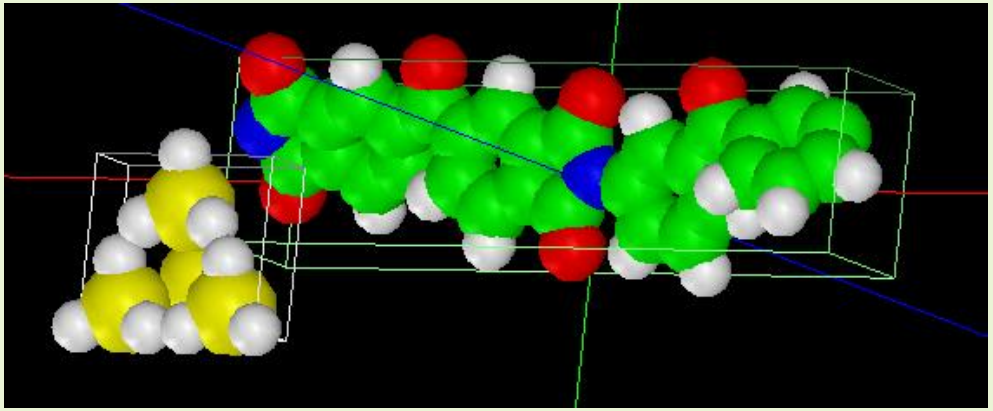


周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.7 Å
周波数のずれは -1.66×10^{2} Hzから 9.18×10^{1} Hz



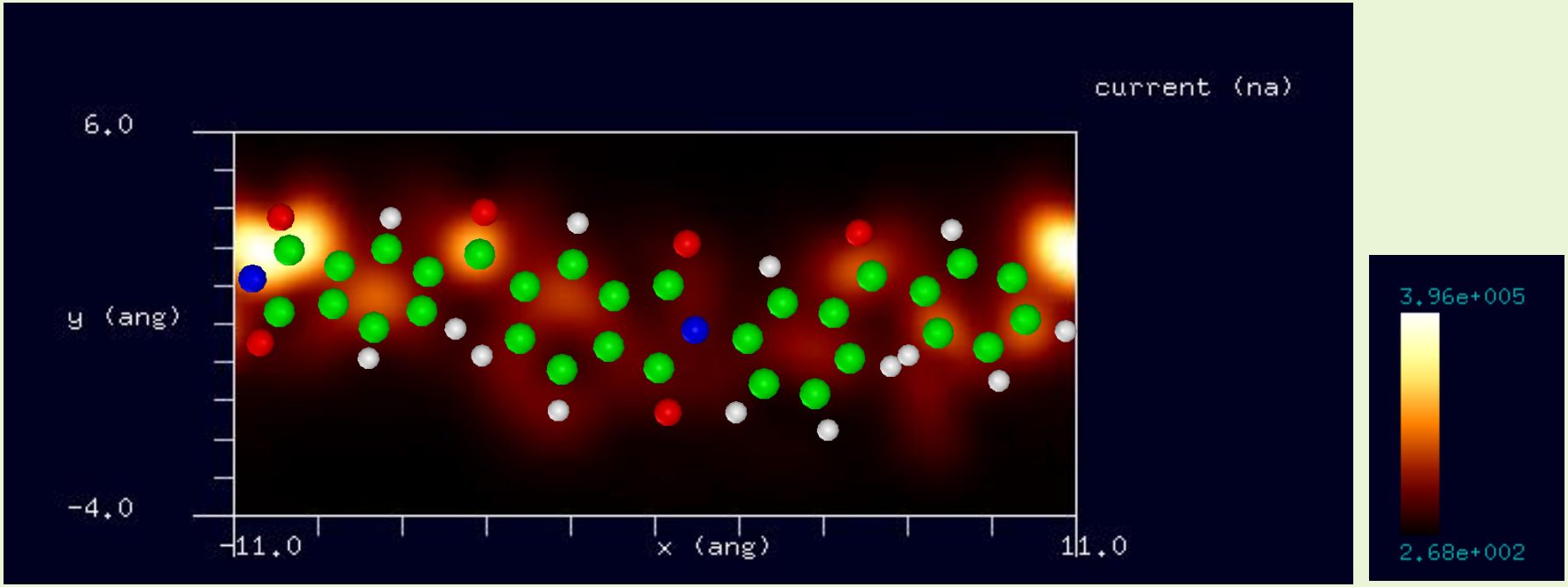
【DFTB】高耐熱性ポリイミド接着剤Larc-TPI



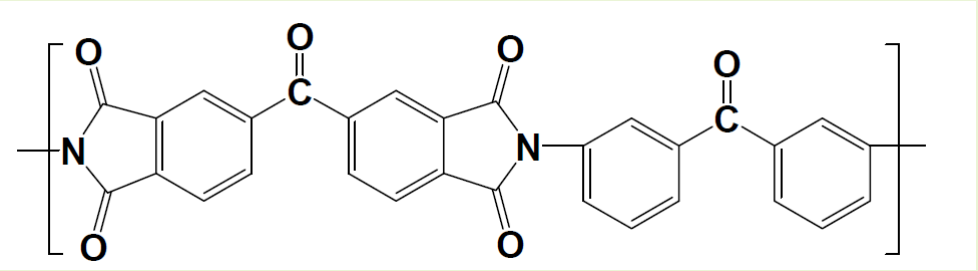


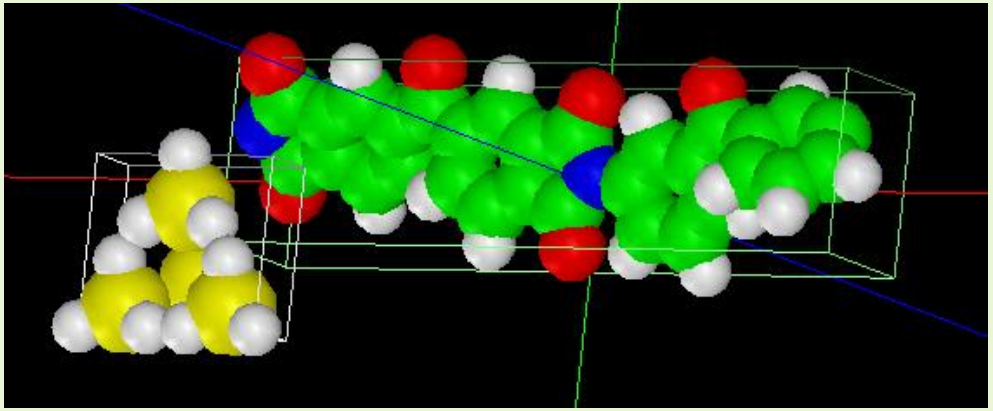
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.3 Å
最大電流 3.96×10^{5} nA、最小電流2.68×10^{2} nA



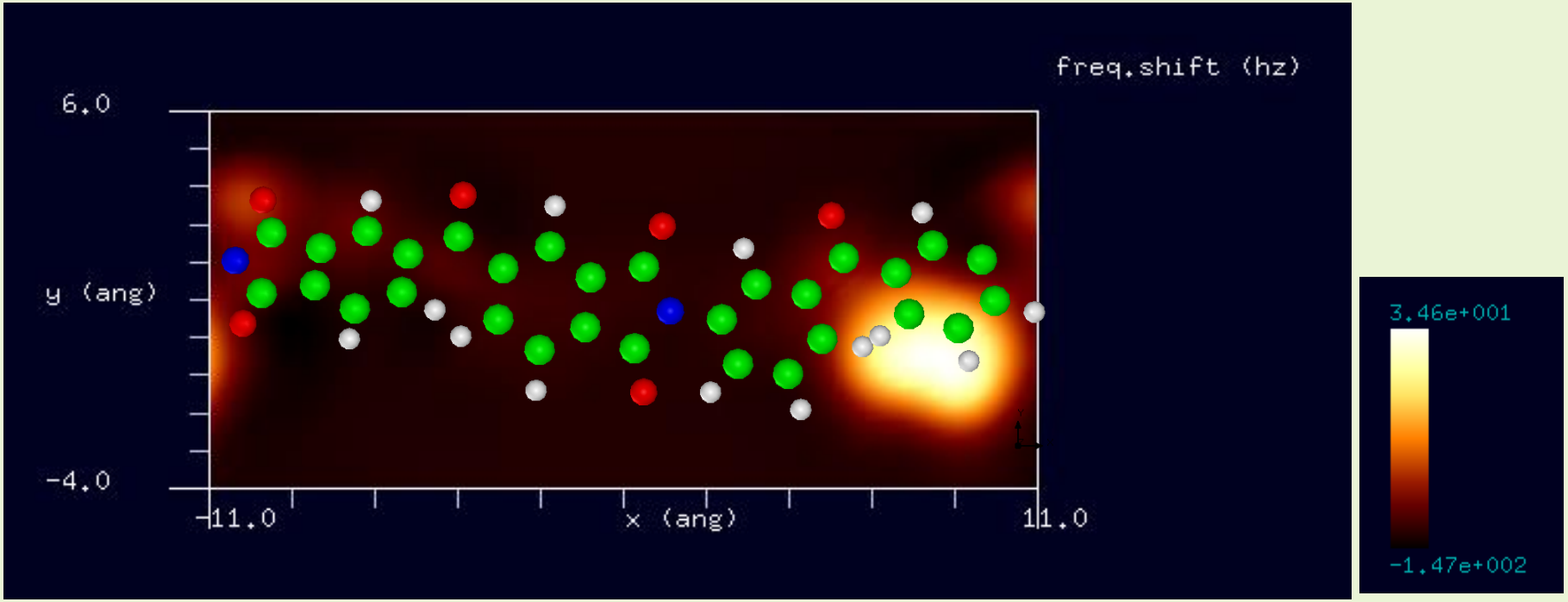
【DFTB】高耐熱性ポリイミド接着剤Larc-TPI



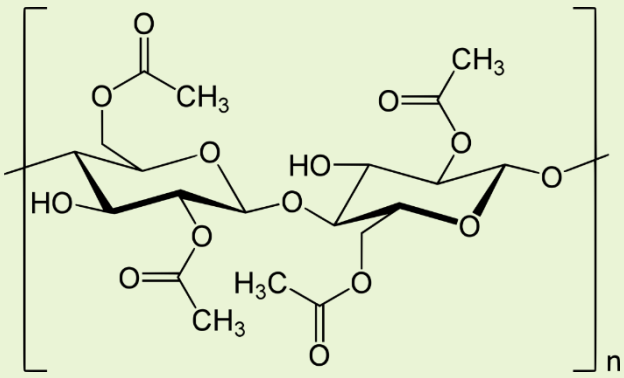


水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーに周期的境界条件を課して計算

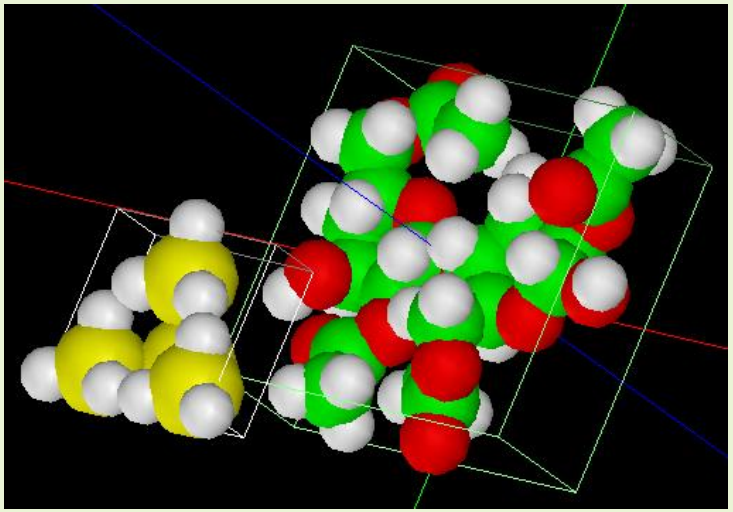
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.8 Å
周波数のずれは -1.47×10^{2} Hzから 3.46×10^{1} Hz



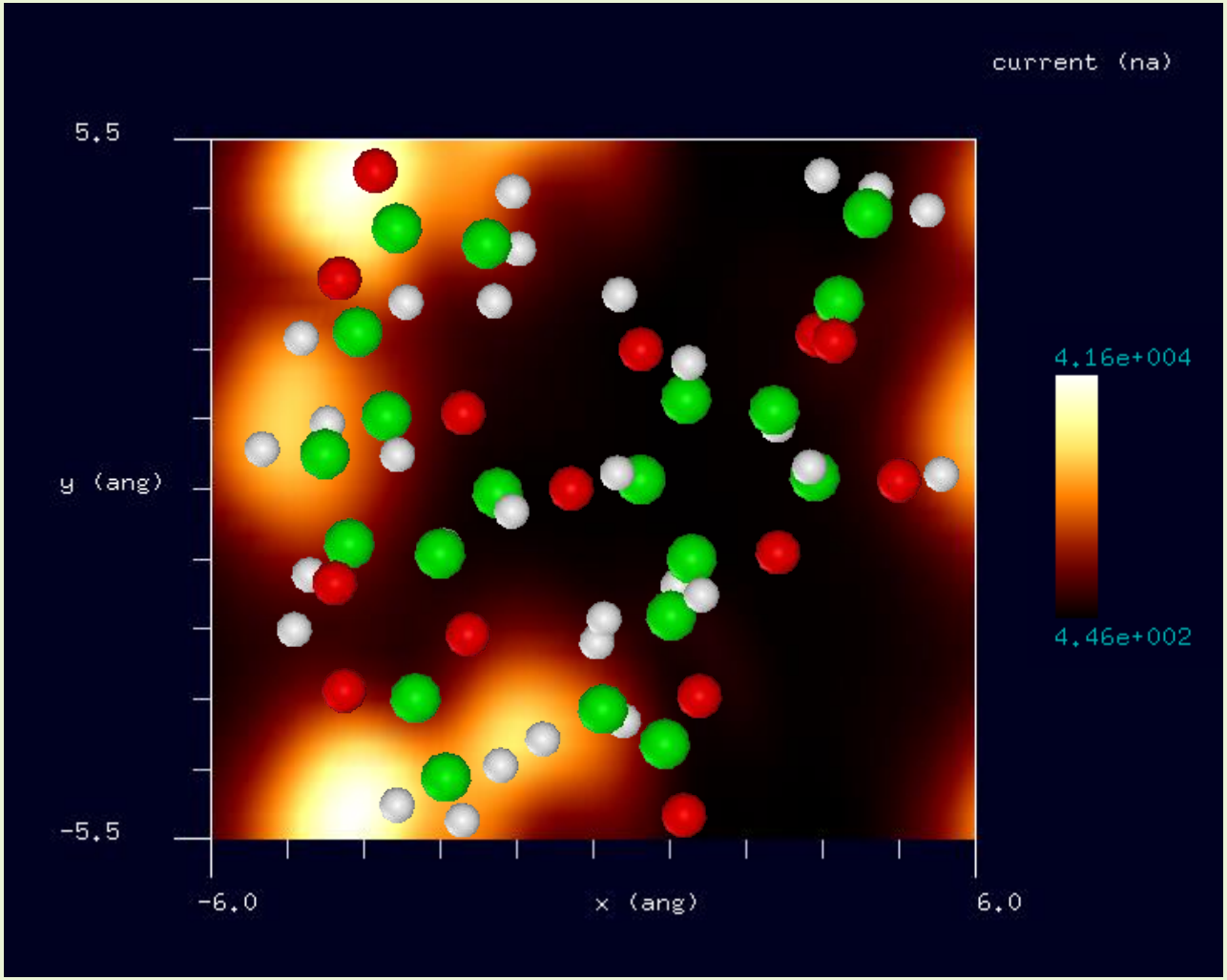
【DFTB】ジアセテート(diacetate)[アセテート繊維の一種]



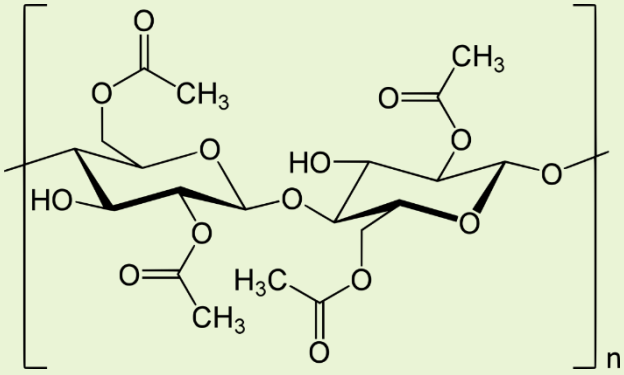
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算



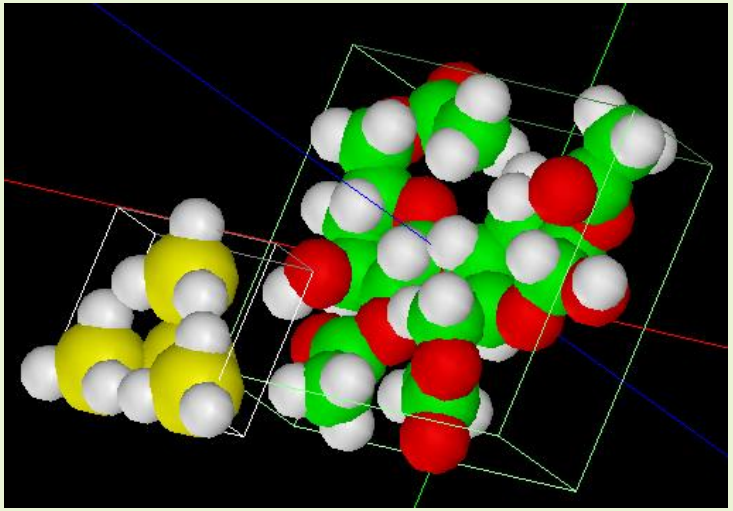
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.8 Å
最大電流 4.16×10^{4} nA、最小電流4.46×10^{2} nA



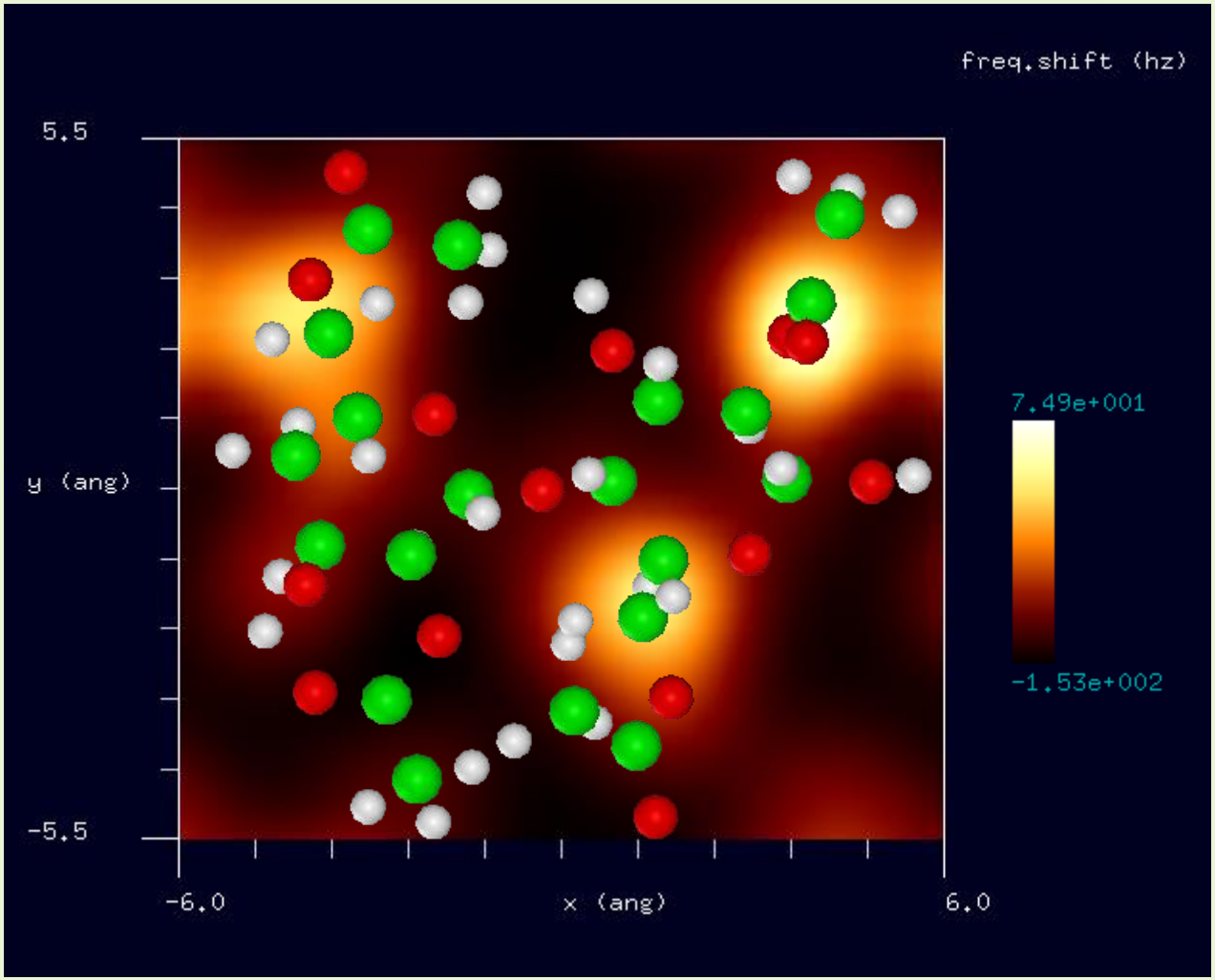
【DFTB】ジアセテート(diacetate)[アセテート繊維の一種]



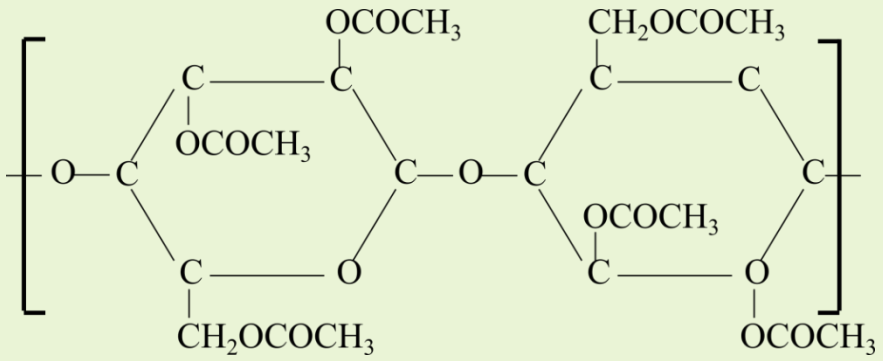
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算



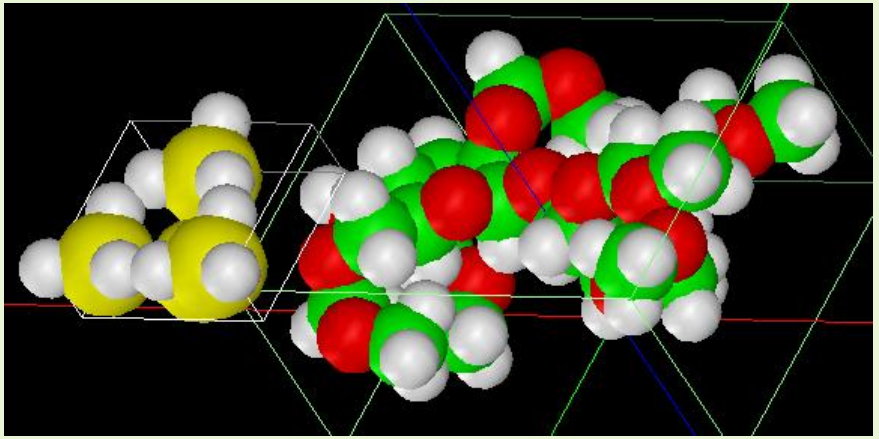
周波数シフトAFM画像:
探針振動の共鳴周波数170kHz,
探針と試料の最短距離4.8 Å
周波数のずれは -1.53×10^{2} Hzから 7.49×10^{1} Hz



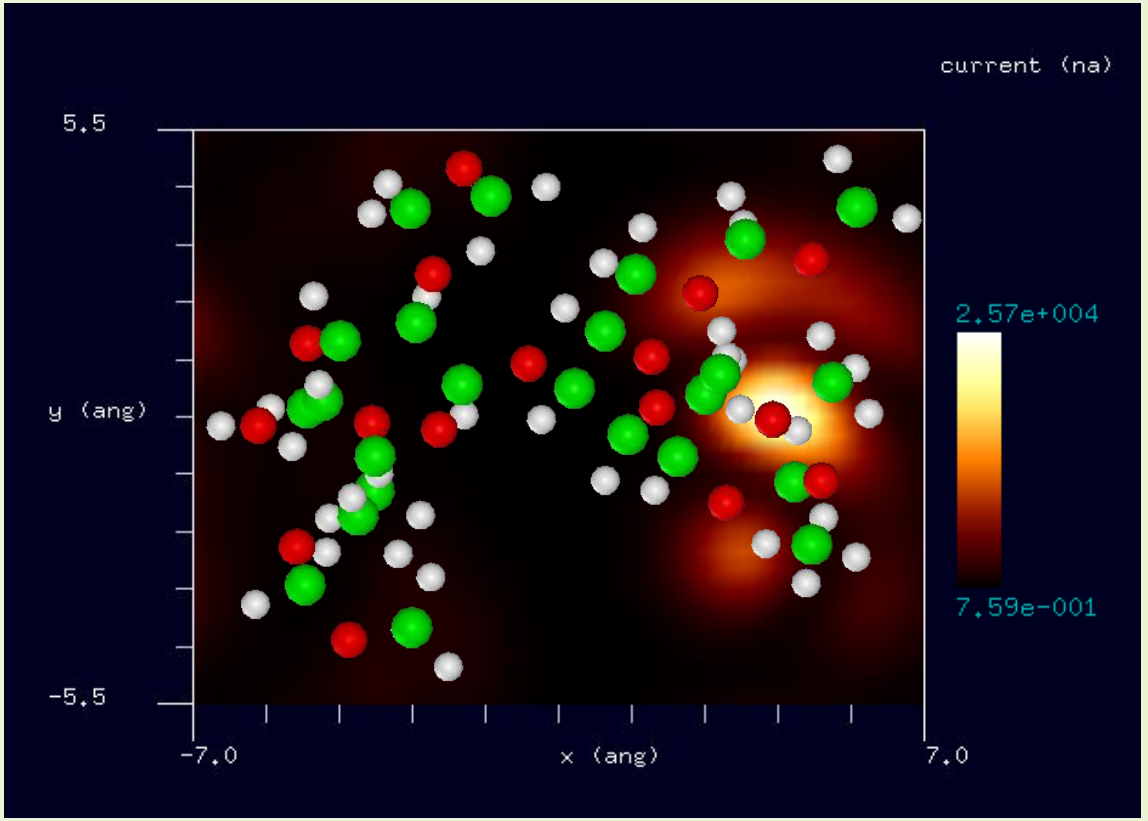
【DFTB】トリアセテート(triacetate)[アセテート繊維の一種]



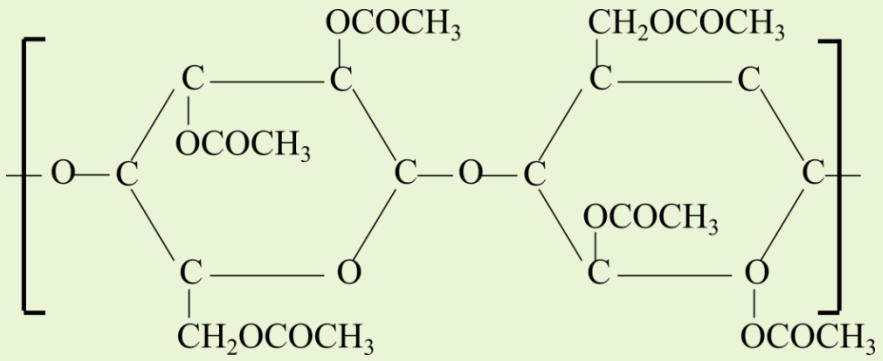
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算



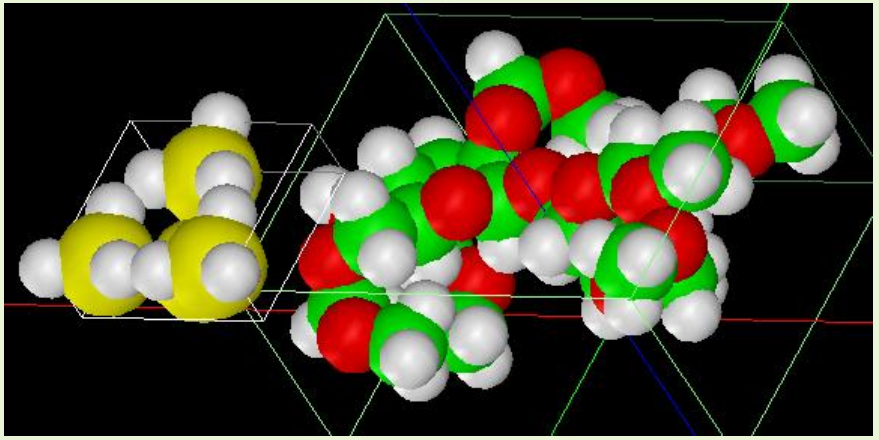
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.3 Å
最大電流 2.57×10^{4} nA、最小電流7.59×10^{-1} nA



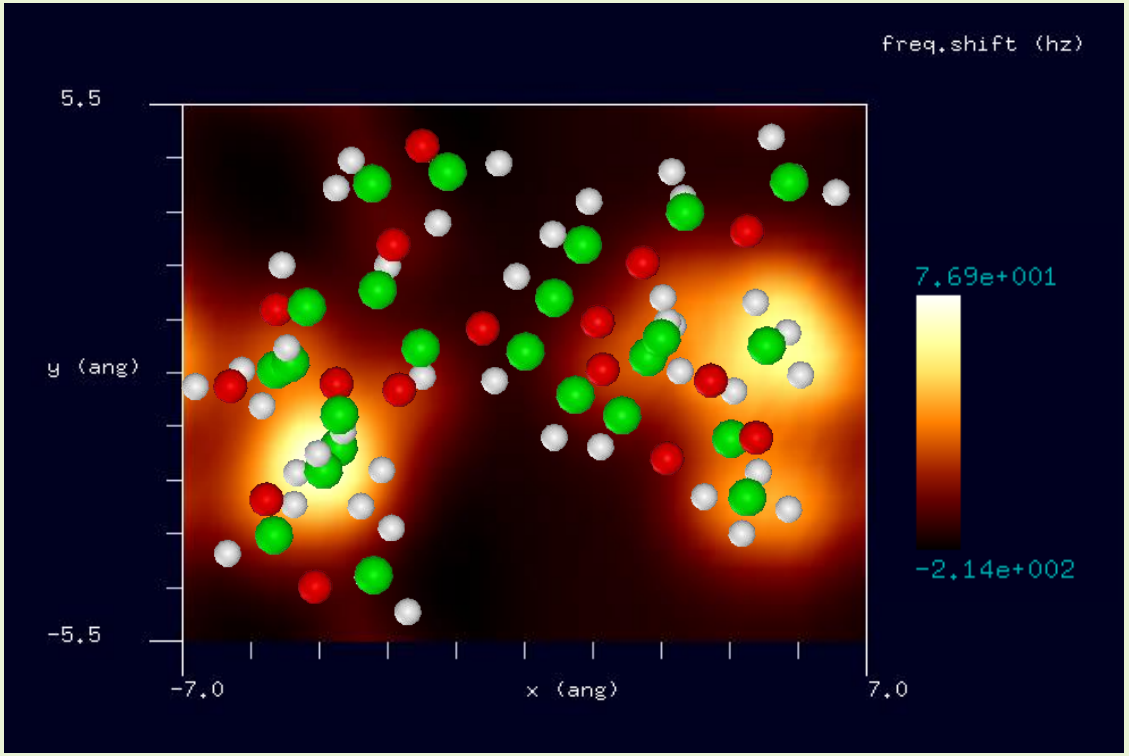
【DFTB】トリアセテート(triacetate)[アセテート繊維の一種]



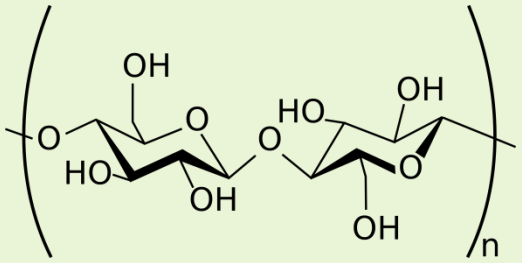
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算



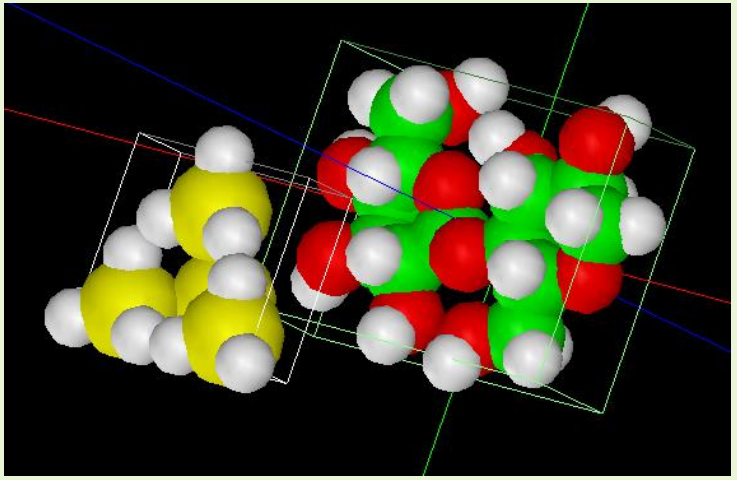
周波数シフトAFM画像:
探針振動の共鳴周波数170kHz,
探針と試料の最短距離4.3 Å
周波数のずれは -2.14×10^{2} Hzから 7.69×10^{1} Hz



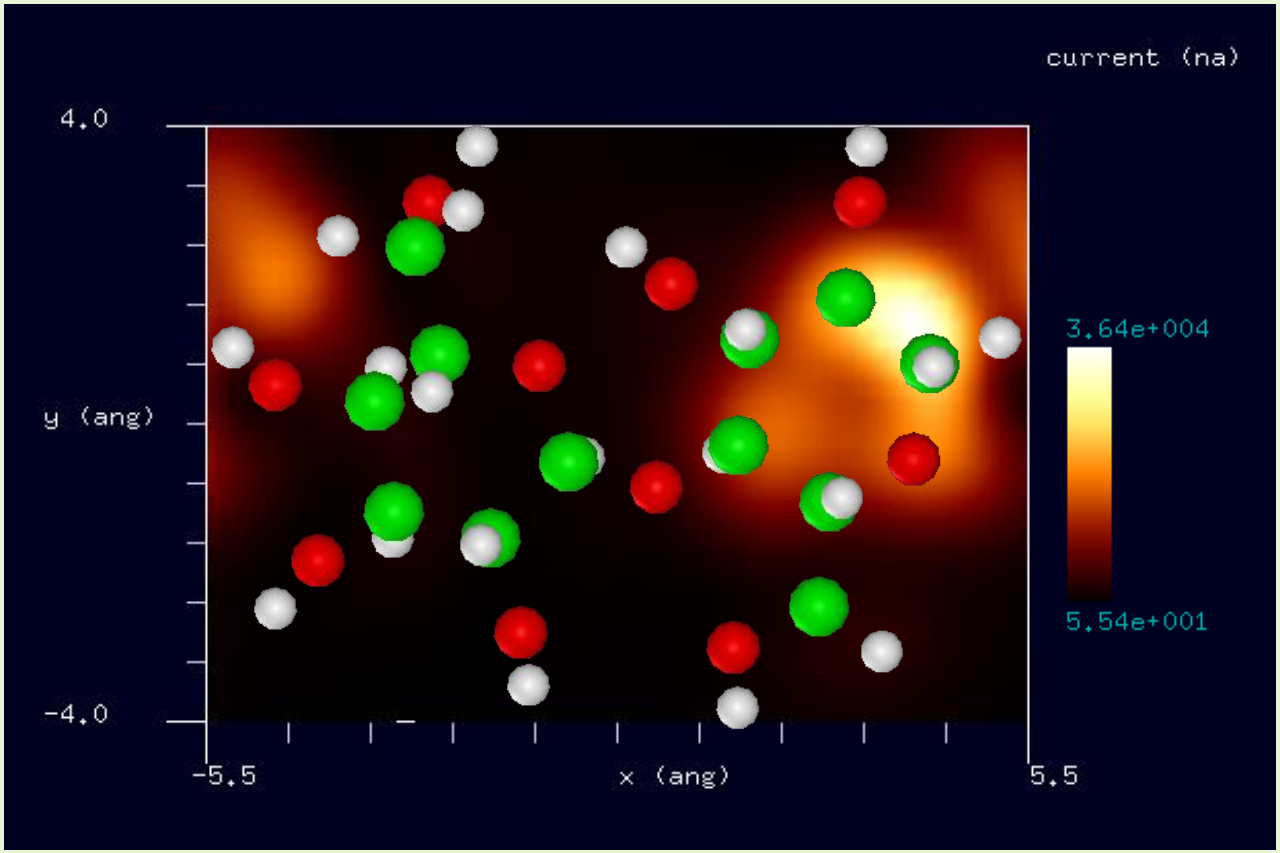
【DFTB】セルロース(cellulose)[アセテート繊維の一種]



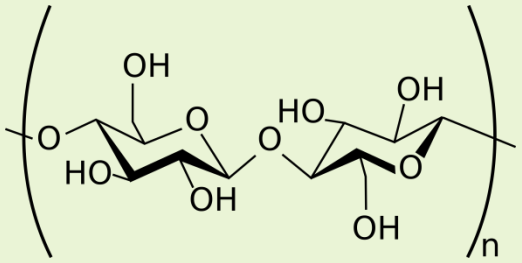
水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算



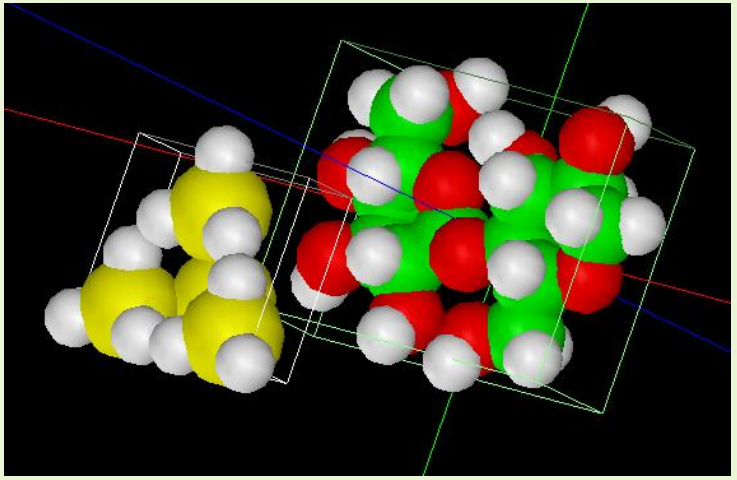
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.9 Å
最大電流 3.64×10^{4} nA、最小電流5.54×10^{1} nA



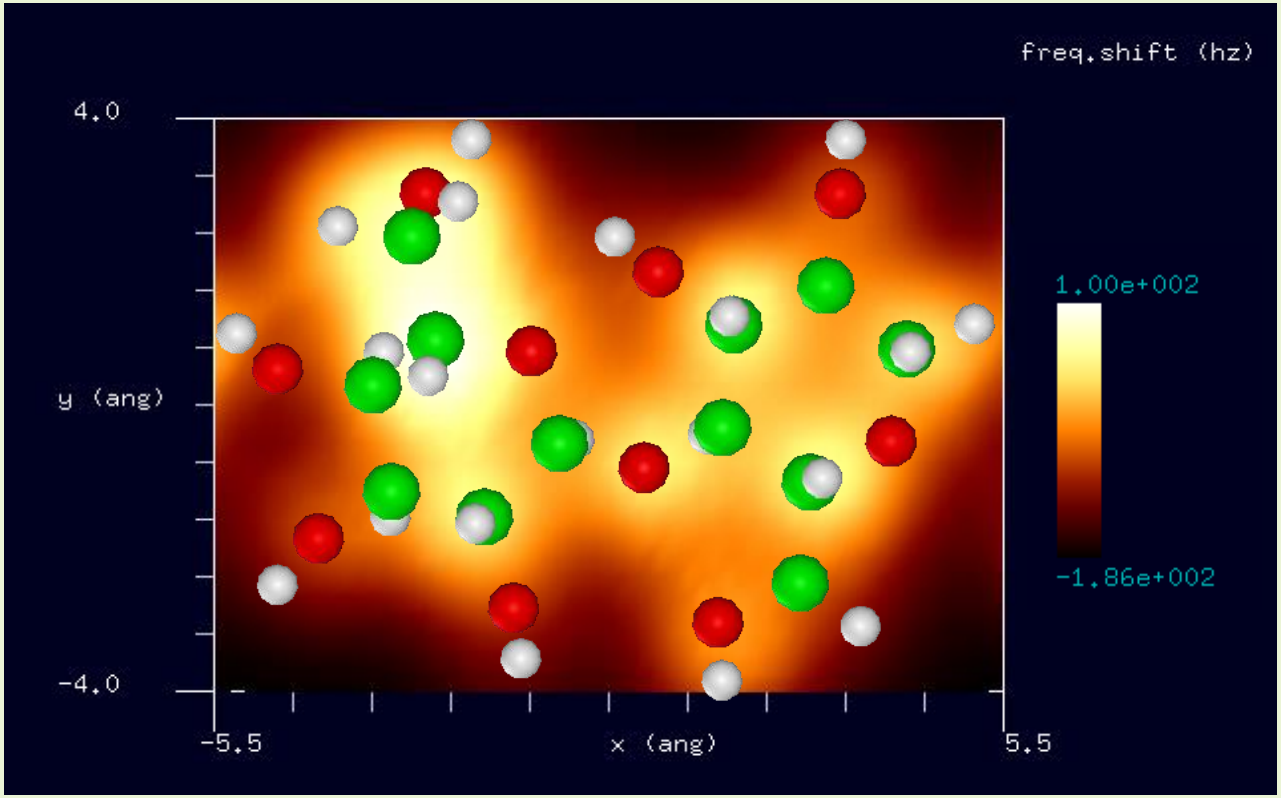
【DFTB】セルロース(cellulose)[アセテート繊維の一種]



水素終端されたシリコン探針を使用
モノマーで計算

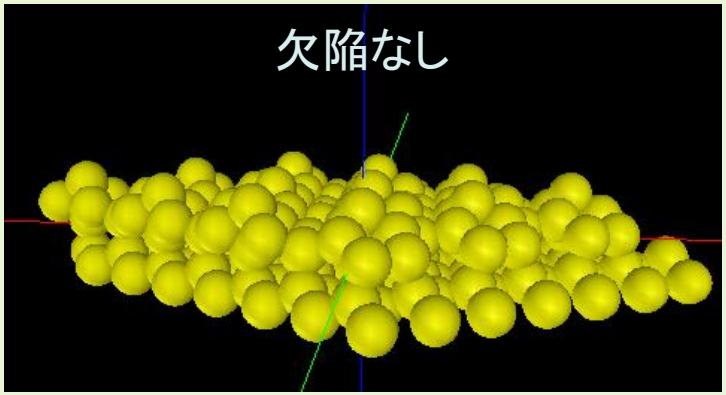


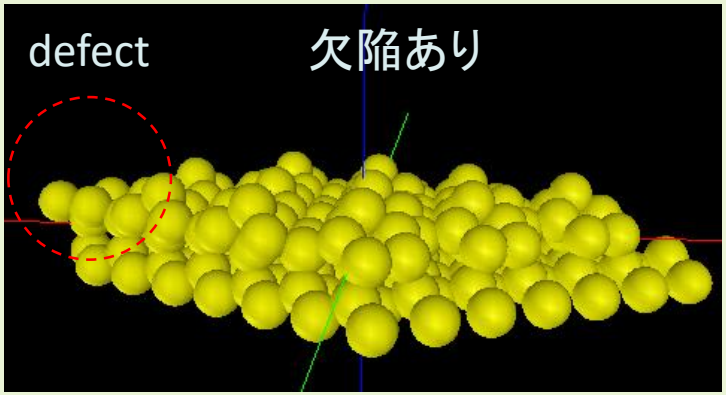
周波数シフトAFM画像:
探針振動の共鳴周波数170kHz,
探針と試料の最短距離4.4 Å
周波数のずれは -1.86×10^{2} Hzから 1.00×10^{2} Hz



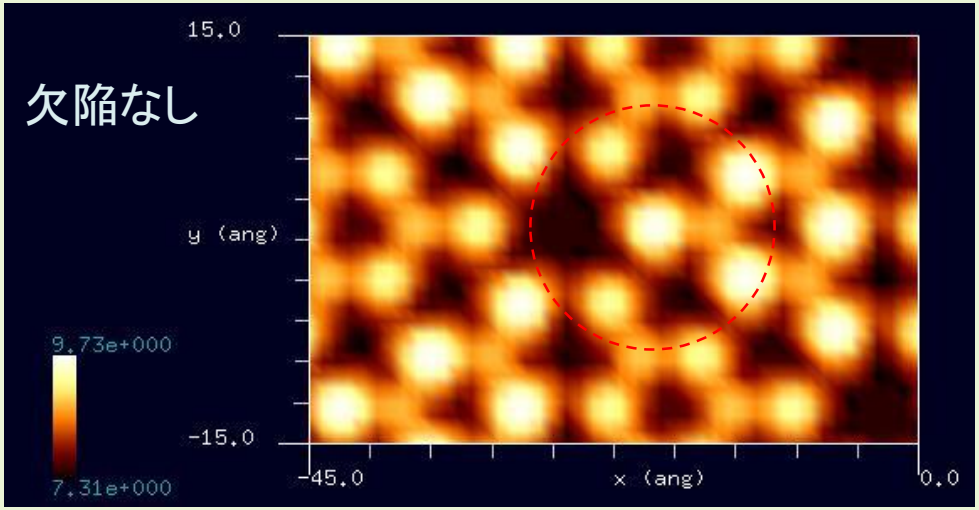
【DFTB】Si表面の欠陥のconstant current STMシミュレーション

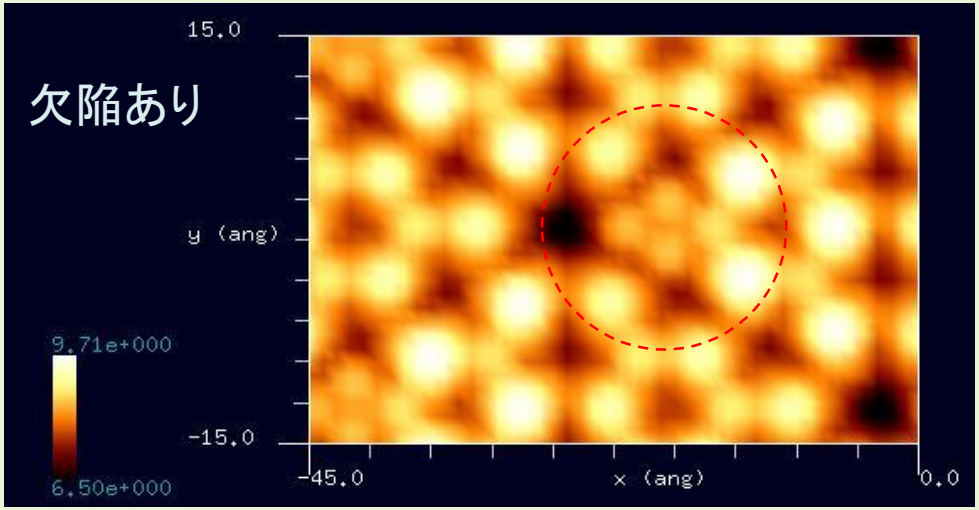
シミュレートモデル





探針：Si_4H_9探針
試料：Si(111)-DAS構造
スキャンエリア：
45 Å x 30 Å
スキャンモード：
constant current,
探針バイアス：-1.0 V
電流値：1000 nA

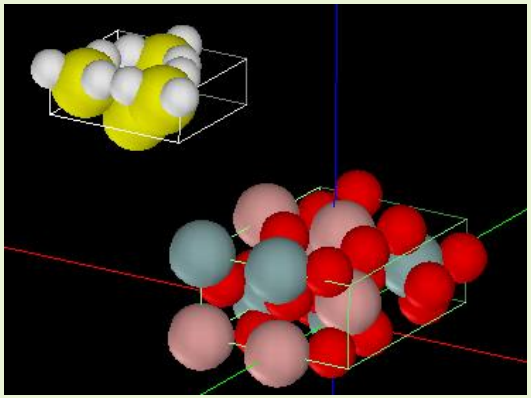


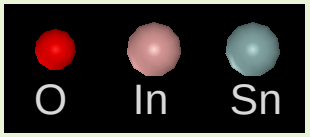


最表面のSi原子の抜けたところに、2層目のSi原子の構造が現れた。

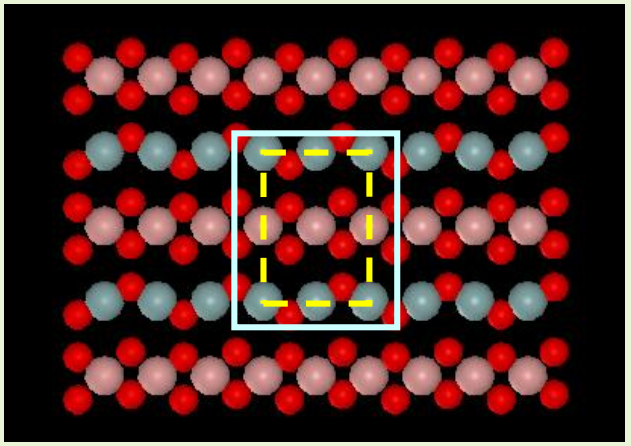
【DFTB】透明導電性フィルム(ITO)のconstant current STMシミュレーション

シミュレートモデル



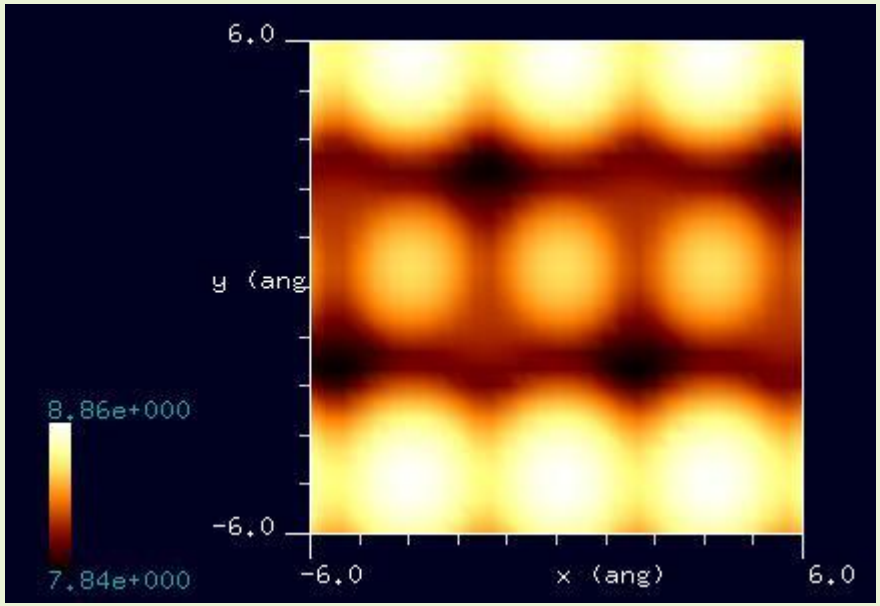


探針：Si_4H_9探針
試料：$In_2Sn_2O_7$ (110)表面
スキャンエリア：
12 Å x 12 Å
スキャンモード：
constant current,
探針バイアス：+1.0 V
電流値：10 nA



最表面の原子配置

黄色枠は単位格子。水色枠はスキャンエリア。



Sn原子の位置が最も高く、
In原子の位置はやや低く現れた。

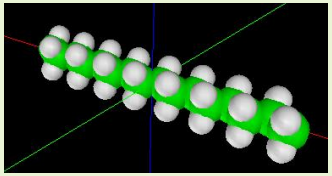
【DFTB】ポリエチレンの周波数シフトAFM像シミュレーション

シミュレートモデル

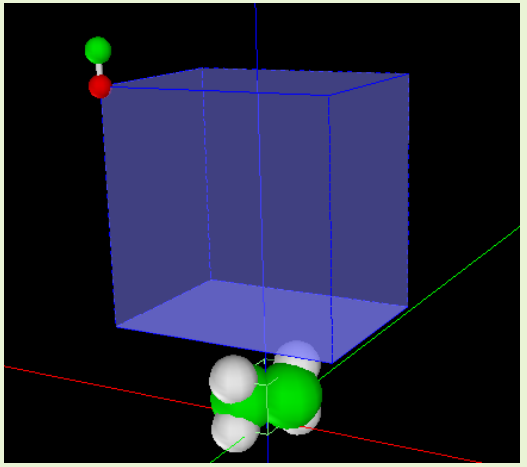
探針: CO探針
試料: ポリエチレン

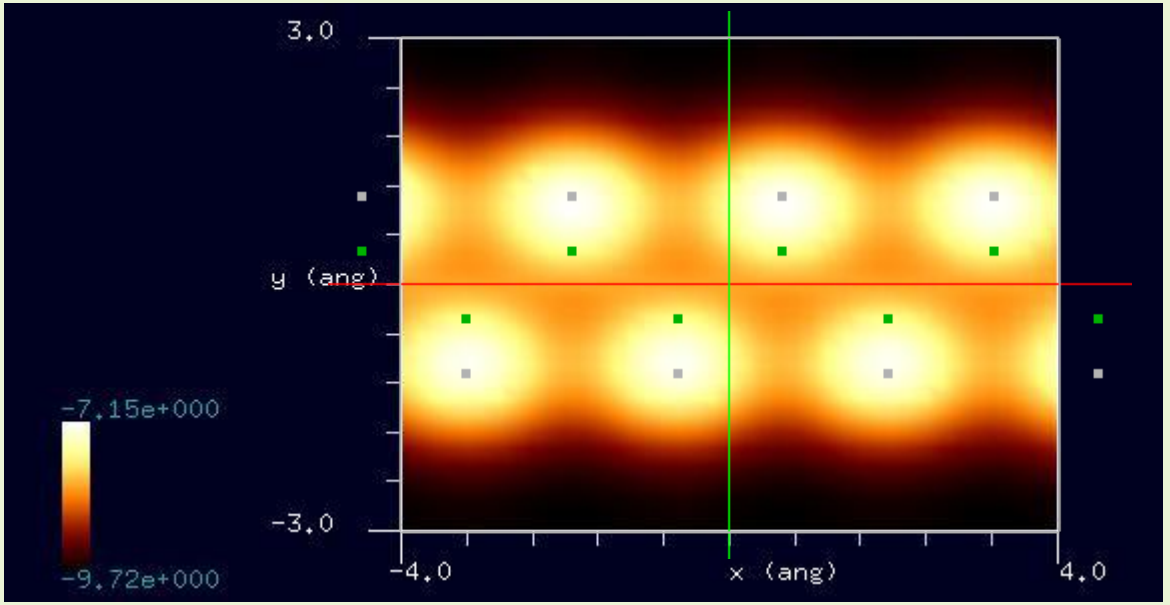


スキャンエリア: 8 Å x 6 Å
スキャンモード: 周波数シフトAFM
共振周波数: 172 kHz

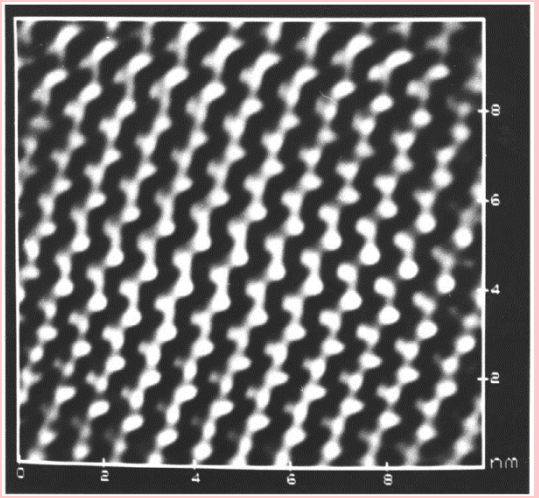


周期的境界条件を課した
ポリエチレンモデル





cf. Experiment



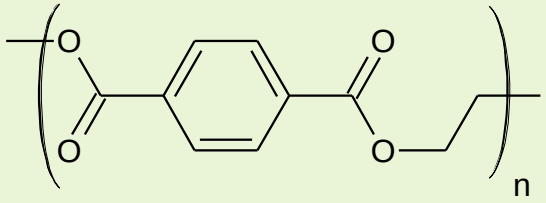
環状アルカン$C_{48}H_{96}$のAFM force像。コントラストは力の変化を相対スケールでカバーする。

環状$C_{48}H_{96}$はポリエチレンに対応するモデル化合物である。周期的な明るいスポットは-(CH_2)-(CH_2)- 基と帰属できる。

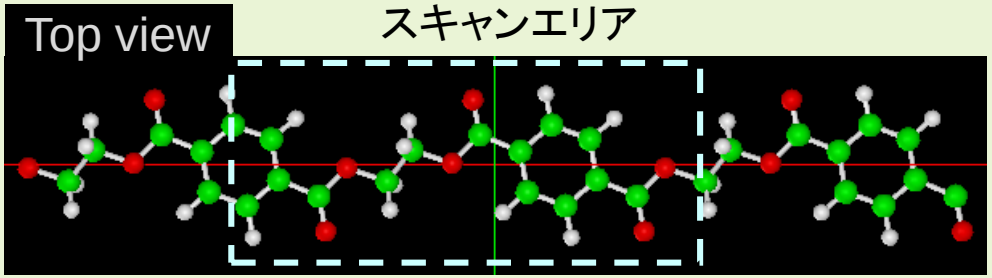
Sergei N. Magonov and Darrell H. Reneker, Annu. Rev. Mater. Sci. 27, 175-222 (1997). Characterization of polymer surfaces with atomic force microscopy.

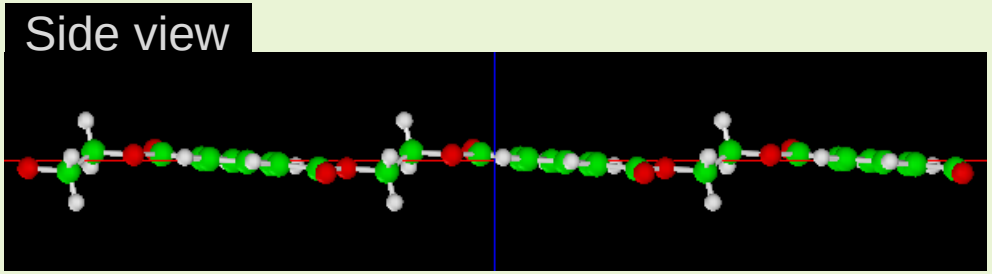
【DFTB】ポリエチレンテレフタレート(PET)のconstant current STMシミュレーション

シミュレートモデル

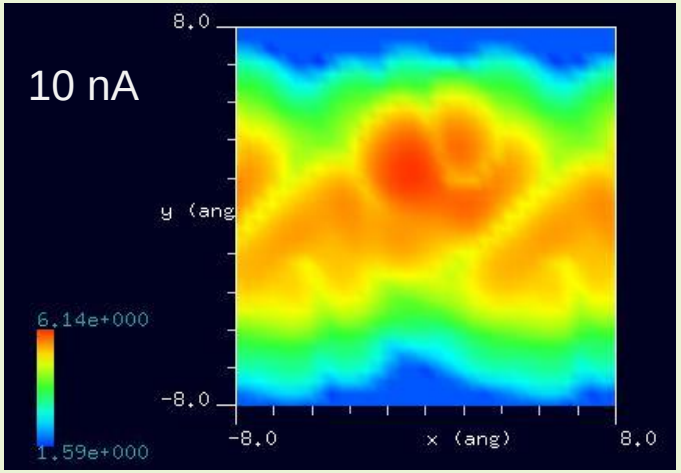


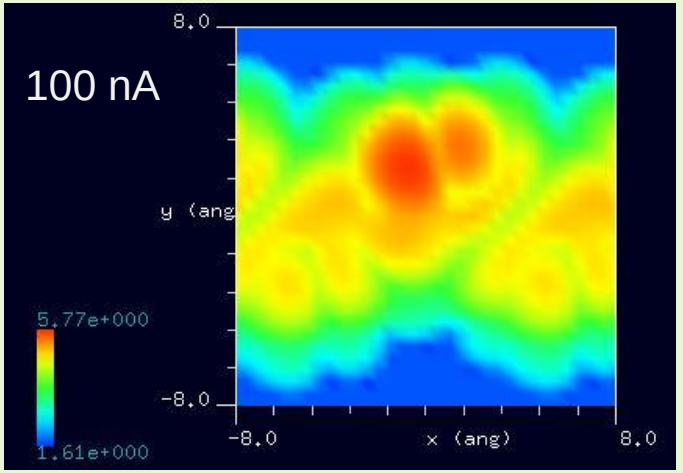
探針：Si_4H_9探針
試料：ポリエチレンテレフタレート(PET)
スキャンエリア：16 Å x 16 Å
スキャンモード：constant current STM
探針バイアス：+2.0 V, -2.0 V
電流値：10, 100, 1000 nA

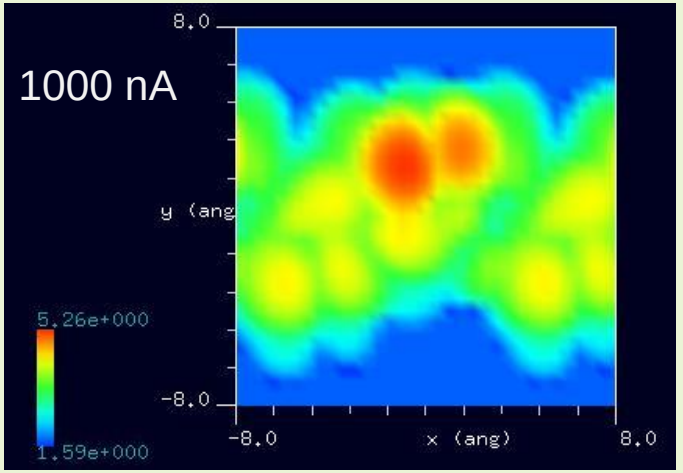




探針バイアス：+2.0 V

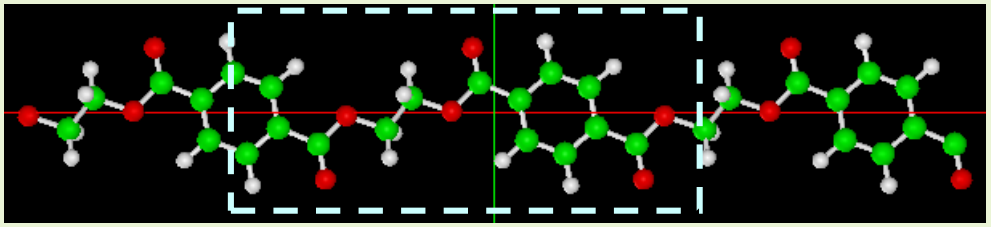




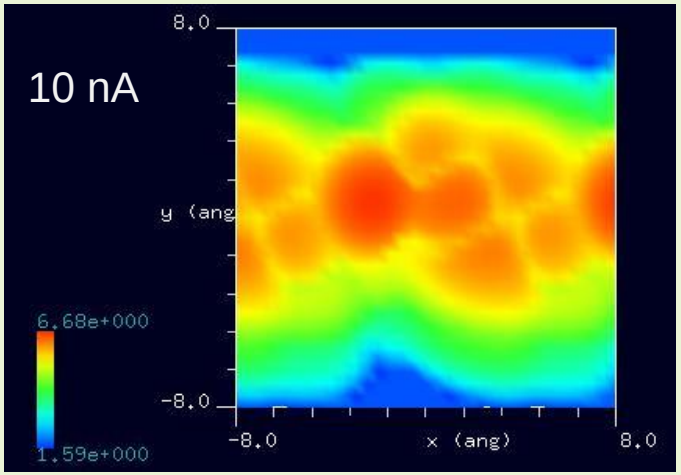


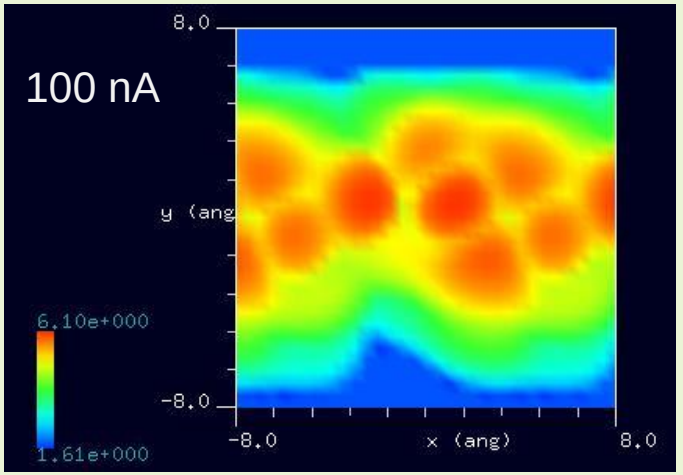
【DFTB】ポリエチレンテレフタレート(PET)のconstant current STMシミュレーション

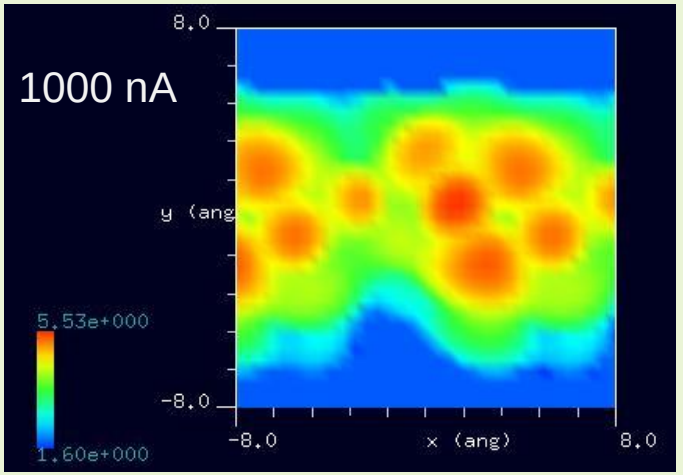
スキャンエリア



探針バイアス: -2.0 V

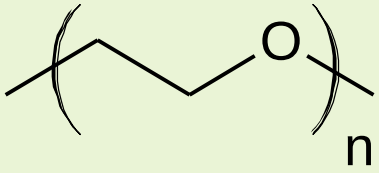




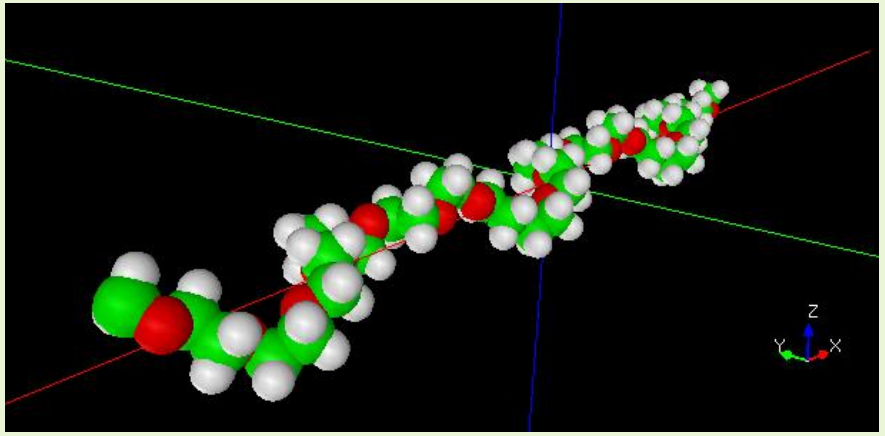


【DFTB】ポリエチレングリコール(PEG)のconstant current STMシミュレーション

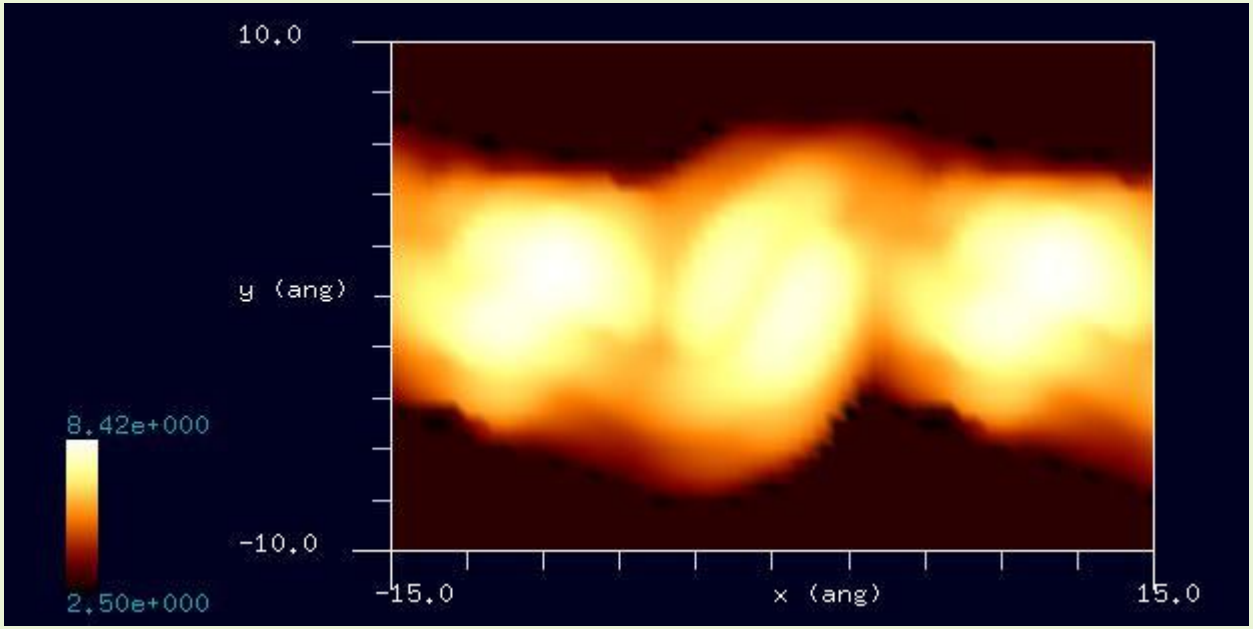
シミュレートモデル



探針: Si_4H_9探針
試料:ポリエチレングリコール(PEG)
スキャンエリア: 30 Å x 20 Å
スキャンモード: constant current STM
探針バイアス: +5.0 V
電流値: 1000 nA

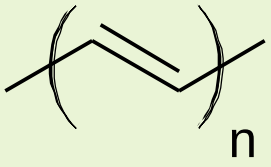


n=7 で1周期のらせん構造。
図はn=21（3周期のらせん）のPEGモデル。

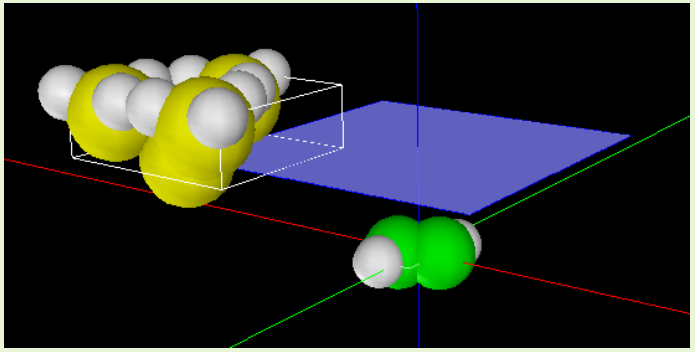


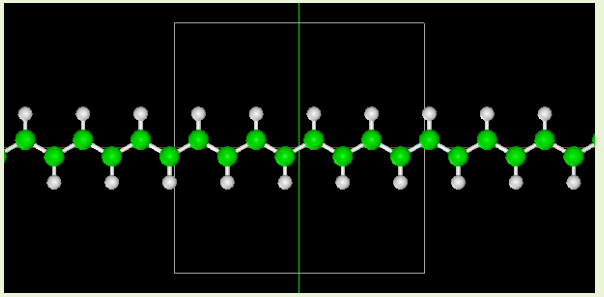
【DFTB】ポリアセチレンのconstant height STMシミュレーション

シミュレートモデル



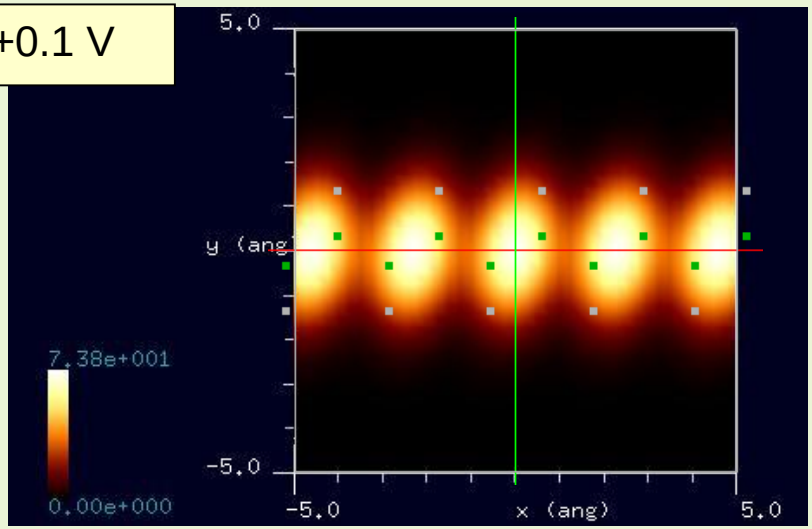
探針：Si_4H_9探針
試料：trans-polyacetylene
スキャンエリア：10 Å x 10 Å
スキャンモード：
constant height STM
探針ー試料間距離：3.5 Å



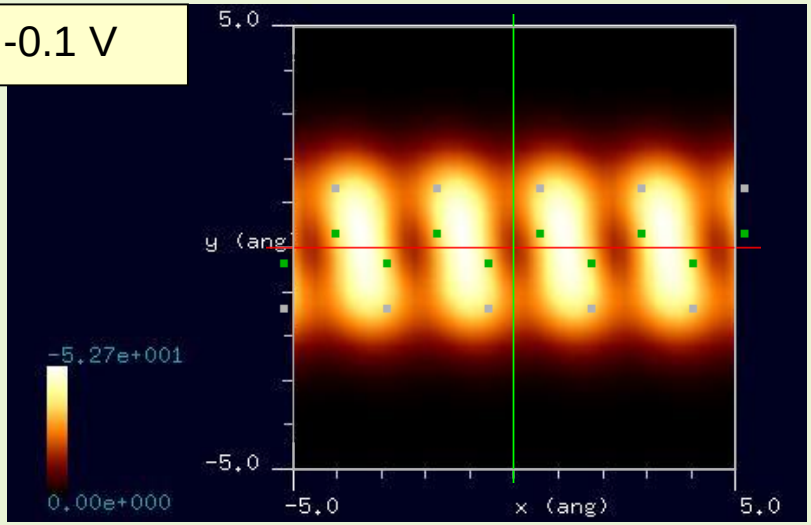


周期的境界条件を課した
trans-polyacetyleneモデル

V_{tip} = +0.1 V

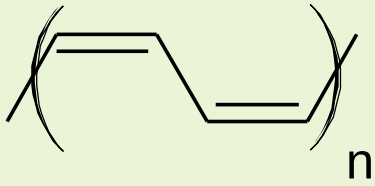


V_{tip} = -0.1 V

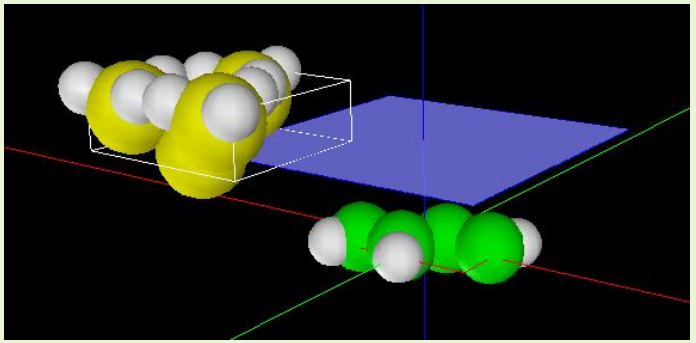


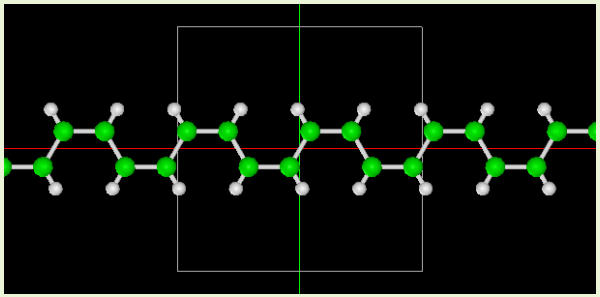
【DFTB】ポリアセチレンのconstant height STMシミュレーション

シミュレートモデル



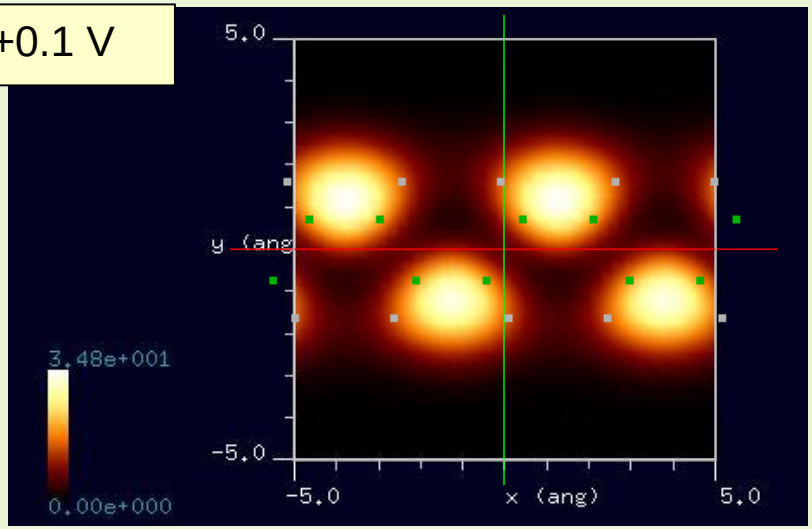
探針：Si_4H_9探針
試料：cis-polyacetylene
スキャンエリア：10 Å x 10 Å
スキャンモード：
　　constant height STM
探針ー試料間距離：3.5 Å



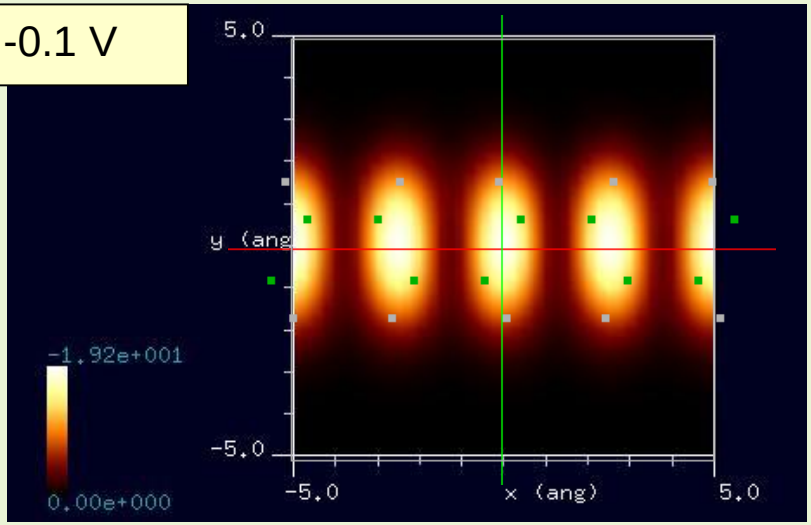


周期的境界条件を課した
cis-polyacetyleneモデル

V_{tip} = +0.1 V



V_{tip} = -0.1 V



【SetModel】原子モデル作成

SetModel

結晶情報を与えて
任意の大きさの
原子モデルを作成

↓

原子の削除・複製・移動・
元素の変更など

↓

水素原子の付加、
MM3力場パラメータの
生成など

↓

SPMシミュレータの
各ソルバーに適した
形式で出力

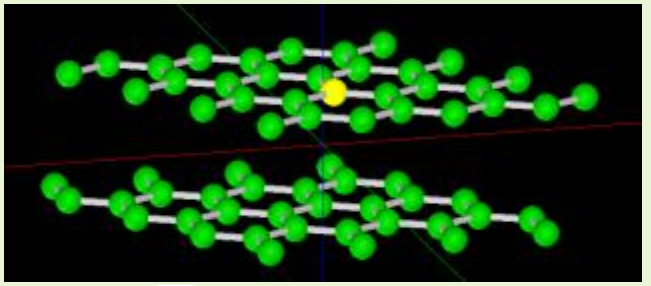
欠陥のあるグラファイトを作成

結晶情報

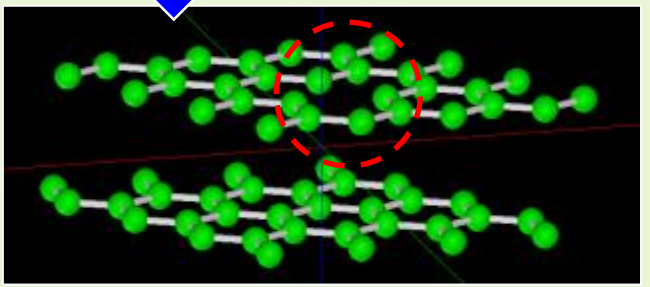
空間群番号：194
格子定数：
a = 2.464 Å
b = 6.711 Å
Fractional座標：
C (0, 0, 1/4)
C (1/3, 2/3, 1/4)

向きや大きさ

ミラー指数：(0 0 1)
格子のサイズ：(4, 4, 1)



原子を選択して削除



MM3力場パラメータの生成

txyz形式で出力

xyz形式で出力

CG　MD　GeoAFM　FemAFM　DFTB

【SetModel】原子モデル作成

SetModel

結晶情報を与えて
任意の大きさの
原子モデルを作成

↓

原子の削除・複製・移動・
元素の変更など

↓

水素原子の付加、
MM3力場パラメータの
生成など

↓

SPMシミュレータの
各ソルバーに適した
形式で出力

シリコンクラスター探針モデルの作成

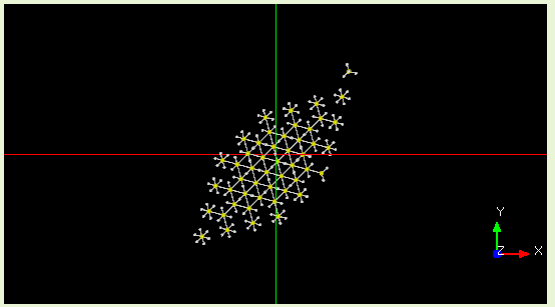
結晶情報

空間群番号：227
格子定数：
a = 5.4 Å
Fractional座標：
Si (0, 0, 0)

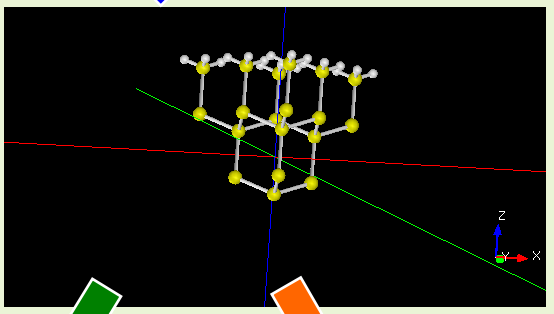
向きや大きさ

ミラー指数：(1 1 1)
格子のサイズ：(2, 2, 3)

ダングリングボンドを
水素終端する



探針の構造に不要な
原子を選択して削除



MM3力場パラメータの生成

txyz形式で出力

xyz形式で出力

CG　MD

GeoAFM　FemAFM

DFTB

【SetModel】原子モデル作成

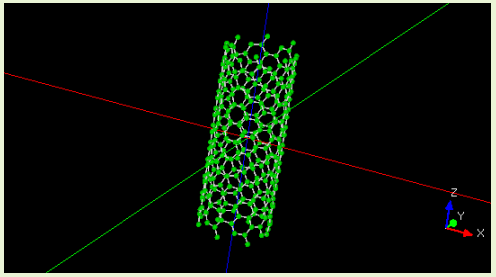
SetModel

カーボンナノチューブモデルの作成

シングルウォールCNT

設定入力

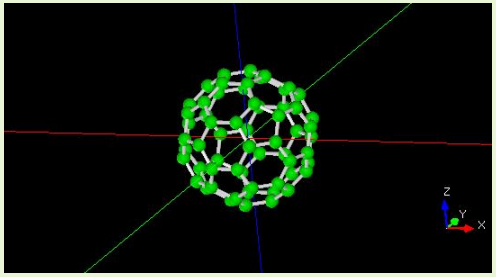
モード: swcnt
カイラル指数: (8, 6)
単位胞数: 1



フラーレン族

設定入力

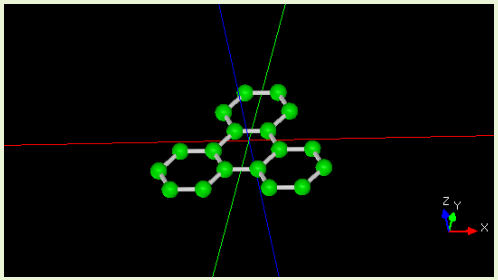
モード: fuller
カイラル指数: (5, 5)
単位胞数: 1



グラフェンシート

設定入力

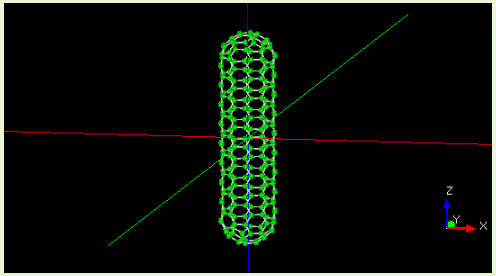
モード: sheet
カイラル指数: (20, -10)
単位胞数: 1



キャップ付きCNT

設定入力

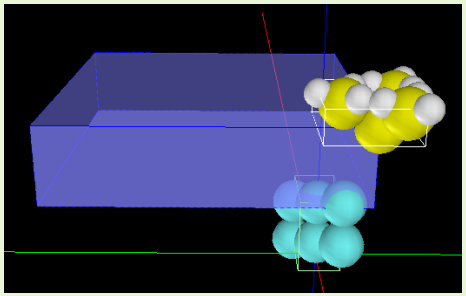
モード: capped
カイラル指数: (10, -5)
単位胞数: 8



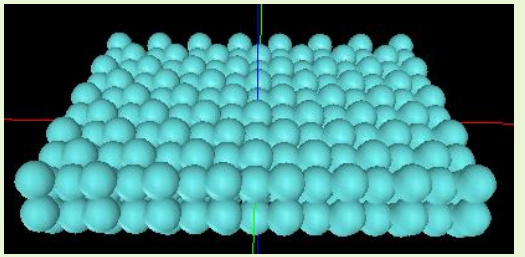
エレクトロニクス

【DFTB】Mo(111)のconstant current STM像

シミュレートモデル

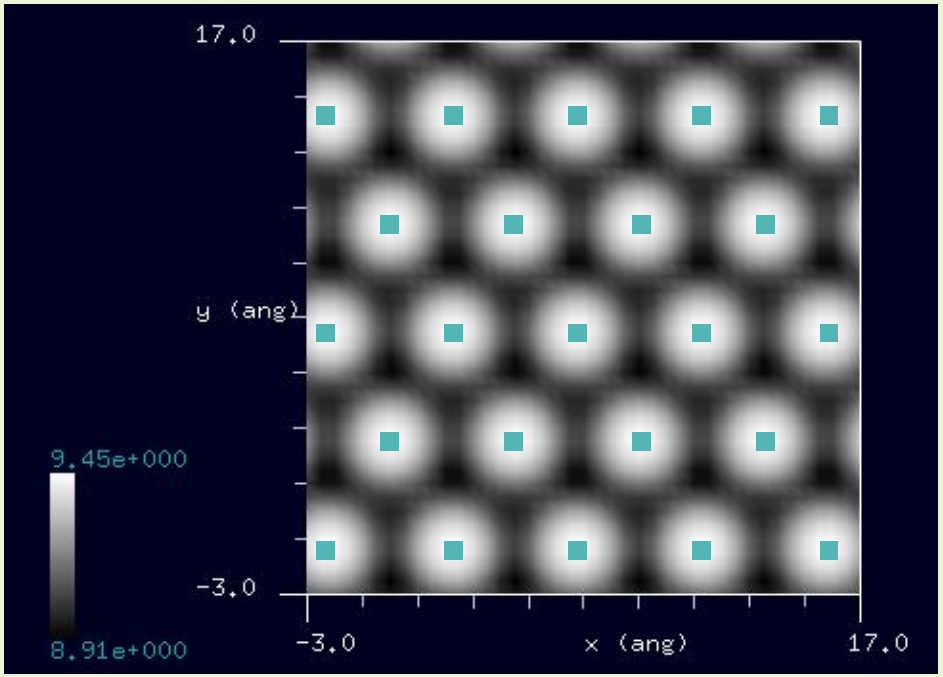


探針：Si_4H_9
試料：Mo(111)表面
スキャンエリア：20 Å x 20 Å
スキャンモード：constant current STM
探針バイアス：+0.5 V
電流値：10 nA

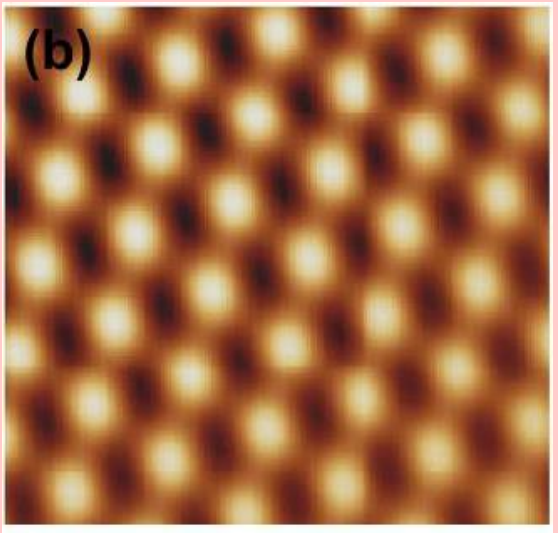


周期的境界条件を課したMo(111)モデル

計算結果



cf. Experiment



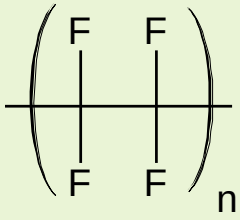
STM image of Mo(111) surface.

http://www.cmu.edu/physics/stm/publ/107/LB-STM.pdf
Scanning Tunneling Microscopy of Metals and Semiconductors

エレクトロニクス

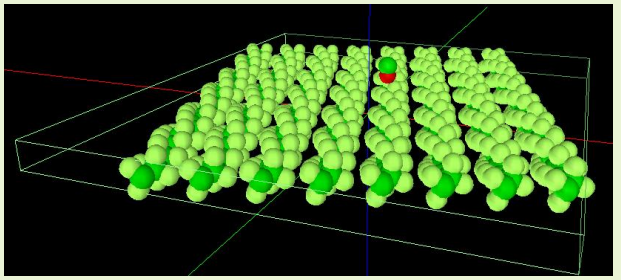
【CG】フッ素系樹脂PTFEのカー定モードAFM像

シミュレートモデル

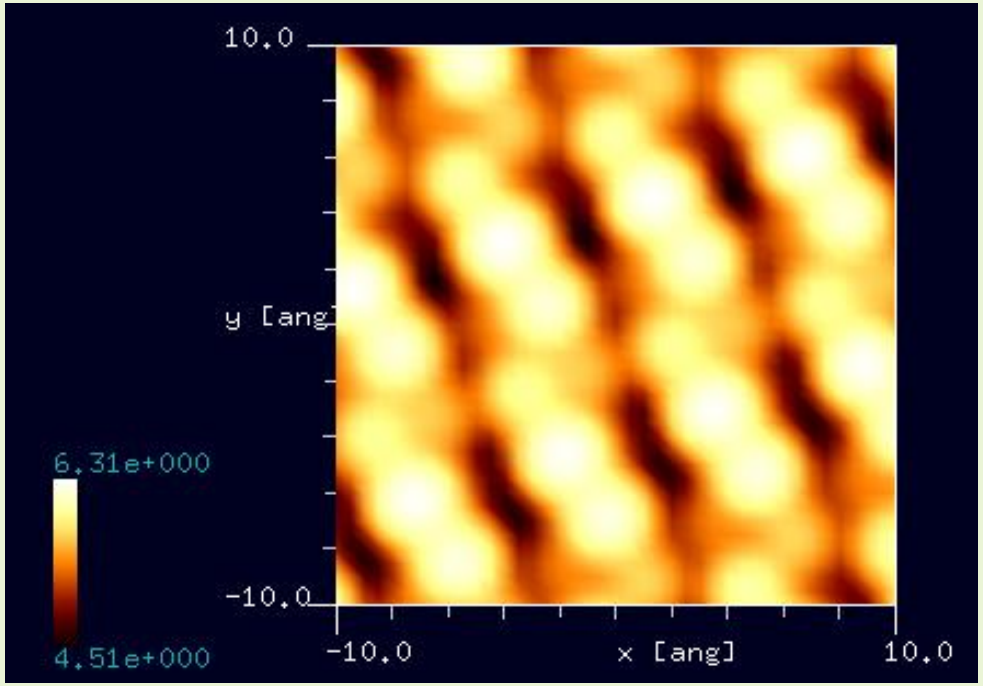


PTFE ＝
ポリテトラフルオロエチレン

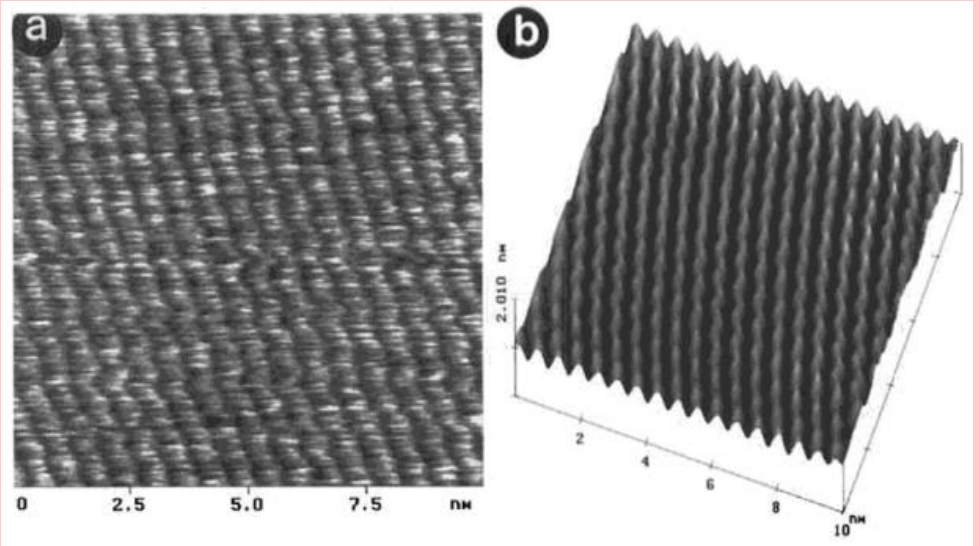
探針: CO
試料: PTFEの13_6-helix chain, 単層シート
スキャンエリア: 20 Å x 20 Å
スキャンモード: カー定モード
力の設定値: +0.01 nN (微小な斥力)
解像度: 0.5 Å



計算結果



cf. Experiment



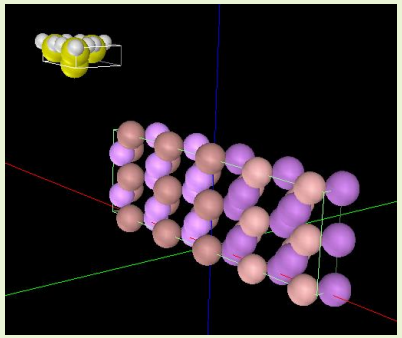
(a) Molecular-scale AFM height image of a PTFE layer deposited by rubbing on a hot glass substrate. (b) Surface view of (a) after filtering.

Sergei N. Magonov and Myung-Hwan Whangbo, Surface Analysis with STM and AFM: Experimental and Theoretical Aspects of Image Analysis

エレクトロニクス

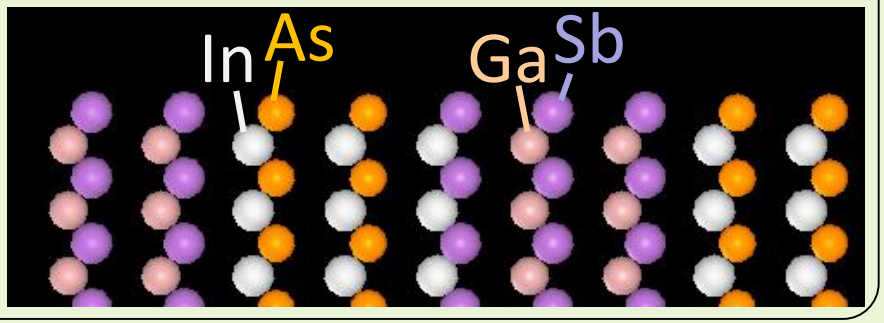
【DFTB】InAs-GaSb界面の(110)面のconstant current STM像

シミュレートモデル

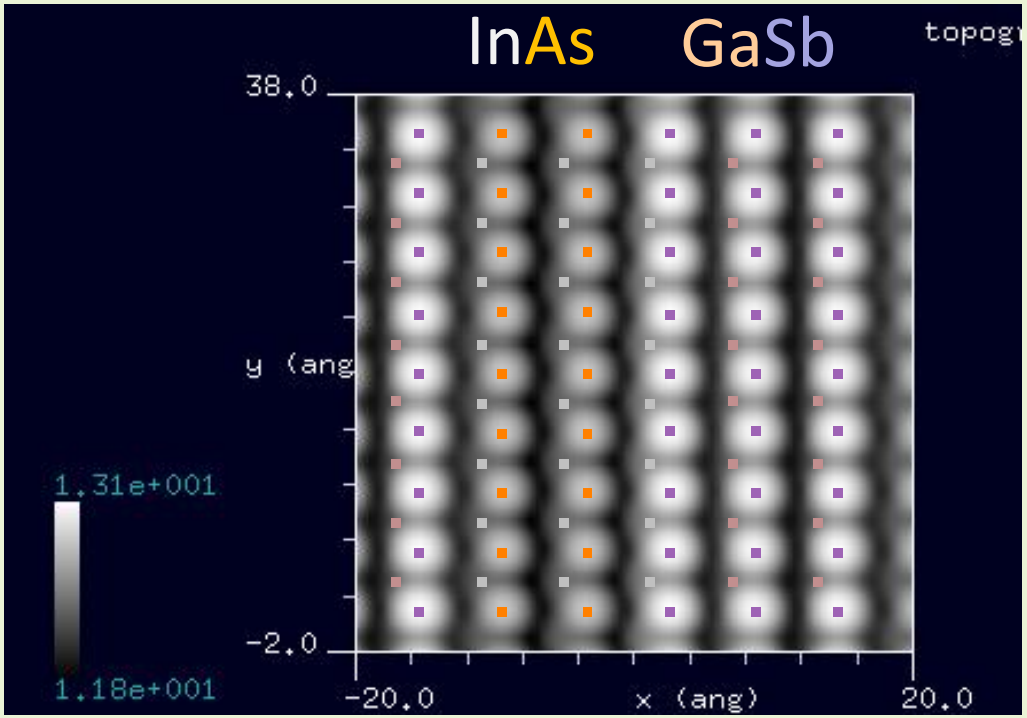


探針：Si_4H_9
試料：InAs-GaSb界面の(110)面
スキャンエリア：40 Å x 40 Å
スキャンモード：constant current STM
探針バイアス：+1.0 V
電流値：1000 nA
解像度：0.5 Å

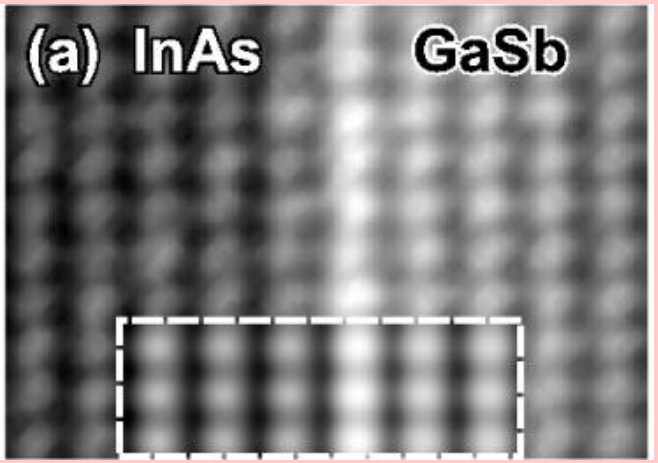
最表面の原子配置（周期的境界条件を適用）



計算結果



cf. Experiment



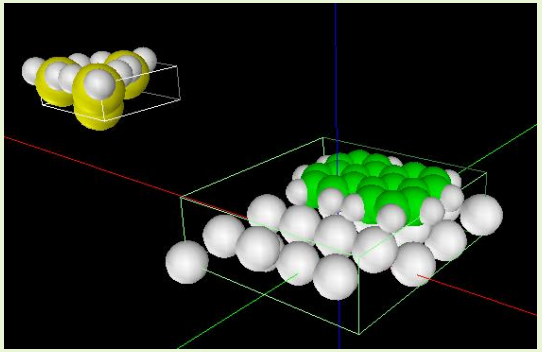
An XSTM image of an InAs-GaSb interface with InSb interfacial bonds. Inset: Simulated XSTM image of this structure. Both gray scales span about 1 Å.

S. G. Kim, S. C. Erwin, B. Z. Nosho, L. J. Whitman, Phys. Rev. B 67, 121306(R) (2003).

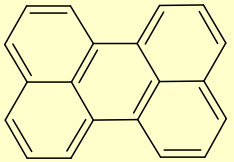
エレクトロニクス

【DFTB】Perylene on Ag(110)のconstant current STM像

シミュレートモデル

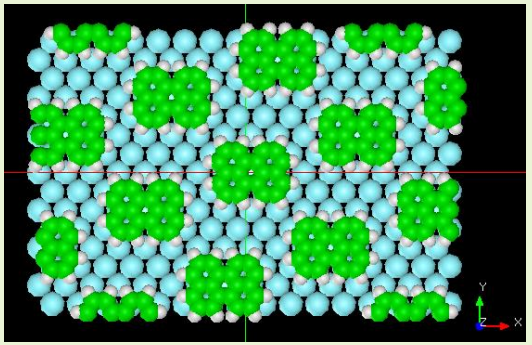


探針: Si_4H_9

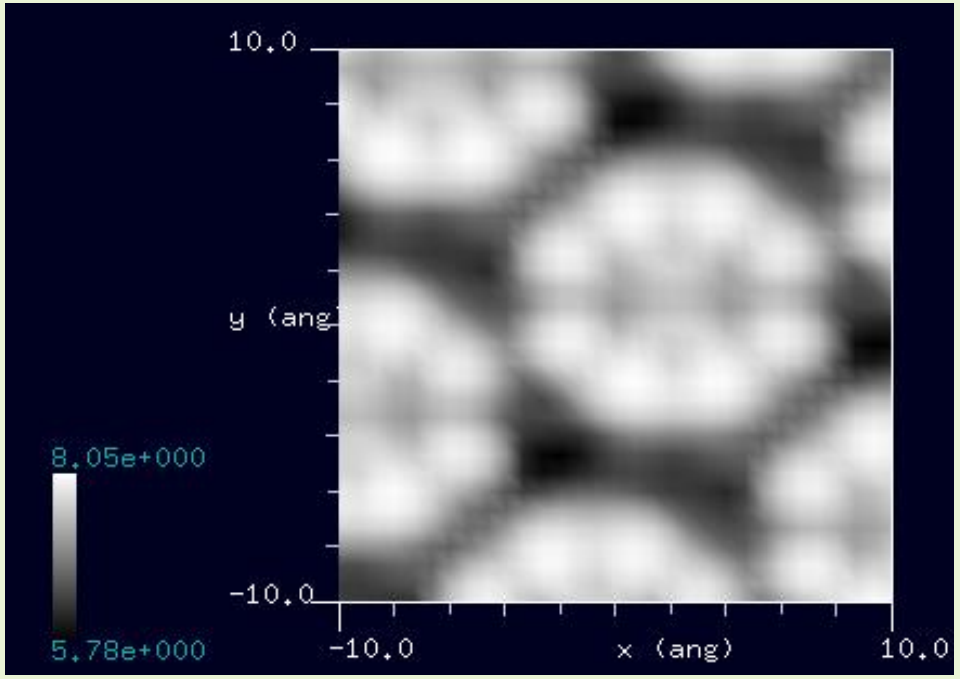


試料: Ag(110)面上の
Perylene分子
スキャンエリア: 20 Å x 20 Å
スキャンモード: constant current STM
探針バイアス: +1.2 V
電流値: 1000 nA
解像度: 0.5 Å

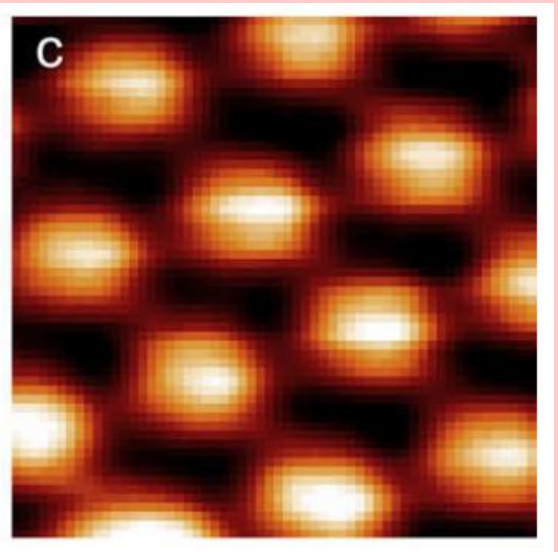
周期的境界条件で拡張したモデル



計算結果



cf. Experiment



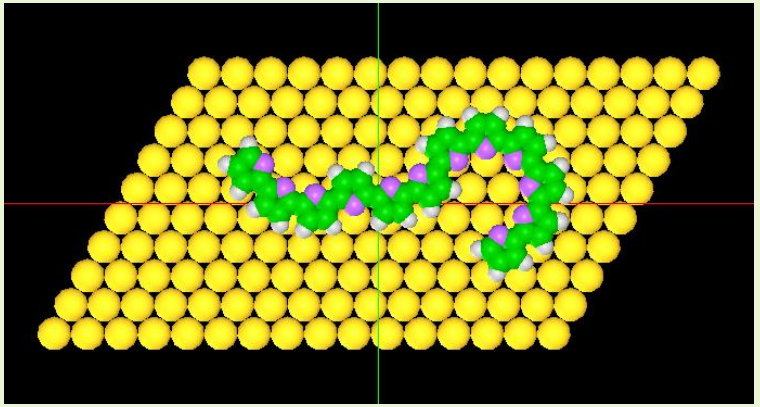
Experimental STM image (4 nm x 4 nm, U = -1.2 V, I = 0.13 nA) of perylene superstructure.

H.-J. Gao and Li Gao, Progress in Surface Science 85, 28–91 (2010).

エレクトロニクス

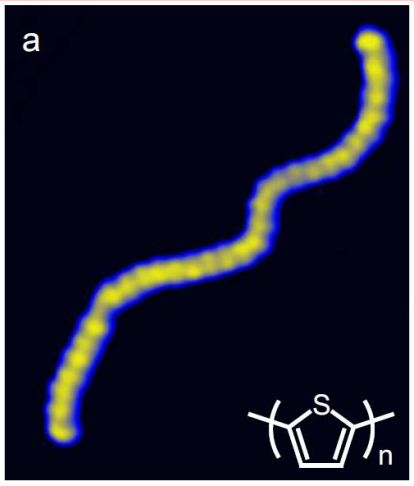
【DFTB】ポリチオフェンワイヤのconstant current STM像

シミュレートモデル



探針：Si_4H_9
試料：Au(111)面上のポリチオフェン分子
スキャンエリア：40 Å x 20 Å
スキャンモード：constant current STM

cf. Experiment

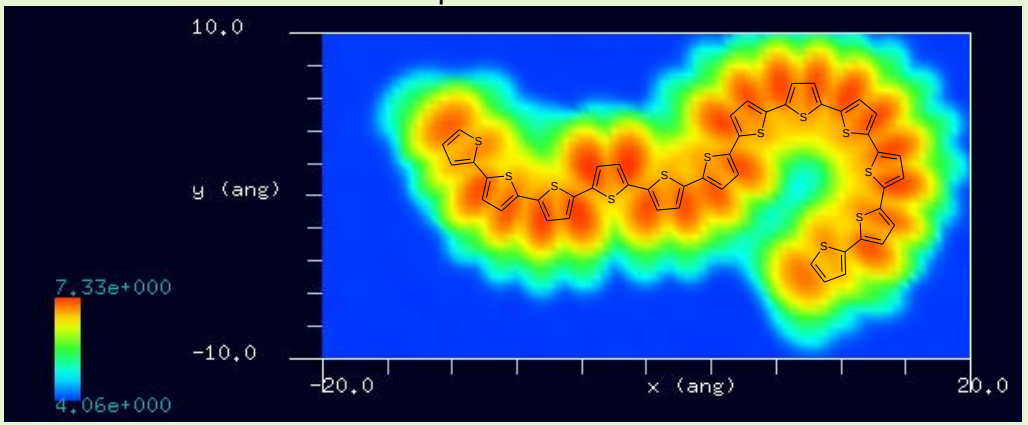


STM image (I = 2 nA, V = 0.1 V).

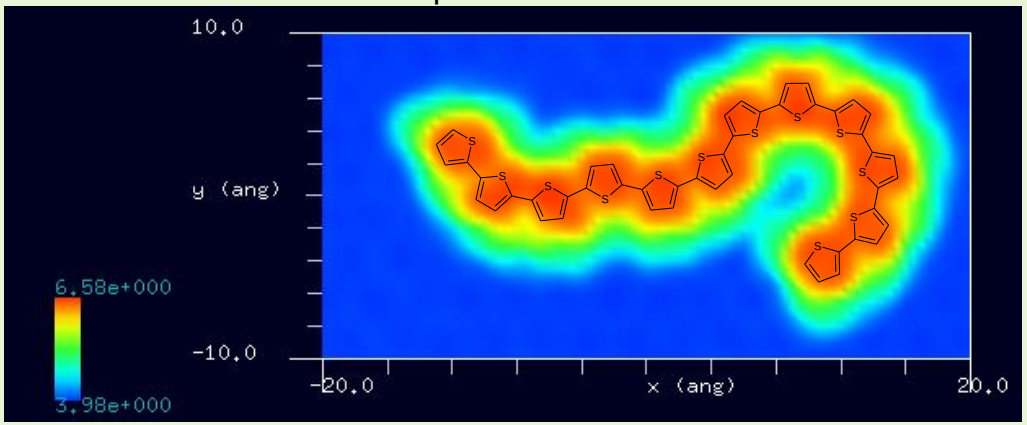
Gael Reecht et al., Phys. Rev. Lett. 2, 112, 047403 (2014).

計算結果

V_{tip} = +0.5 V, I = 100 nA.



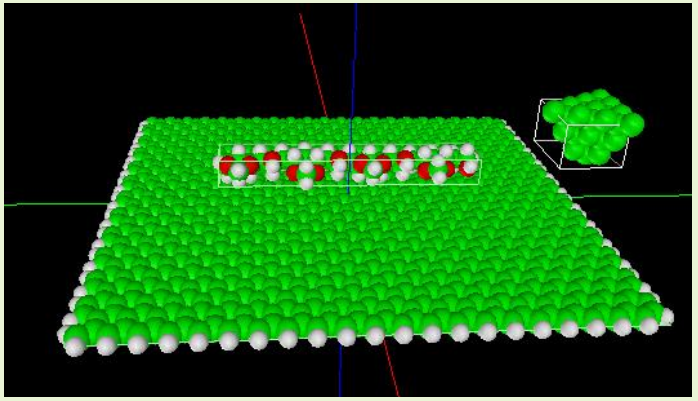
V_{tip} = -0.5 V, I = 100 nA.



エレクトロニクス

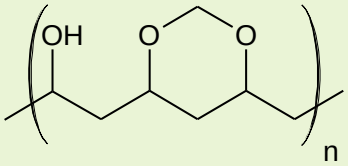
【CG】Polyvinyl formalのカー定モードAFM像

シミュレートモデル

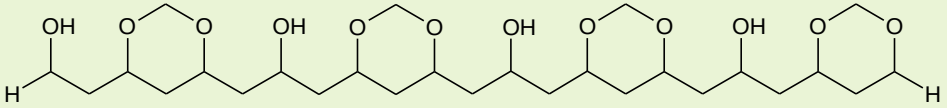


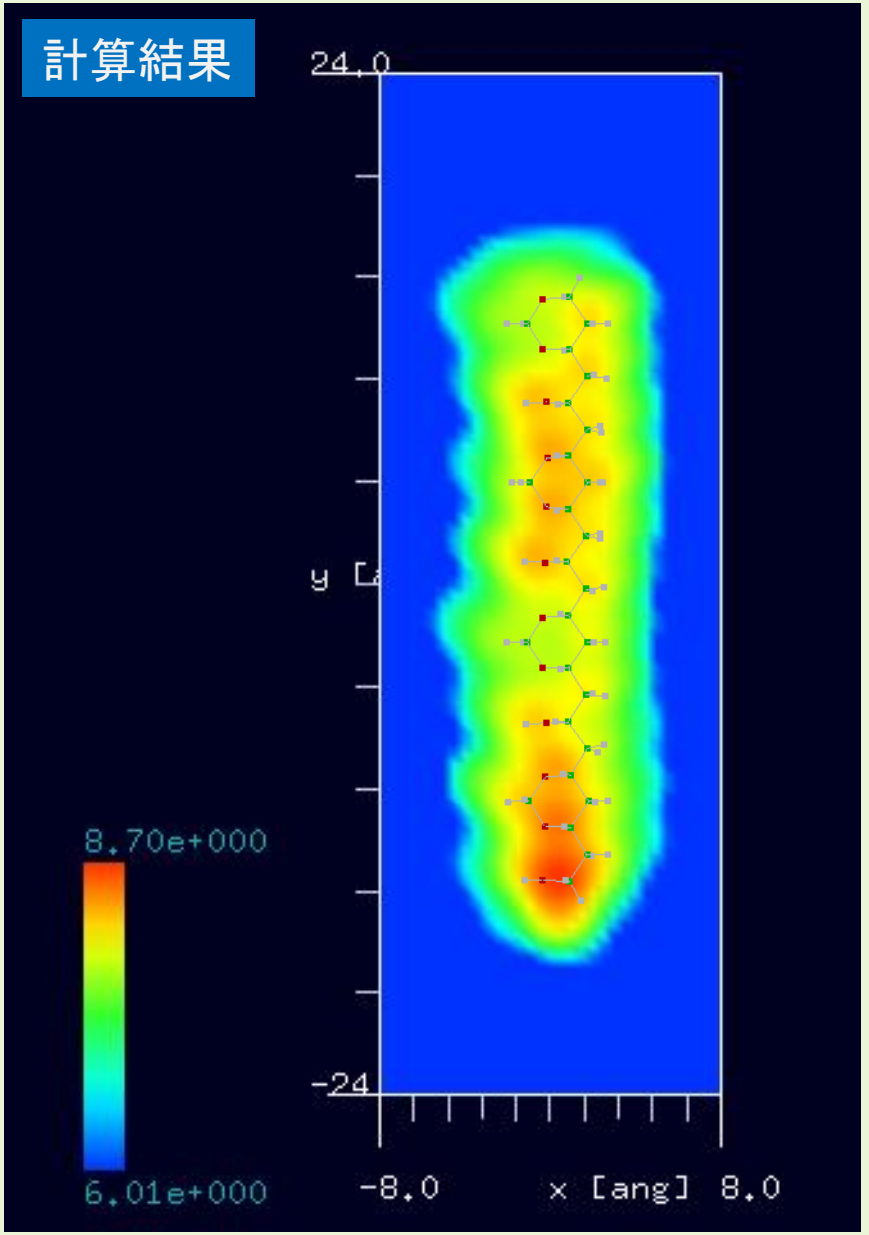
探針：ダイヤモンド
試料：グラフェンシート上のpolyvinyl formal分子
スキャンエリア：(w, d, h) = (16, 48, 3) [Å]
スキャンモード：カー定モード
力の設定値：+0.01 nN (微小な斥力)
解像度：0.5 Å

polyvinyl formalの構造



n = 4 のモデル



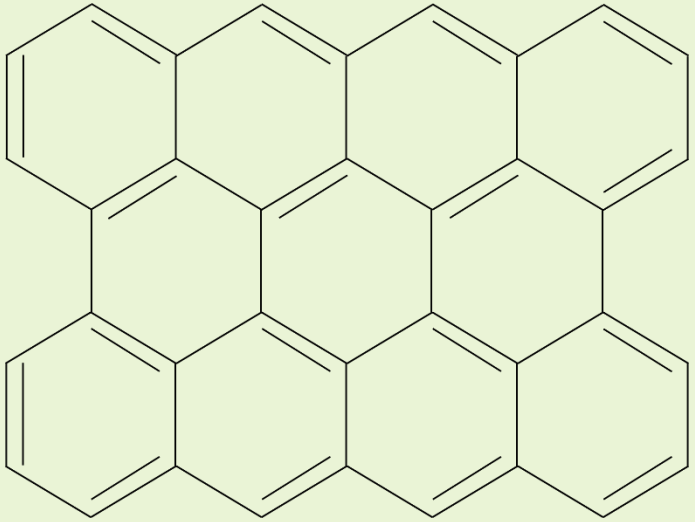


エレクトロニクス

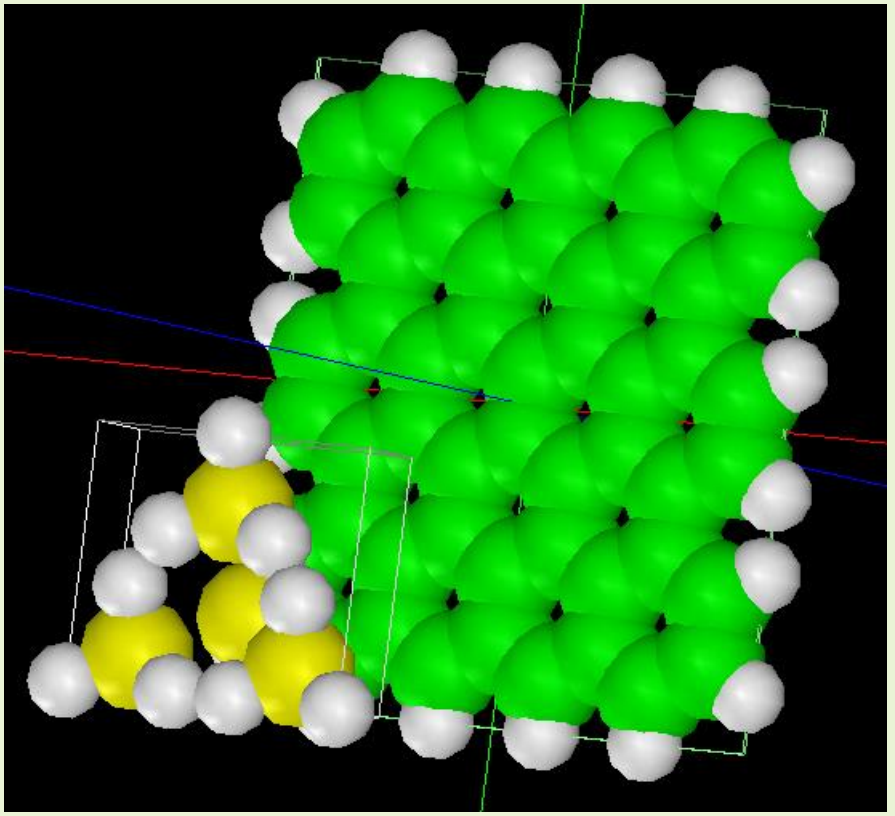
【DFTB】HOPGのSTM像およびAFM像

DFTB

HOPG(高配向熱分解黒鉛)

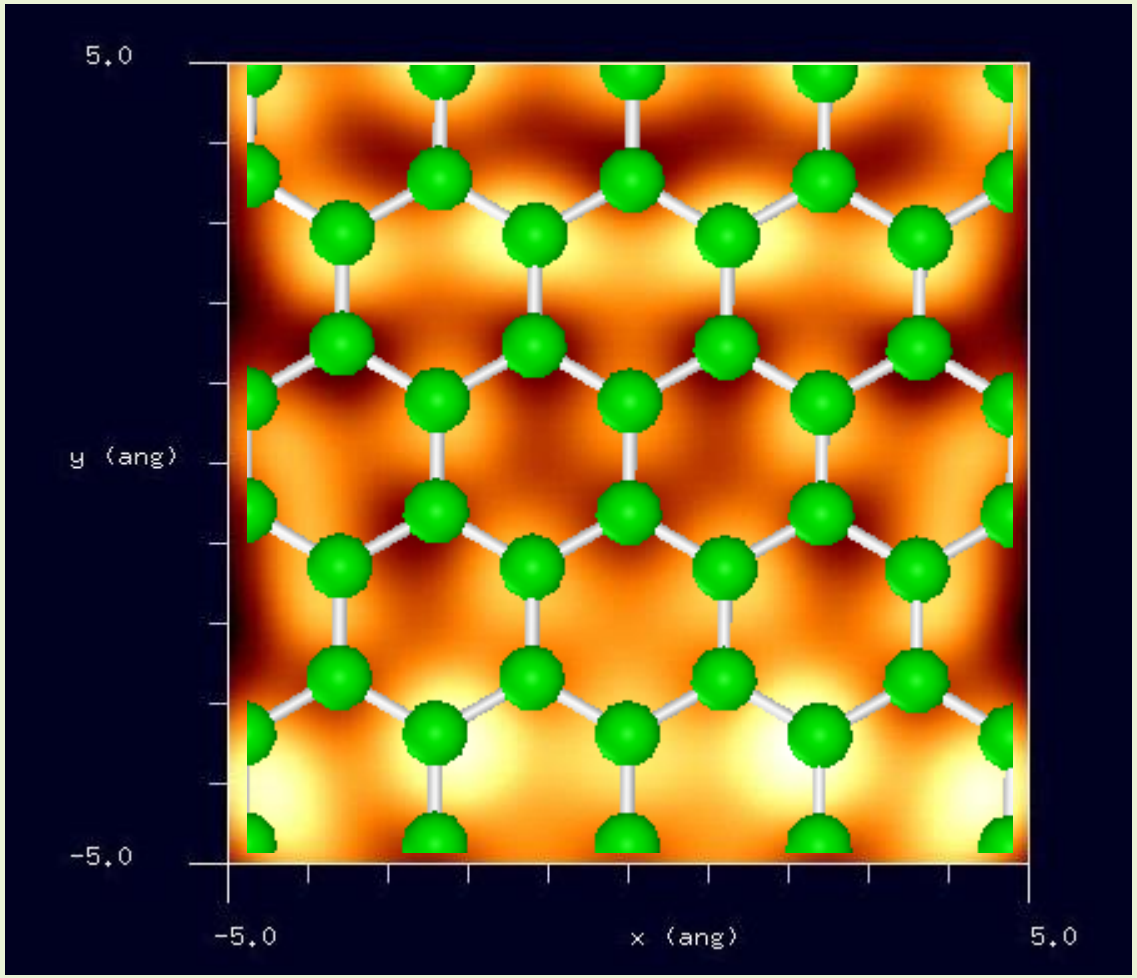


水素終端されたシリコン探針を使用



【DFTB】HOPGのconstant height STM像

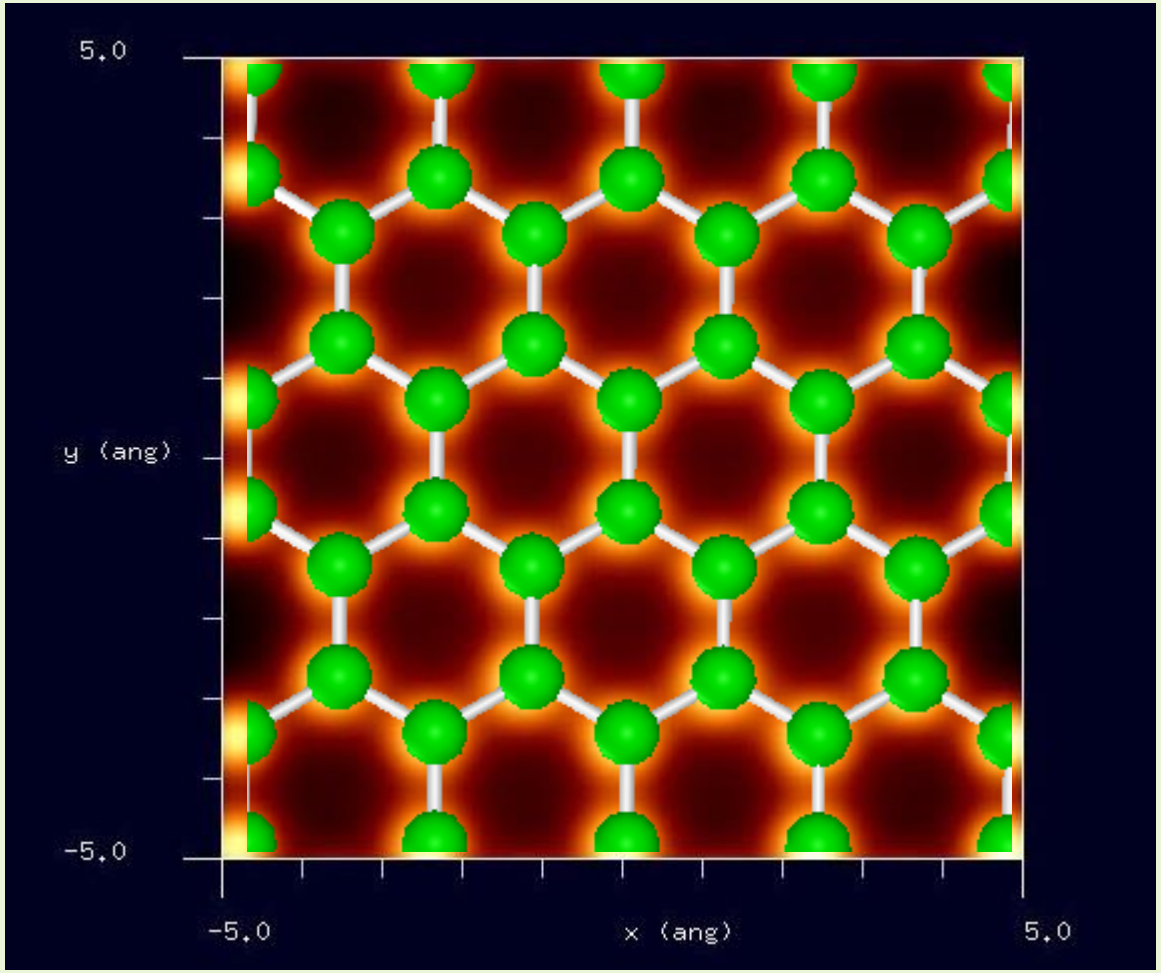
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.4 Å
最大電流 3.23×10^{5} nA、最小電流 1.34×10^{5} nA





【DFTB】HOPGの周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離3.9 Å
周波数のずれは 3.77×10^{2} Hzから 2.14×10^{3} Hz



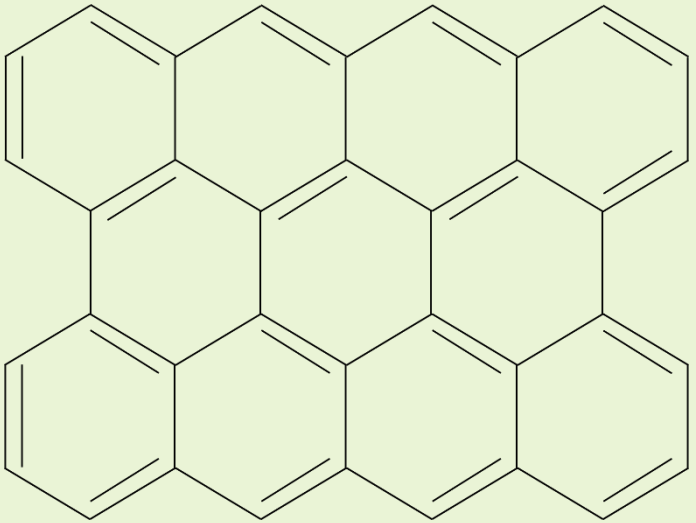


エレクトロニクス

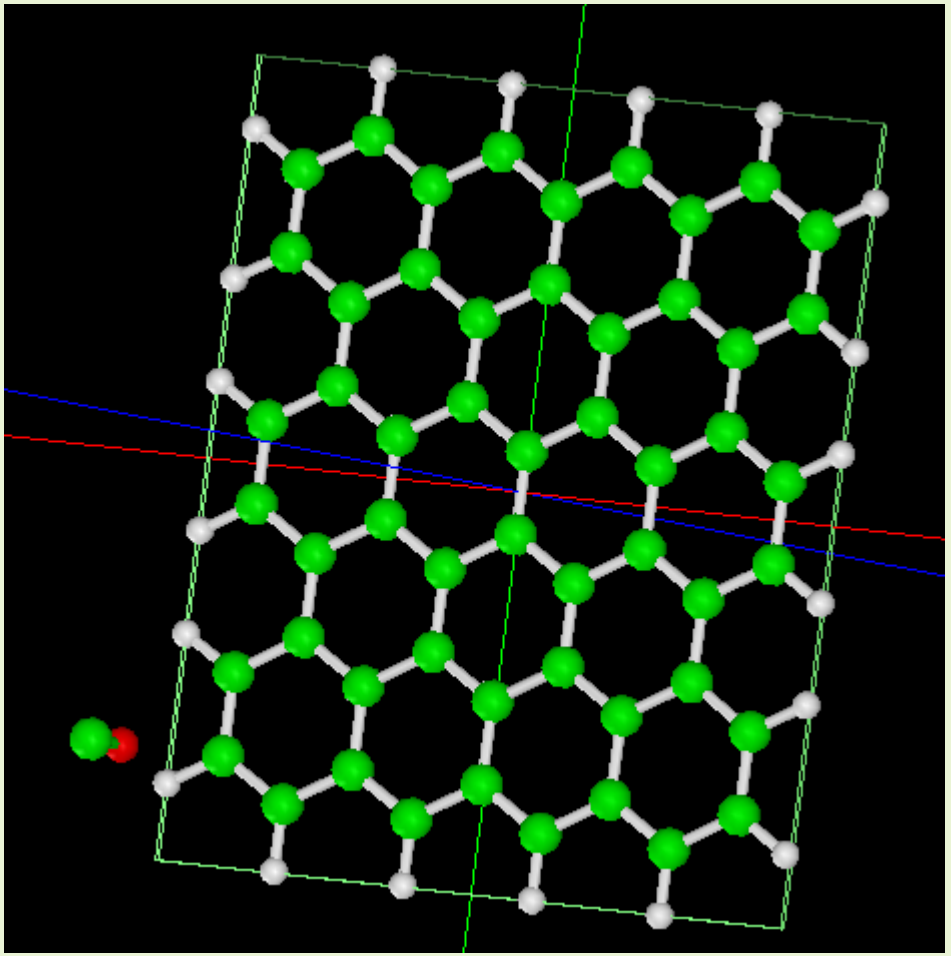
【CG】HOPGの周波数シフトAFM像

CG

HOPG(高配向熱分解黒鉛)



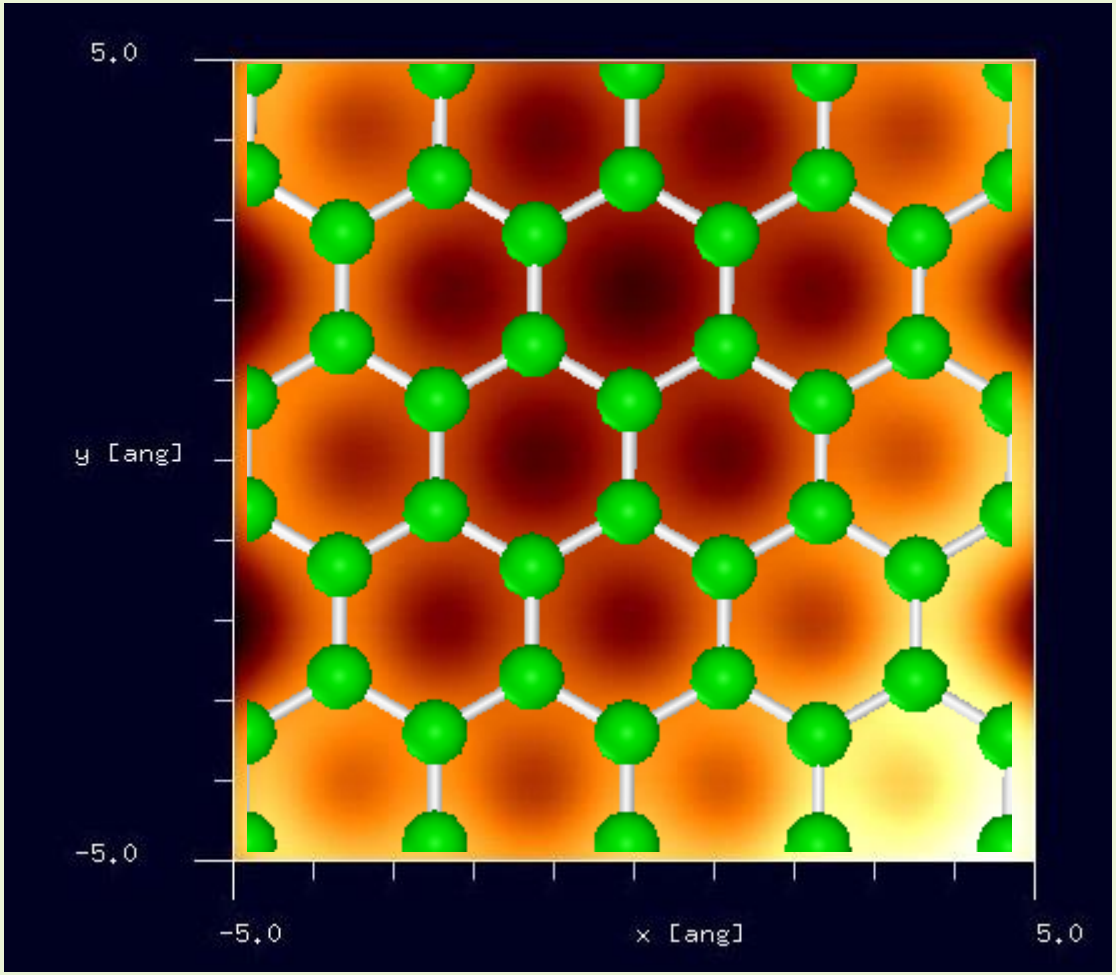
CO探針を使用



エレクトロニクス

【CG】HOPGの周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離3.4 Å
周波数のずれは 2.23×10^{1} Hzから 1.06×10^{2} Hz

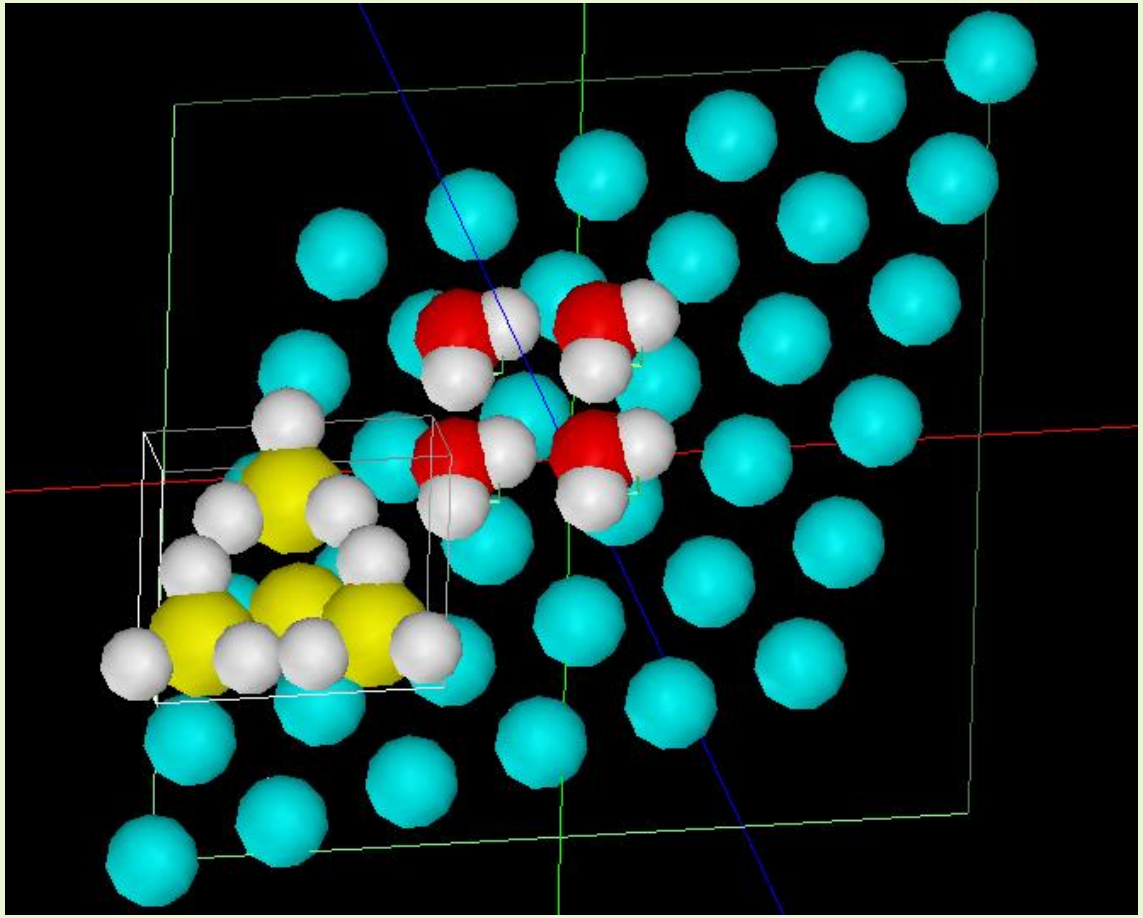




エレクトロニクス

【DFTB】Au(111)基板上の水分子のSTM像およびAFM像

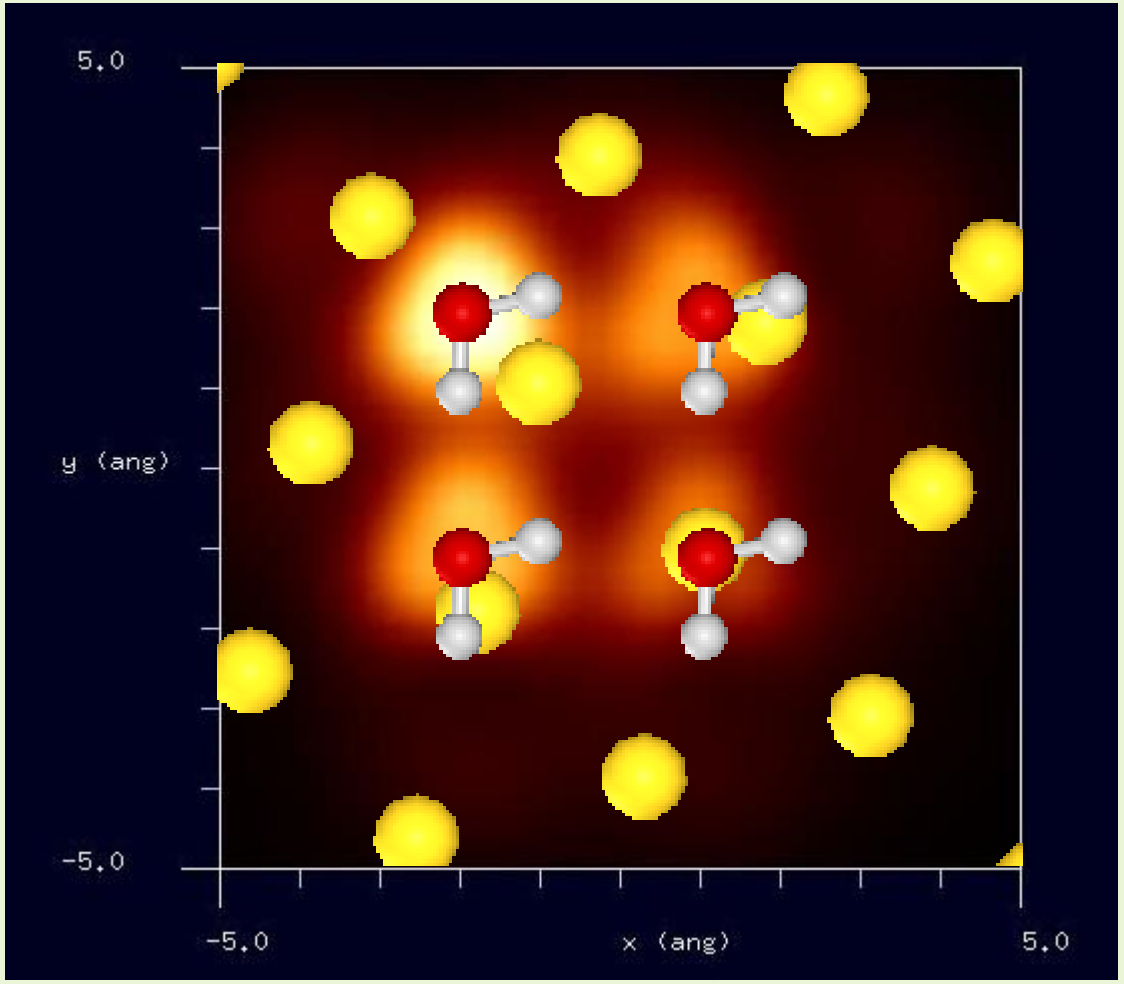
水素終端されたシリコン探針を使用



エレクトロニクス

【DFTB】Au(111)基板上の水分子のconstant height STM像

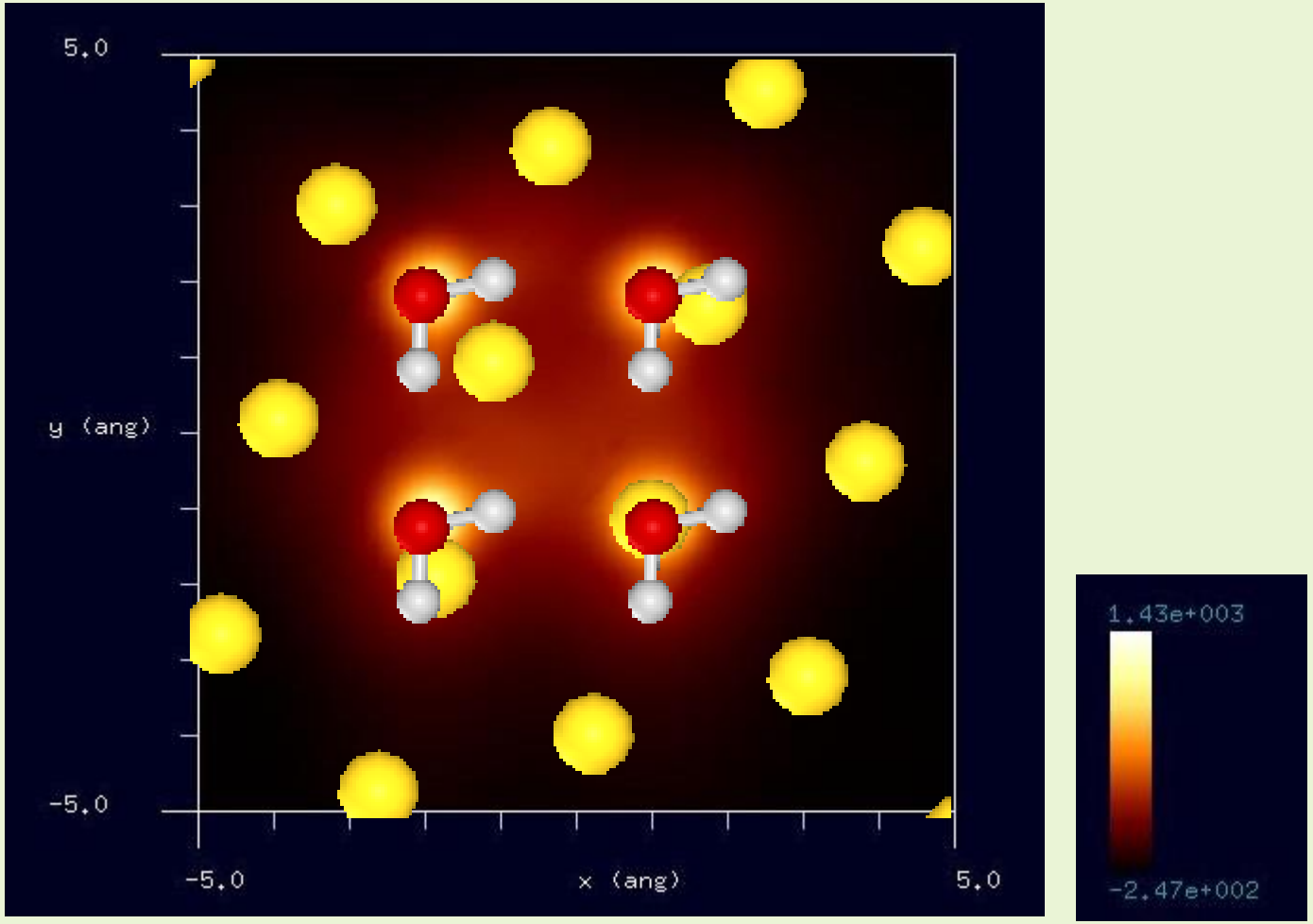
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.2 Å
最大電流 1.91×10^{5} nA、最小電流 9.49×10^{3} nA





【DFTB】Au(111)基板上の水分子の周波数シフトAFM像

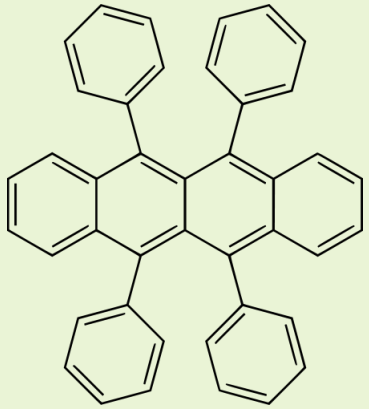
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離3.9 Å
周波数のずれは -2.47×10^{2} Hzから 1.43×10^{3} Hz



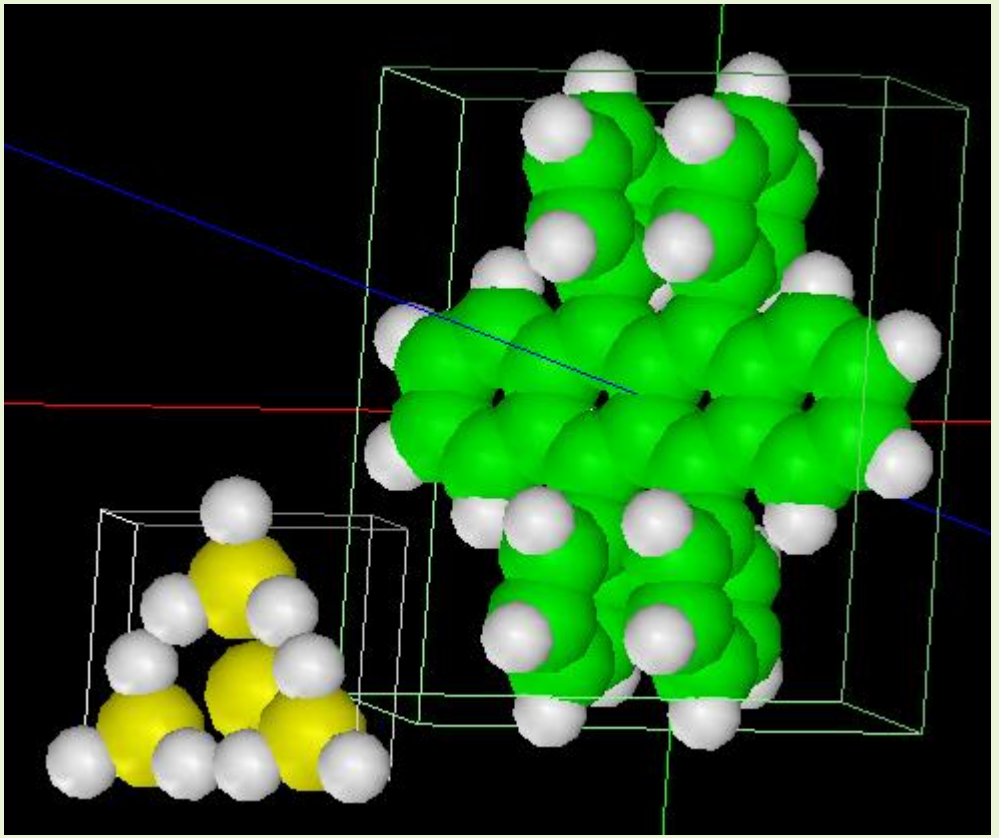
エレクトロニクス

【DFTB】ルブレン分子のSTM像およびAFM像

ルブレン(rubrene)[有機ELの一種]

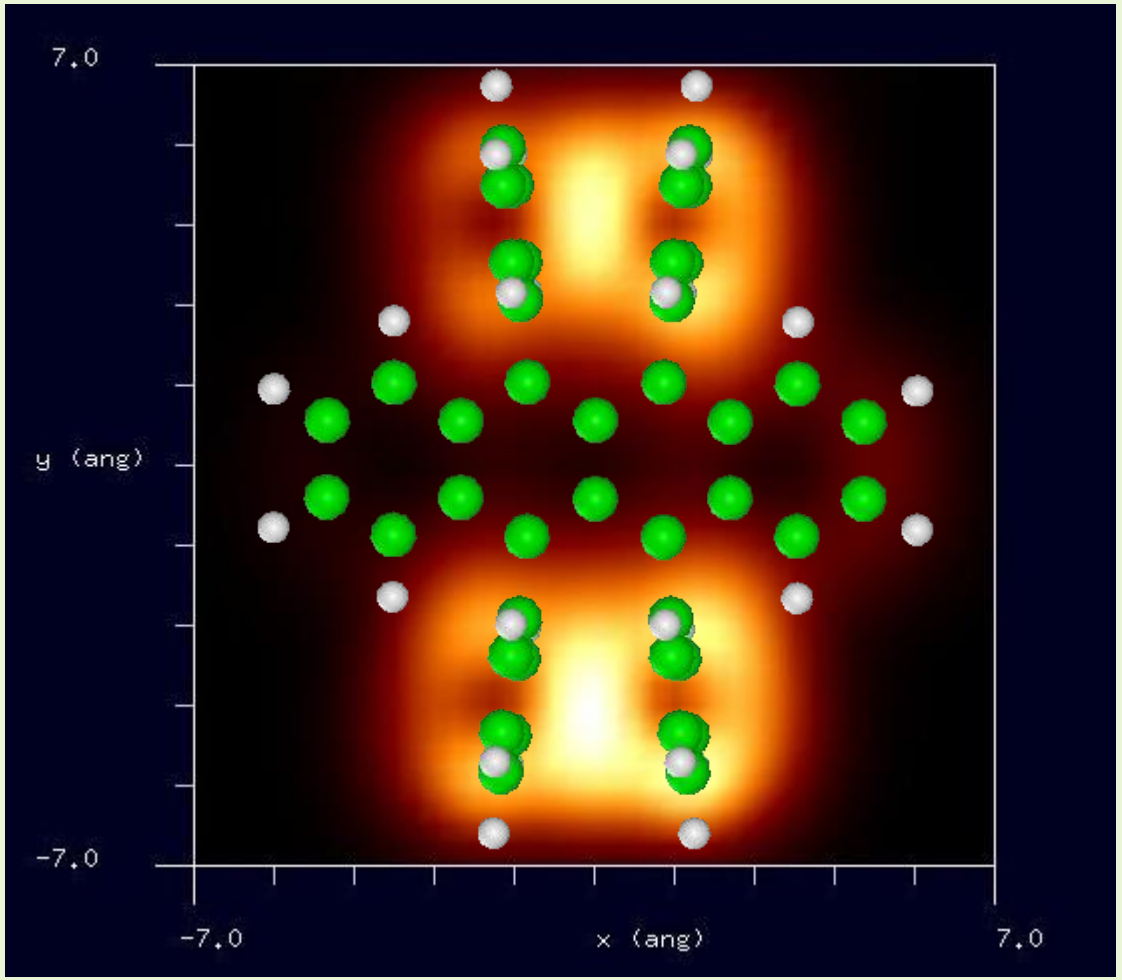


水素終端されたシリコン探針を使用



【DFTB】ルブレン分子のconstant height STM像

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.4 Å
最大電流 4.36×10^{4} nA、最小電流 0.00×10^{0} nA

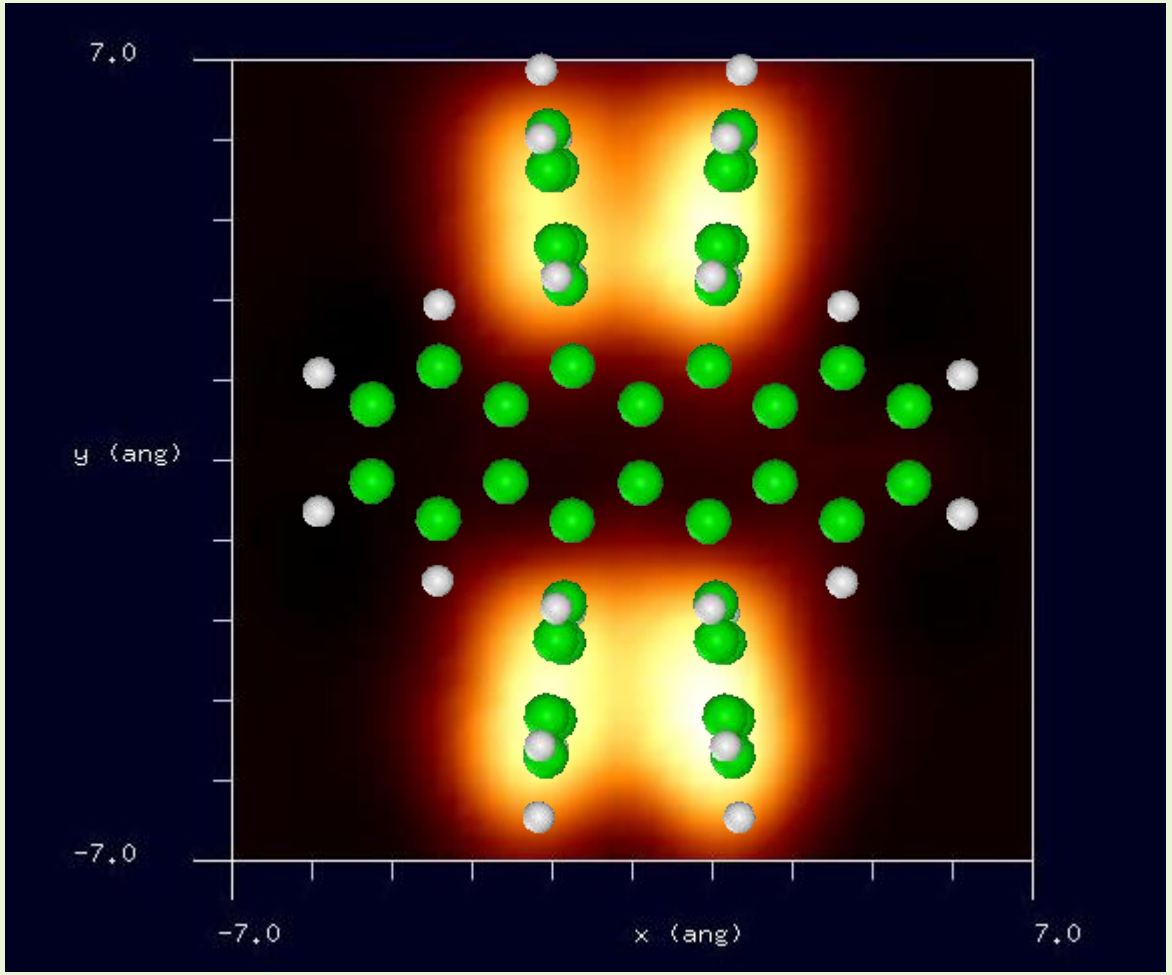




エレクトロニクス

【DFTB】ルブレン分子の周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.4 Å
周波数のずれは -1.70×10^{2} Hzから 4.90×10^{1} Hz

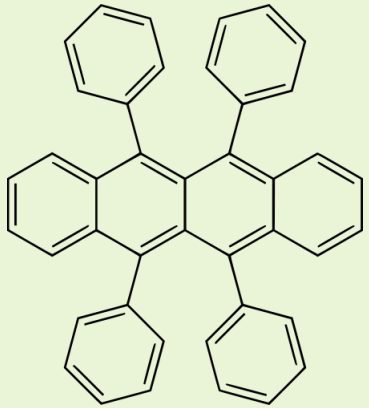




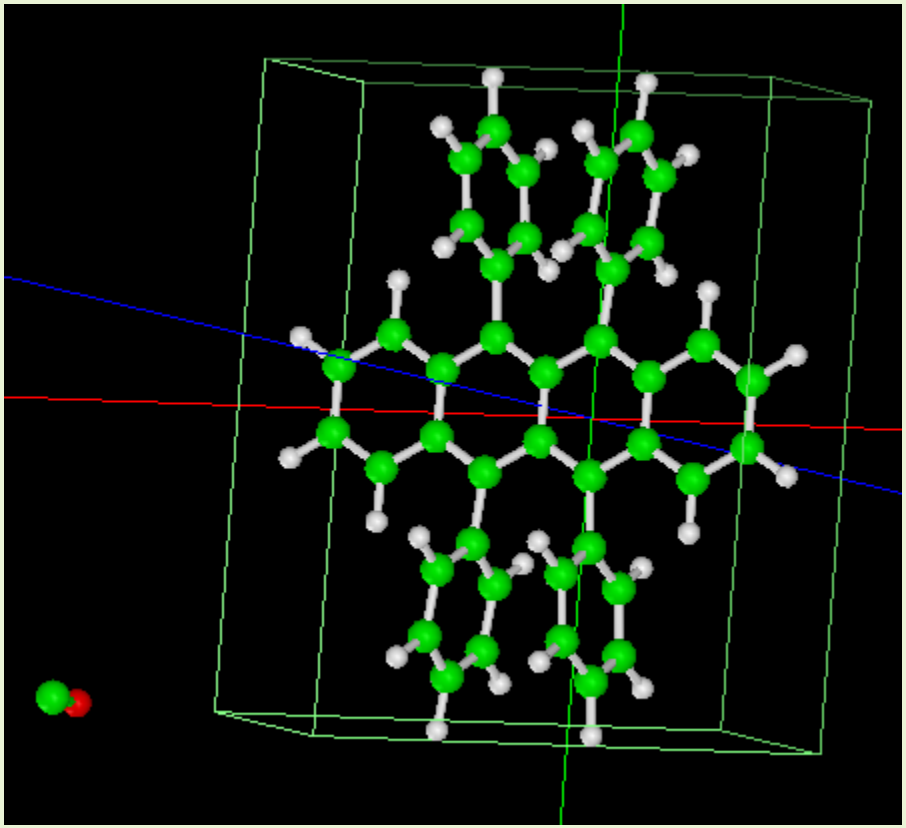
エレクトロニクス

【CG】ルブレン分子の周波数シフトAFM像

ルブレン(rubrene)[有機ELの一種]

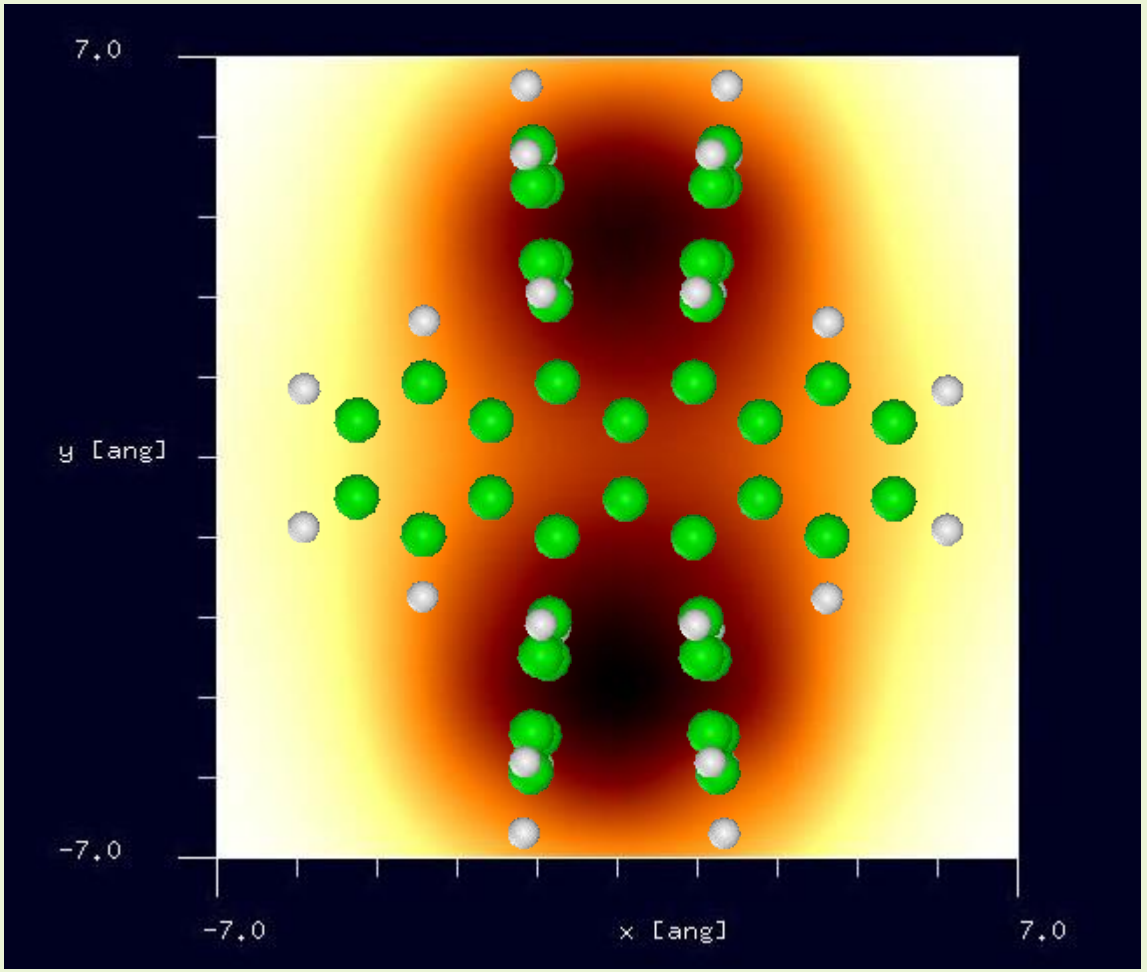


CO探針を使用



【CG】ルブレン分子の周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離3.9 Å
周波数のずれは -2.04×10^{1} Hzから -7.00×10^{-1} Hz

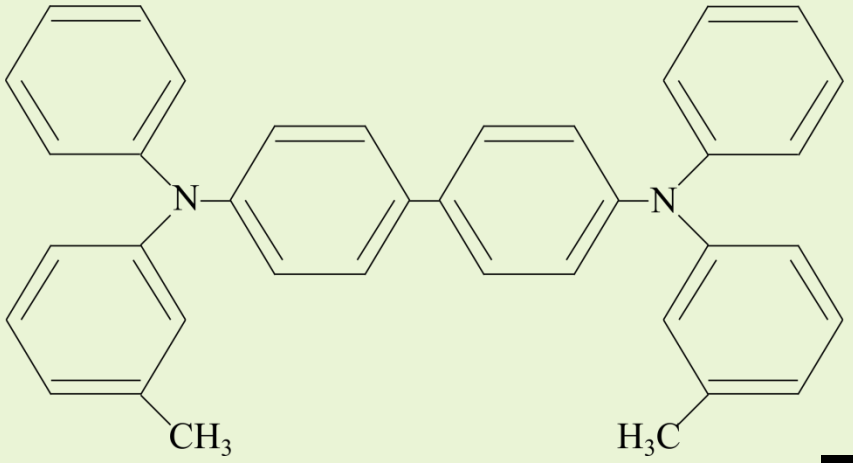




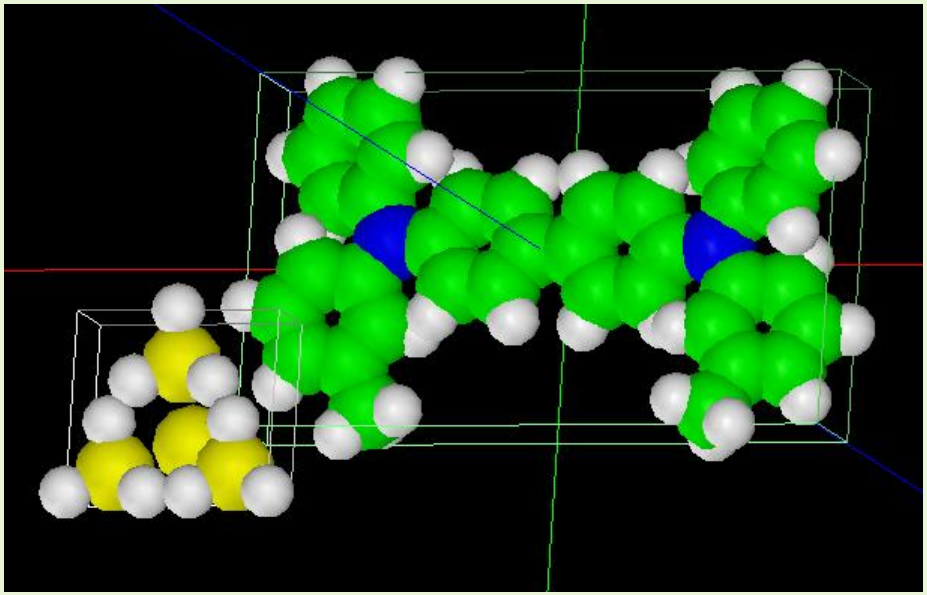
エレクトロニクス

【DFTB】TPD分子のSTM像およびAFM像

TPD(triphenyldiamine)[有機ELの一種]

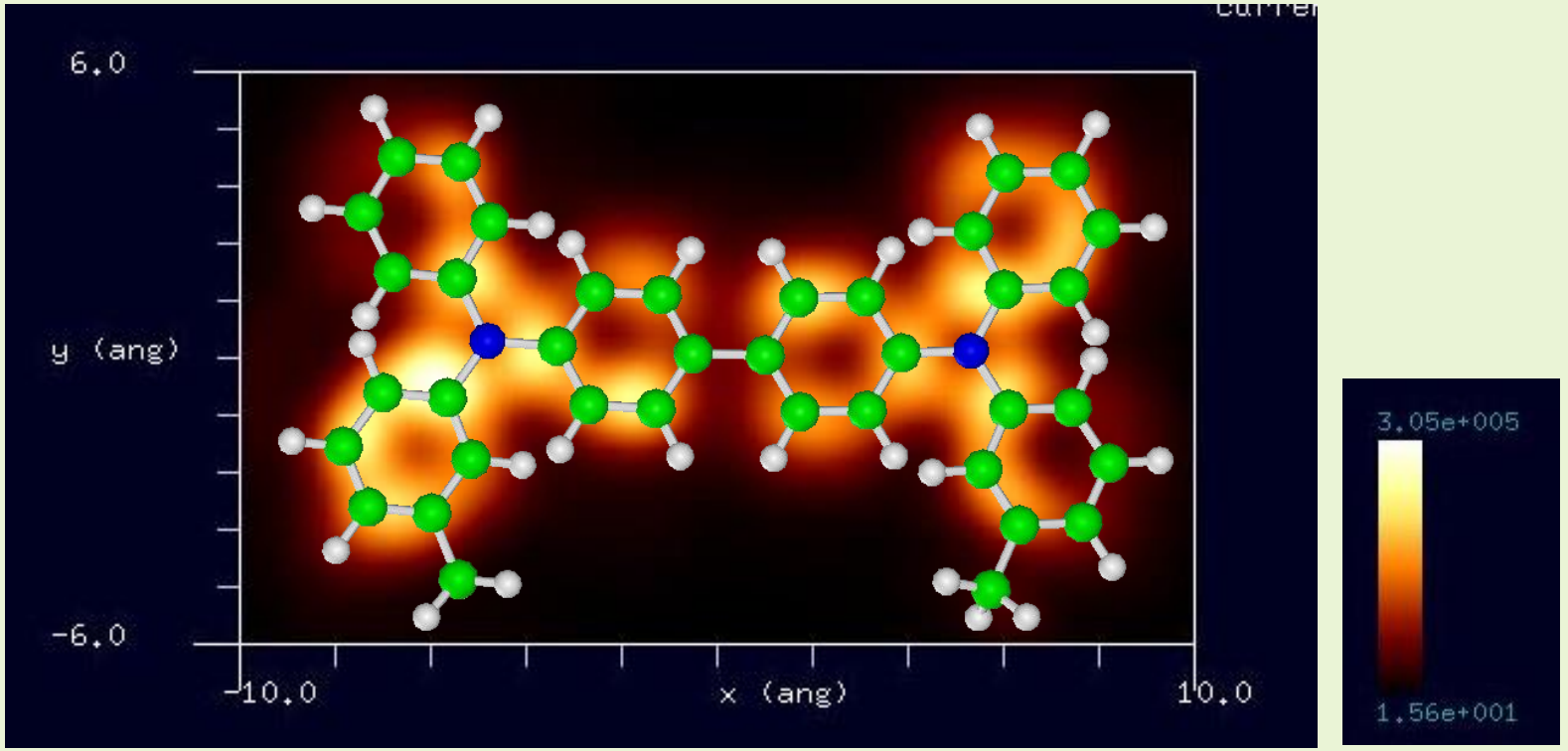


水素終端されたシリコン探針を使用



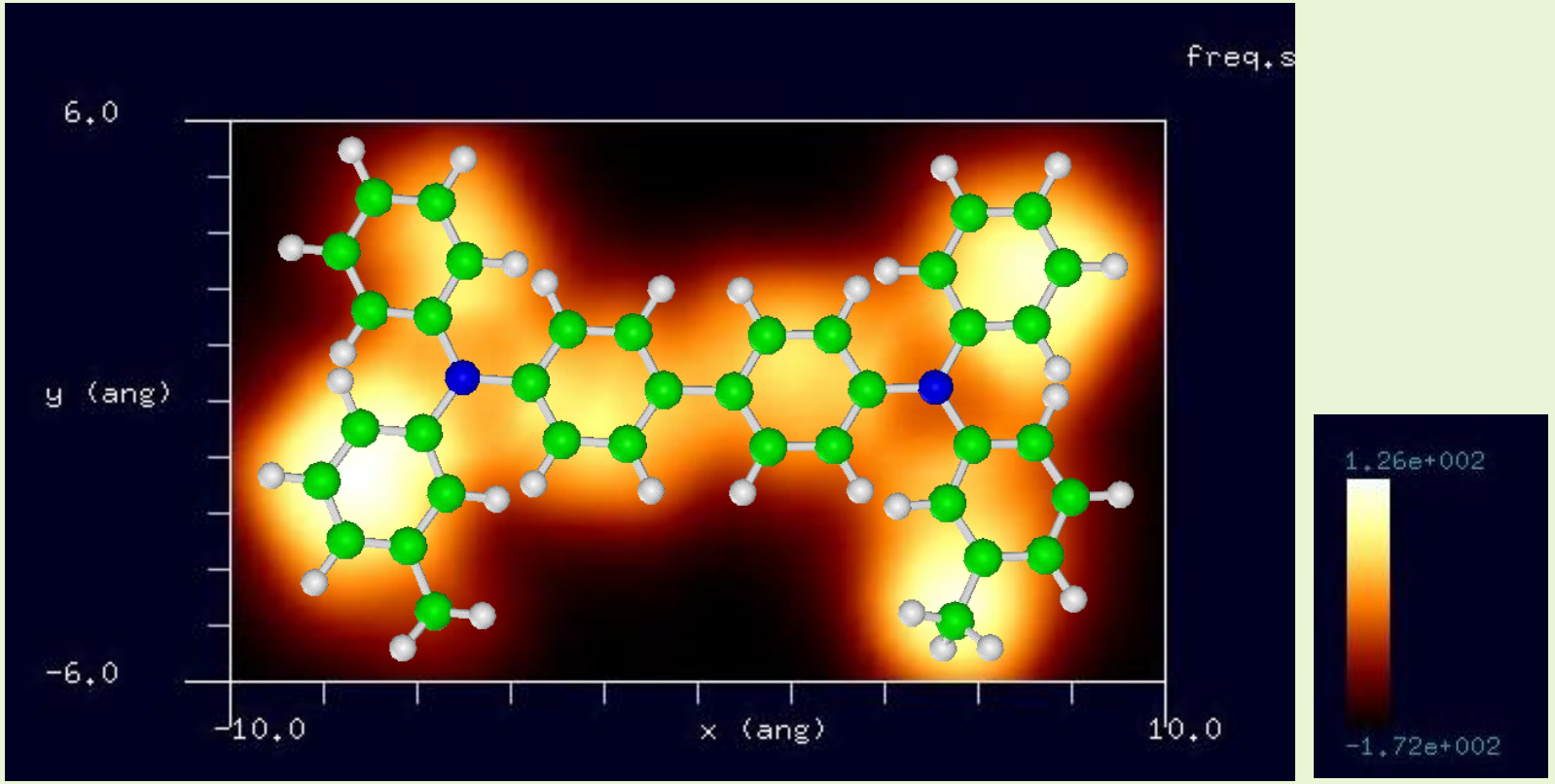
【DFTB】TPD分子のconstant height STM像

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.85 Å
最大電流 3.05×10^{5} nA、最小電流 1.56×10^{1} nA



【DFTB】TPD分子の周波数シフトAFM像

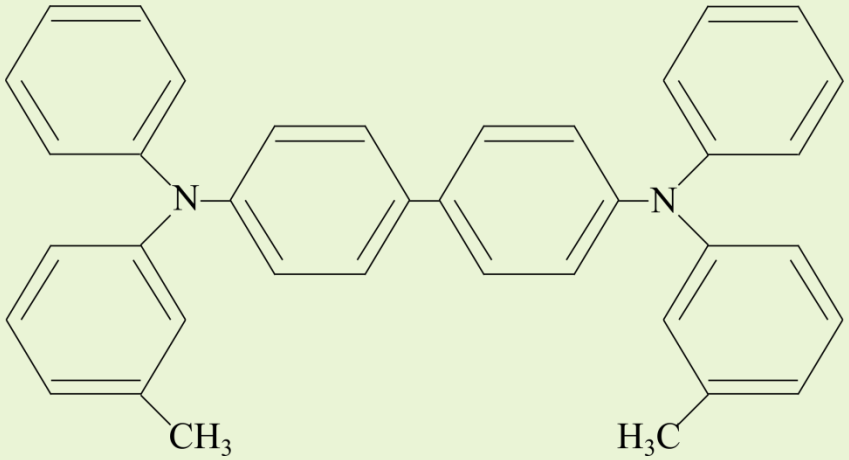
周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.3 Å
周波数のずれは -1.72×10^{2} Hzから 1.26×10^{2} Hz



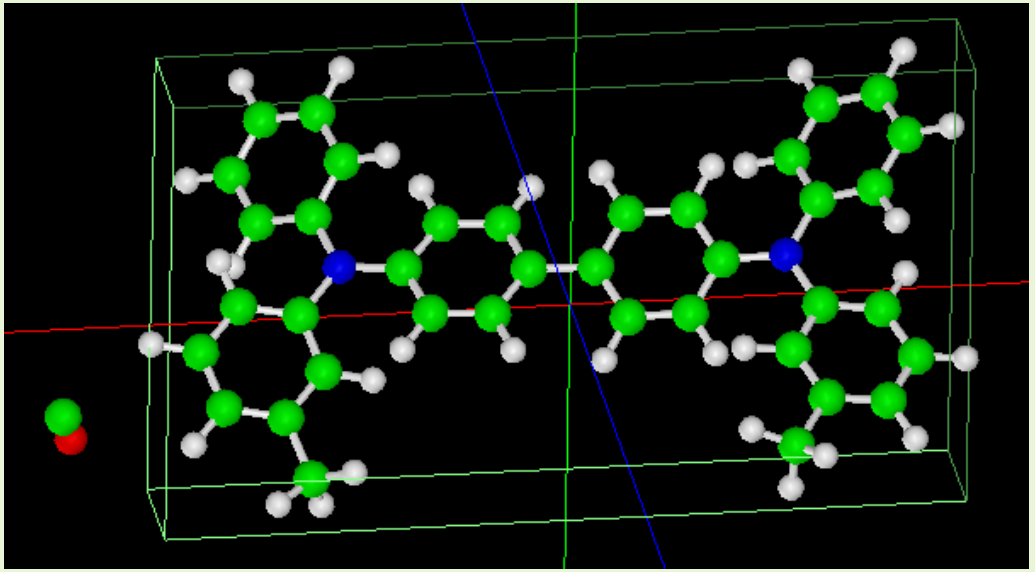
エレクトロニクス

【CG】TPD分子の周波数シフトAFM像

TPD(triphenyldiamine)[有機ELの一種]



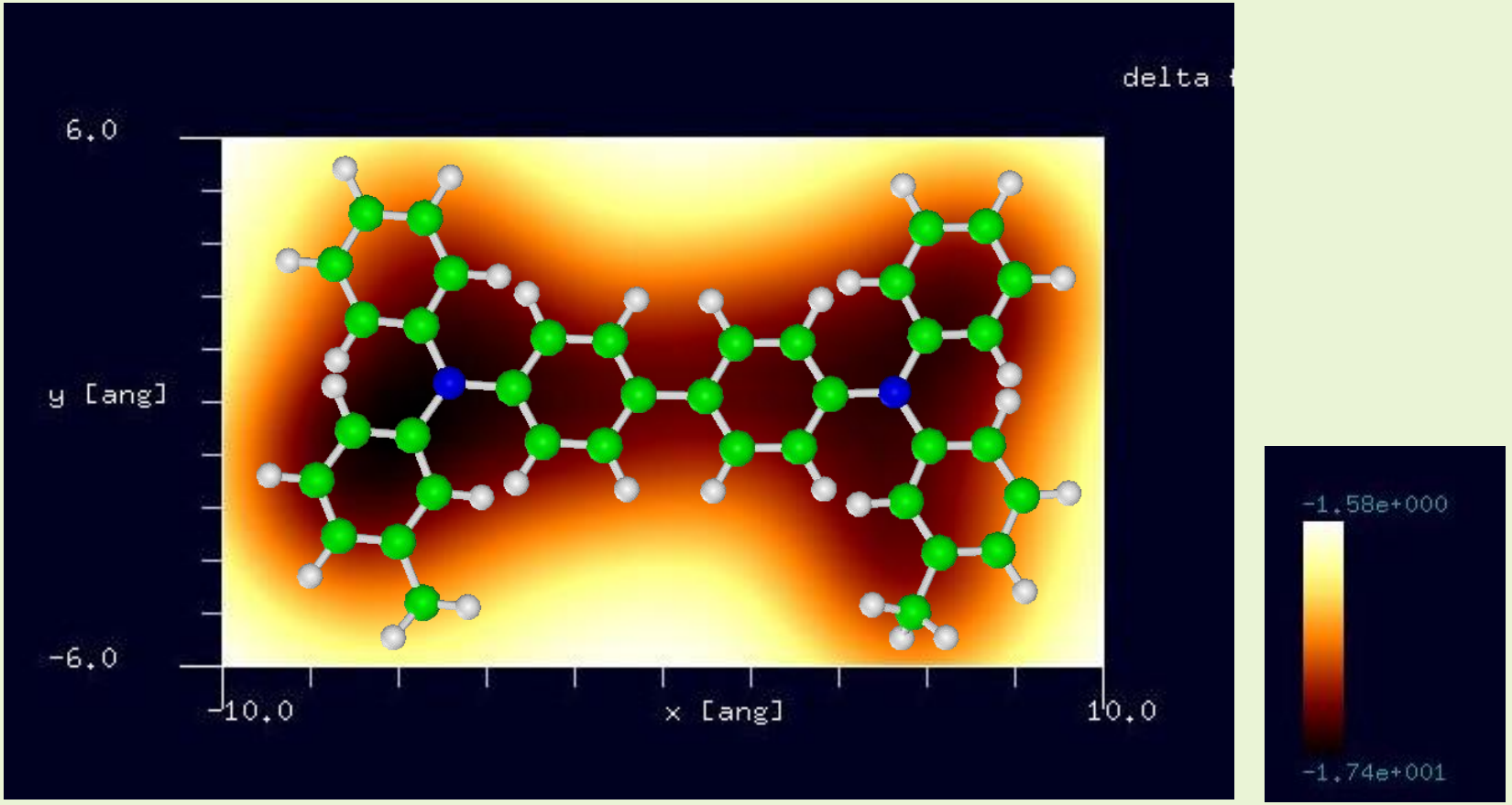
CO探針を使用



エレクトロニクス

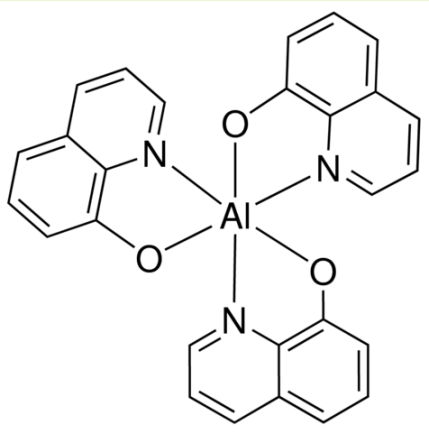
【CG】TPD分子の周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数25kHz, 探針と試料の最短距離4.3 Å
周波数のずれは -1.74×10^{1} Hzから -1.58×10^{0} Hz



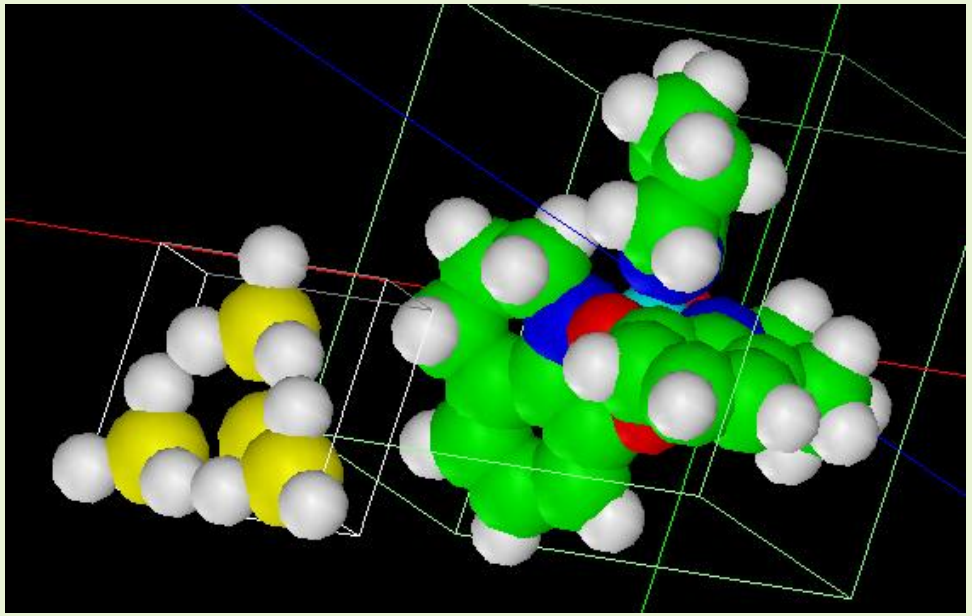
エレクトロニクス

【DFTB】Alq3のSTM像およびAFM像



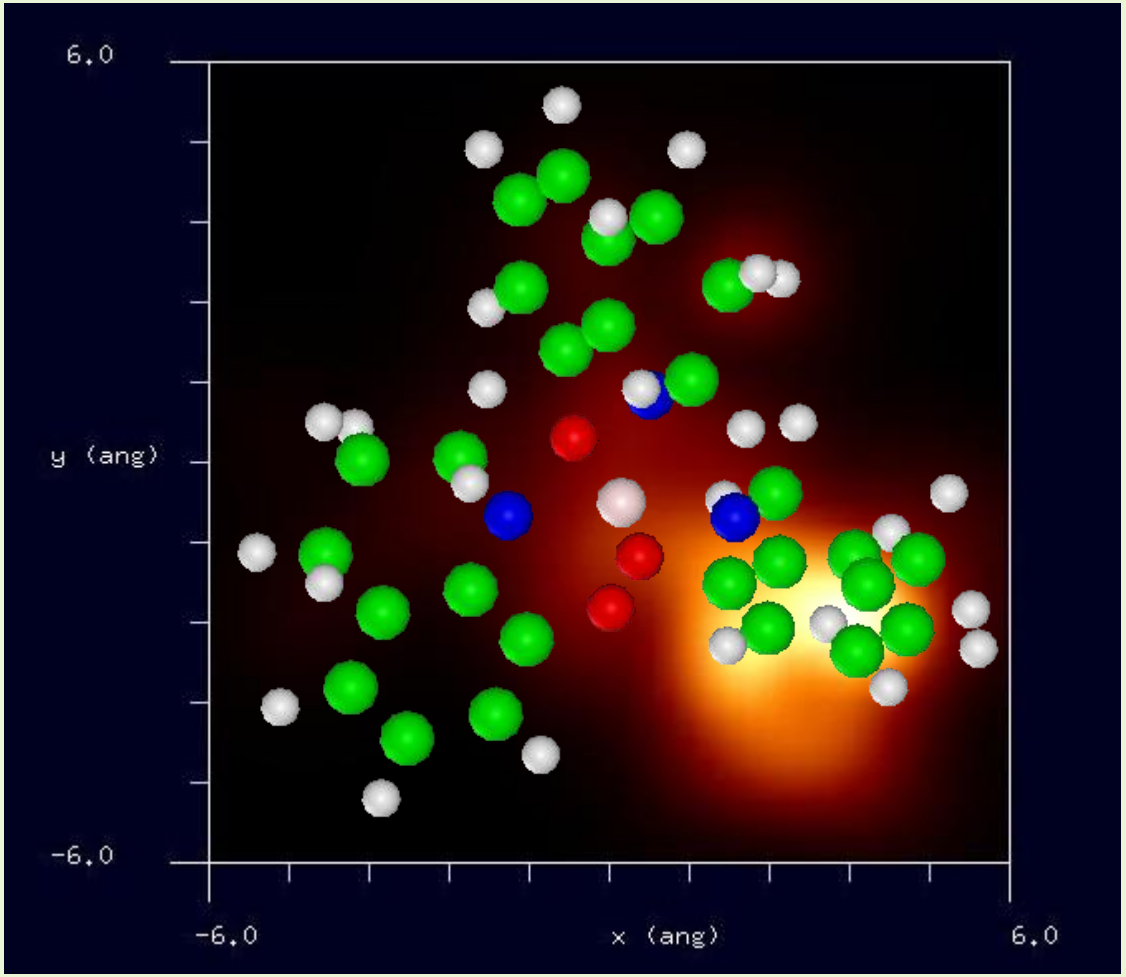
Alq3: トリス(8-ヒドロキシキノリン)アルミニウム[有機ELの一種]

水素終端されたシリコン探針を使用



【DFTB】Alq3のconstant height STM像

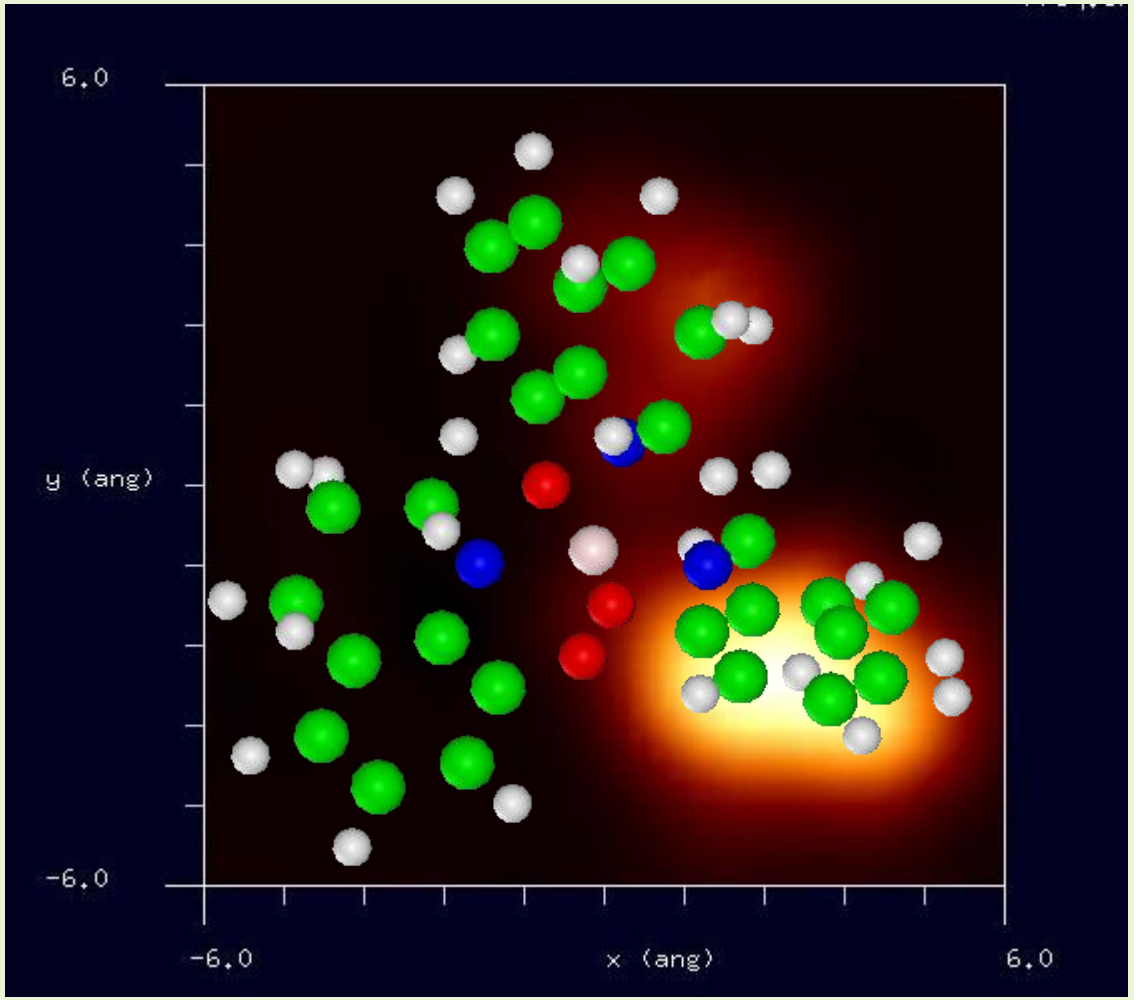
STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.46 Å
最大電流 2.21×10^{5} nA、最小電流 0.00×10^{0} nA





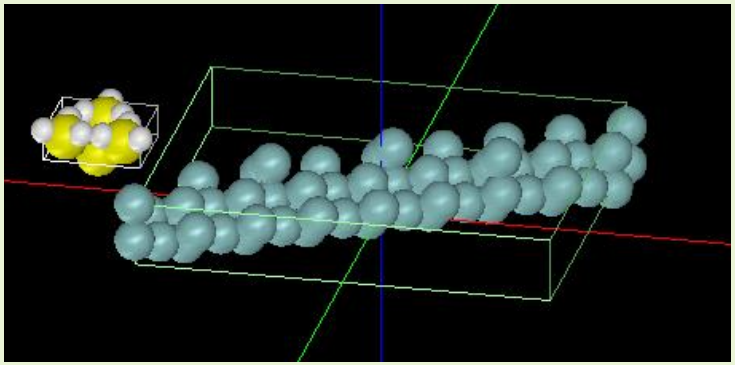
【DFTB】Alq3の周波数シフトAFM像

周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.4 Å
周波数のずれは -1.78×10^{2} Hzから 8.55×10^{1} Hz





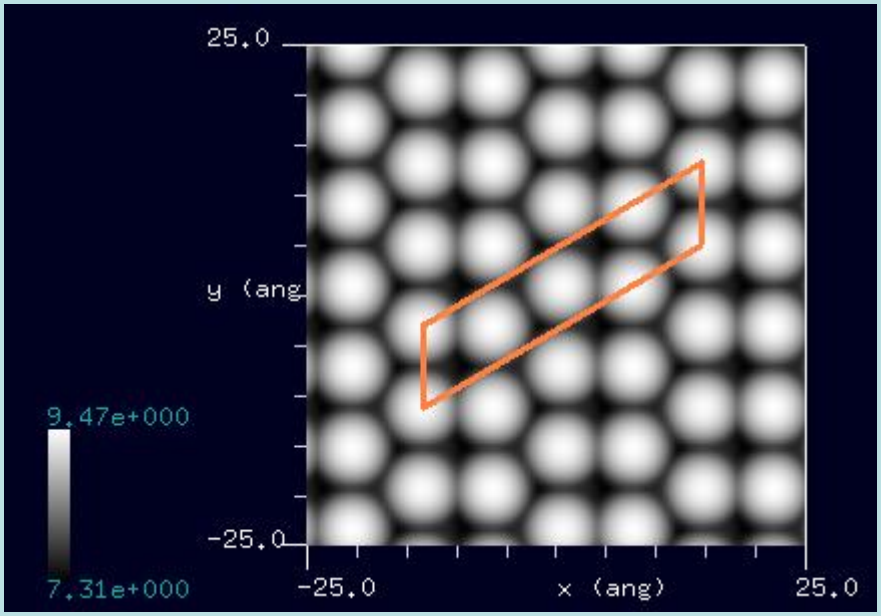
半導体関連トピック　【DFTB】Ge(111)-c(2×8)のconstant current STMシミュレーション



探針: Si_4H_9
試料: Ge(111)-c(2×8).
手法: constant current STM
電流セットポイント: 10 nA
探針バイアス: +0.5 V

constant current STMシミュレート結果

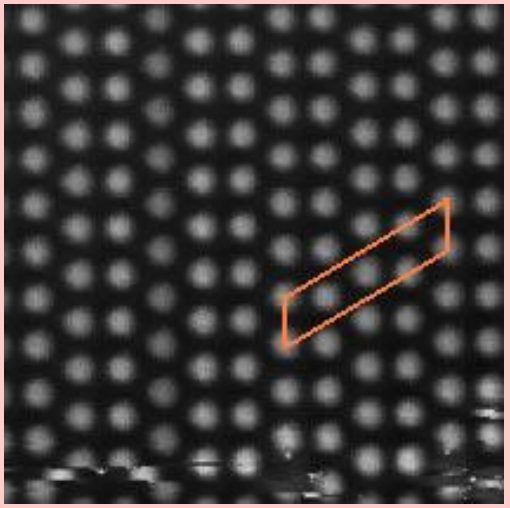
50 Å x 50 Å



cf. Experiment

試料: Ge(111)-c(2×8)
手法: STM
探針バイアス: +0.5V

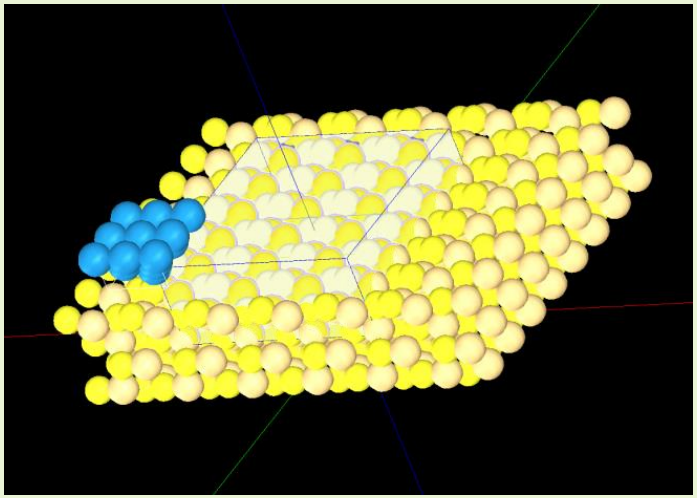
80 Å x 80 Å



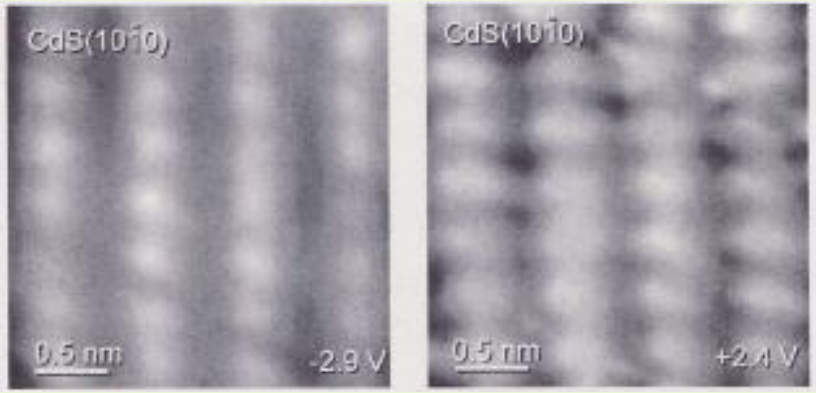
D. Sawada et al., Materials Transactions 50, 940–942 (2009).

半導体関連トピック

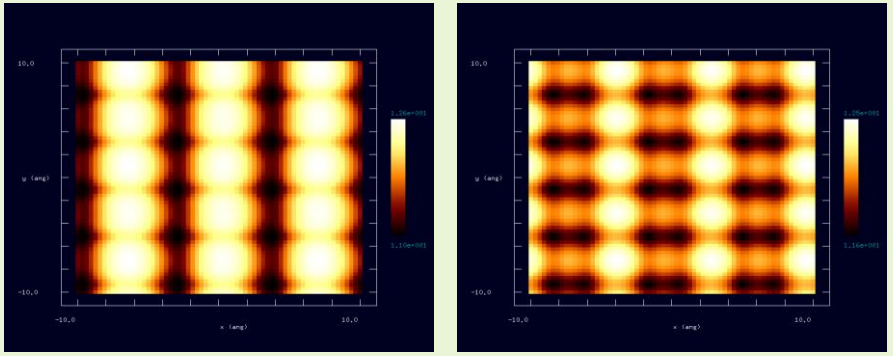
【DFTB】CdS(100)-(1x1) STM



探針: タングステン探針
試料表面: CdS $(10\bar{1}0)$ -(1x1)



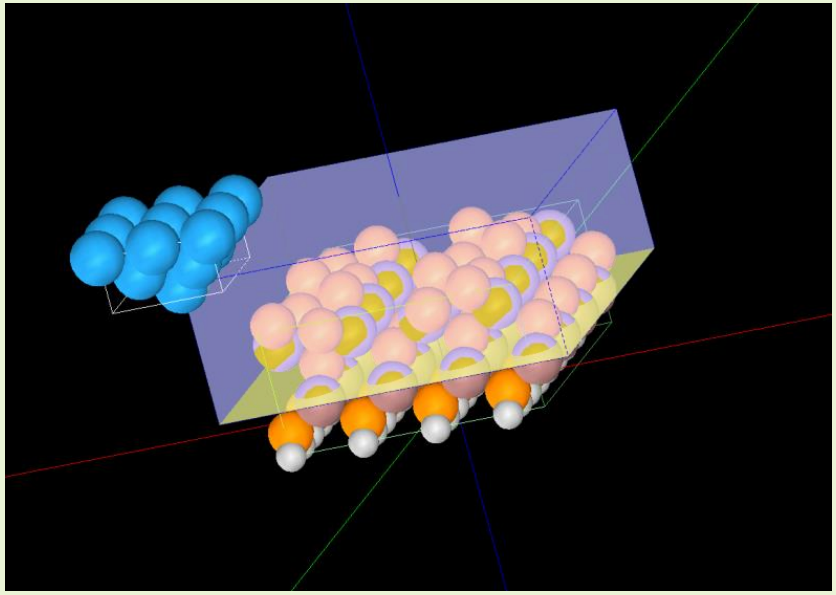
STM実験結果(Phys. Rev. B 56, 12321)
左:占有状態、試料バイアス-2.9V
右:非占有状態、試料バイアス+2.4V



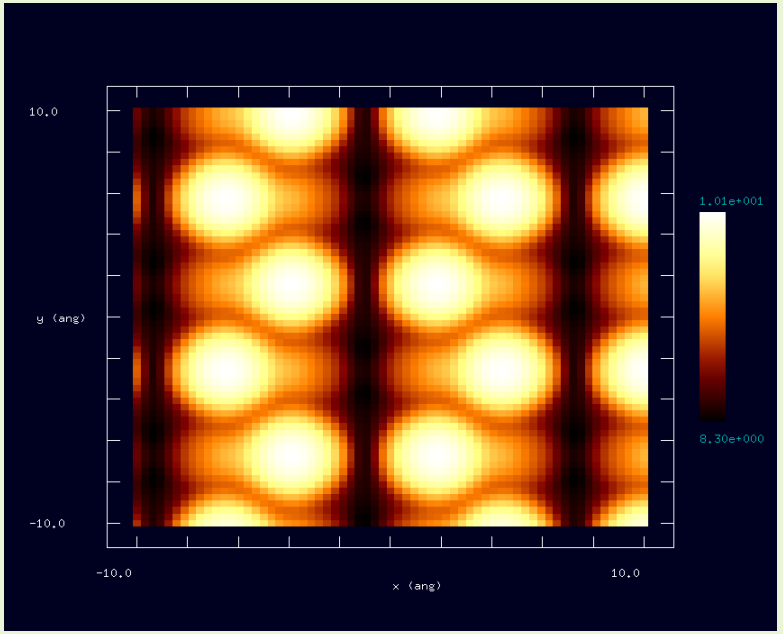
DFTB STM 電流一定像
左:占有状態、探針バイアス2.0V
右:非占有状態、探針バイアス-2.0V

半導体関連トピック

【DFTB】InP(001)-c(4x2) STM



探針: タングステン
試料表面: InP(001)-c(4x2)

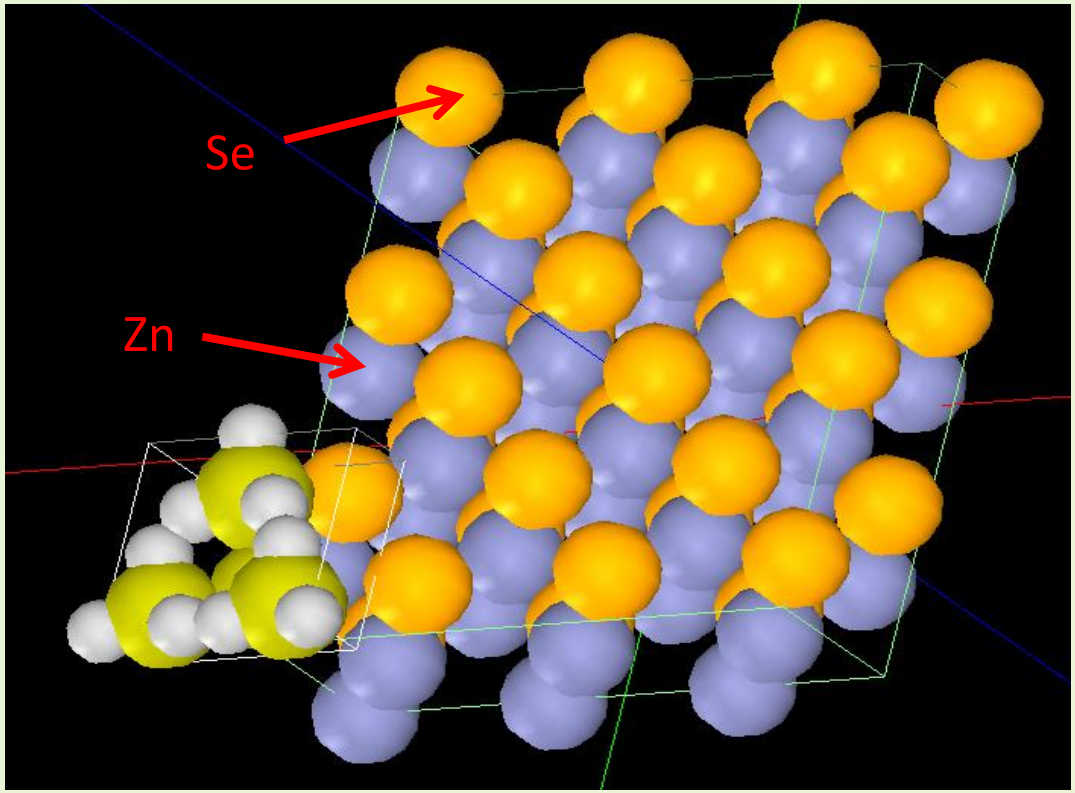


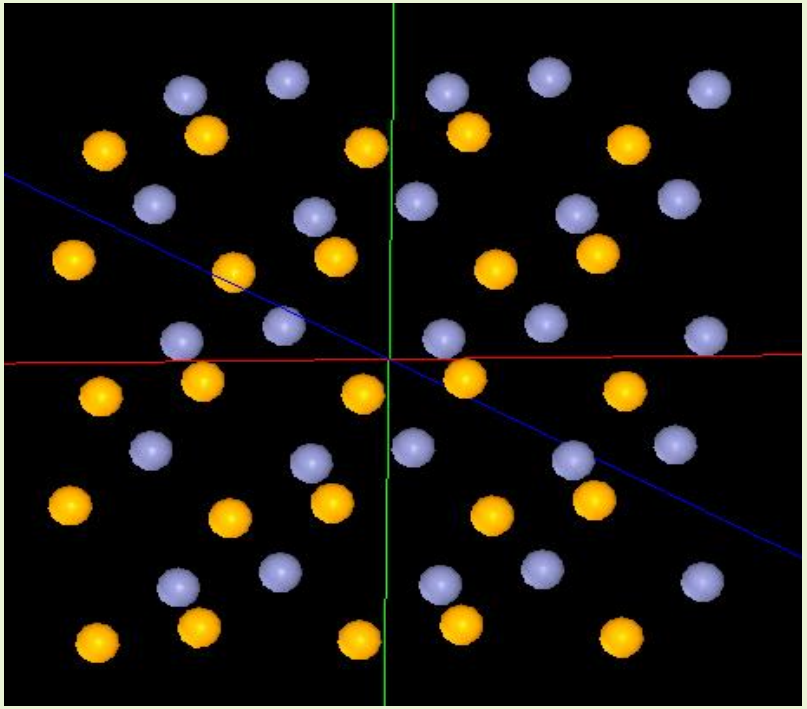
STM コンスタントカレントモード
探針バイアス: 1.5V
電流値: 10000nA

半導体関連トピック

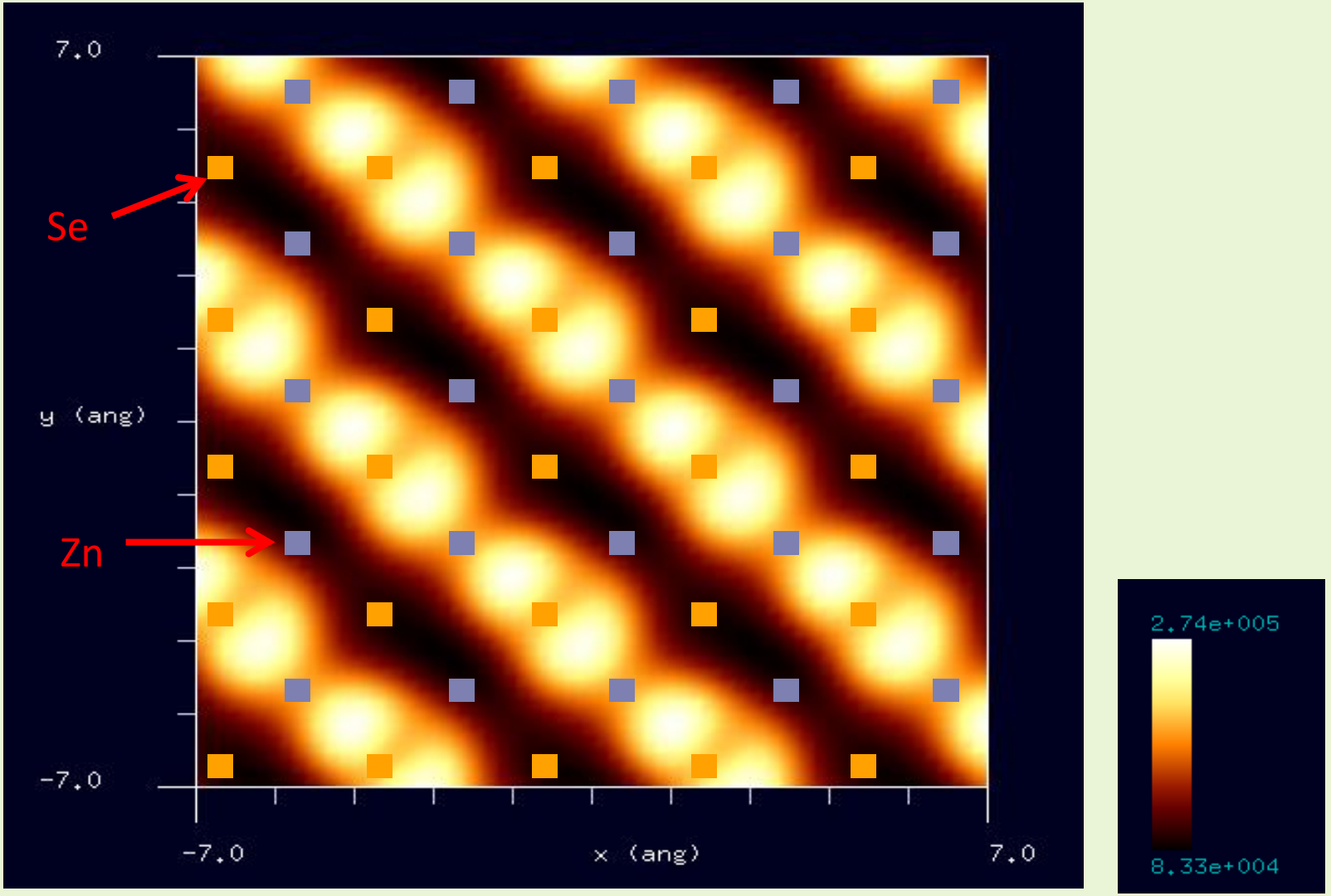
DFTB　ZnSe (セレン化亜鉛　発光ダイオード、半導体レーザーの材料)

水素終端されたシリコン探針を使用
立方晶(空間群番号:216)
(001)面

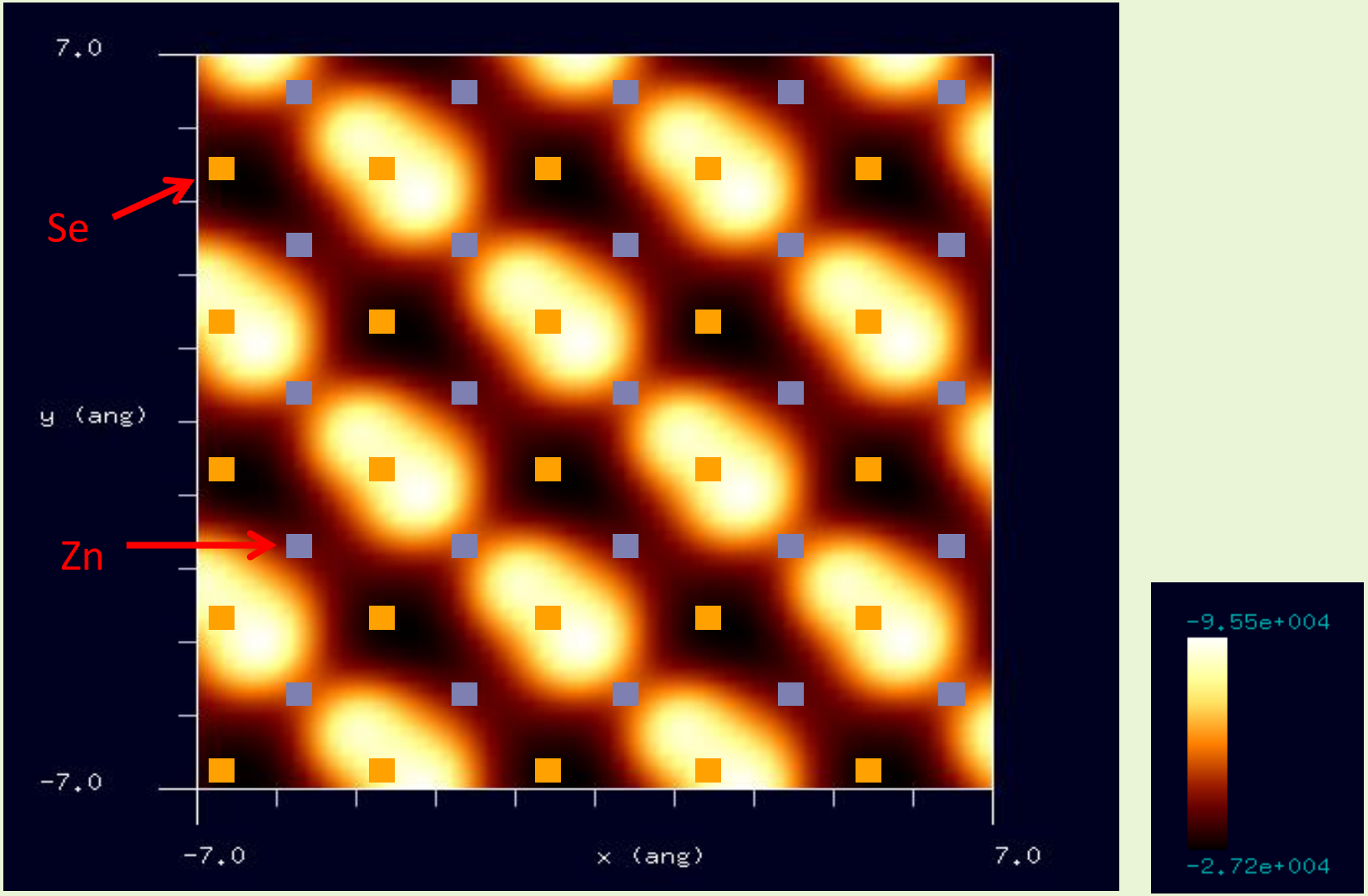




STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.2Å
最大電流 2.74×10^{5}nA、最小電流8.33×10^{4} nA



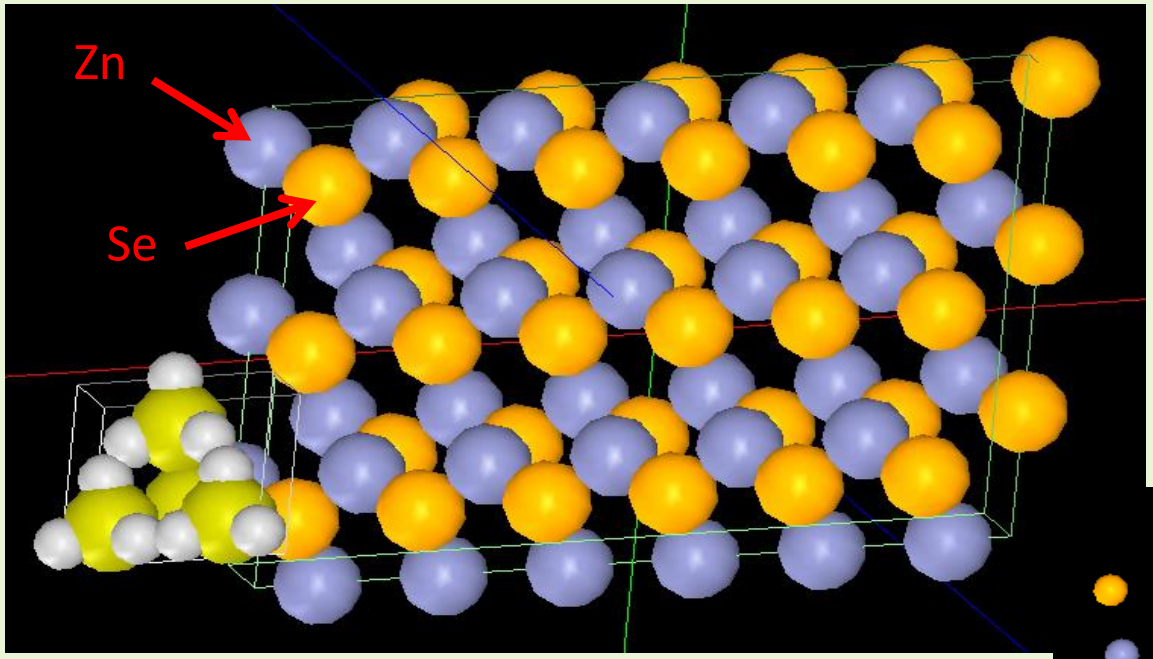
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.2Å
最大電流 -2.72×10^{4} nA、最小電流 -9.55×10^{4} nA

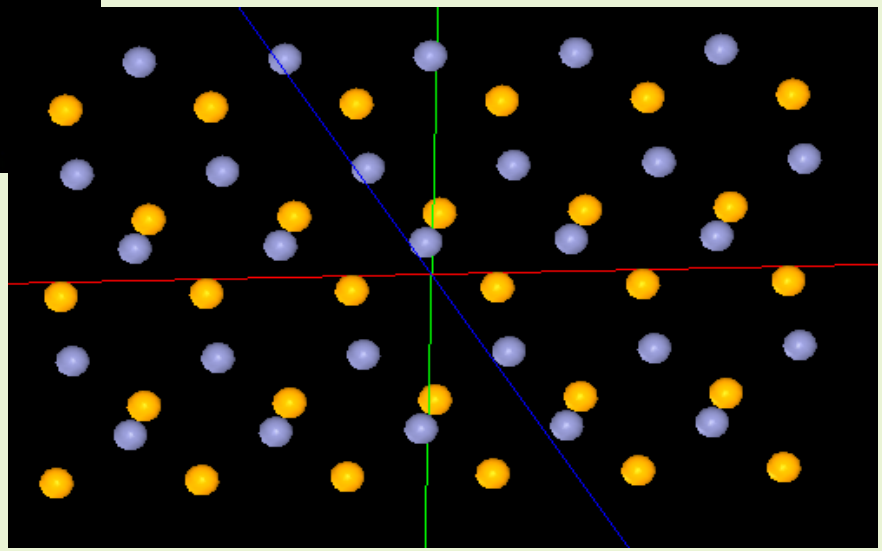


DFTB

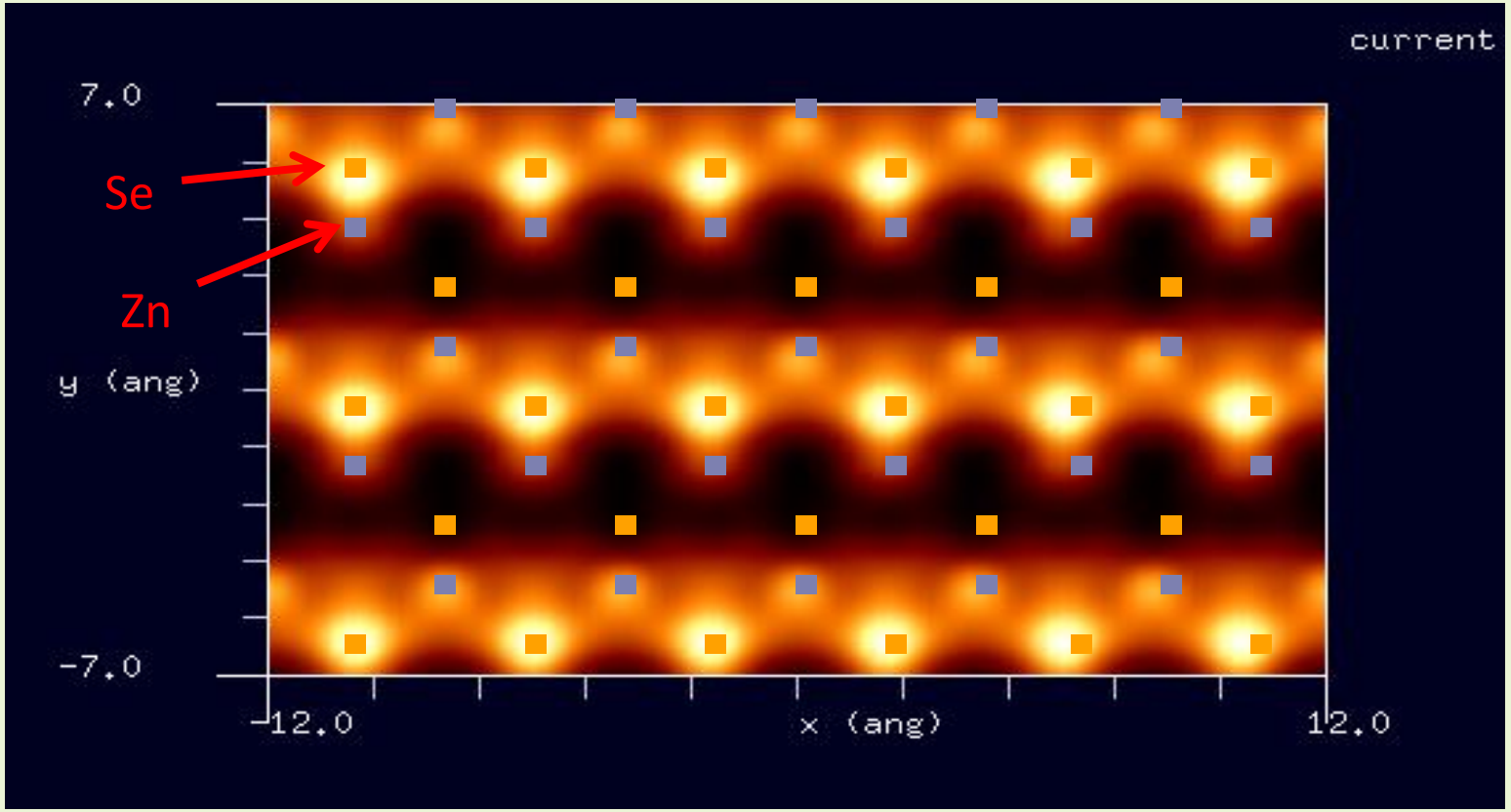
ZnSe(セレン化亜鉛　発光ダイオード、半導体レーザーの材料)

水素終端されたシリコン探針を使用
立方晶(空間群番号:216)
(110)面

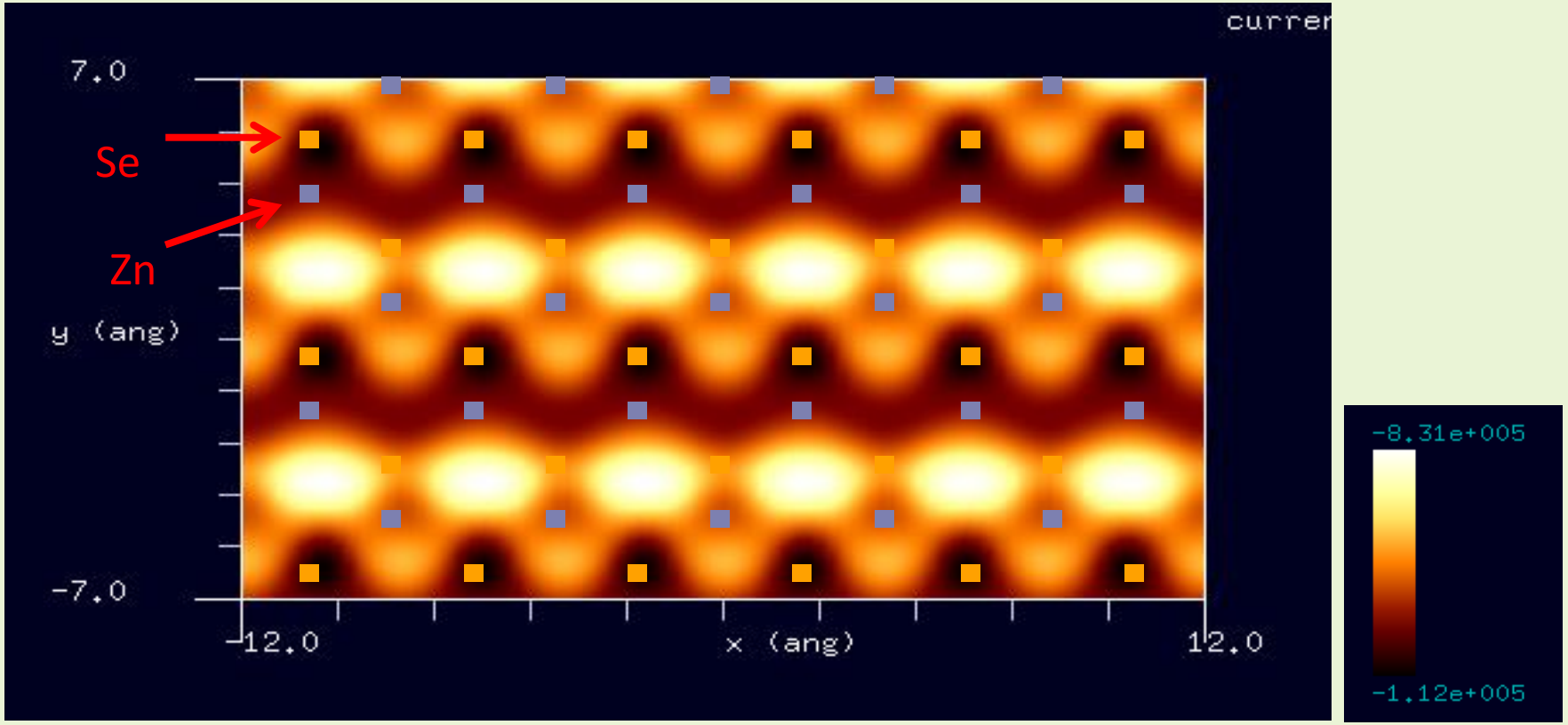




STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.99Å
最大電流 7.27×10^{5}nA、最小電流2.71×10^{5} nA



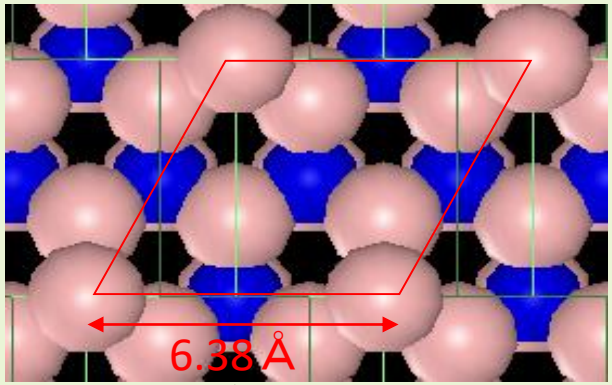
STM画像: 印加電圧-4V, 探針と試料の最短距離0.99Å
最大電流 -1.12×10^{5} nA、最小電流 -8.31×10^{5} nA



半導体関連トピック

【DFTB】GaNの結晶面のSTMシミュレーション

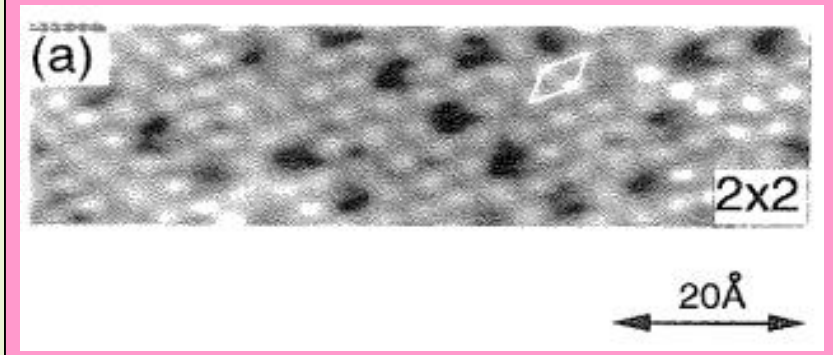
GaN(0001)の2×2再構成



試料のモデル（赤枠は単位格子）

探針：Si_4H_9
試料：GaN
スキャンエリア：20Å×12Å
スキャンモード：constant current STM
探針バイアス：+1.0[V]
電流値：2400[nA]

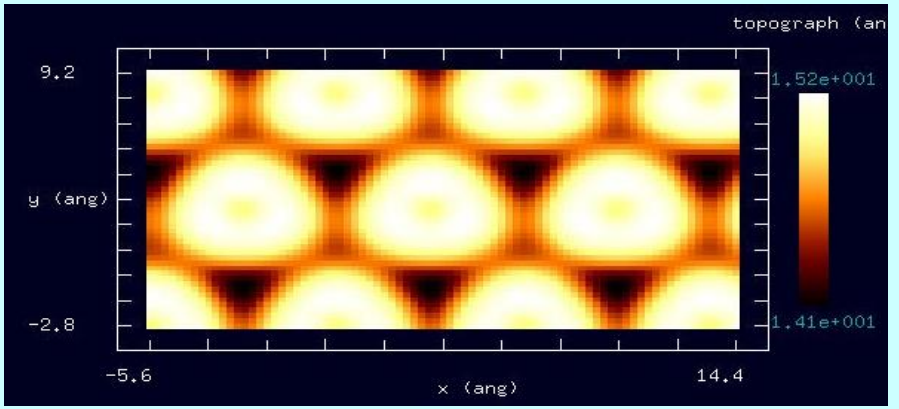
実測画像



サンプル電圧：-3.0[V]

表面科学Vol.21, No3, pp.134-141,2000

constant current STMシミュレーション

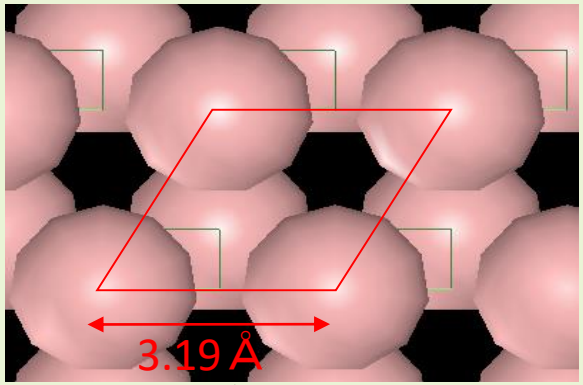


20Å

半導体関連トピック

【DFTB】GaNの結晶面のSTMシミュレーション

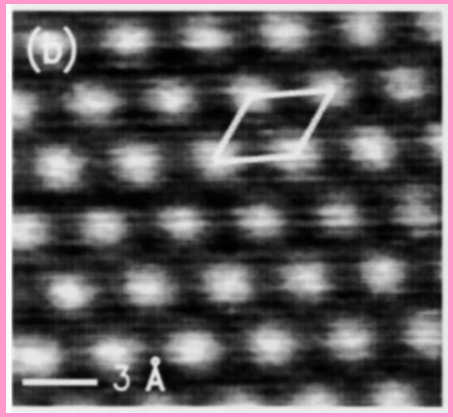
GaN$(000\bar{1})$の1×1再構成



試料のモデル（赤枠は単位格子）

探針：Si_4H_9
試料：GaN
スキャンエリア：10 Å ×6 Å
スキャンモード：constant current STM
探針バイアス：+1.0[V]
電流値：8500[nA]

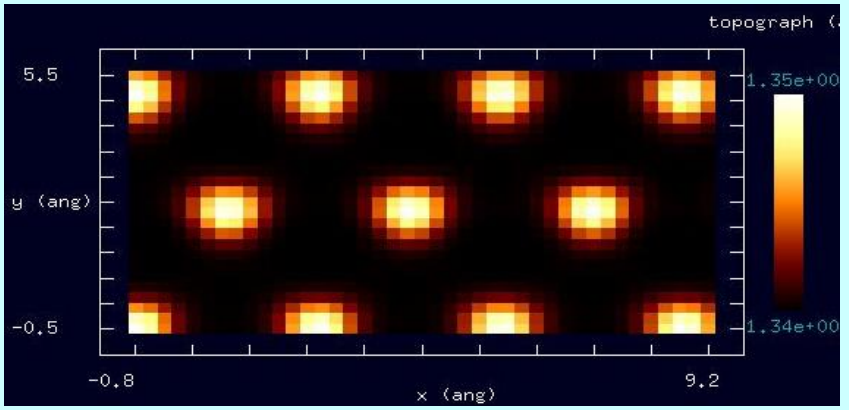
実測画像



試料バイアス電圧：
-0.75[V]
電流値：
0.03~0.11[nA]

PHYSICAL REVIEW LETTERS VOLUME 79, NUMBER 20 17 NOVEMBER 1997

constant current STMシミュレーション



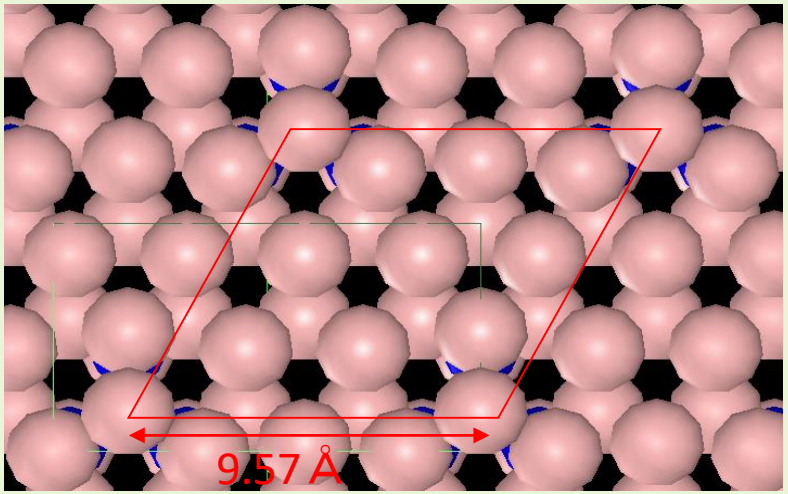
10 Å

画像はコントラスト調整後

半導体関連トピック

【DFTB】GaNの結晶面のSTMシミュレーション

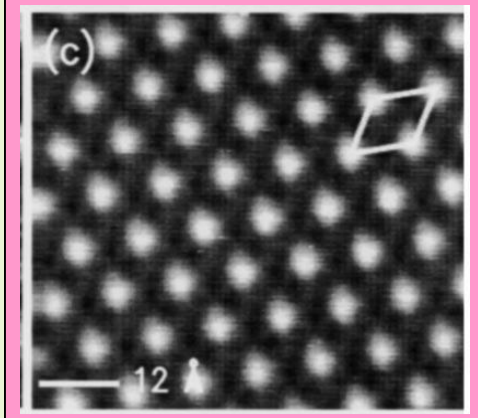
$GaN(000\bar{1})$の3×3再構成



試料のモデル（赤枠は単位格子）

探針：Si_4H_9
試料：GaN
スキャンエリア：20 Å × 15 Å
スキャンモード：constant current STM
探針バイアス：+1.0[V]
電流値：800[nA]

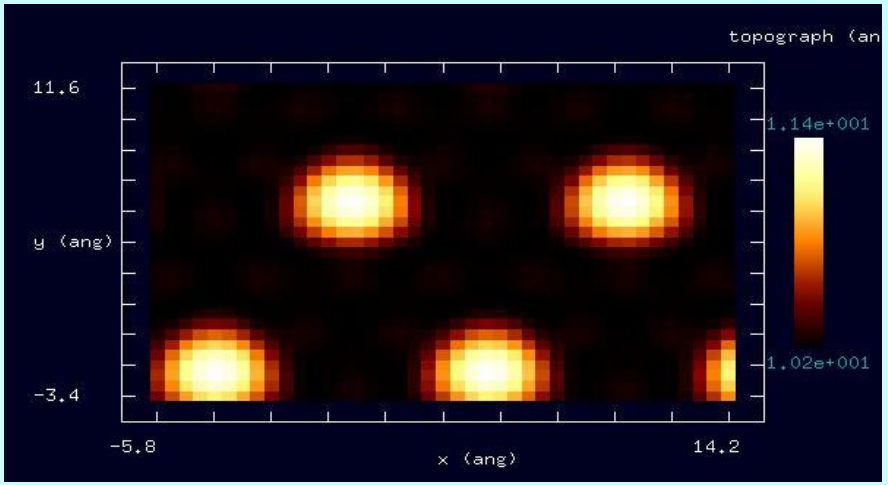
実測画像



試料バイアス電圧：
-0.1[V]
電流値：
0.03~0.11[nA]

PHYSICAL REVIEW LETTERS VOLUME 79, NUMBER 20 17 NOVEMBER 1997

constant current STMシミュレーション

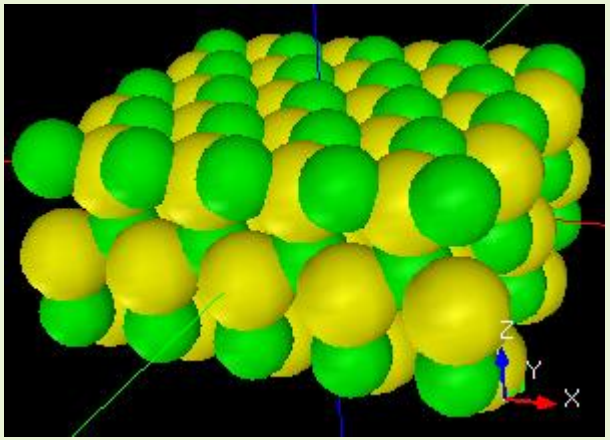


画像はコントラスト調整後

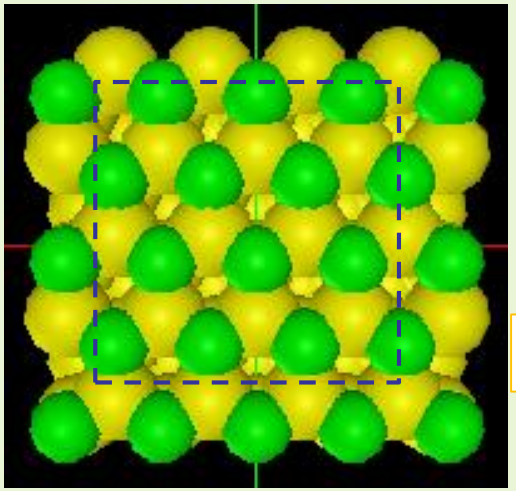
半導体関連トピック

【DFTB】4H-SiC (0001) 表面の constant current STM像シミュレーション

4H-SiC (0001) 表面の構造



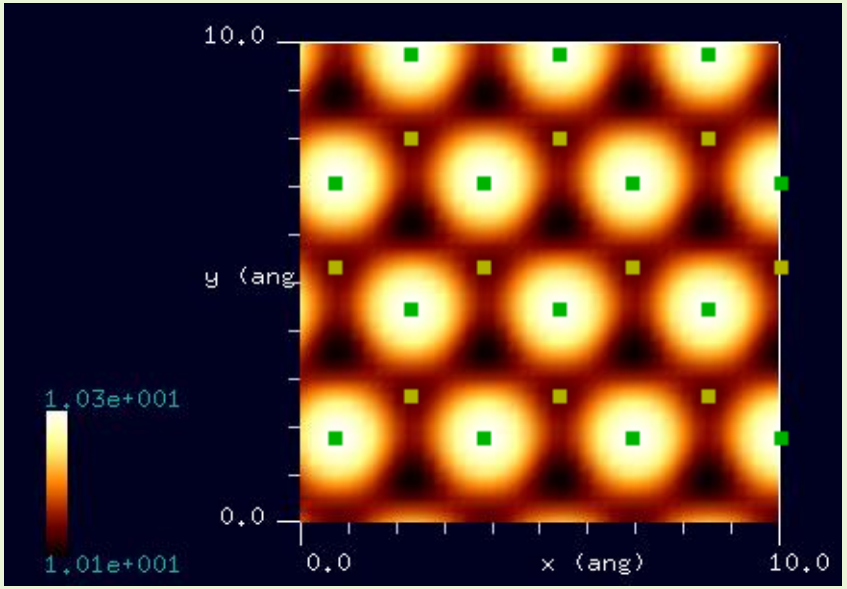
緑＝炭素原子。黄＝Si原子。



Scan area

探針: Si_4H_9
試料: 4H-SiC (0001)
手法: constant current STM
電流セットポイント: 10 nA
探針バイアス: +1.0 V

探針高さ
高
低



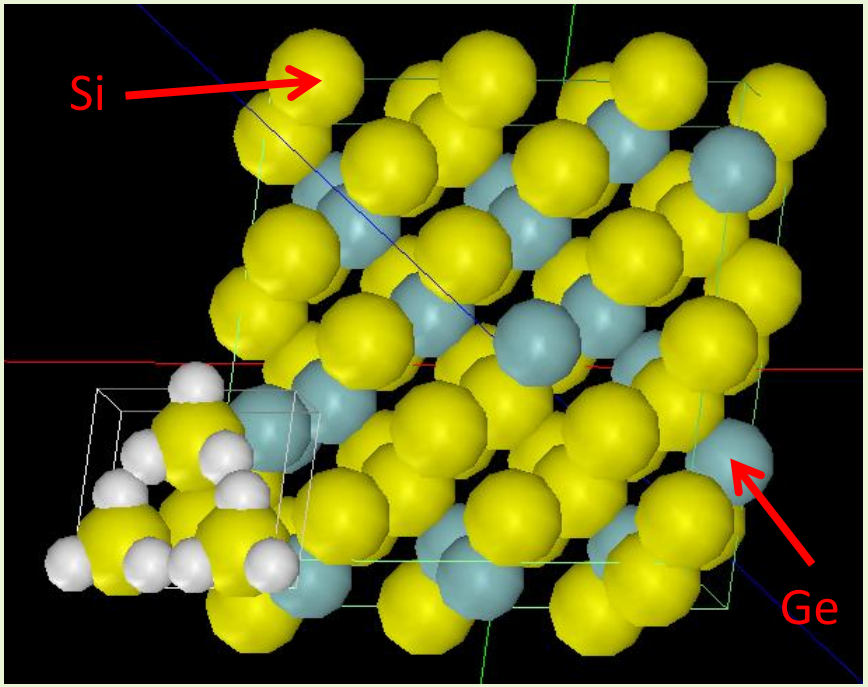
半導体関連トピック

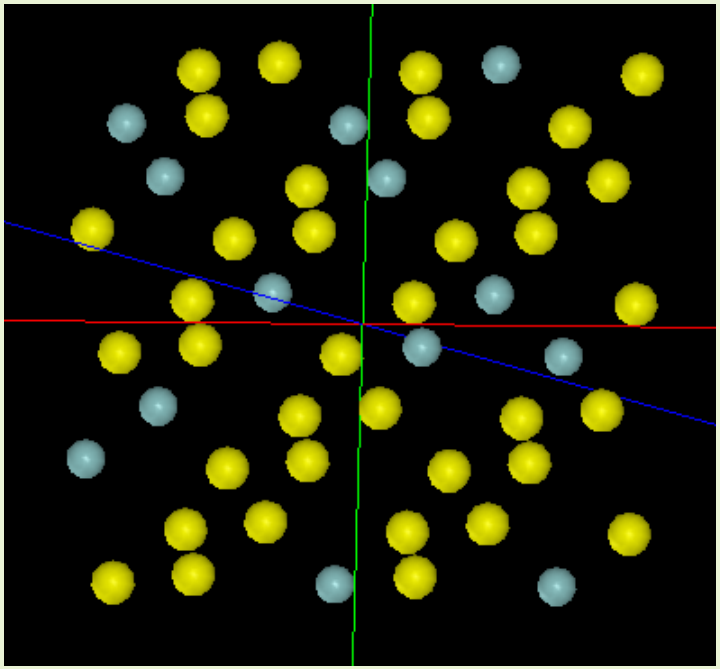
DFTB　SiGe (トランジスタの材料)

水素終端されたシリコン探針を使用

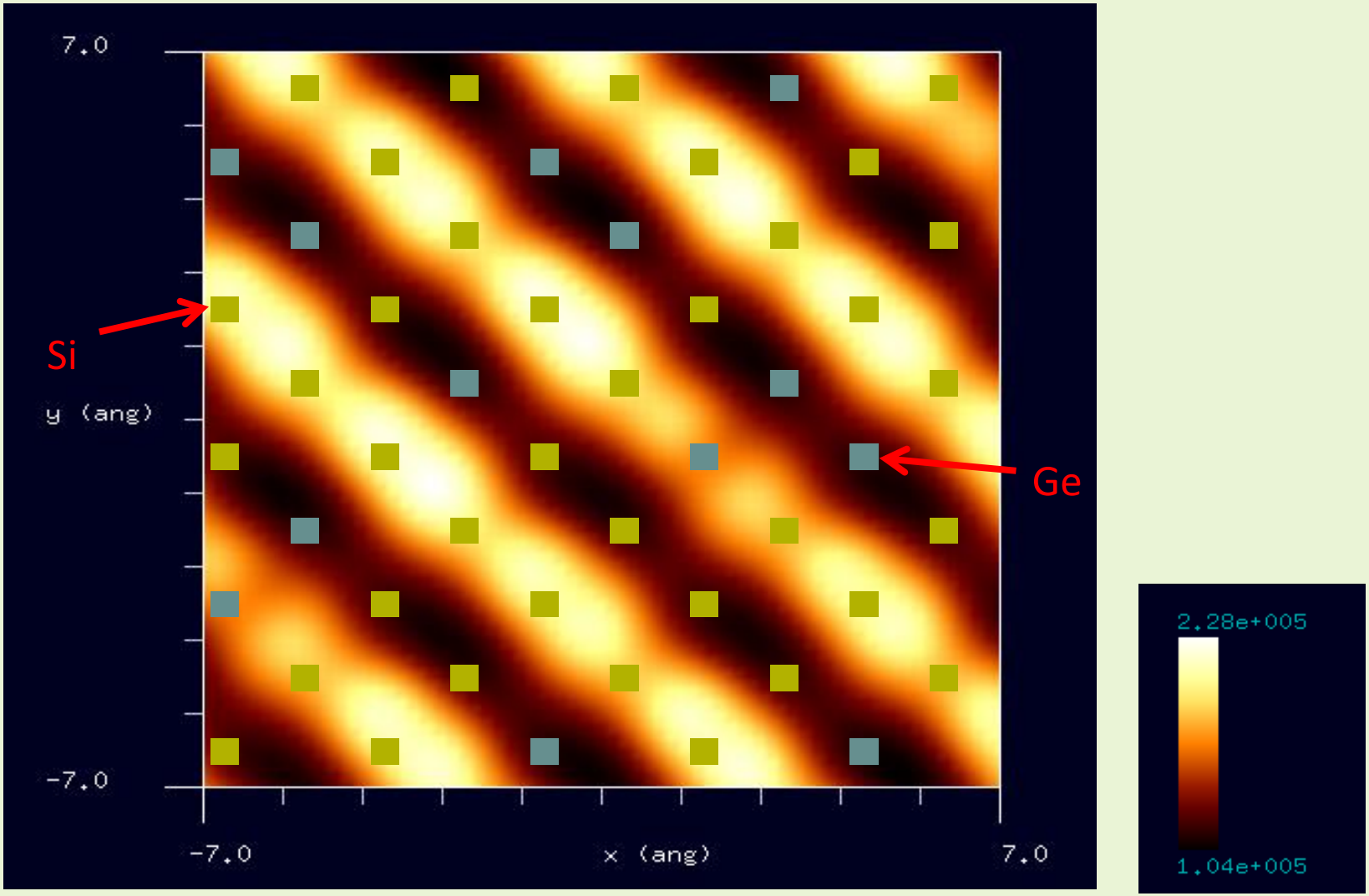
$Si_{0.75}Ge_{0.25}$

立方晶(空間群番号:227)
(001)面
Si結晶中のSi原子をランダムにGeと置き換えたもの

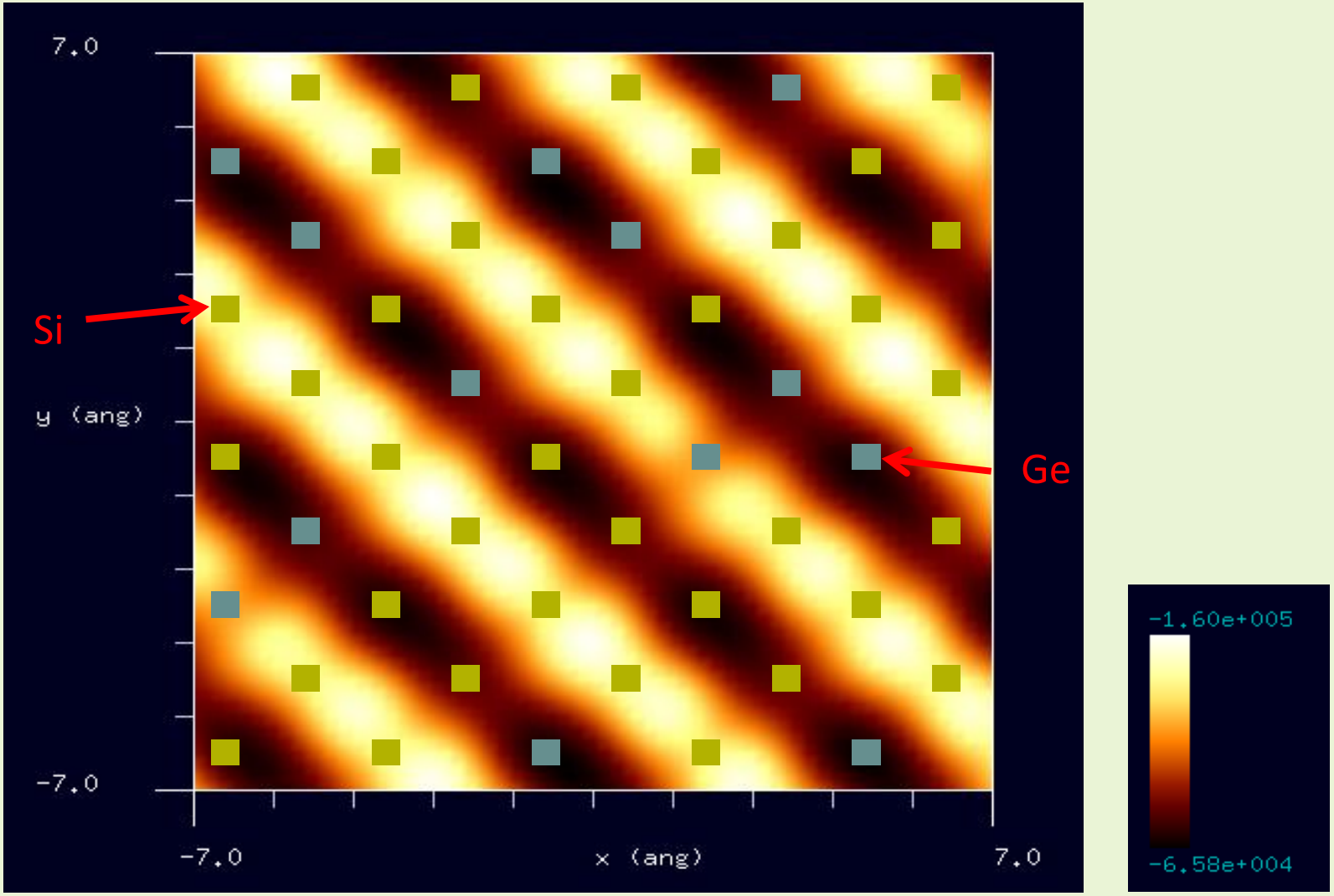




STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.5Å
最大電流 2.28×10^{5}nA、最小電流1.04×10^{5} nA

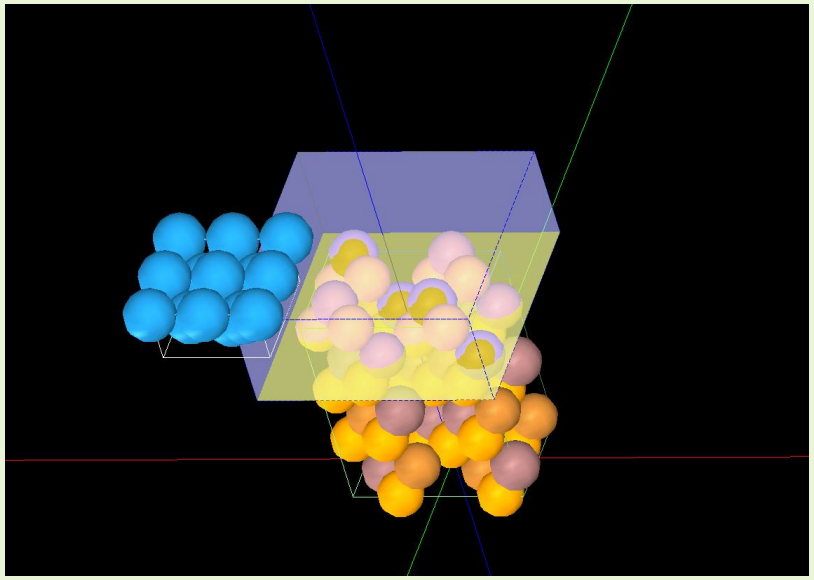


STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.5Å
最大電流 -6.58×10^{4} nA、最小電流 -1.60×10^{5} nA

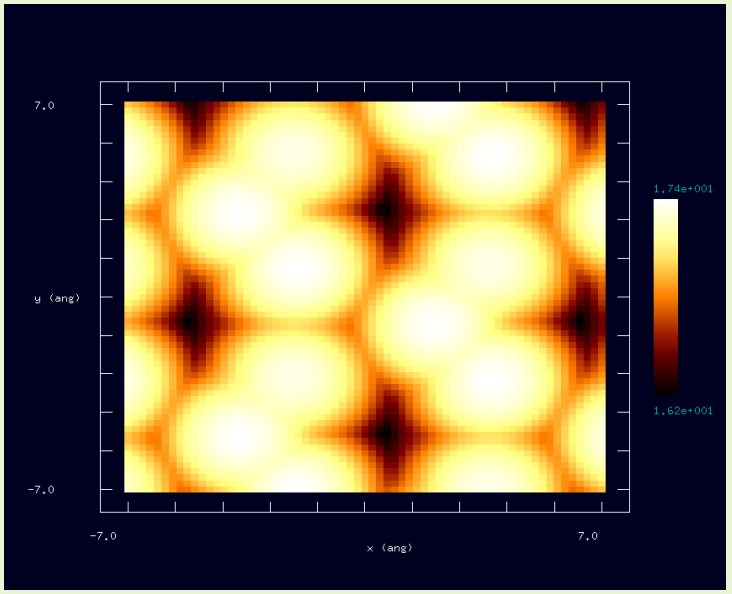


半導体関連トピック

【DFTB】CuInSe2(001) STM

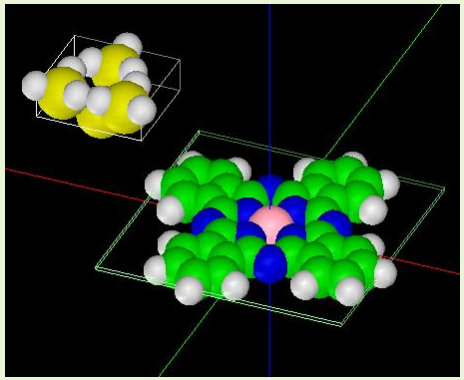


探針: タングステン
試料表面:CuInSe2(001)

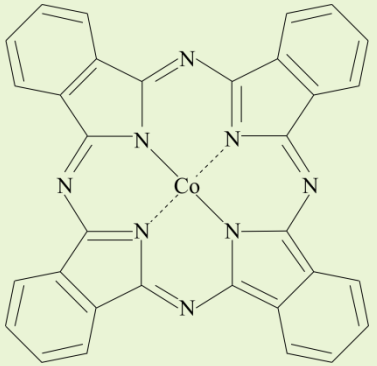


STM コンスタントカレントモード
探針バイアス: 1.0V
電流値: 1.0nA

有機半導体 【DFTB】フタロシアニンコバルトのSTMシミュレーション

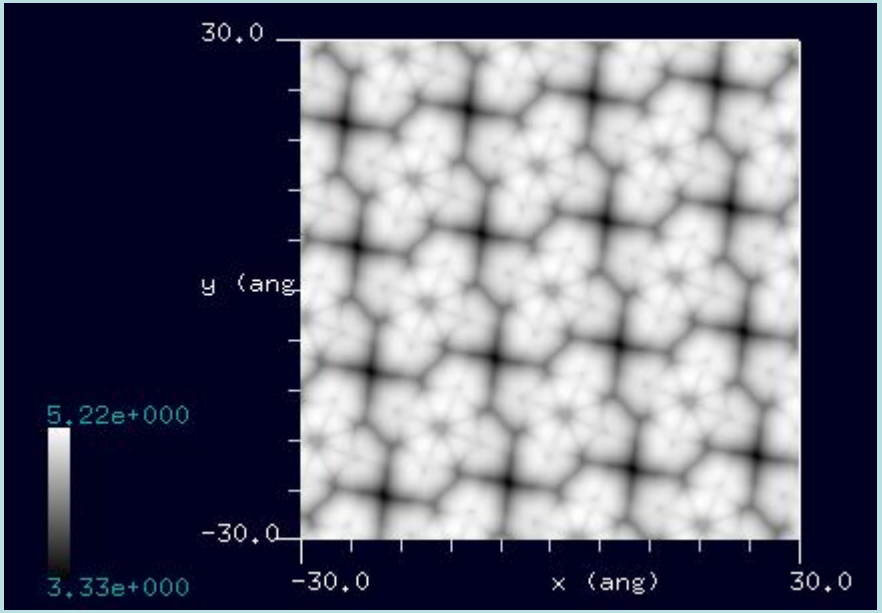


探針: Si_4H_9
試料: CoPc, $C_{32}H_{16}CoN_8$.
　　基板は無視
手法: constant current STM
電流セットポイント: 0.1 nA
探針バイアス: +2.0 V



constant current STMシミュレート結果

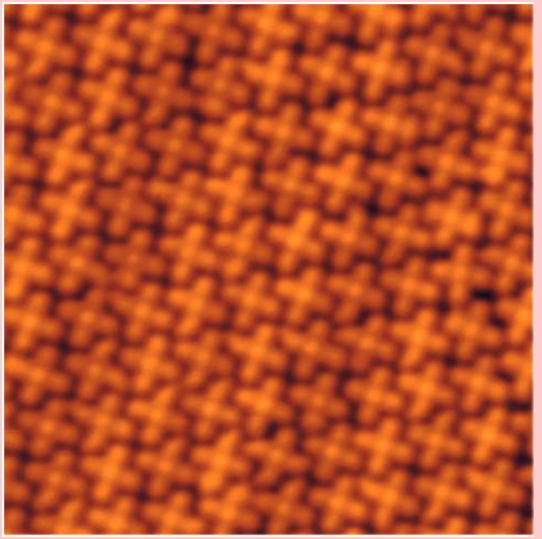
60 Å x 60 Å



cf. Experiment

試料: CoPc on Au (111)
手法: STM

150 Å x 150 Å



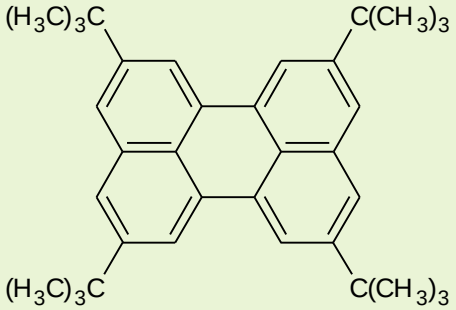
多田博一, 応用物理 76, 1284–1287 (2007).

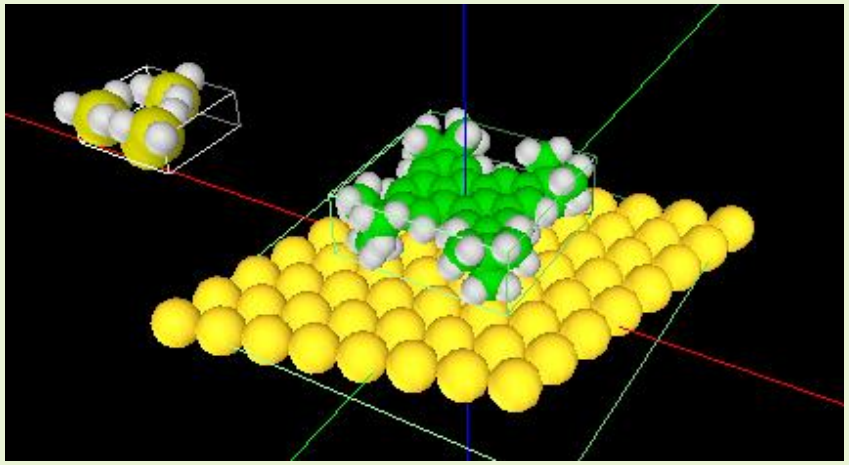
有機半導体

【DFTB】2,5,8,11-テトラ-tert-ブチルペリレンのconstant current STM像

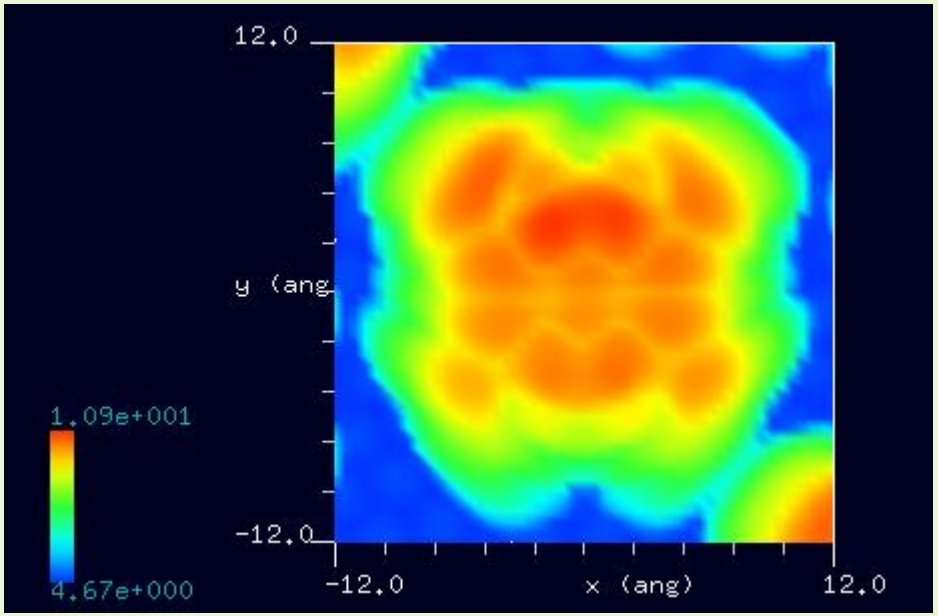
シミュレートモデル

探針: Si_4H_9探針
試料: Au(111)面上のTBP分子
スキャンエリア: 24 Å x 24 Å
スキャンモード: Constant current STM
探針バイアス: -1.0 V
電流値: 1.0 nA



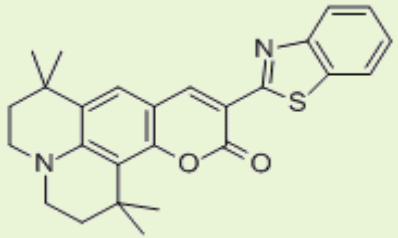


計算結果

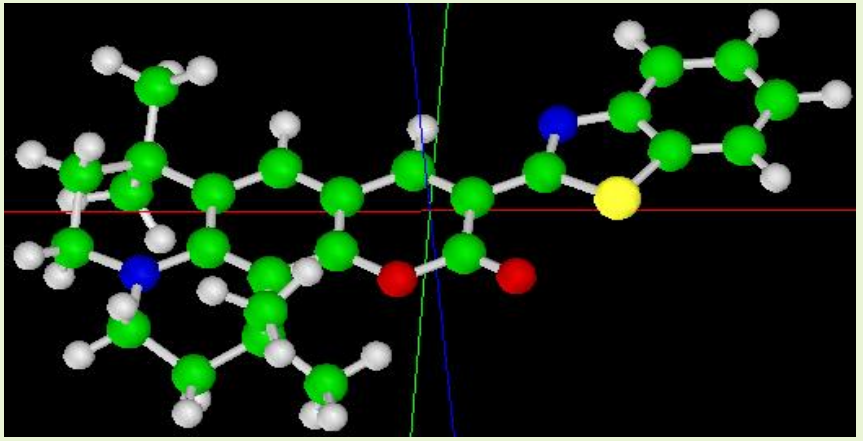


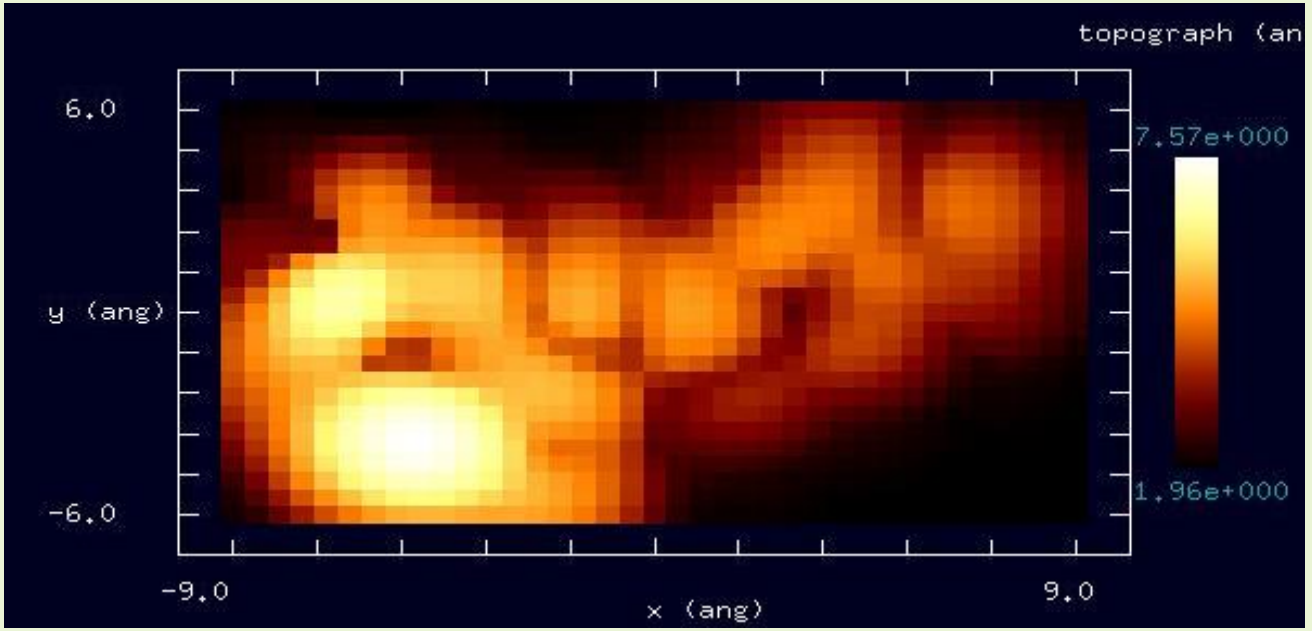
有機半導体

【DFTB】C545TのSTM像



探針：Si_4H_9
試料：クマリン545T
スキャンエリア：18 Å ×12 Å
スキャンモード：constant current STM
探針バイアス：+1.0[V]
電流値：10[nA]



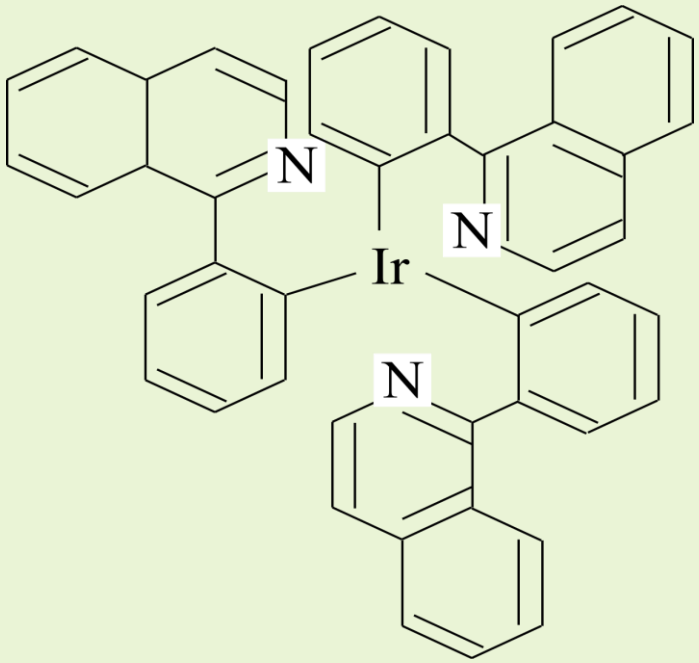


画像はコントラスト調整後

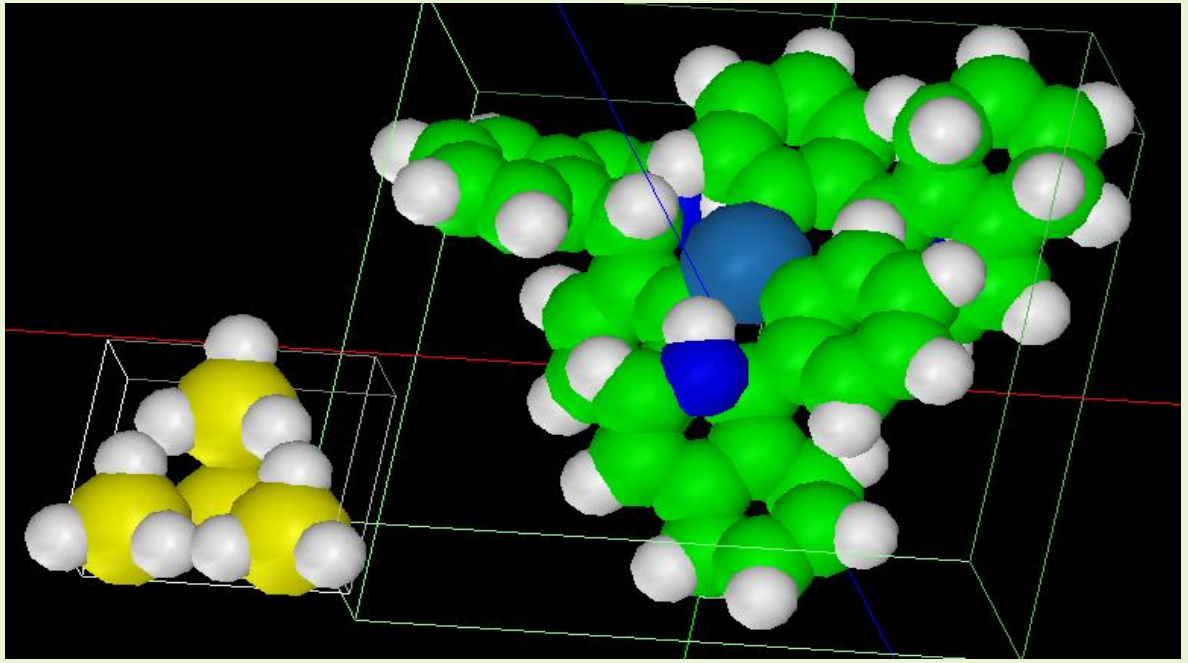
有機半導体

DFTB

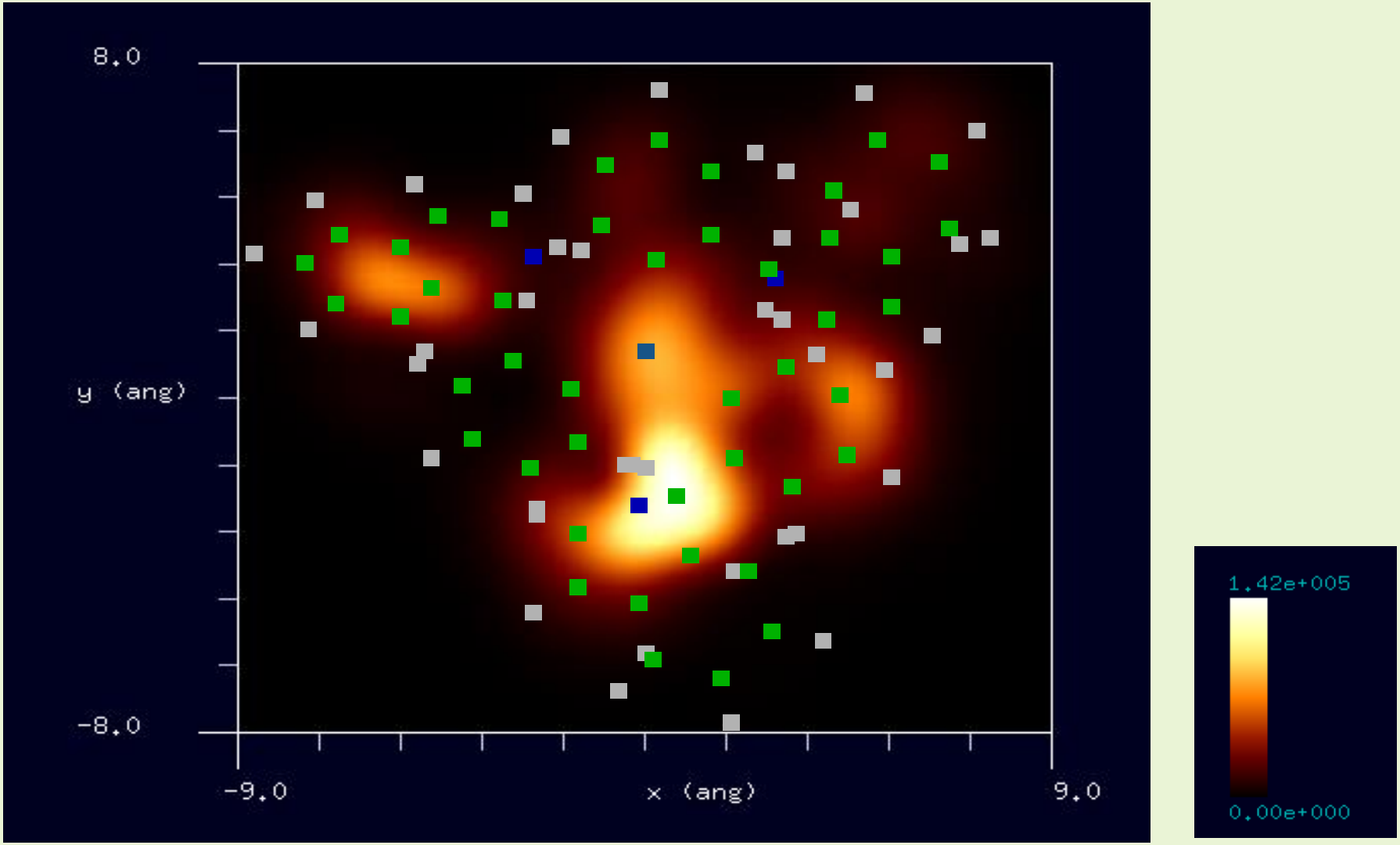
Ir(piq)3[トリス[1-フェニルイソキノリン-C2,N]イリジウム(III)]　有機半導体の一種



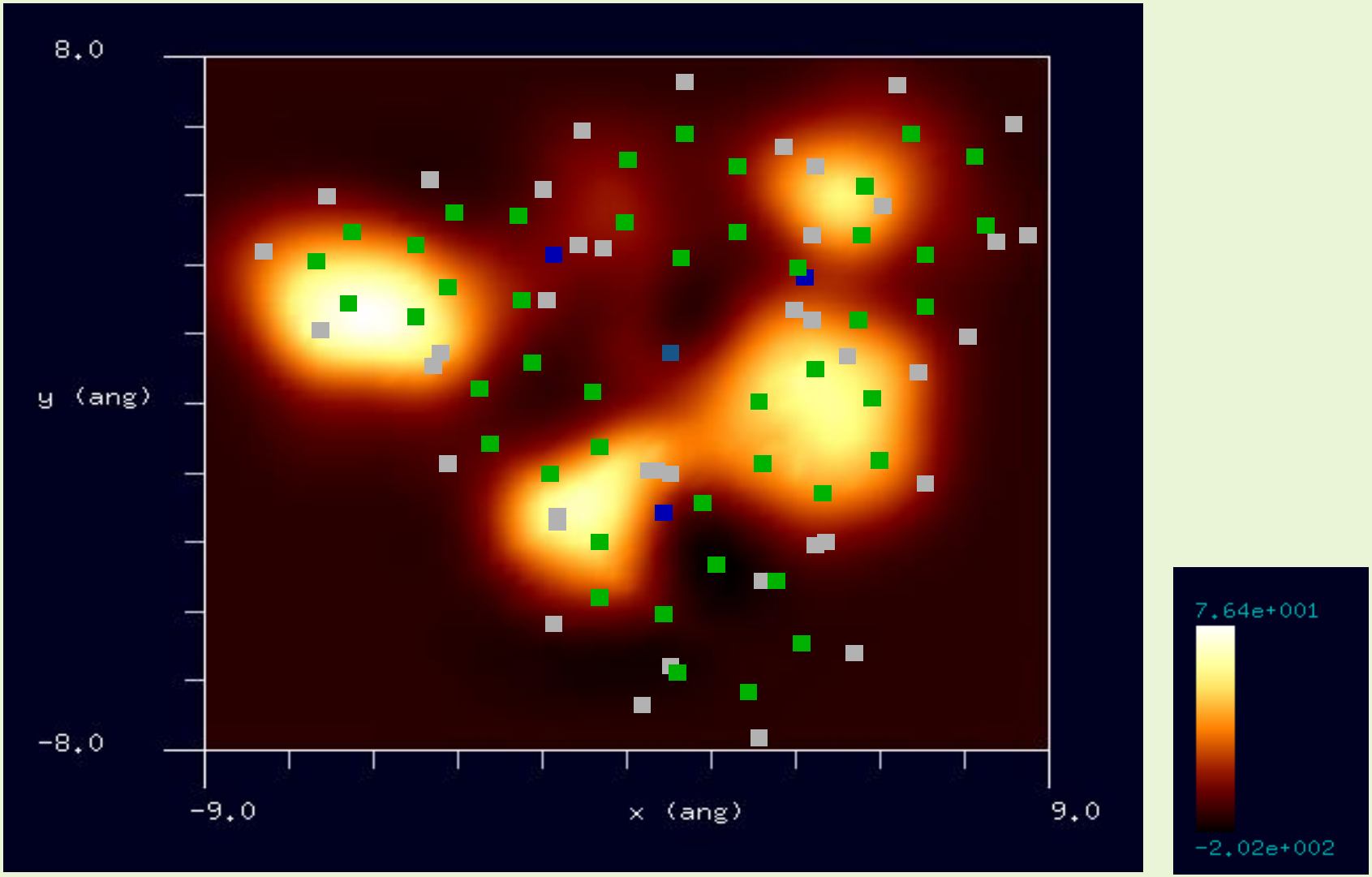
水素終端されたシリコン探針を使用



STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.3Å
最大電流 1.42×10^{5} nA、最小電流 0.00×10^{0} nA

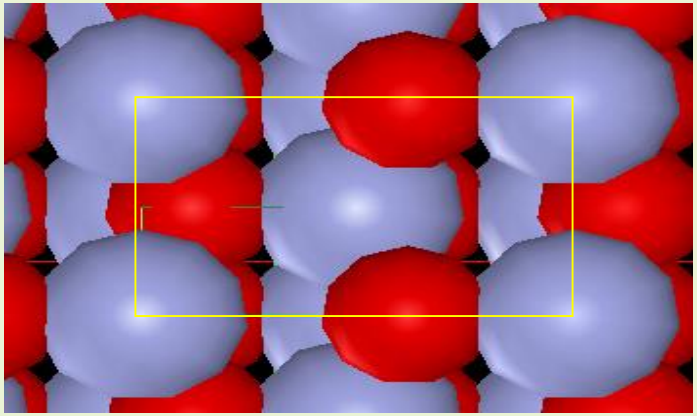


周波数シフトAFM画像: 探針振動の共鳴周波数170kHz, 探針と試料の最短距離4.3Å
周波数のずれは -2.02×10^{2} Hzから 7.64×10^{1} Hz



透明電極

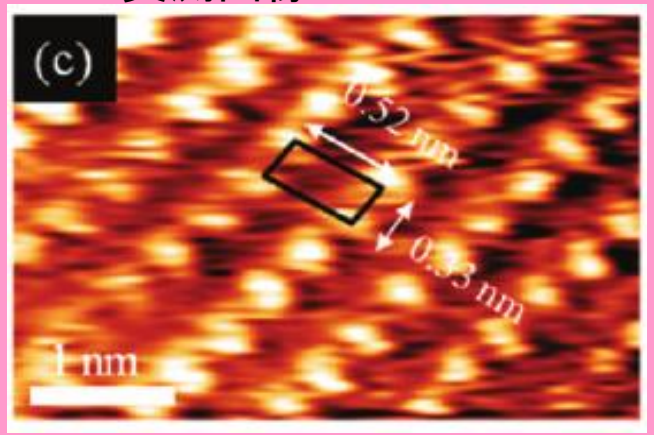
【DFTB】透明導電膜ZnOのSTM像



試料のモデル（黄枠は単位格子）

探針：Si_4H_9
試料：ZnO
スキャンエリア：18 Å × 12 Å
スキャンモード：constant current STM
探針バイアス：-2.0[V]
電流値：3000[nA]

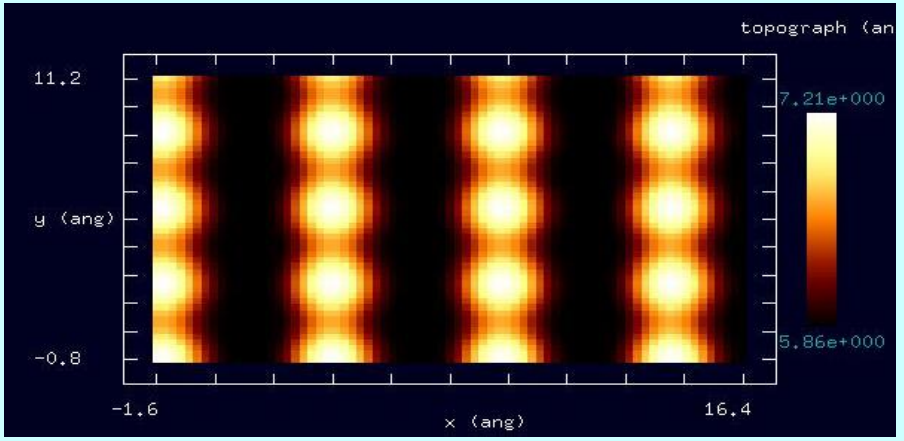
実測画像



Vs=2.5[V]
It=0.6[nA]

The Journal of Physical Chemistry C 116(18):9917–9924 · April 2012

constant current STMシミュレーション



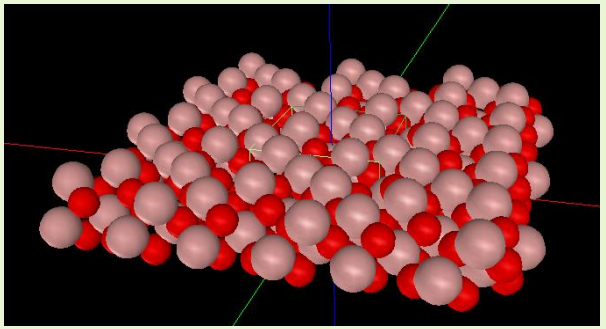
画像はコントラスト調整後

透明電極

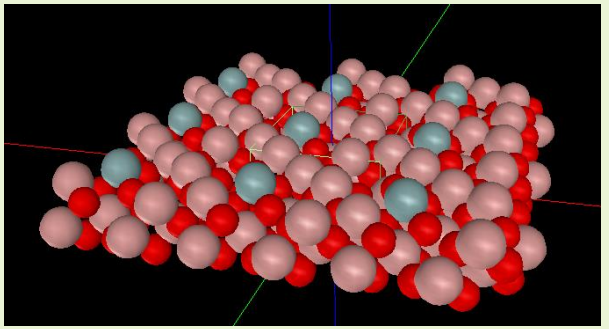
【DFTB】透明導電膜ITO (Indium Tin Oxide)のSTM像

シミュレートモデル

探針: Si_4H_9探針
試料: In_2O_3 (001)面
スキャンエリア: 30 Å x 30 Å
スキャンモード: Constant current STM
探針バイアス: -1.0 V
電流値: 10 nA



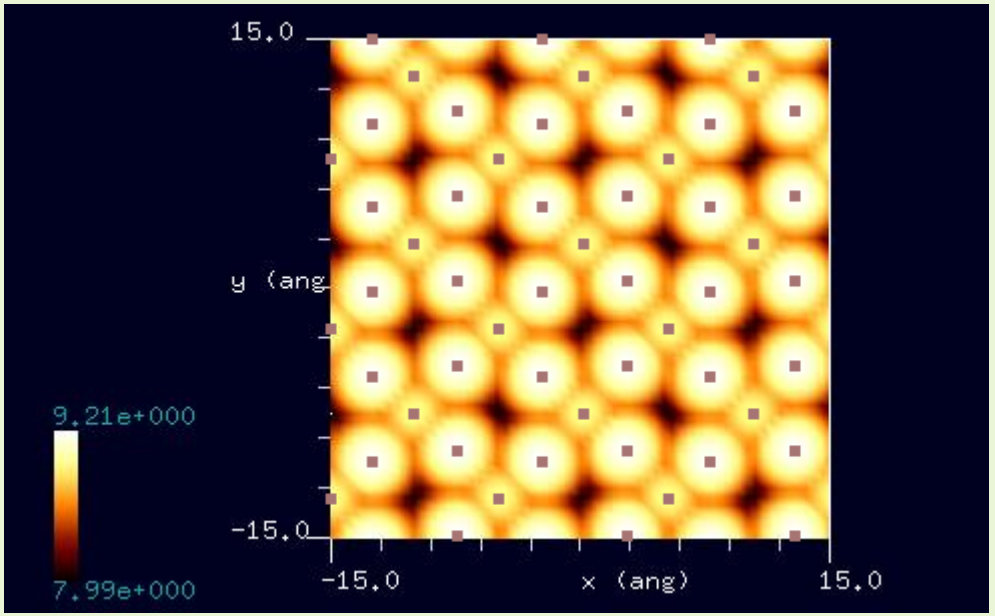
周期的境界条件を課した
In_2O_3 (001)表面モデル



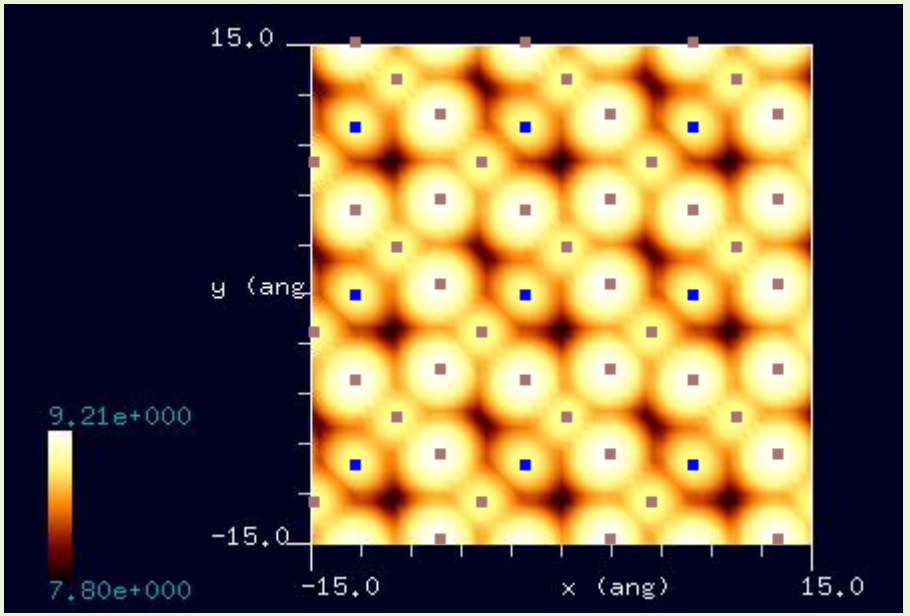
最表面の一部をSnで置換した
In_2O_3 (001)表面モデル

計算結果

In_2O_3 (001)表面のSTM



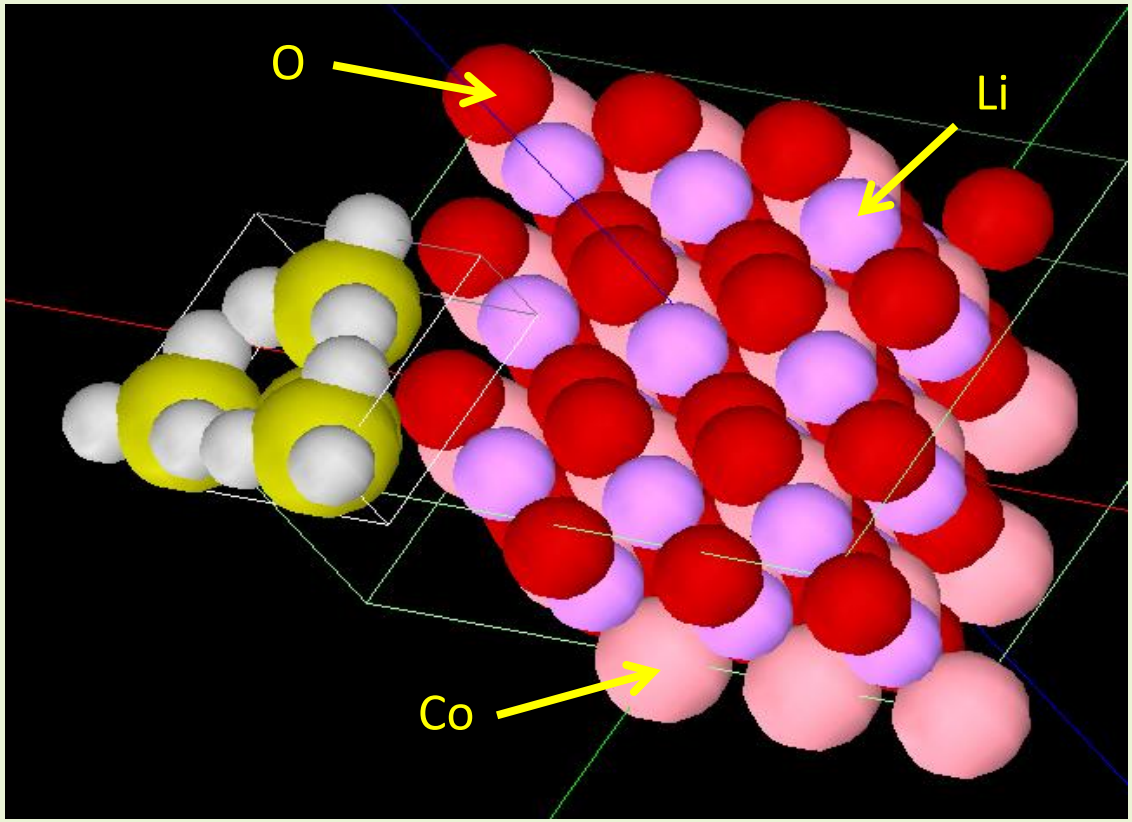
一部をSnで置換したIn_2O_3 (001)表面のSTM

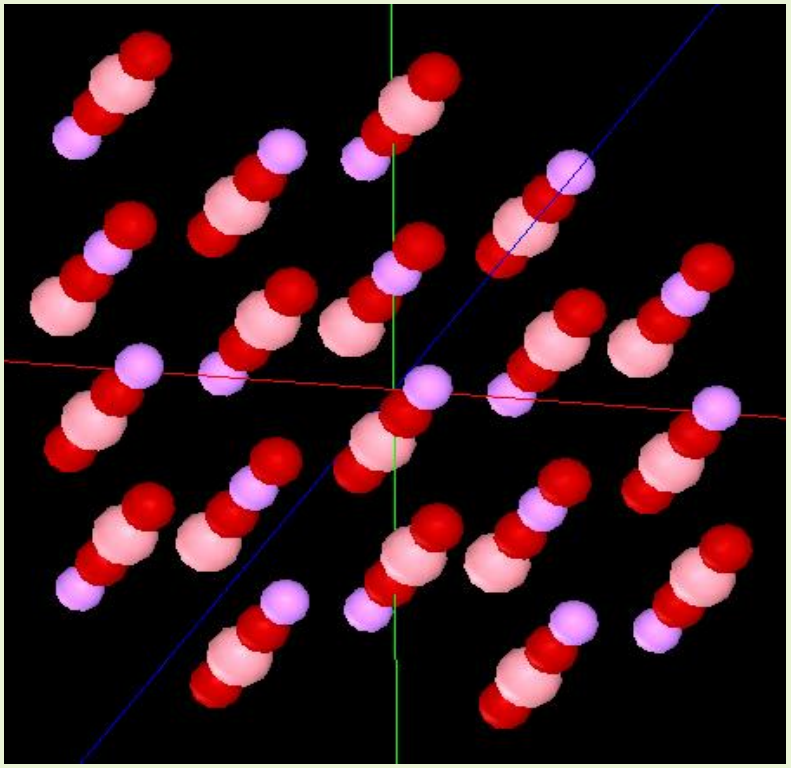


リチウムイオン電池関連トピック

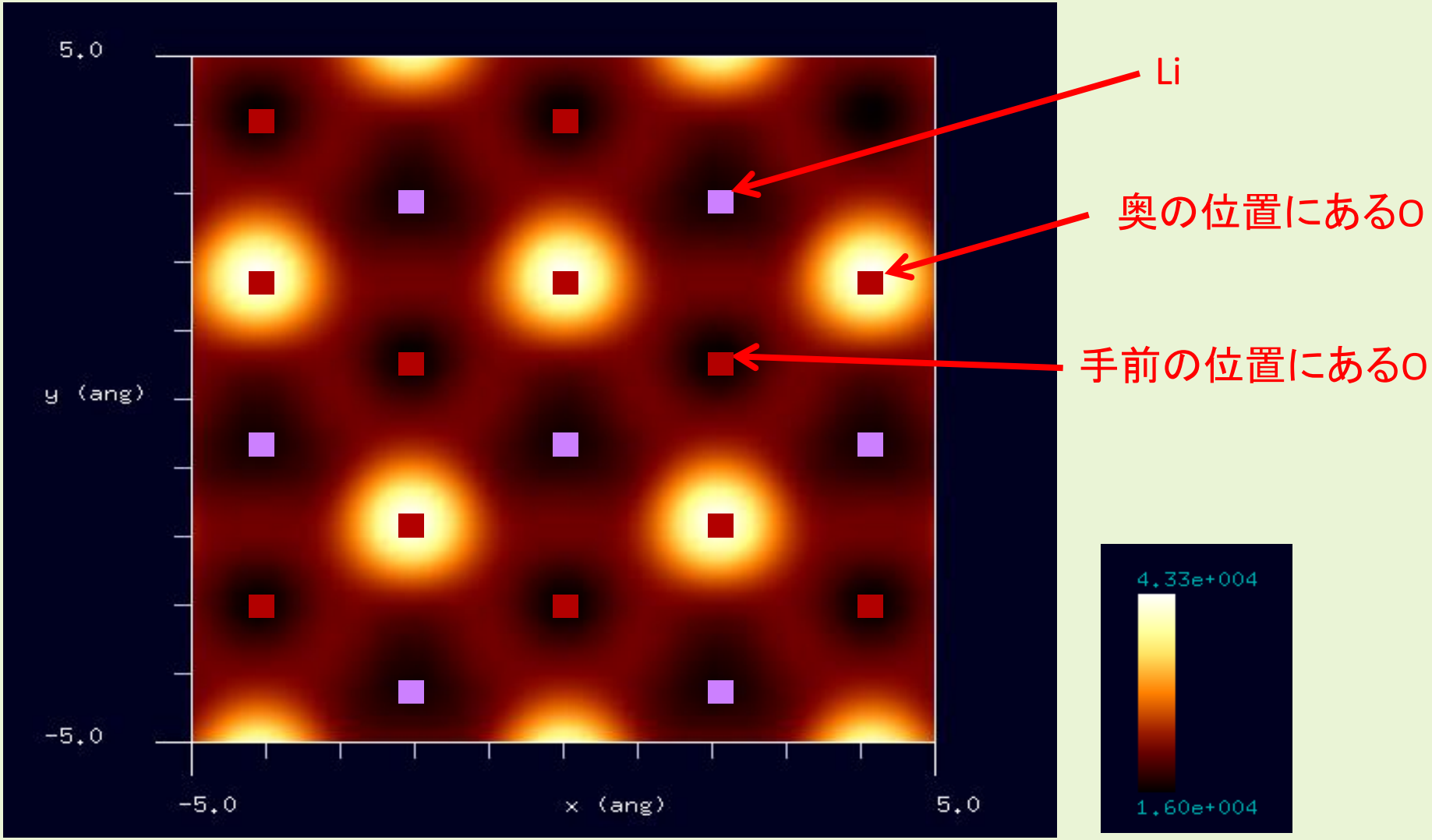
DFTB $LiCoO_2$ (リチウムイオン電池の正極活物質)

水素終端されたシリコン探針を使用
三方晶(空間群番号:166)
(001)面

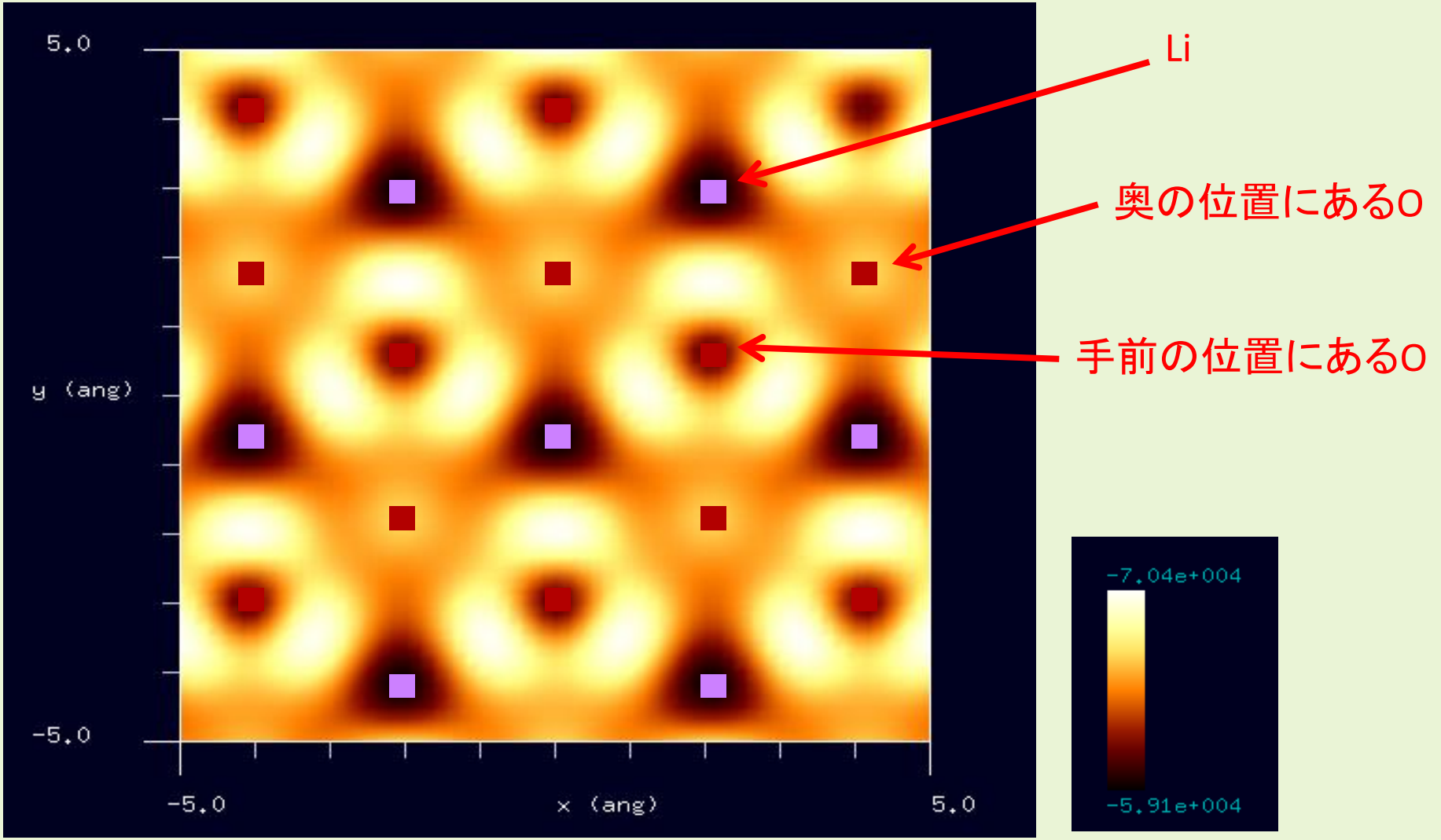




STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.3Å
最大電流4.33×10^{4} nA、最小電流1.60×10^{4} nA

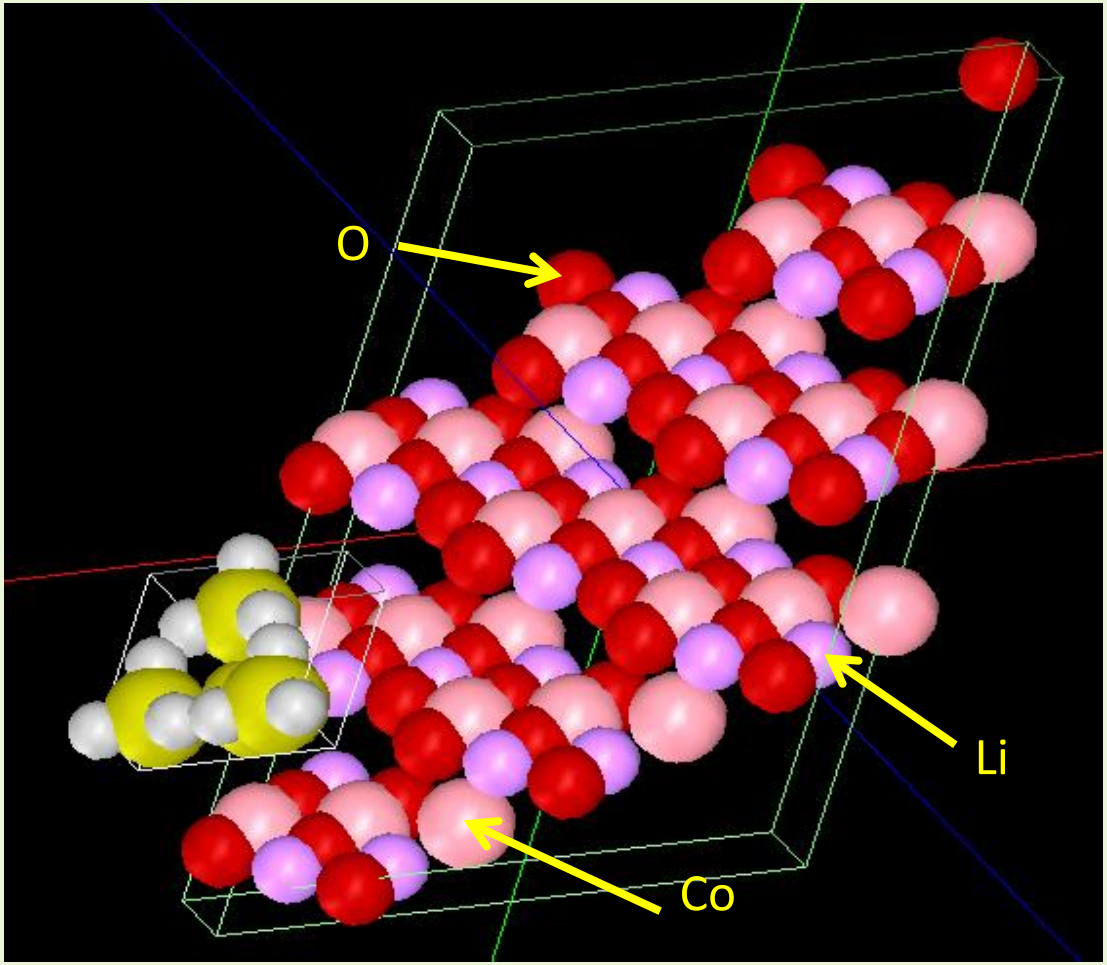


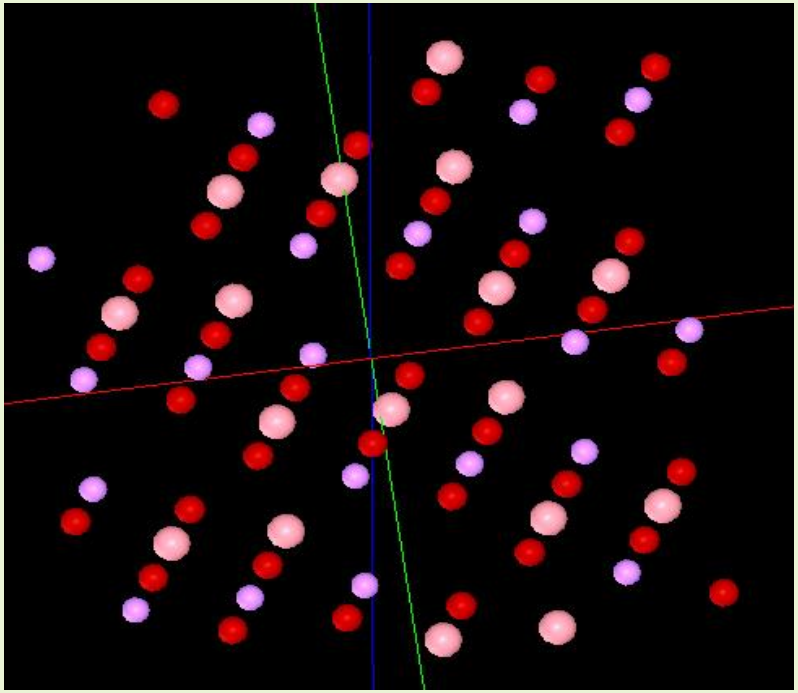
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.3Å
最大電流 -5.91×10^{4} nA、最小電流 -7.04×10^{4} nA



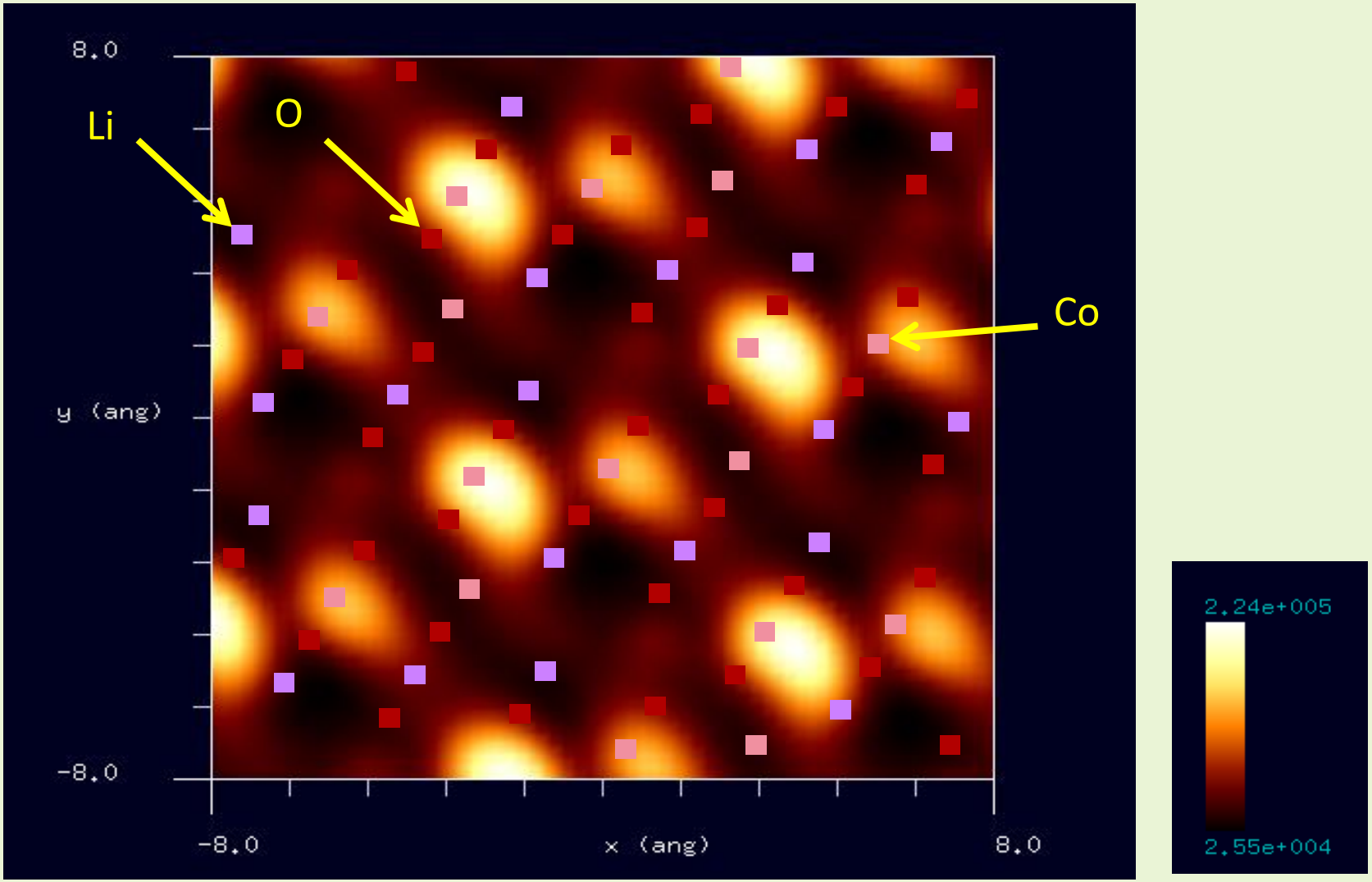
DFTB $LiCoO_2$ (リチウムイオン電池の正極活物質)

水素終端されたシリコン探針を使用
三方晶(空間群番号:166)
(111)面

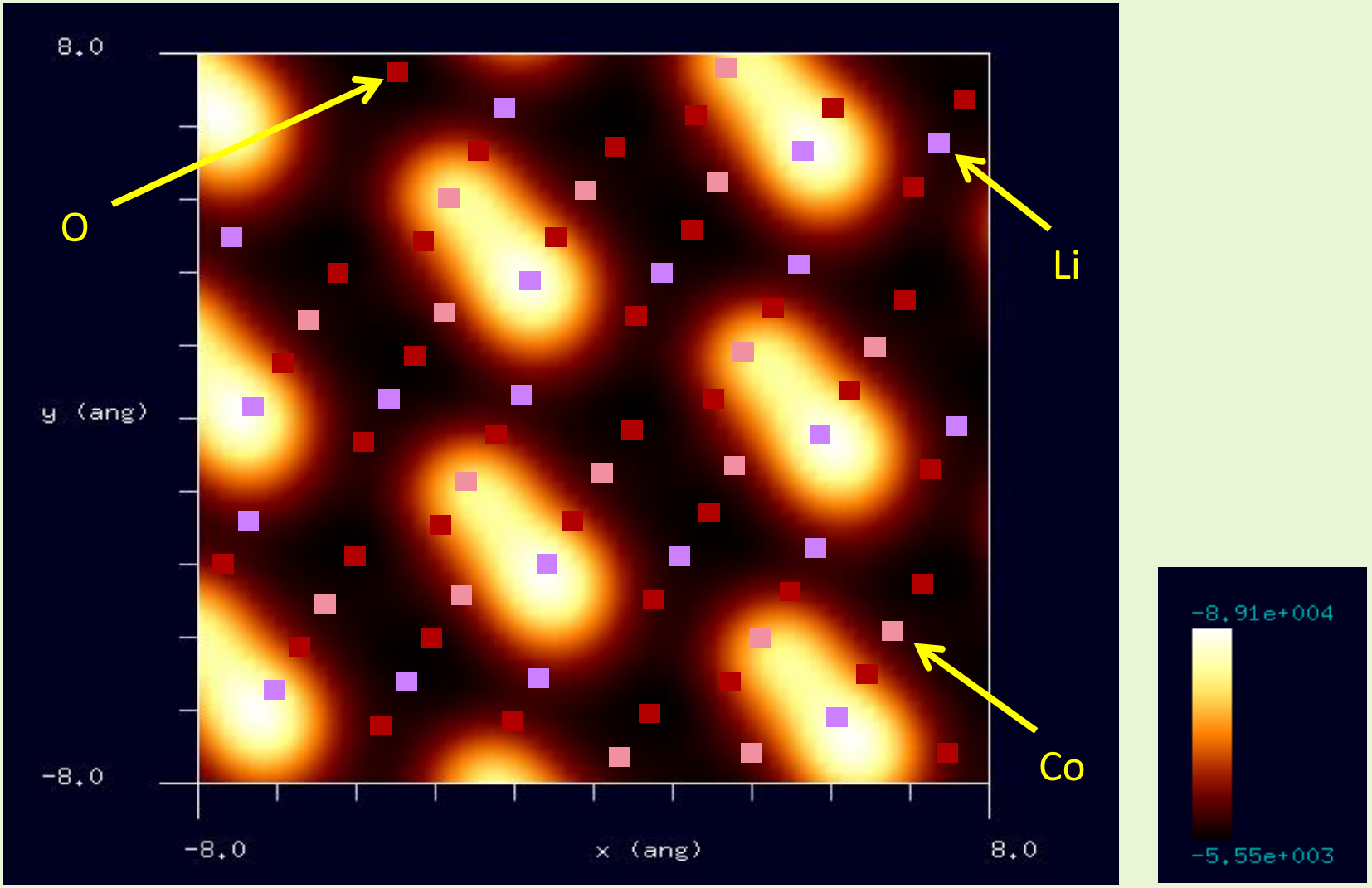




STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.2Å
最大電流2.24×10^{5} nA、最小電流 2.55×10^{4} nA



STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離2.2Å
最大電流 -5.55×10^{3} nA、最小電流 -8.91×10^{4} nA

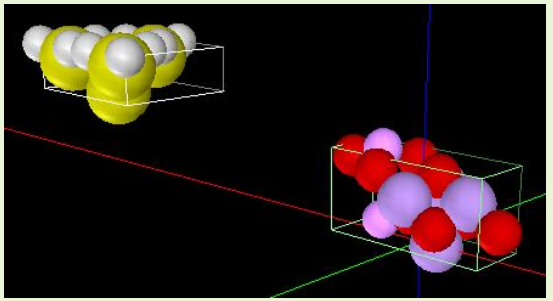


リチウムイオン電池関連トピック

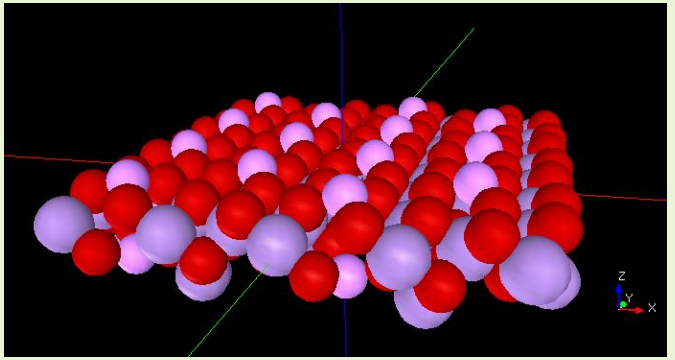
【DFTB】リチウムイオン電池の正極活物質$LiMn_2O_4$粒子のSTM画像

シミュレートモデル

探針：Si_4H_9探針
試料：$LiMn_2O_4$ (111)表面（Li 終端）
スキャンエリア：20 Å x 20 Å
スキャンモード：Constant current STM
探針バイアス：+1.0 V
電流値：10 nA

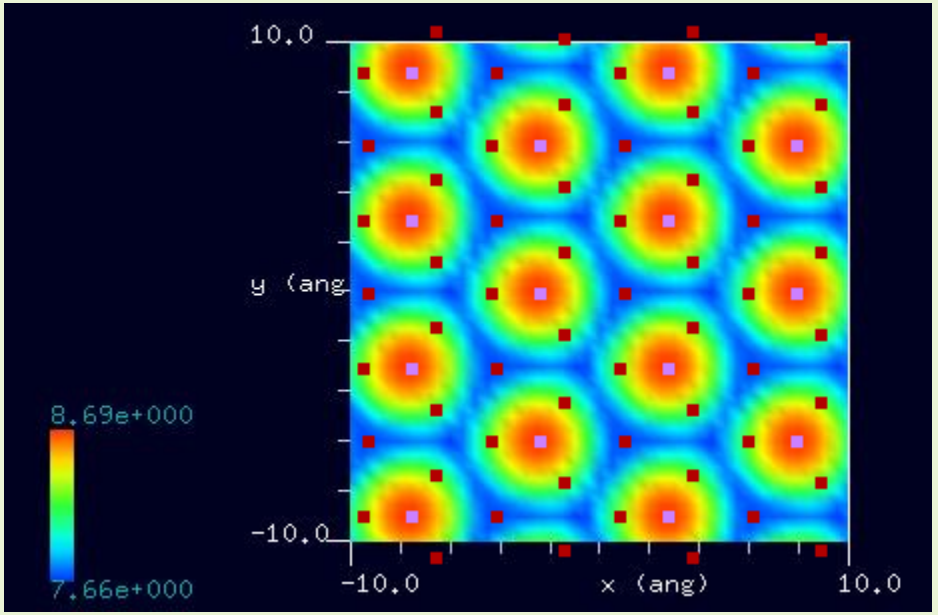


●：酸素、●：リチウム、
●：マンガン、
●：シリコン、●：水素



周期的境界条件を課した
Li 終端モデル

計算結果



自動車：高分子材料

合成ゴムのAFMシミュレーション

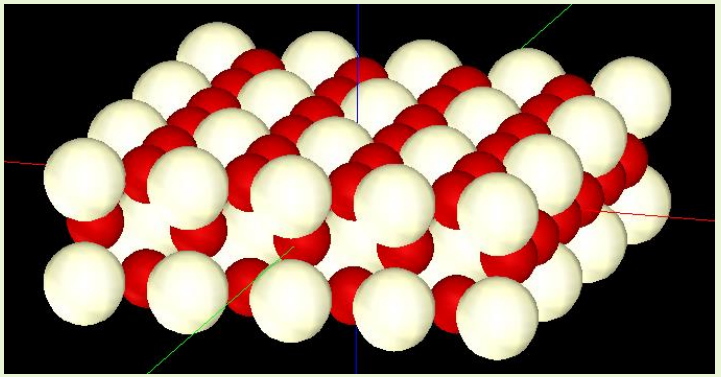
計算不可能

実験は、非相溶性ゴムの力学的損失マップ。
SPMシミュレータでは、力学的損失マップを計算することができない。
SPMシミュレータでは、試料を複数のエリアに区切って複数の物性データを与えることができない。

自動車：排ガス触媒

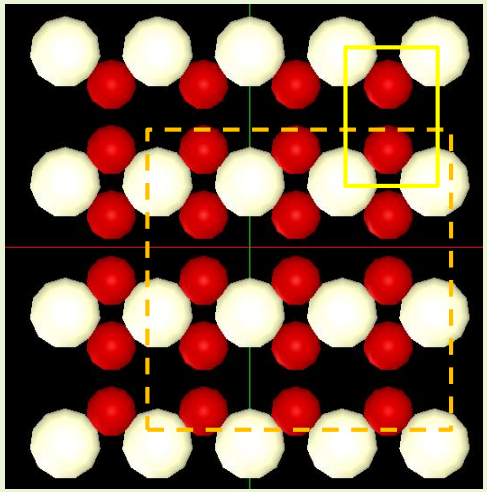
【DFTB】CeO_2 (110) 表面のconstant current STM像シミュレーション

CeO_2 (110) 表面の構造



赤＝酸素原子。白＝Ce原子。

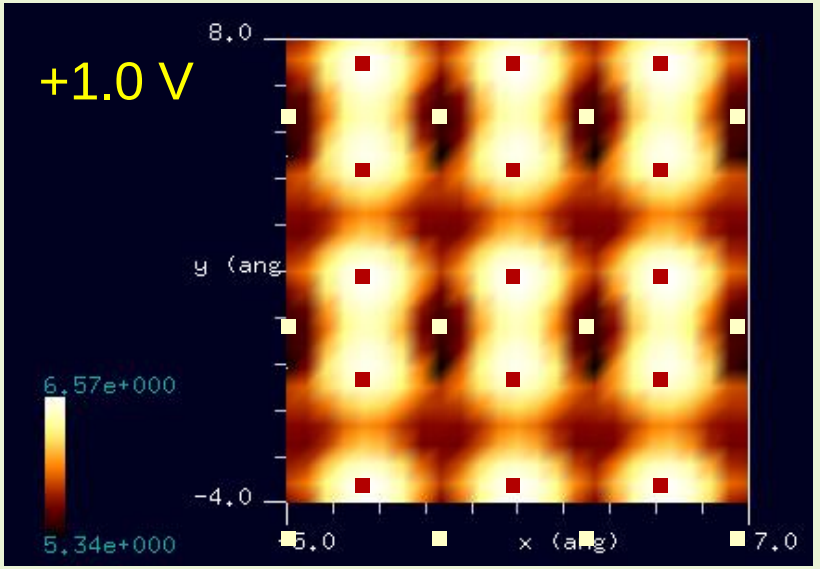
最表面の原子配置

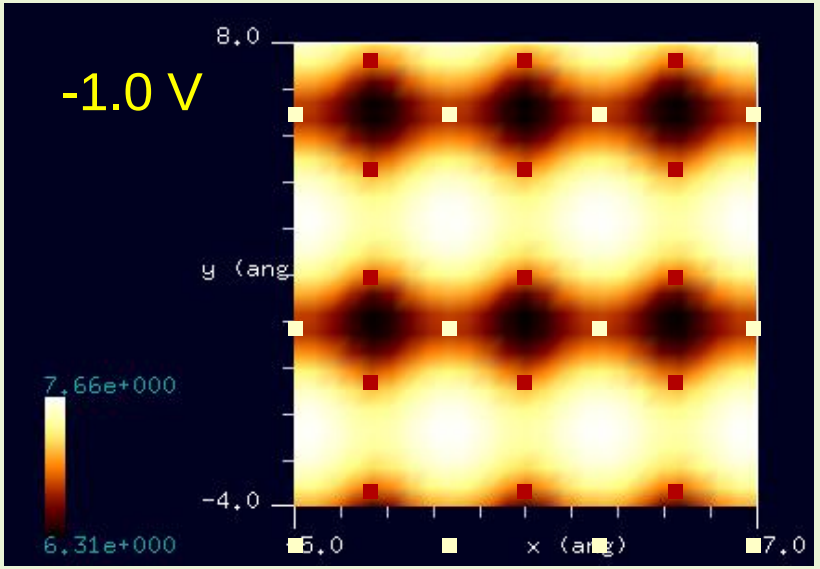


電流セットポイント: 1000 nA

探針バイアス

探針高さ 高 低

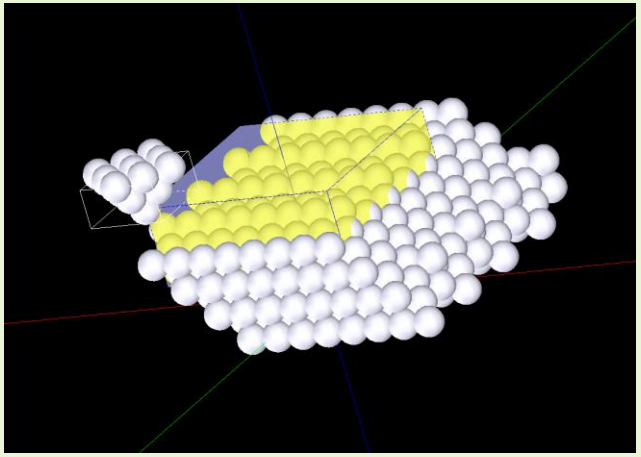




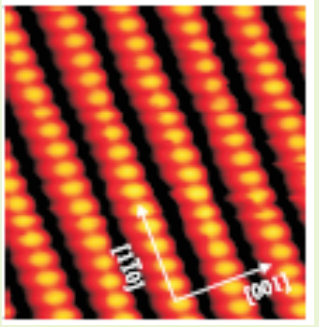
バイアスの正負によって、趣の全く異なるSTM像が得られた。

自動車：排ガス触媒

【DFTB】Pt(110)-(1x2) STM



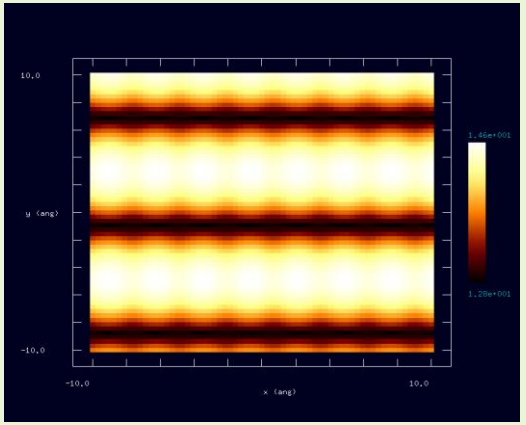
探針: プラチナ探針
試料表面: Pt(110)-(1x2)
missing row reconstruction



STM実験結果
Scanning Tunneling Microscopy Studies of Model Systems Relevant to Catalysis“, PhD thesis. Figure 4.1

[001]

$[1\bar{1}0]$

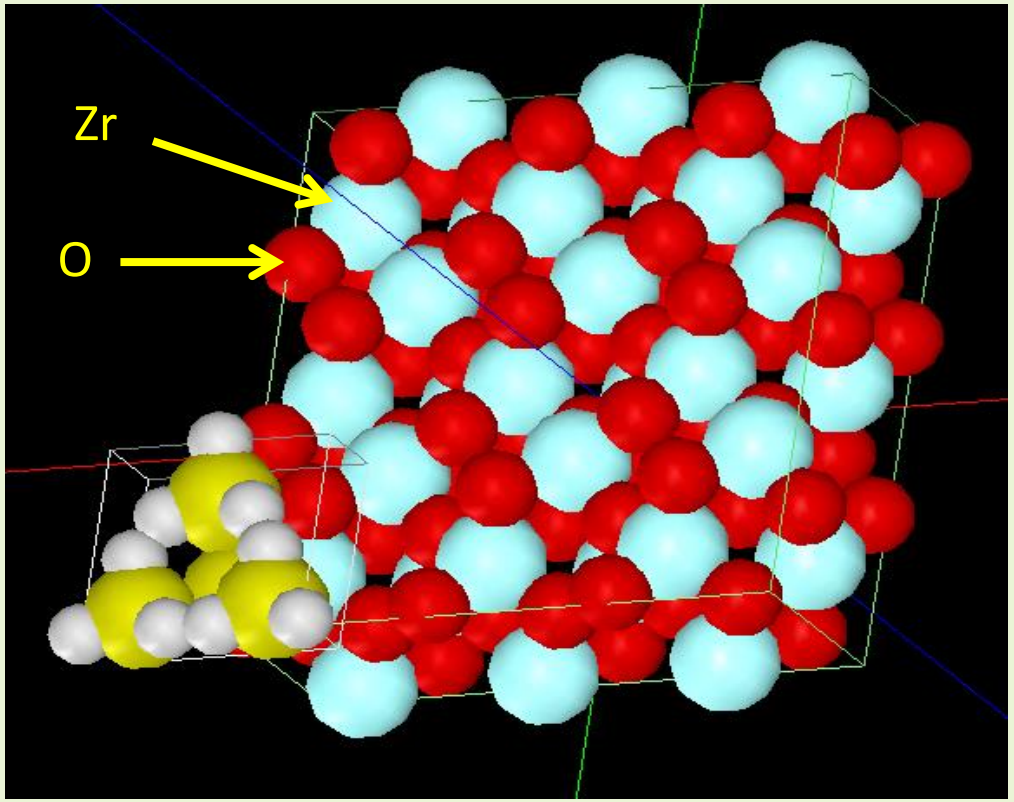


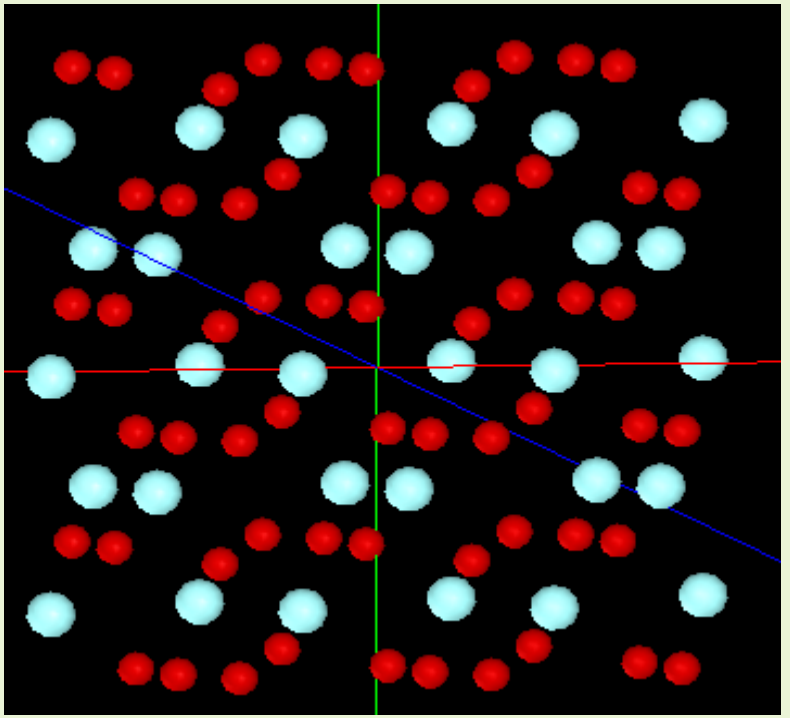
DFTB STM 電流一定像
占有状態、バイアス 1.0 V

自動車：排ガス触媒

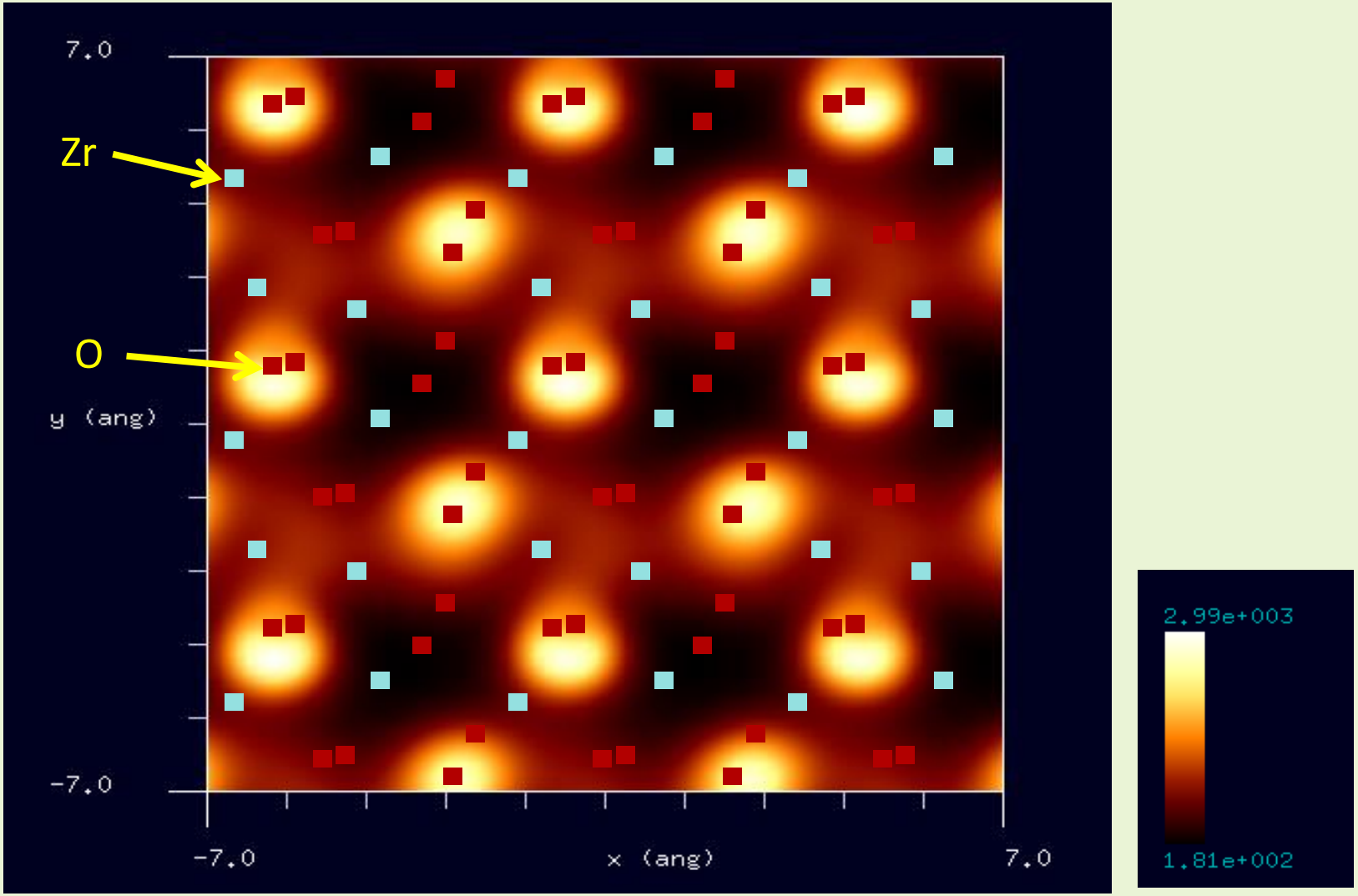
DFTB　ZrO_2 (ジルコニア　自動車の排ガス触媒として用いられる)

水素終端されたシリコン探針を使用
単斜晶(空間群番号：14)[常温の場合]
(001)面

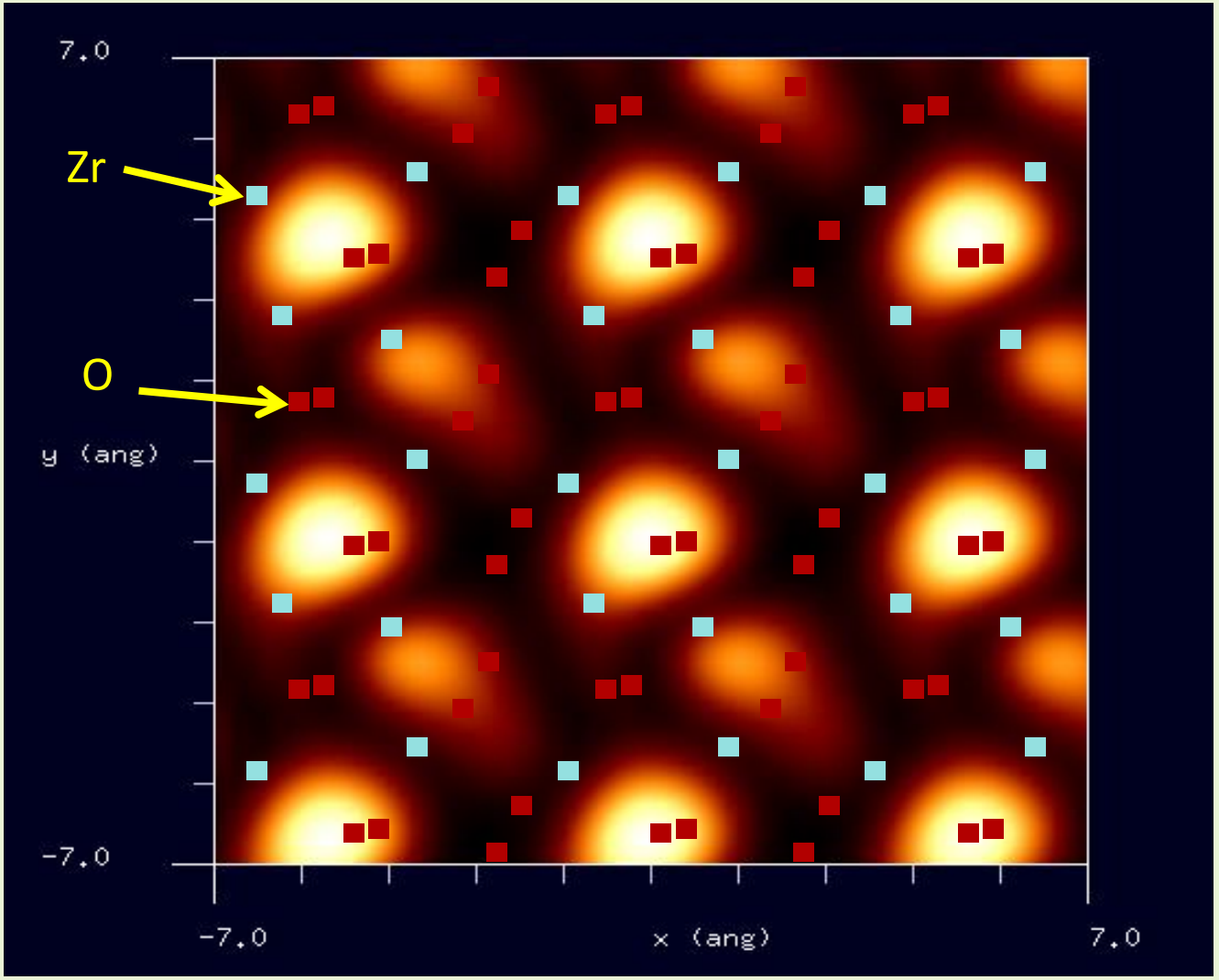


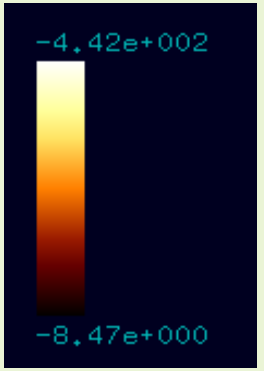


STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離0.97 Å
最大電流2.99×10^{3} nA、最小電流1.81×10^{2} nA



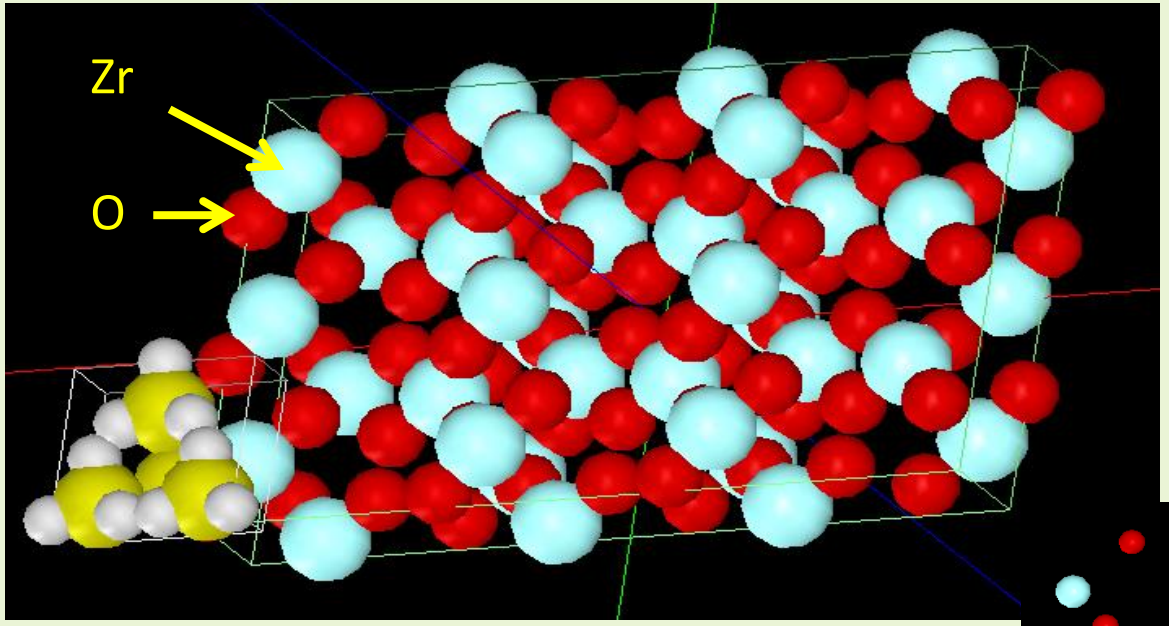
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.5Å
最大電流 -8.47×10^{0} nA、最小電流 -4.42×10^{2} nA

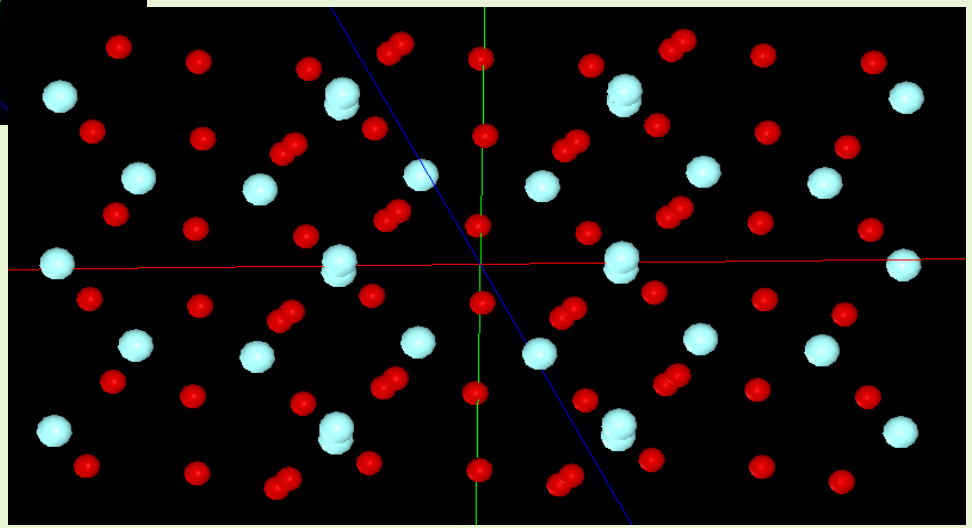




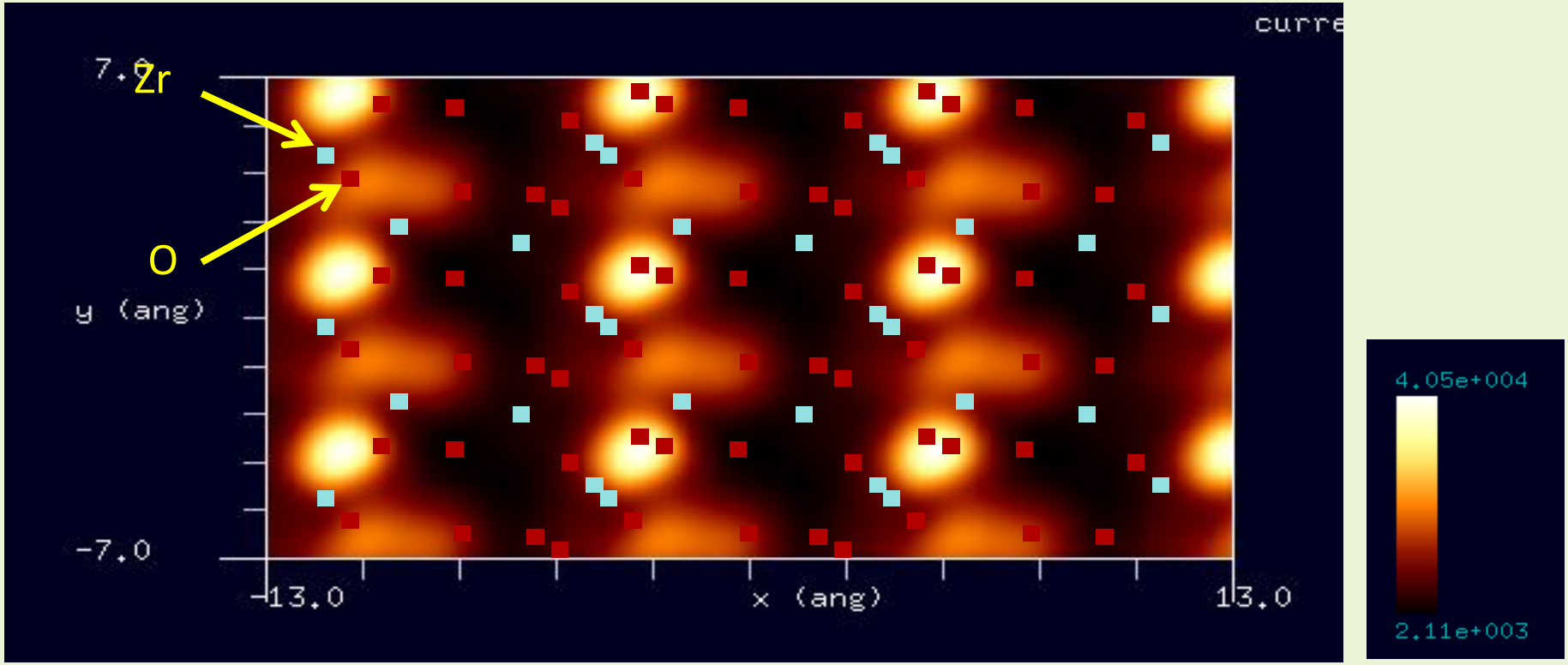
DFTB　ZrO_2 (ジルコニア　自動車の排ガス触媒として用いられる)

水素終端されたシリコン探針を使用
単斜晶(空間群番号:14)[常温の場合]
(110)面

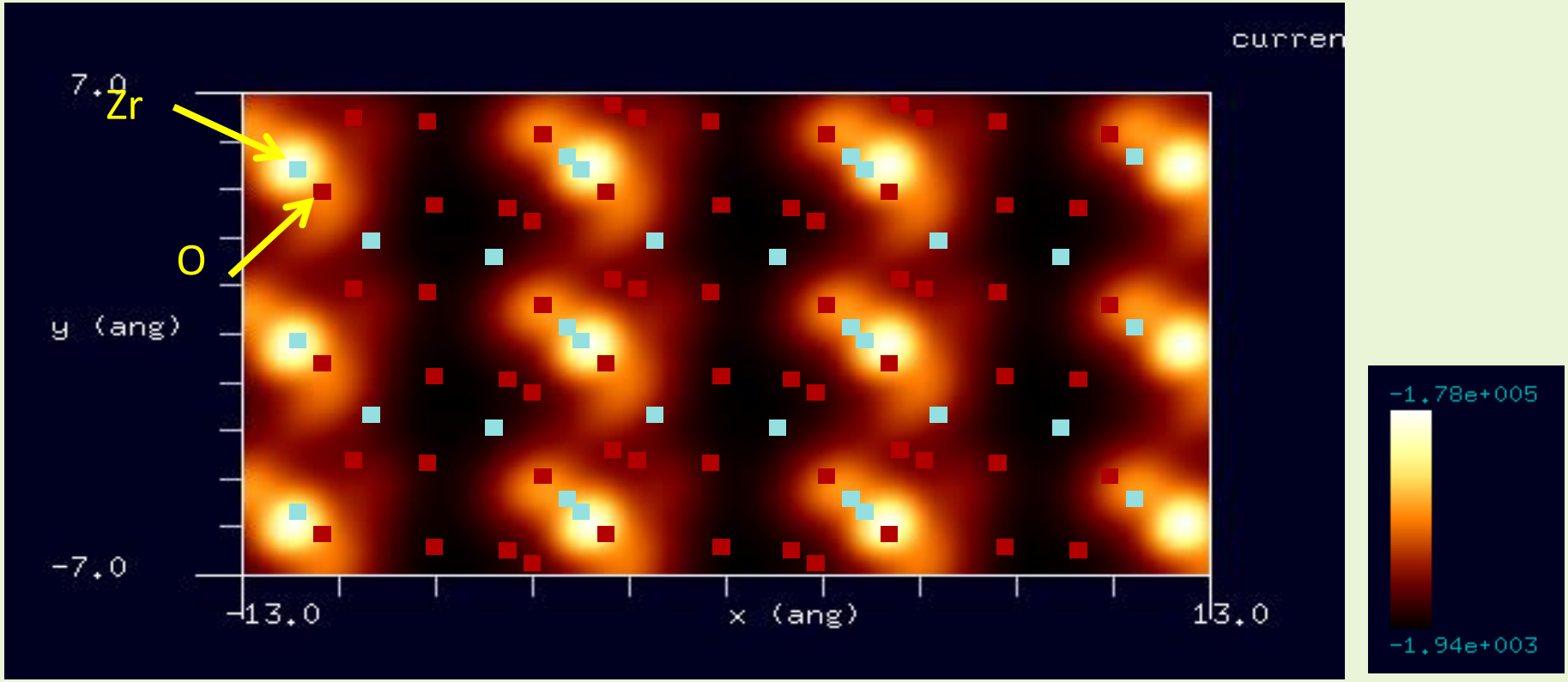




STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.7Å
最大電流 4.05×10^{4}nA、最小電流2.11×10^{3} nA

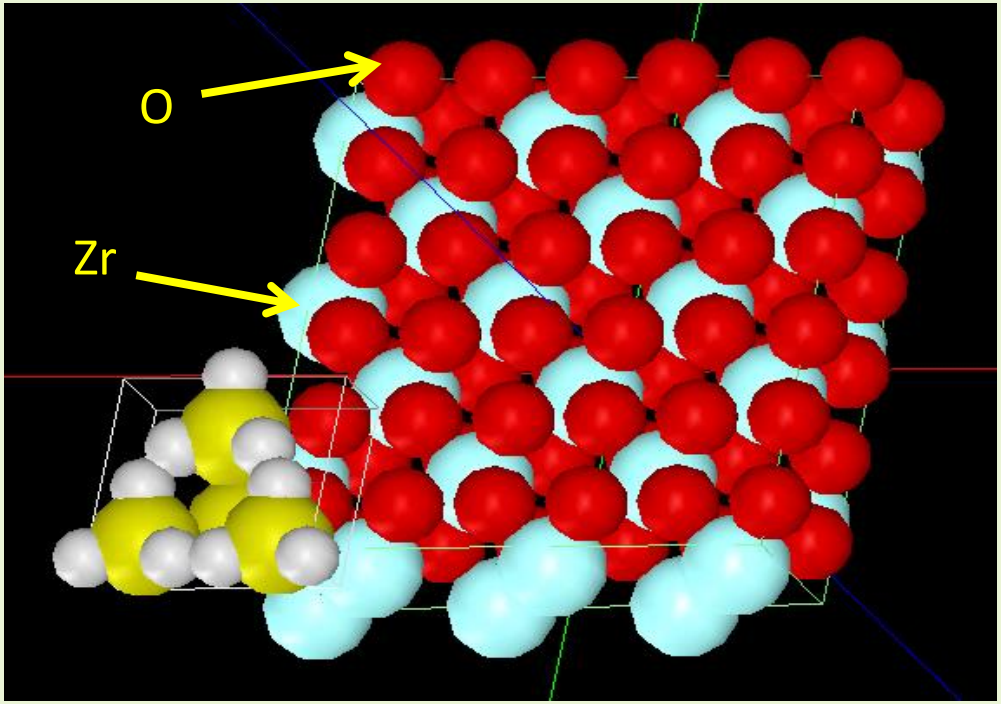


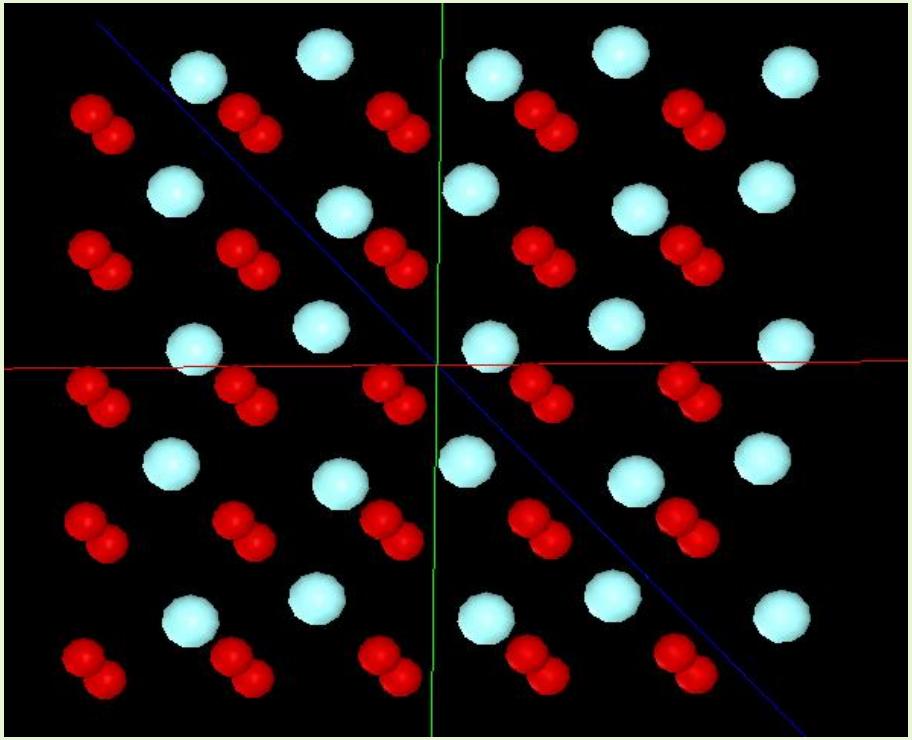
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.7 Å
最大電流 -1.94×10^{3} nA、最小電流 -1.78×10^{5} nA



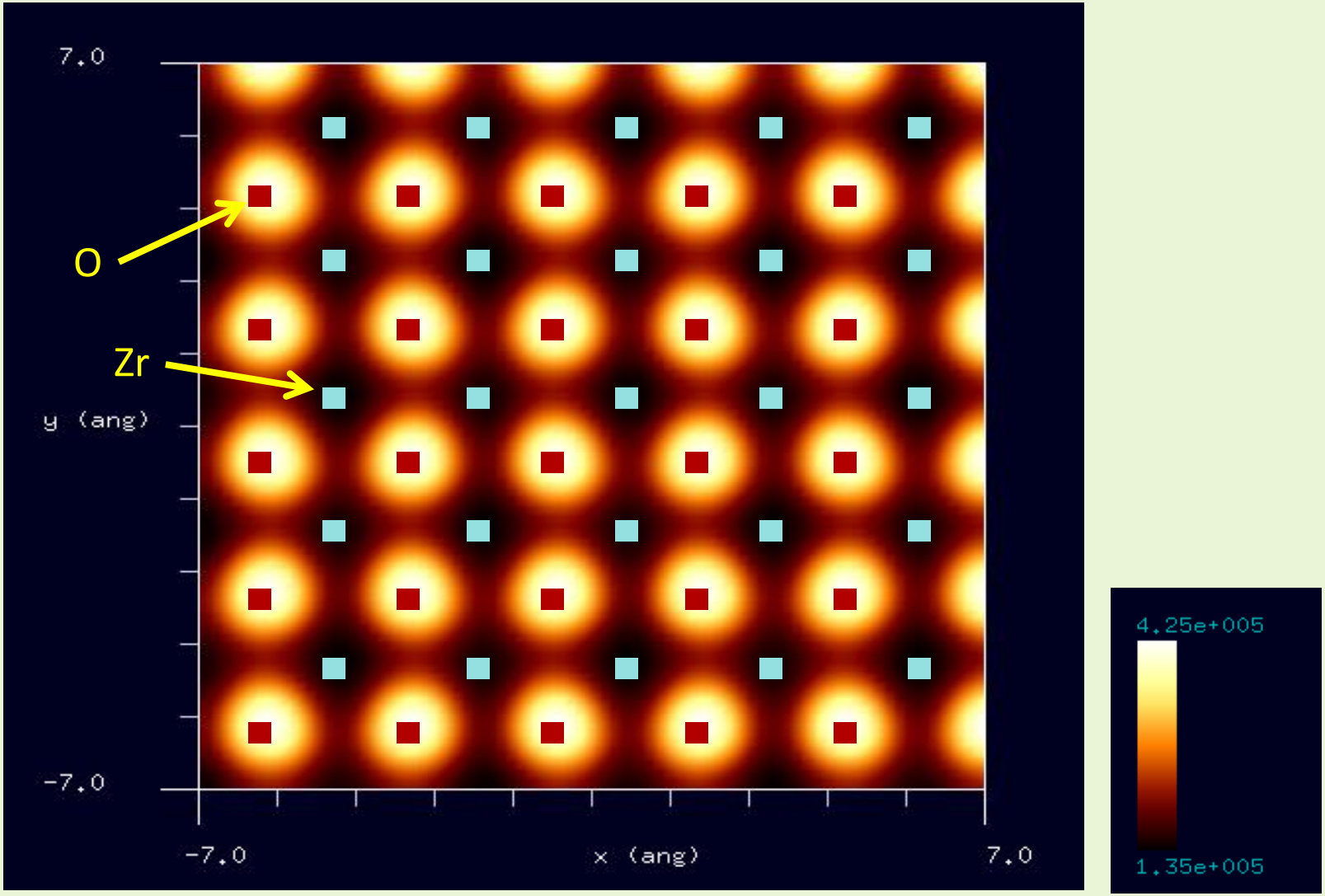
DFTB　ZrO_2 (ジルコニア　自動車の排ガス触媒として用いられる)

水素終端されたシリコン探針を使用
立方晶(空間群番号:225)[高温の場合]
(001)面

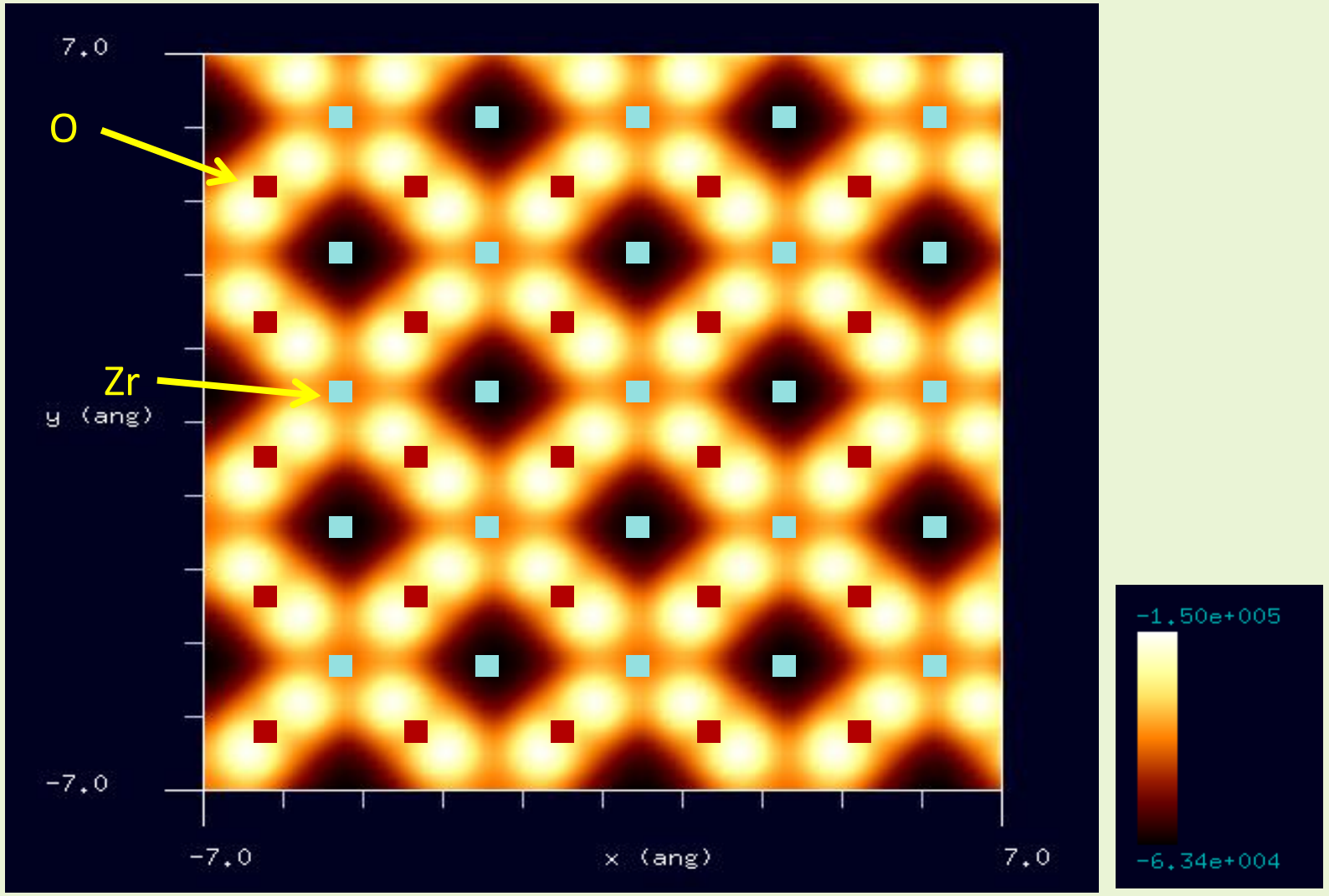




STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.1Å
最大電流 4.25×10^{5}nA、最小電流1.35×10^{5} nA

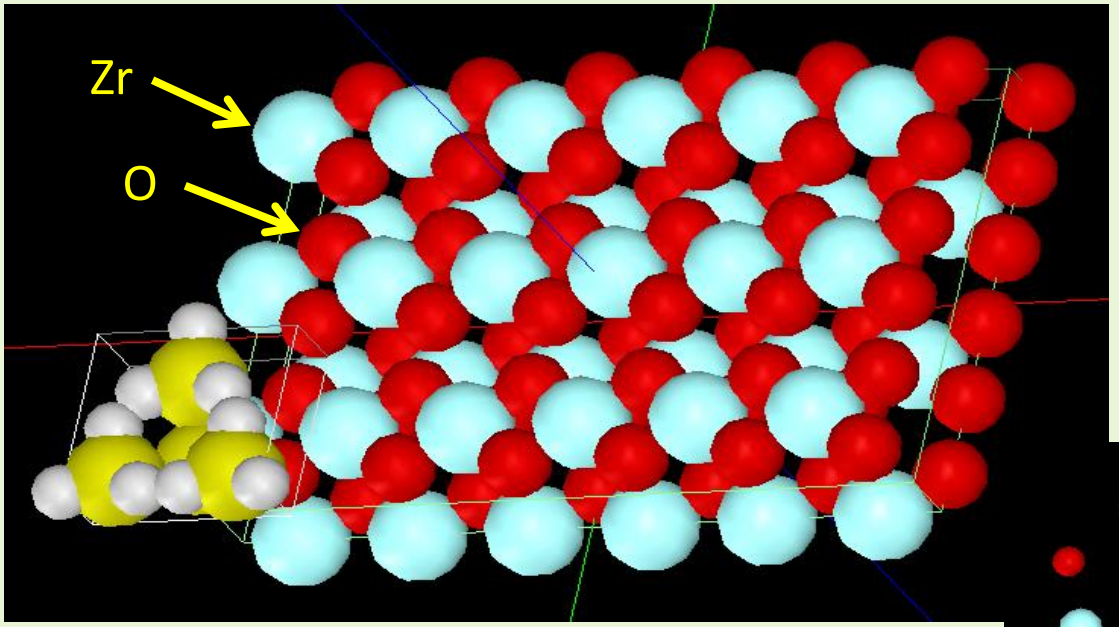


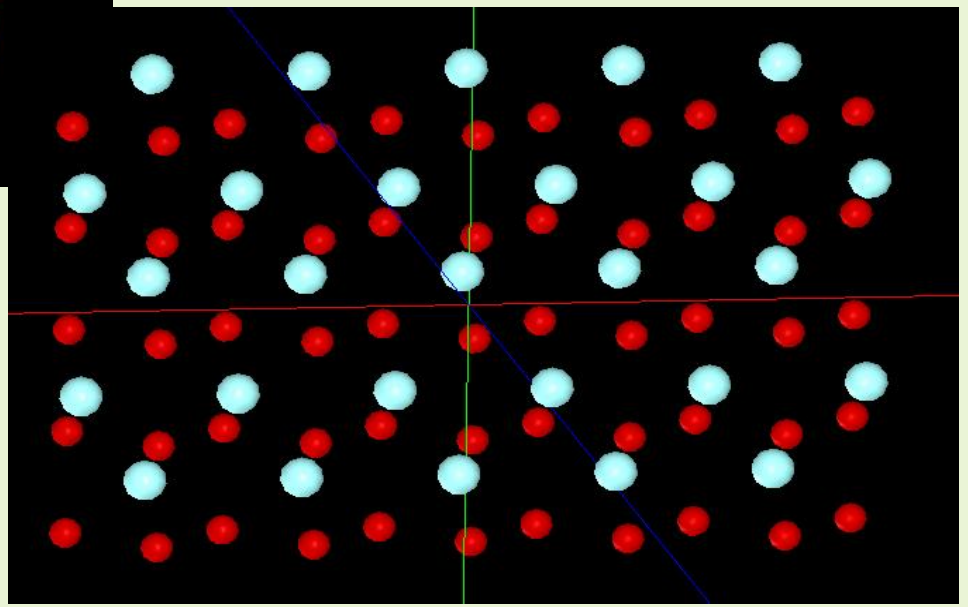
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.1Å
最大電流 -6.34×10^{4} nA、最小電流 -1.50×10^{5} nA



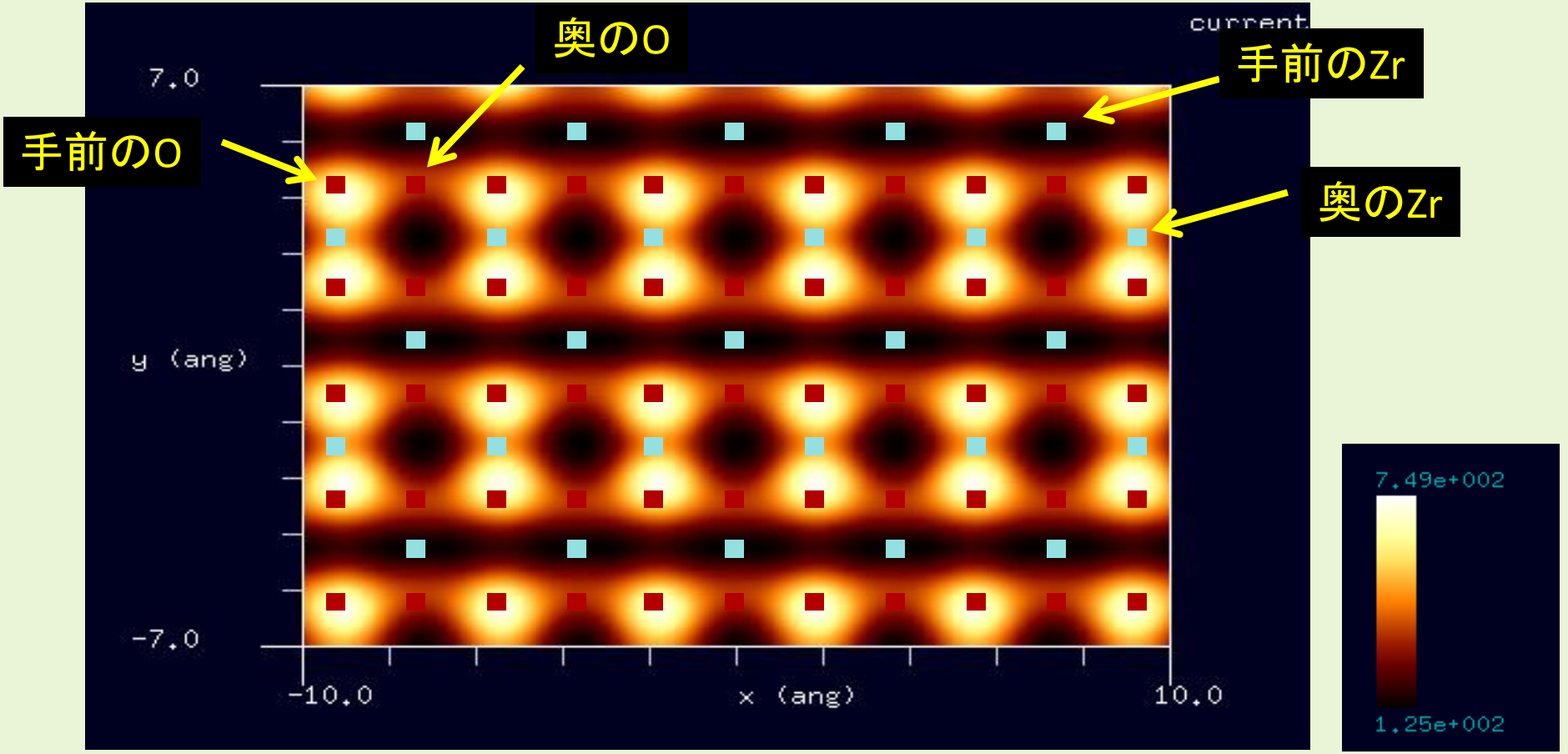
DFTB　ZrO_2　(ジルコニア　自動車の排ガス触媒として用いられる)

水素終端されたシリコン探針を使用
立方晶(空間群番号:225)[高温の場合]
(110)面

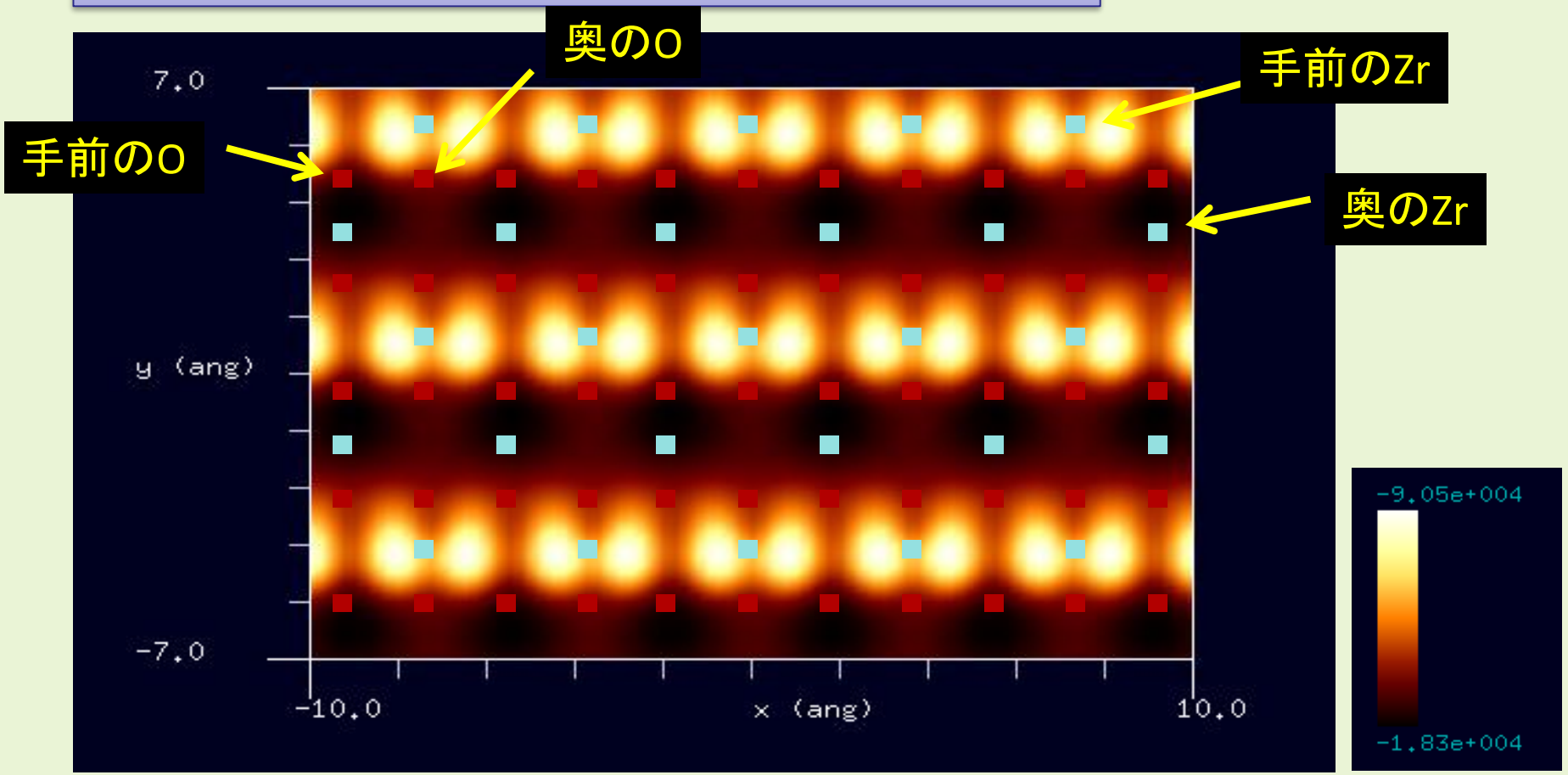




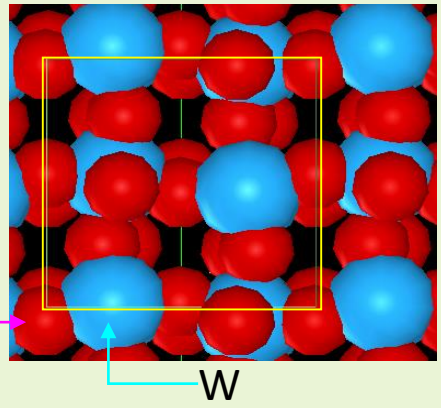
STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離2.7 Å
最大電流 7.49×10^{2} nA、最小電流 1.25×10^{2} nA



STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.7 Å
最大電流　-1.83×10^{4} nA、最小電流　-9.05×10^{4} nA

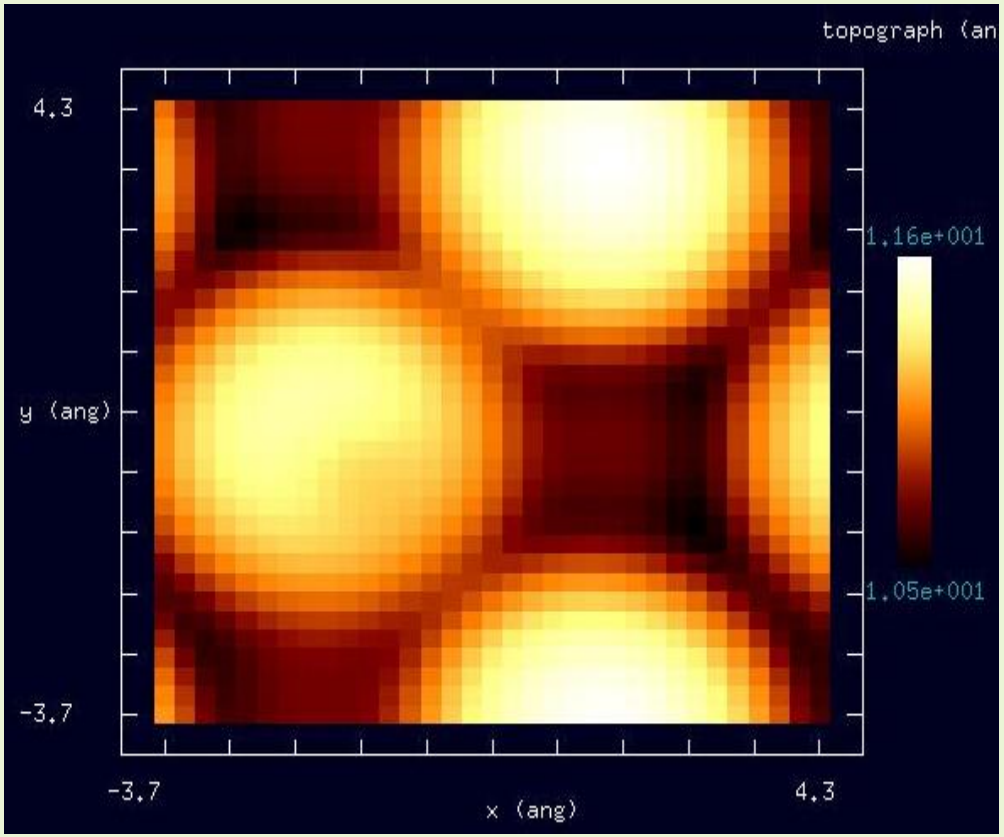


【DFTB】WO_3表面のSTM像



試料（黄色の枠が単位格子）

探針：Si_4H_9
試料：WO_3
スキャンエリア：8 Å ×8 Å
スキャンモード：constant current STM
探針バイアス：+1.0[V]
電流値：48[nA]

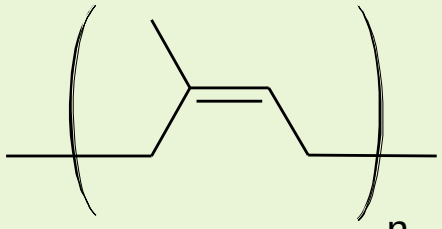


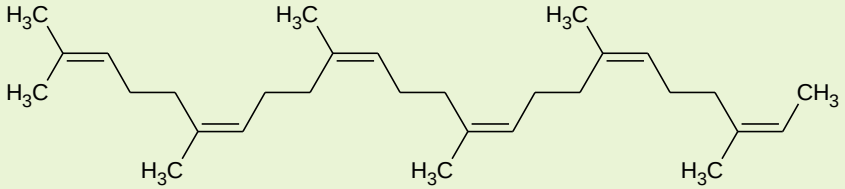
【DFTB】ポリイソプレンのconstant current STM像

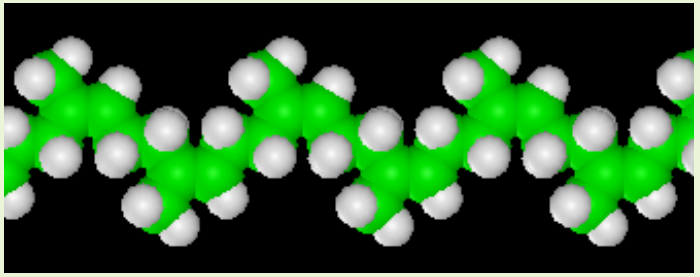
シミュレートモデル

探針：Si_4H_9探針
試料：cis-ポリイソプレン(天然ゴム)、およびtrans-ポリイソプレン(グタペルカ)
スキャンエリア：20 Å x 10 Å
スキャンモード：Constant current STM

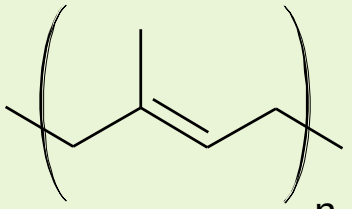
cis-ポリイソプレン（天然ゴム）

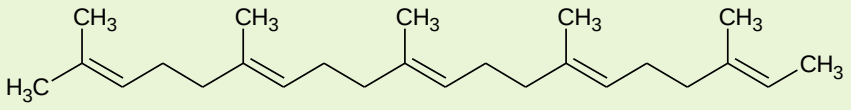


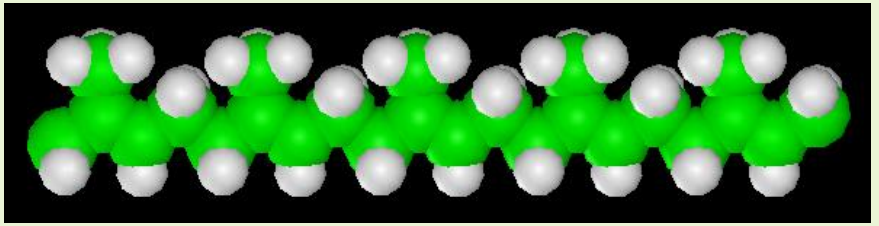




trans-ポリイソプレン（グタペルカ）

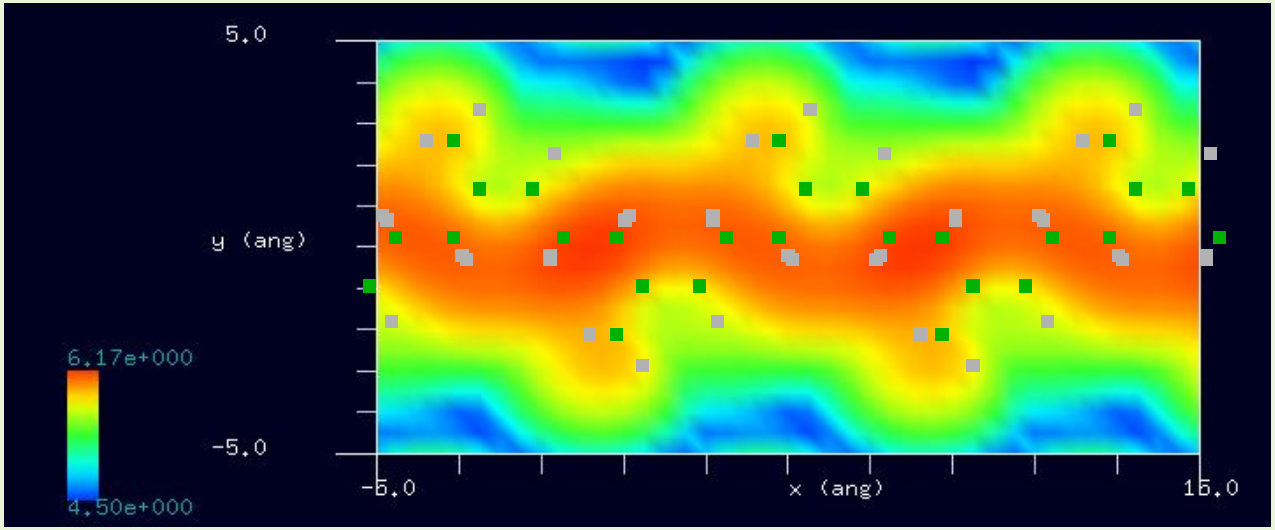




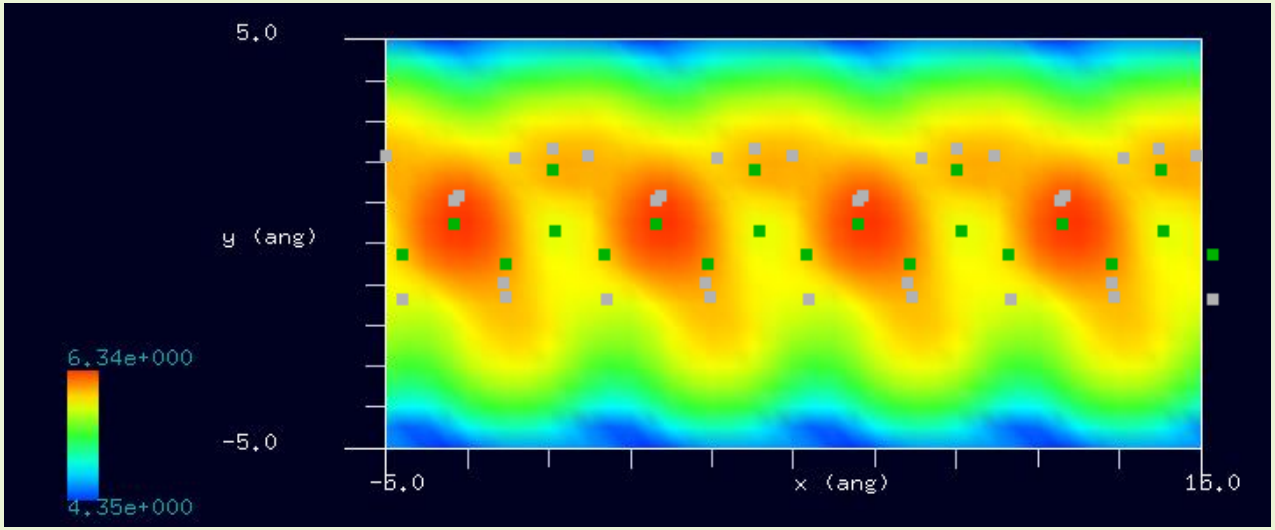


【DFTB】ポリイソプレンのconstant current STM像

cis-polyisoprene, constant current STM, V_{tip} = +5.0 V, I = 10 nA.

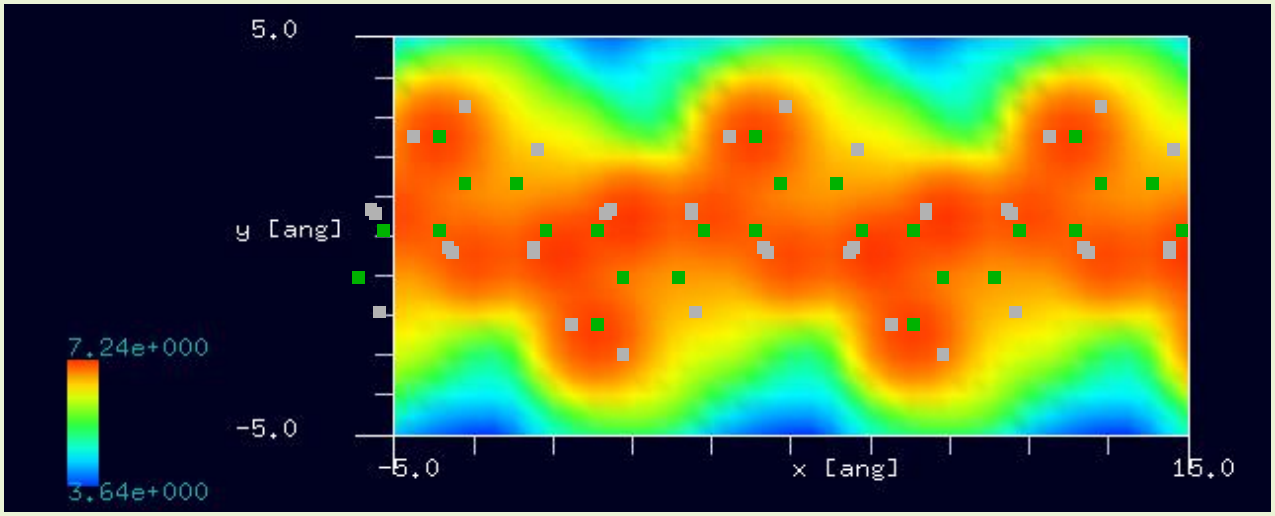


trans-polyisoprene, constant current STM, V_{tip} = +5.0 V, I = 10 nA.

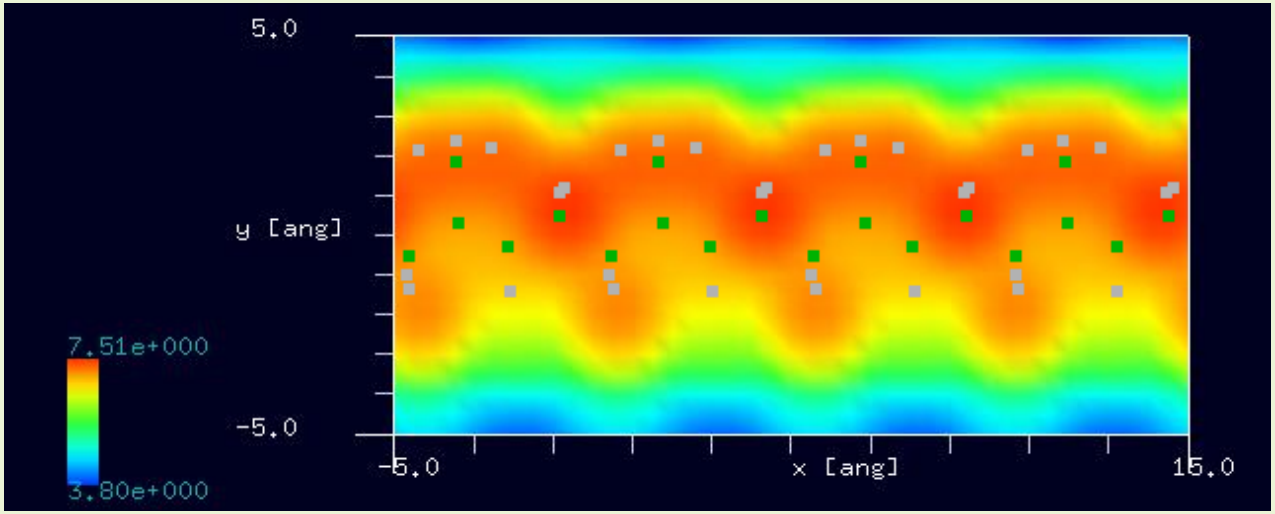


【CG】ポリイソプレンのカー定モードAFM像

cis-polyisoprene, constant force, +0.01 nN.



trans-polyisoprene, constant force, +0.01 nN.



化学・ゴム・プラスチックス関連分野

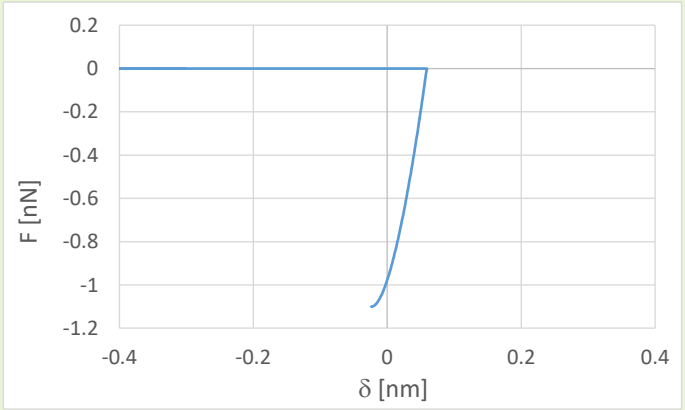
【FemAFM】いろいろな材料の粘弾性接触解析

以下の3種類の物質の物性値を用いて、粘弾性接触解析を行った。

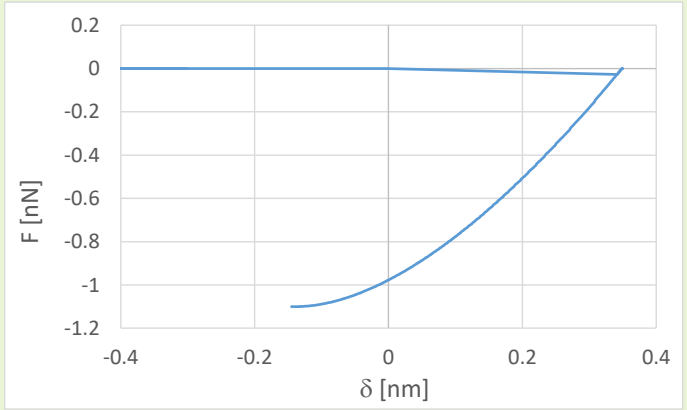
	金	ポリカーボネート	天然ゴム
ヤング率 (GPa)	74	2.6	0.001
ポアソン比	0.42	0.39	0.4999
ハマカー定数 (zJ)	455	50.8	85.8

表面張力はいずれも水の1.5倍の0.108 N/mに固定した。

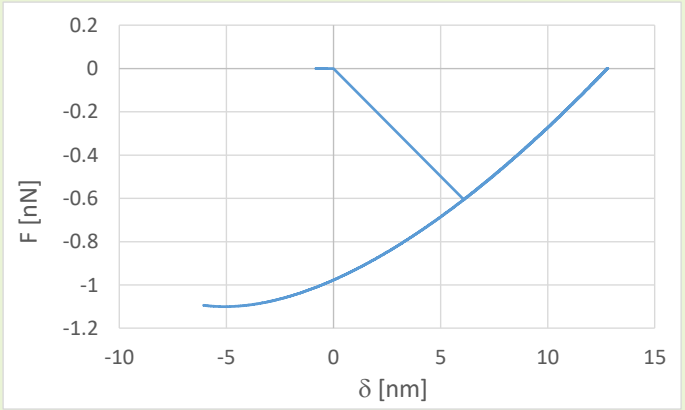
金



ポリカーボネート



天然ゴム



化学・ゴム・プラスチックス関連分野

イソプレンゴムとスチレン-ブタジエンゴムのAFM像

実験例：https://research.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/ja/research/736

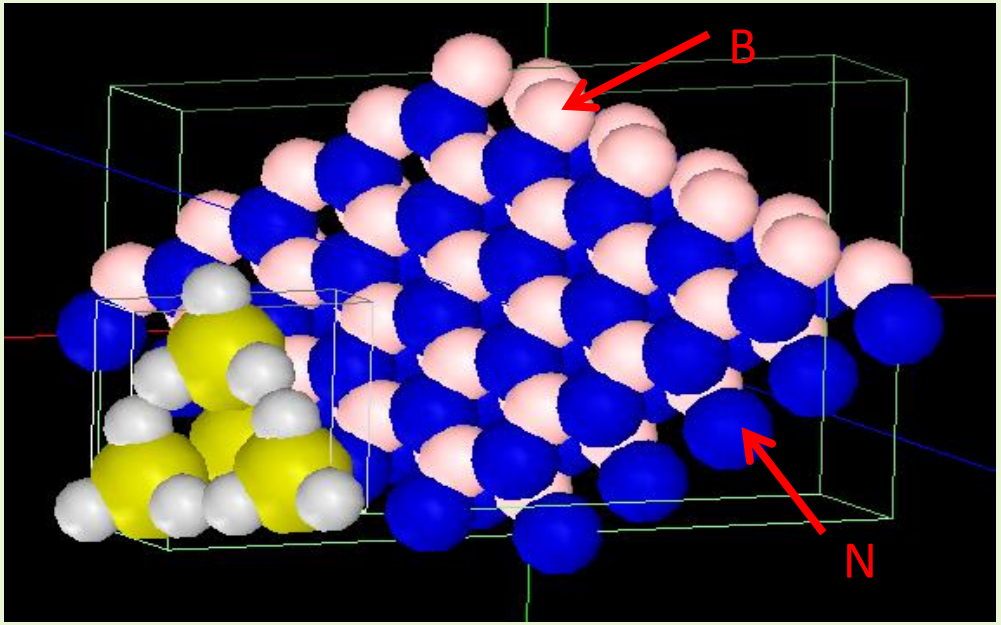
計算不可能

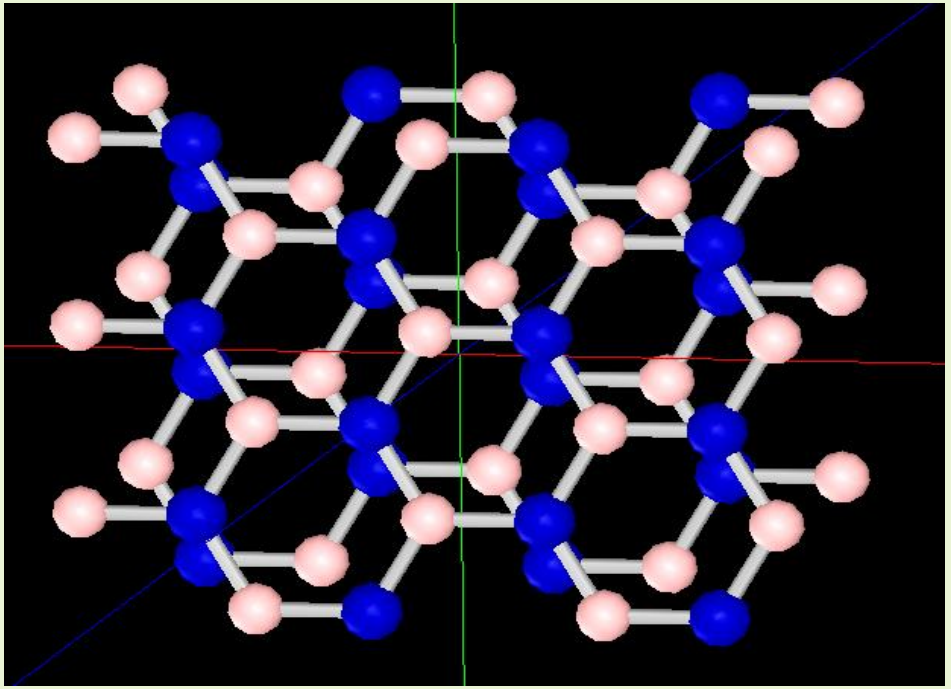
実験は、非相溶性ゴムの力学的損失マップ。
SPMシミュレータでは、力学的損失マップを計算することができない。
SPMシミュレータでは、試料を複数のエリアに区切って複数の物性データを与えることができない。

化学・ゴム・プラスチックス関連分野

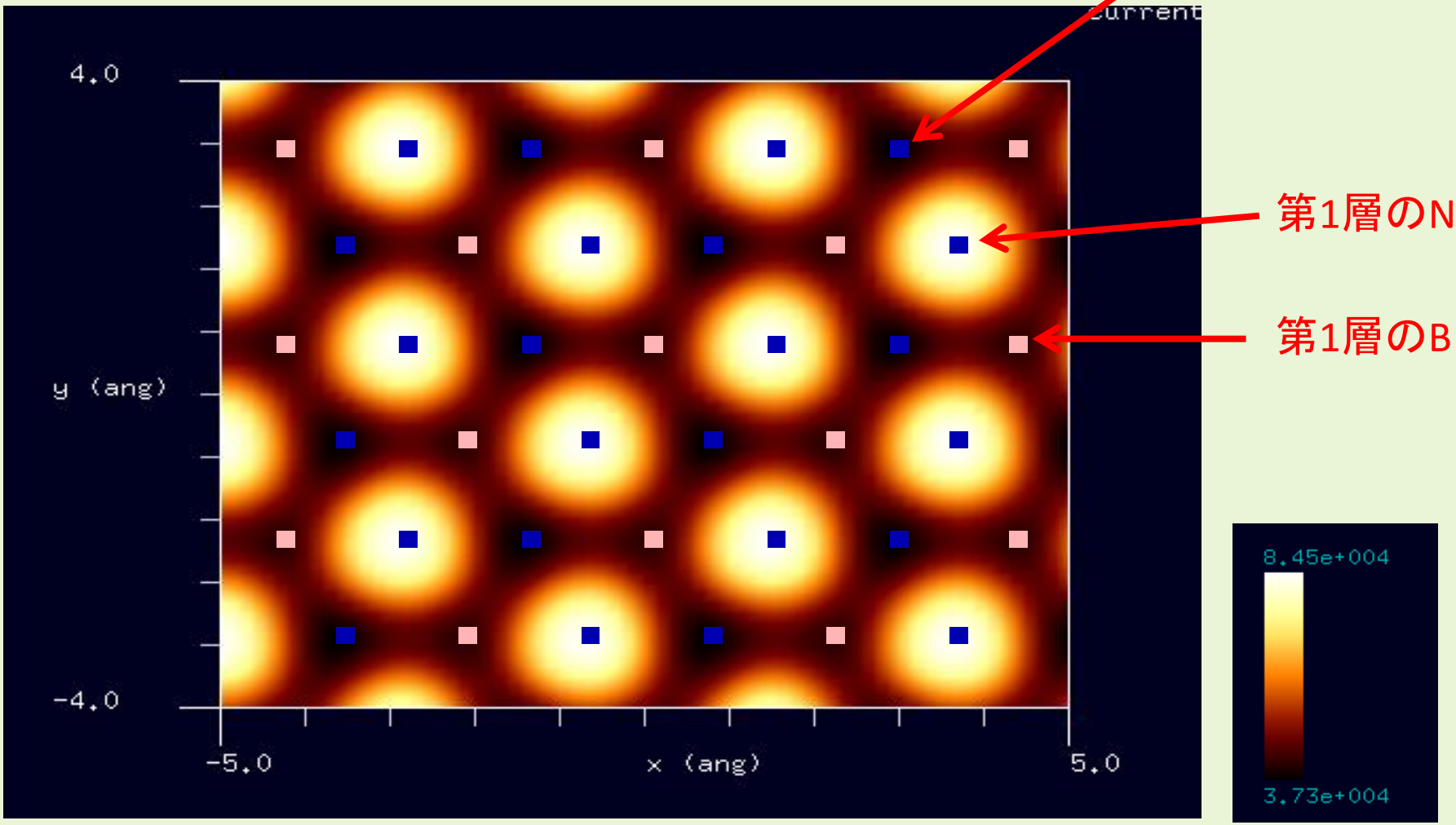
DFTB　BN (窒化ホウ素　発光ダイオード、半導体レーザーの材料)

水素終端されたシリコン探針を使用
六方晶(空間群番号：194)





STM画像: 印加電圧2V, 探針と試料の最短距離1.0Å
最大電流 8.45×10^{4}nA、最小電流 3.73×10^{4} nA

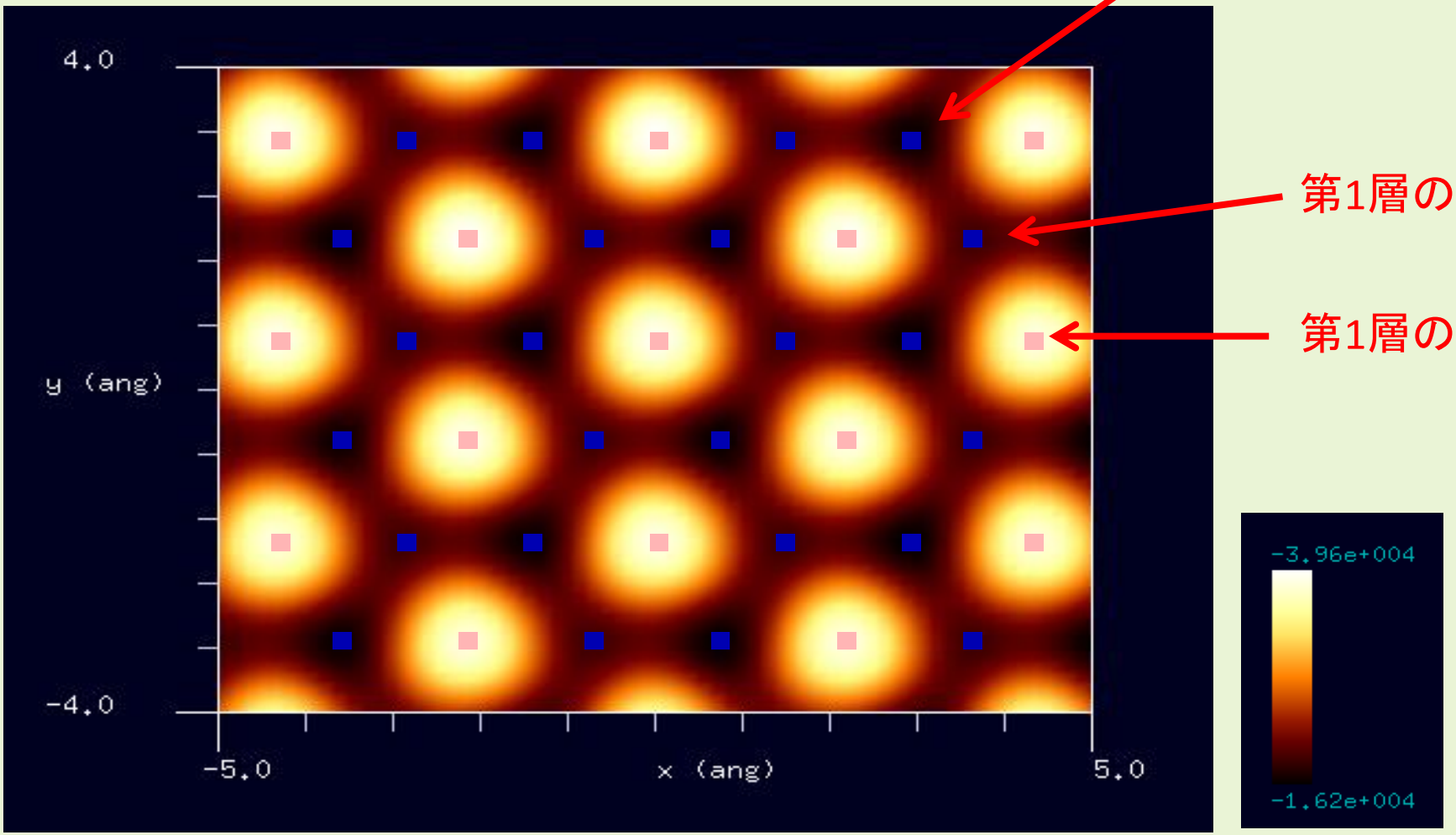


第2層のN

第1層のN

第1層のB

STM画像: 印加電圧-2V, 探針と試料の最短距離1.0Å
最大電流 -1.62×10^{4} nA、最小電流 -3.96×10^{4} nA



第2層のN

第1層のN

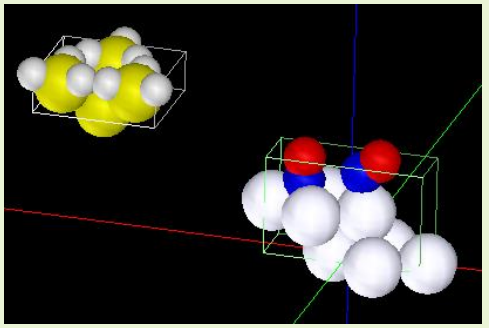
第1層のB

自動車関連分野

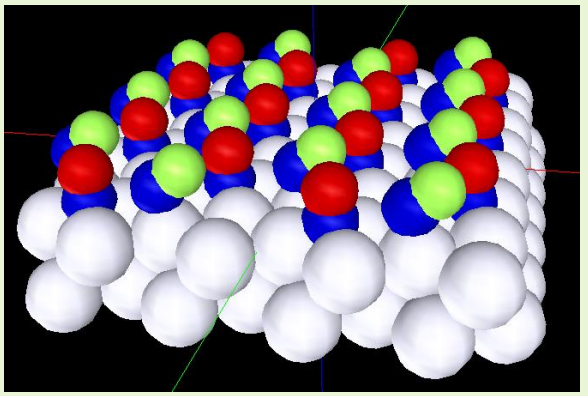
【DFTB】NO/Pt(111)のconstant current STM像

シミュレートモデル

探針：Si_4H_9探針
試料：NO分子が飽和吸着したPt(111)表面
スキャンエリア：20 Å x 20 Å
スキャンモード：Constant current STM
探針バイアス：+1.0 V
電流値：0.5 nA

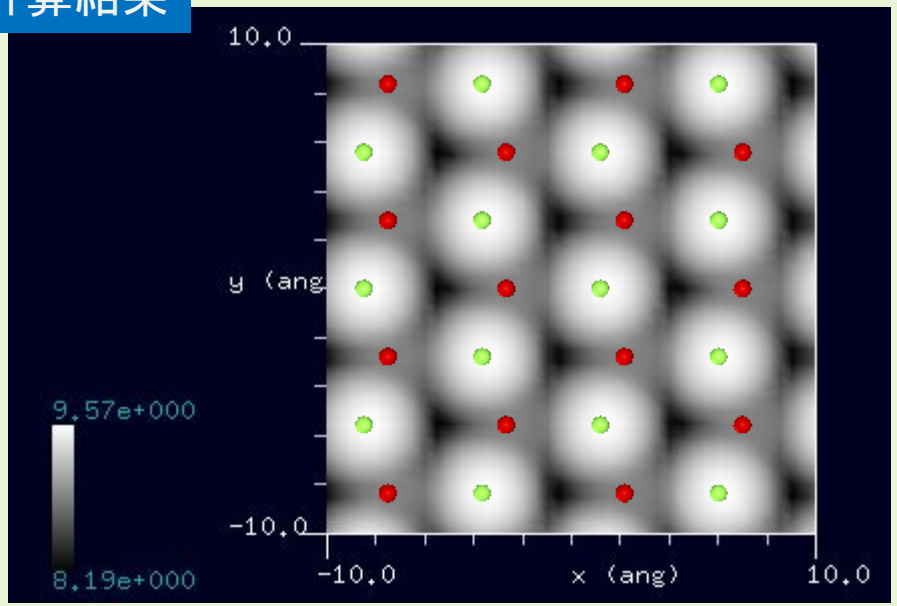


●：酸素、●：窒素、●：白金、
●：シリコン、●：水素

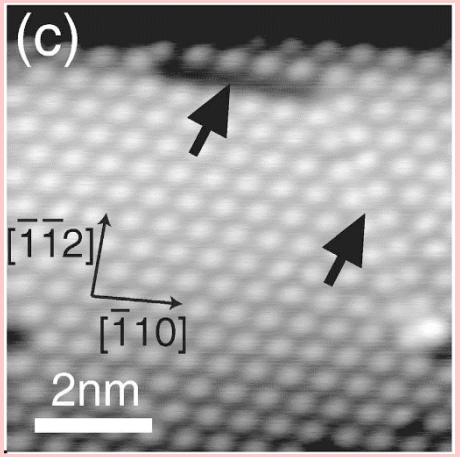


周期的境界条件を課したモデル。便宜上、オントップサイトのO原子を緑色に変えた。

計算結果



cf. Experiment



NO分子が飽和吸着したPt(111)表面のSTM像

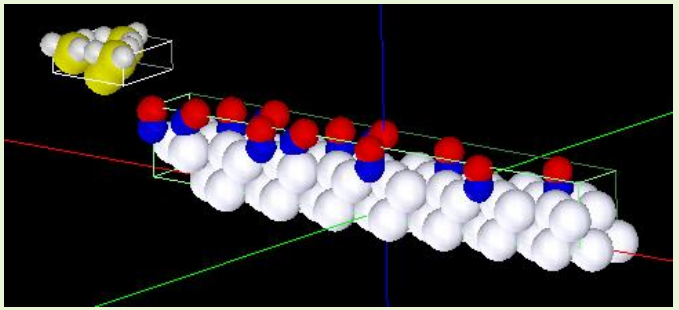
https://www.jstage.jst.go.jp/article/jvsj2/52/2/52_2_47/_pdf

自動車関連分野

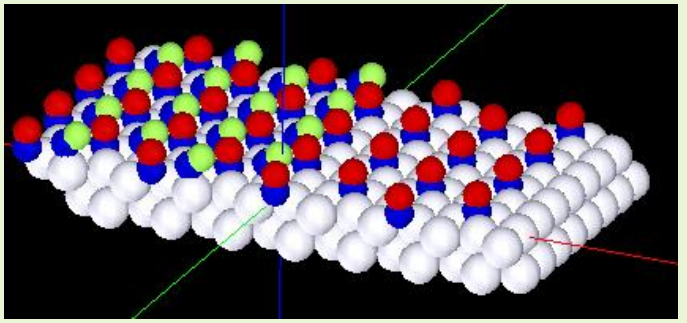
【DFTB】NO/Pt(111)のconstant current STM像

シミュレートモデル

探針：Si_4H_9探針
試料：NO分子が吸着したPt(111)表面
スキャンエリア：35 Å x 20 Å
スキャンモード：Constant current STM
探針バイアス：+1.0 V
電流値：0.5 nA

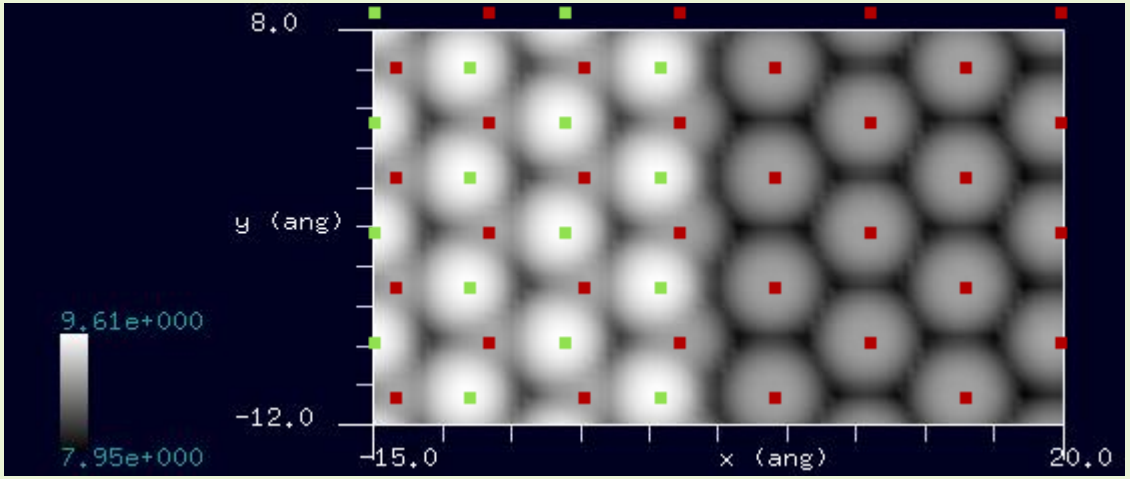


●：酸素、●：窒素、●：白金、
●：シリコン、●：水素

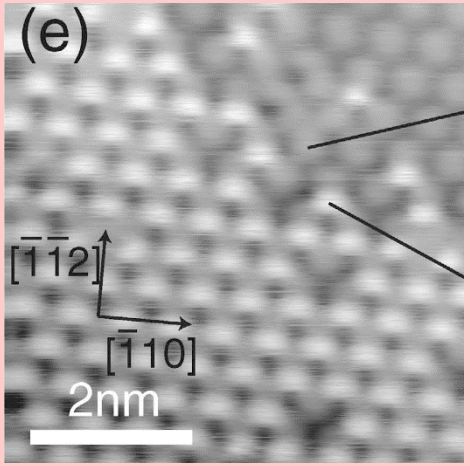


周期的境界条件を課したモデル。便宜上、オントップサイトのO原子を緑色に変えた。

計算結果



cf. Experiment

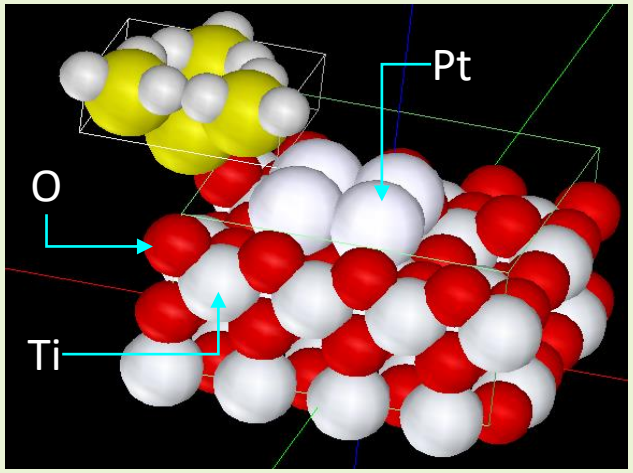


NO分子が吸着したPt(111)表面のSTM像
https://www.jstage.jst.go.jp/article/jvsj2/52/2/52_2_47/_pdf

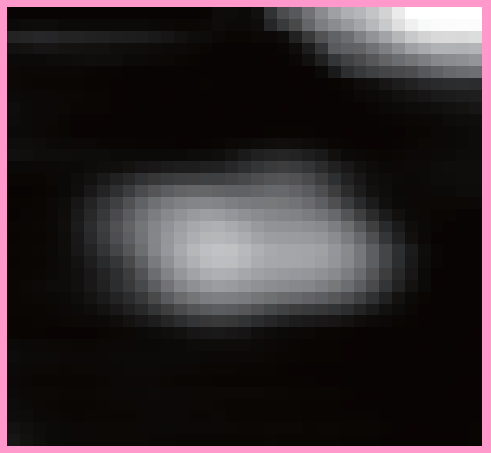
自動車関連分野

【DFTB】TiO_2(110)上のPtのSTM像

実験画像（Pt_4の場合）



実測画像

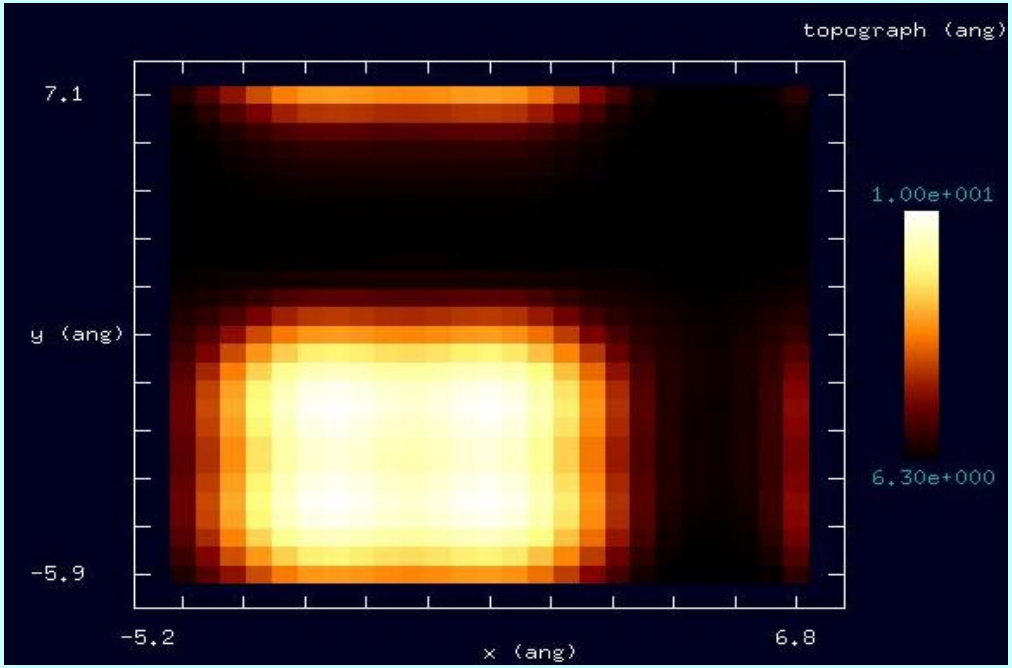


スキャンエリア：3.5×3.5nm^2
バイアス、電流値は未記載

表面科学Vol. 31, No. 10, pp. 537-542, 2010

Constant current STMシミュレーション

探針：Si_4H_9
試料：TiO_2上のPt_4
スキャンエリア：12 Å ×13 Å
スキャンモード：constant current STM
探針バイアス：+1.0[V]
電流値：400[nA]



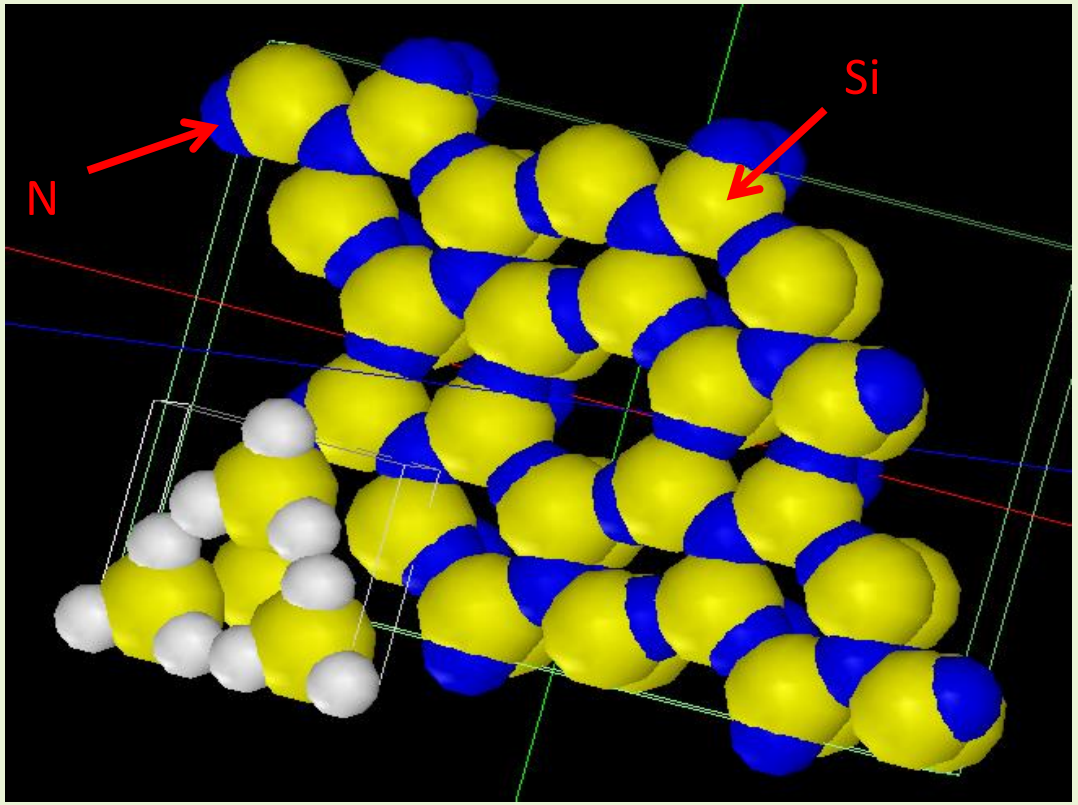
画像はコントラスト調整後

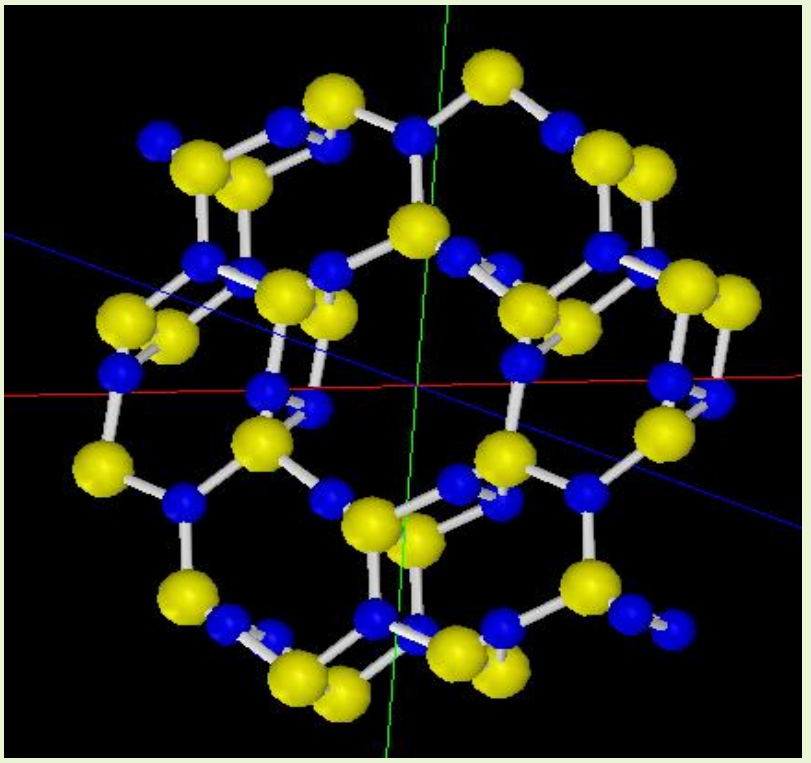
自動車関連分野

DFTB

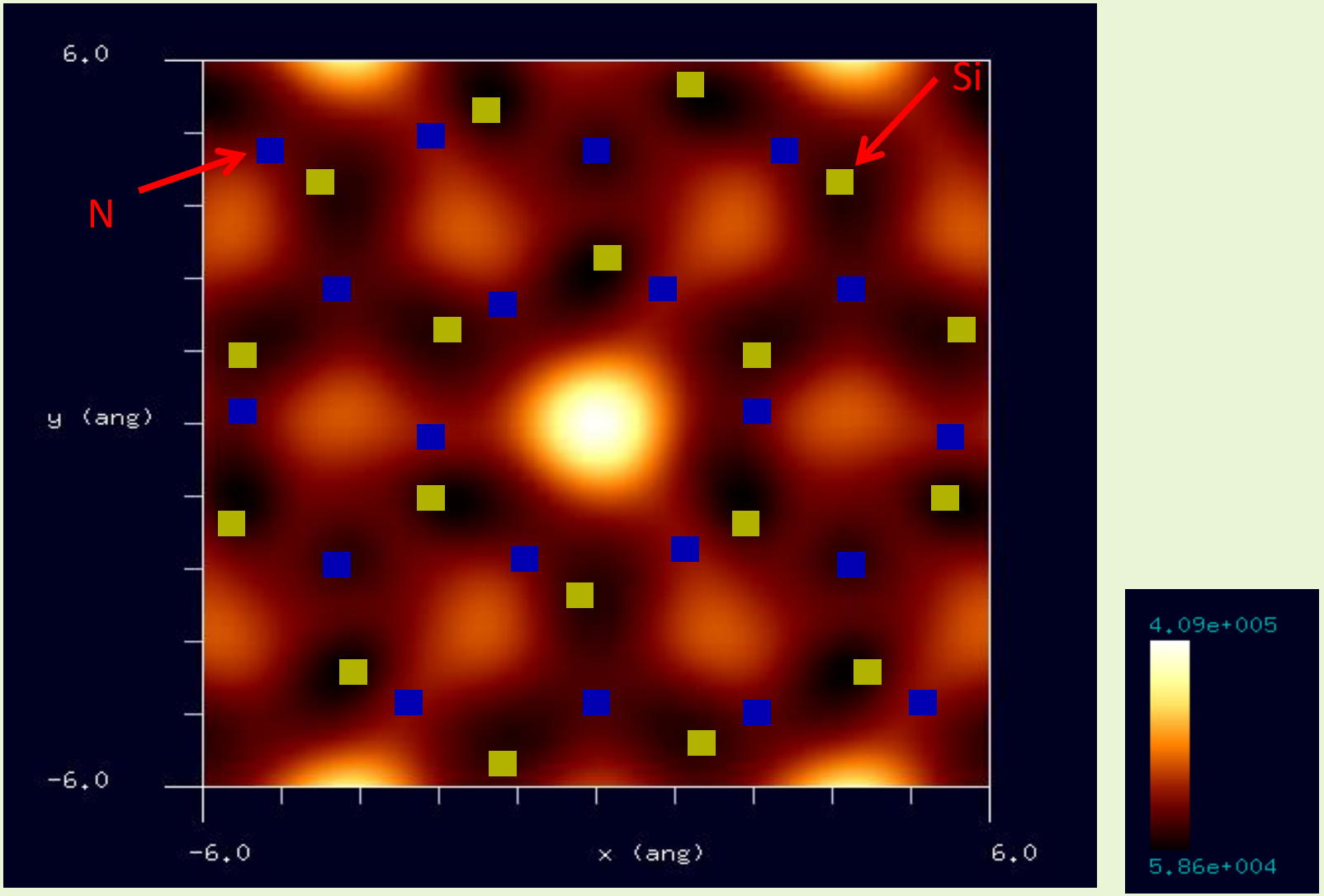
Si_3N_4 (シリコンナイトライド、エンジン部品に使用されるファインセラミック)

水素終端されたシリコン探針を使用
六方晶(空間群番号:176)
(001)面

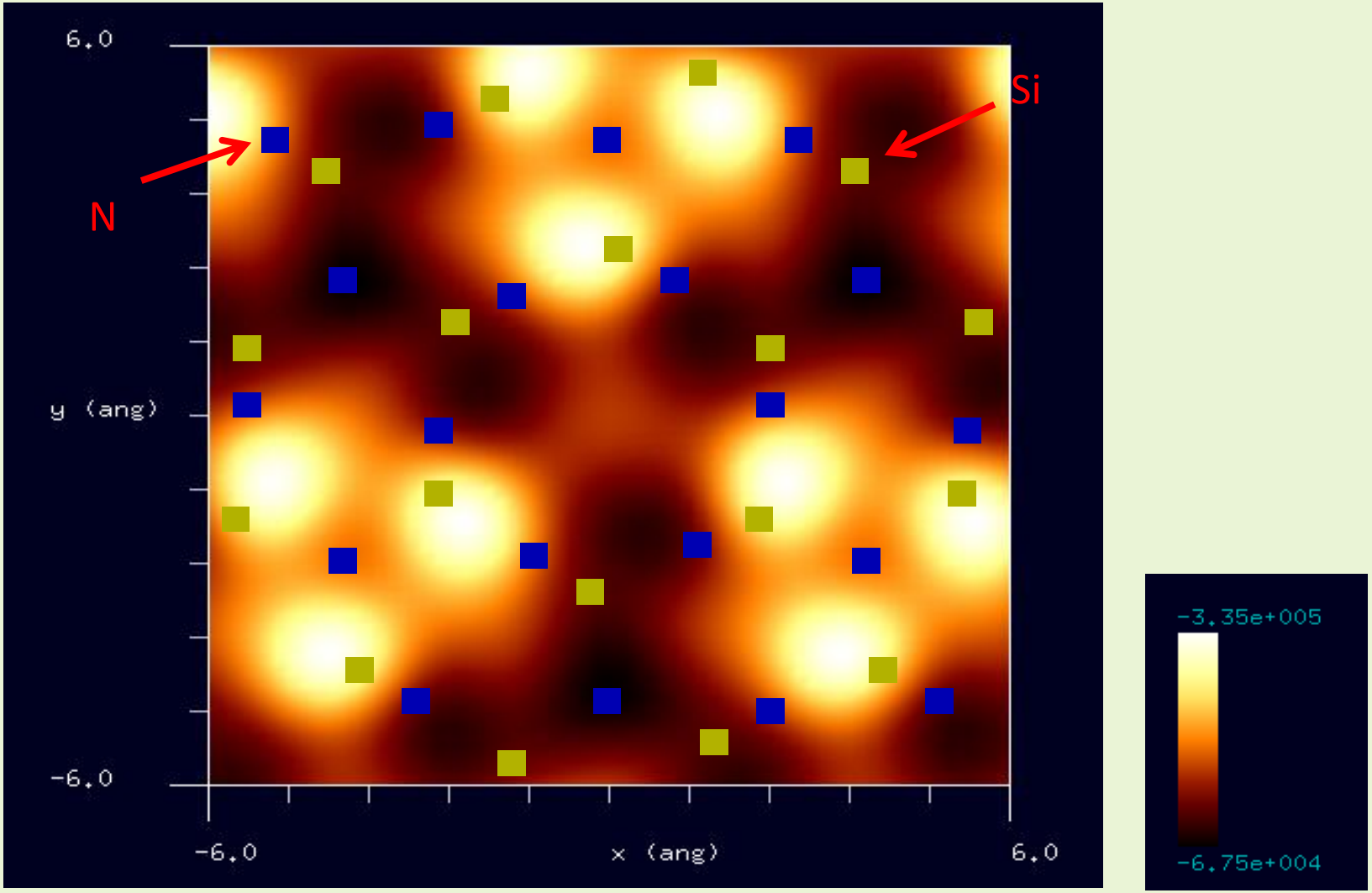




STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.0Å
最大電流4.09×10^{5} nA、最小電流5.86×10^{4} nA



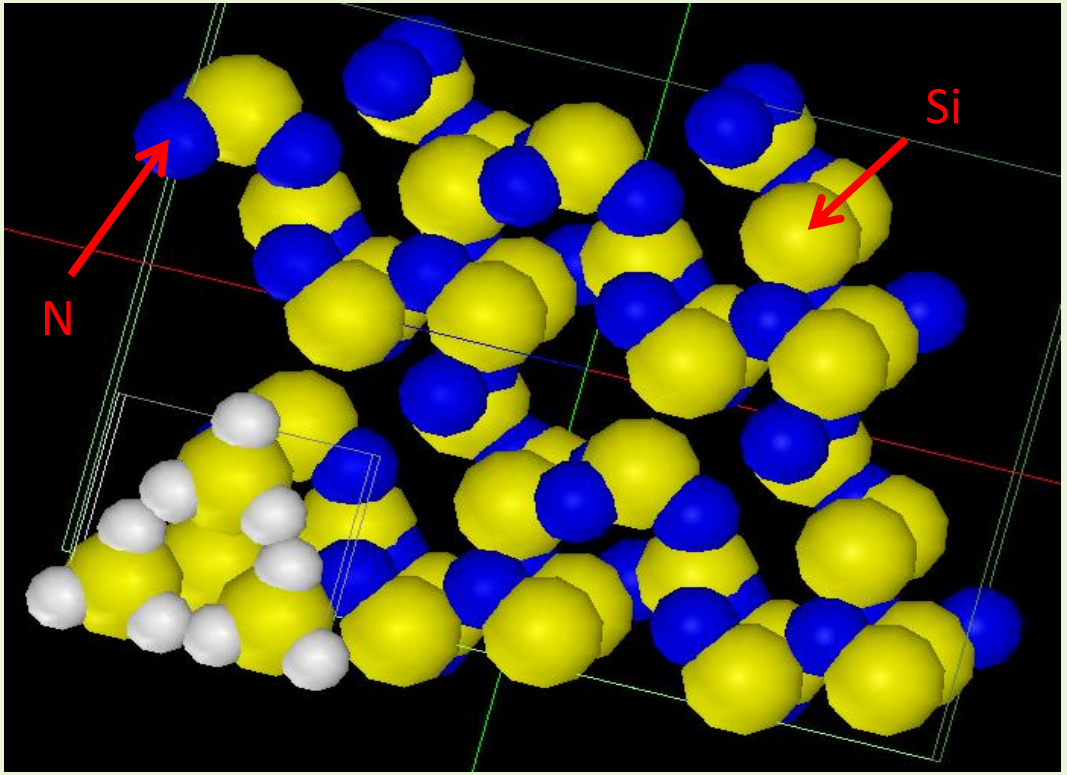
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離2.0Å
最大電流 -6.75×10^{4} nA、最小電流 -3.35×10^{5} nA

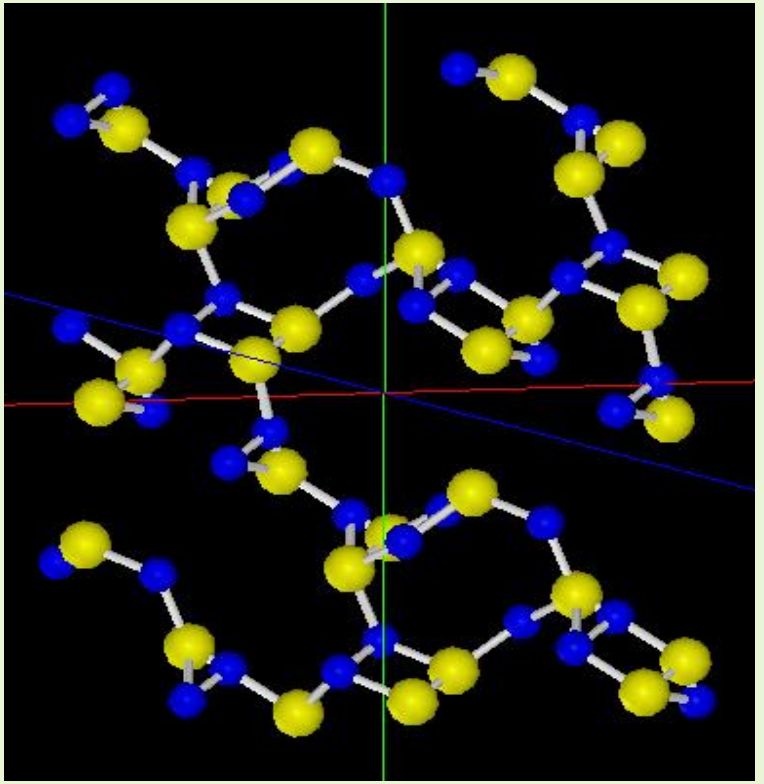


DFTB

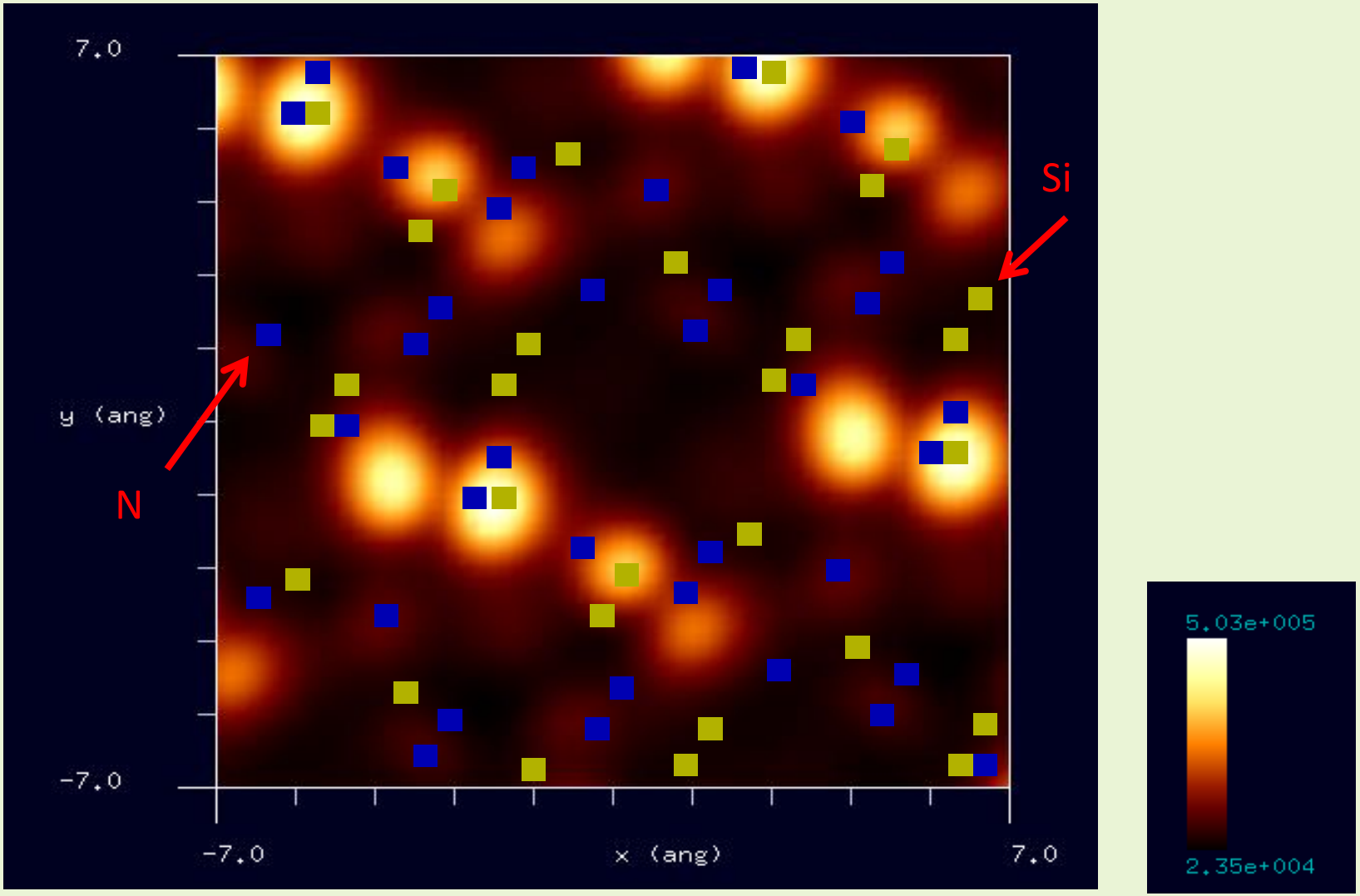
Si_3N_4 (シリコンナイトライド、エンジン部品に使用されるファインセラミック)

水素終端されたシリコン探針を使用
六方晶(空間群番号:176)
(111)面

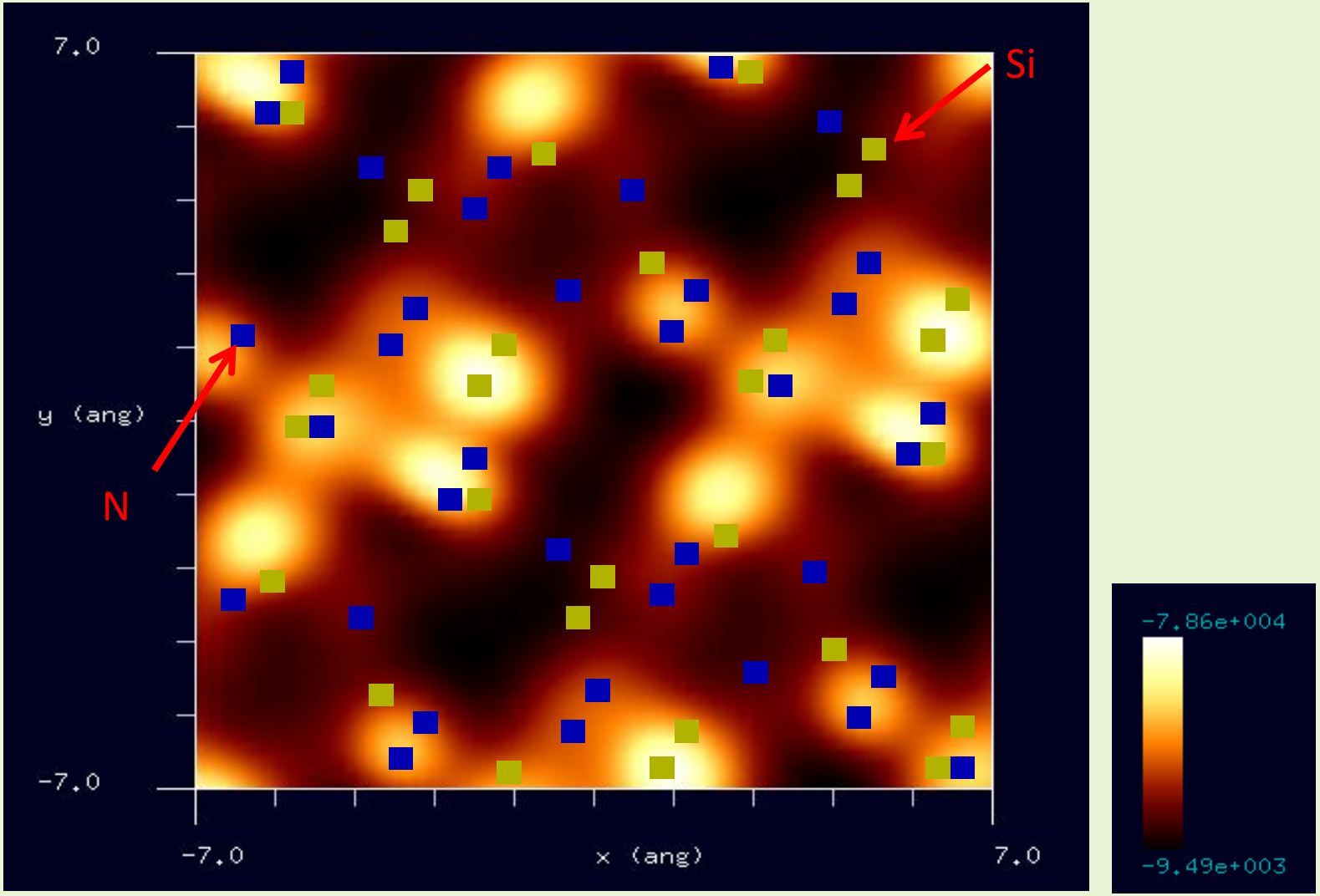




STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.1 Å
最大電流 5.03×10^{5} nA、最小電流 2.35×10^{4} nA



STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.8Å
最大電流 -9.49×10^{3} nA、最小電流 -7.86×10^{4} nA

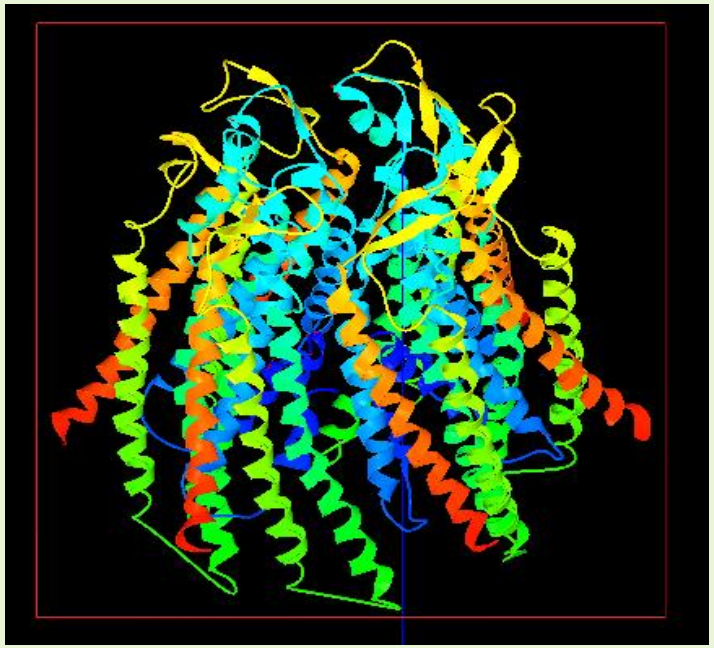


バイオ関連

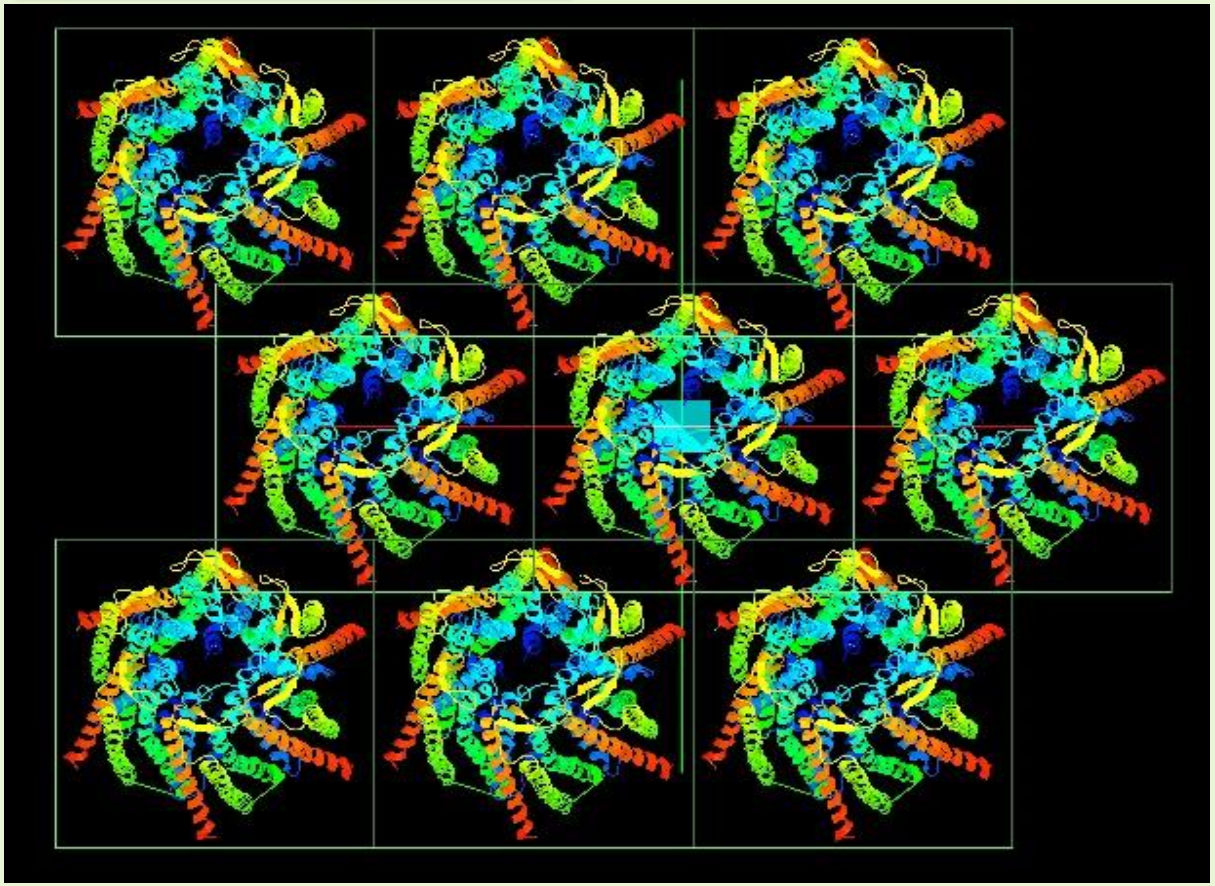
GeoAFM

整列したコネクソン(connexon、タンパク質の複合体で細胞間のチャンネルの働きをする)

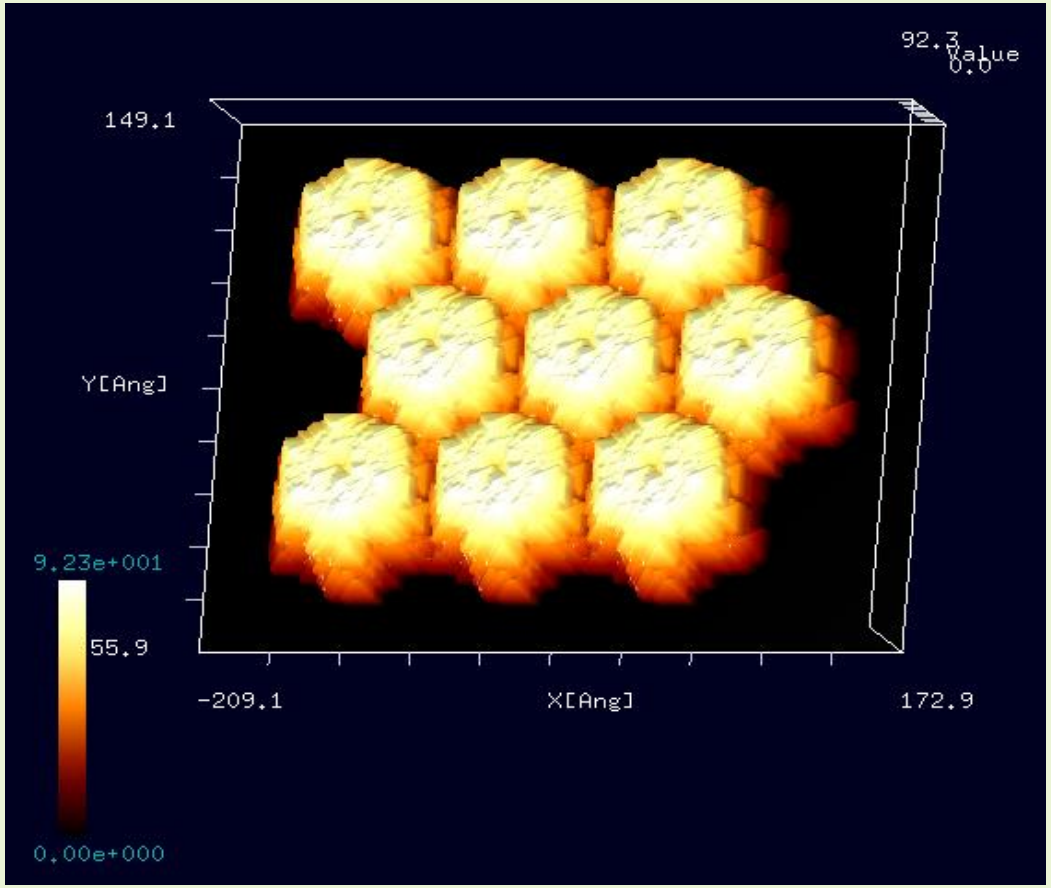
Protein Data Bank (http://pdbj.org/mine/summary/2zw3)
2ZW3: Structure of the connexin-26 gap junction channel at 3.5 angstrom resolution



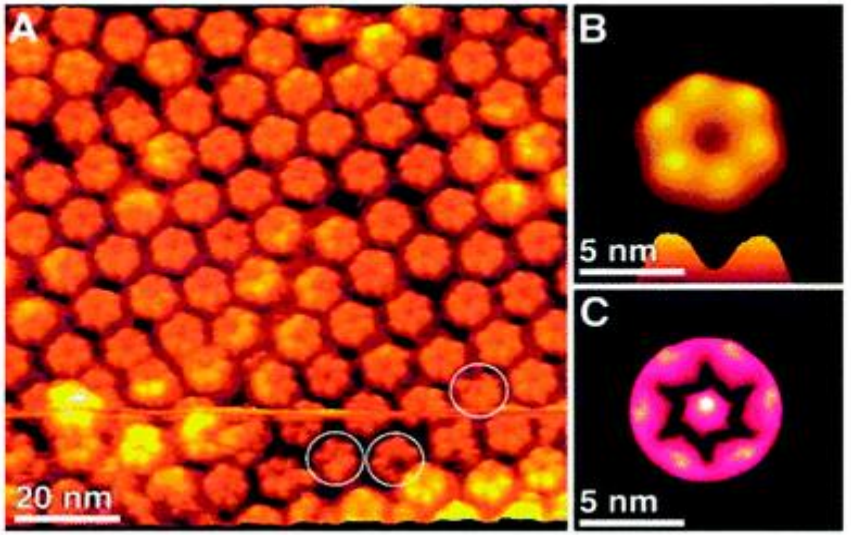
ピラミッド形探針を使用



GeoAFMによるAFMシミュレーション画像



AFM実験画像



F. Variola, ‘Atomic force microscopy in biomaterials surface science’, *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2015, 17, 2950.

バイオ関連分野

生体物質のAFM像

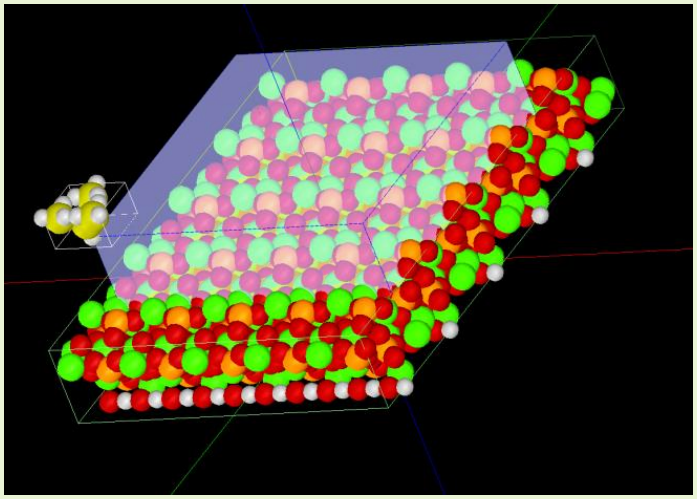
実験例: http://www.asylumtec.co.jp/gallery/bio_new.html
生体物質のμmオーダーのAFM像が多数ある。

計算不可能

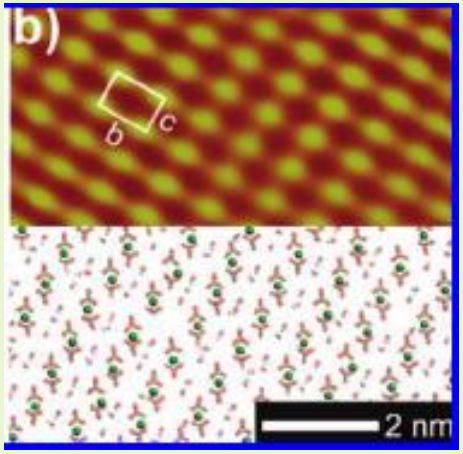
いずれもμmオーダーあるいはそれ以上の大きさ。
SPMシミュレータはμmオーダーのシミュレートに対応していない。
また、生体物質の分子構造データもしくは形状データを得ることができず、シミュレートできない。

バイオ関連分野

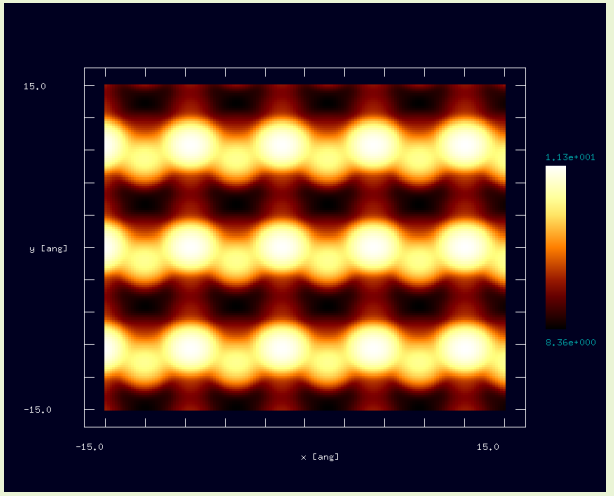
【CG】ハイドロキシアパタイト AFM



探針: シリコン
試料表面: HAP(100)



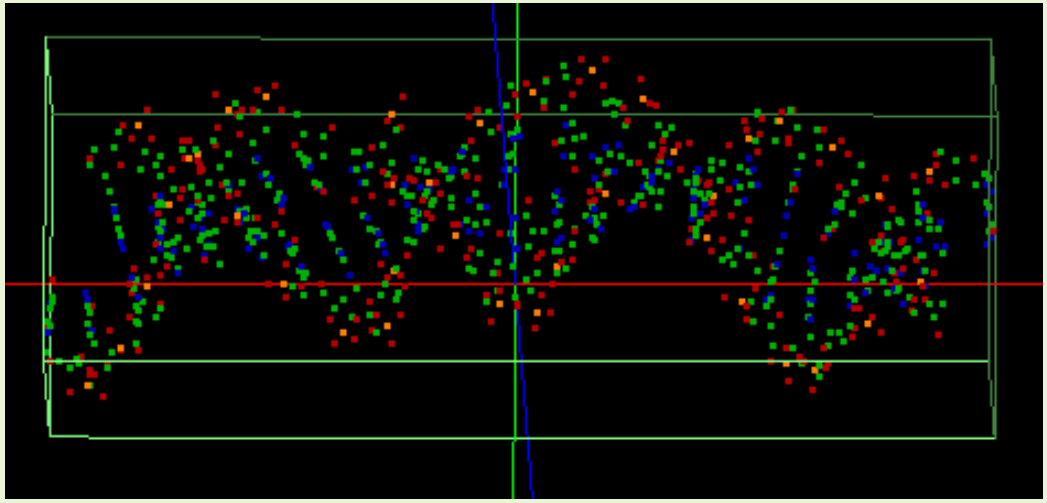
AFM実験結果
Langmuir, 24, 12446-12451 (2008)



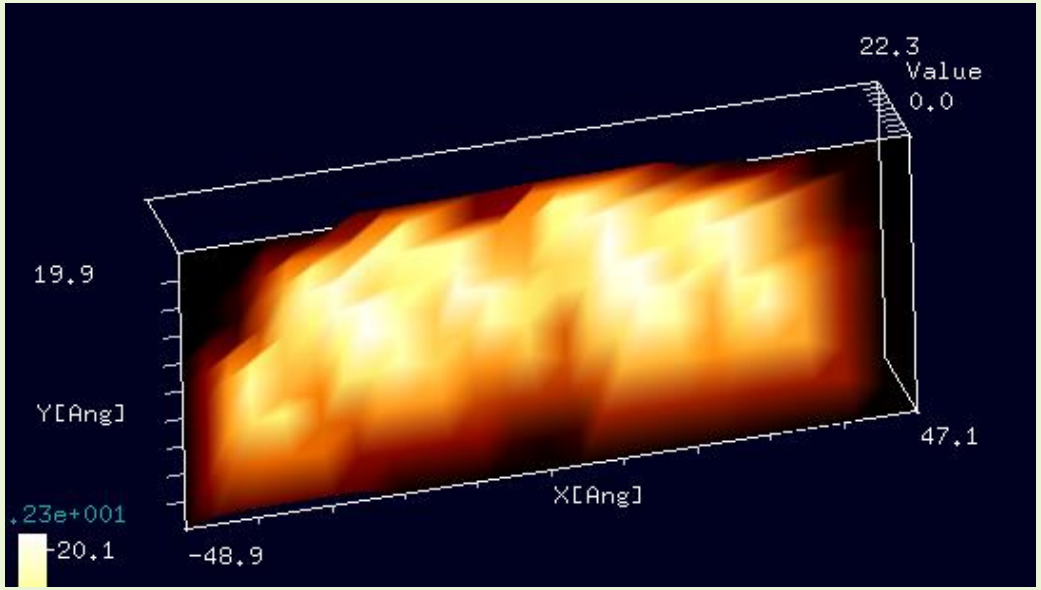
CGAFM 力一定像
原子位置固定

macroKPFM

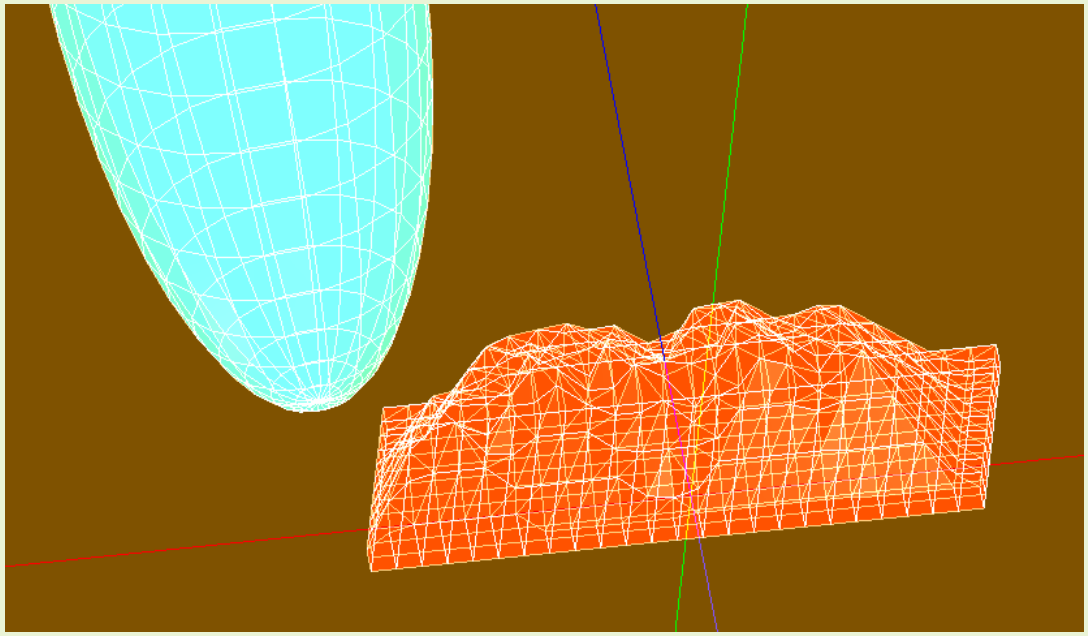
均一な表面電荷を持つDNA分子に対して探針が感じる力の分布



DNAの分子構造図



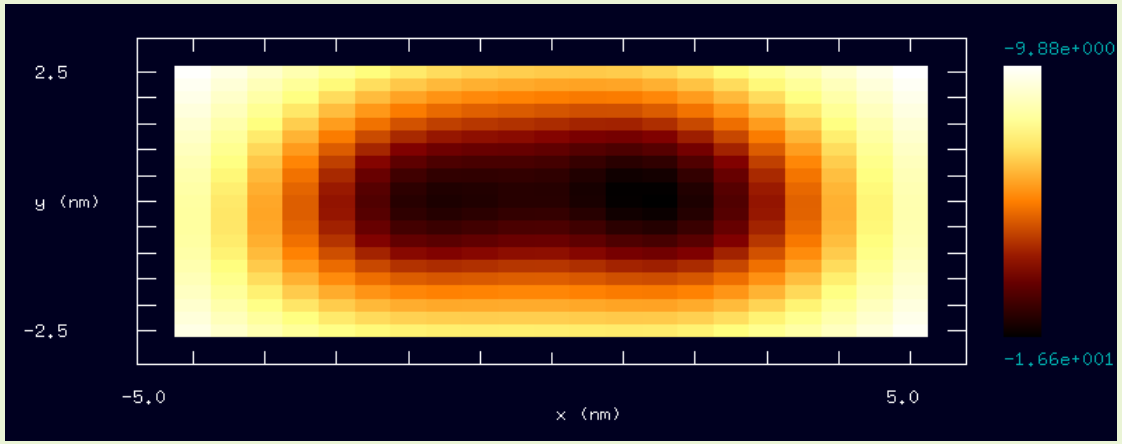
DNA分子に対して、0.4[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 0.875[nm]

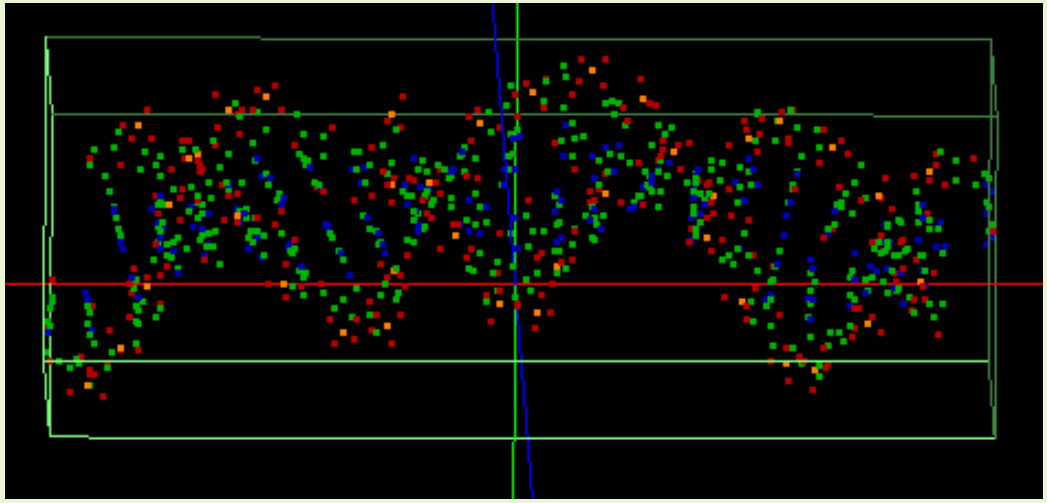
試料形状　横: 9.6[nm]
　　縦: 4[nm]
　　高さ: 2.63[nm]
試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
1.0E−6[C/m^2]



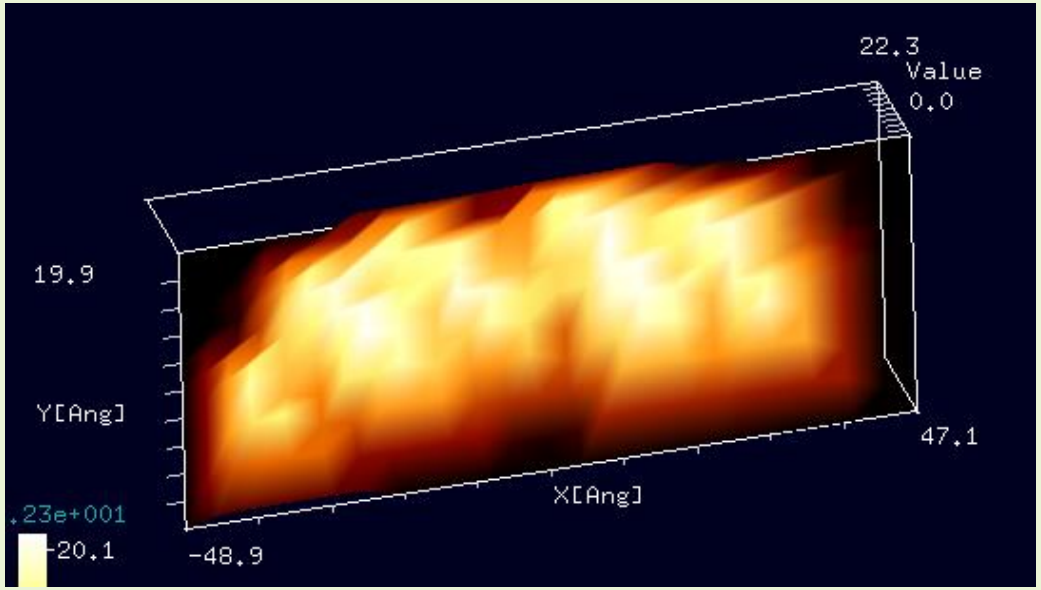
探針の感じるz方向の
力の分布
最大値: −9.88[pN]
最小値: −16.6[pN]

macroKPFM

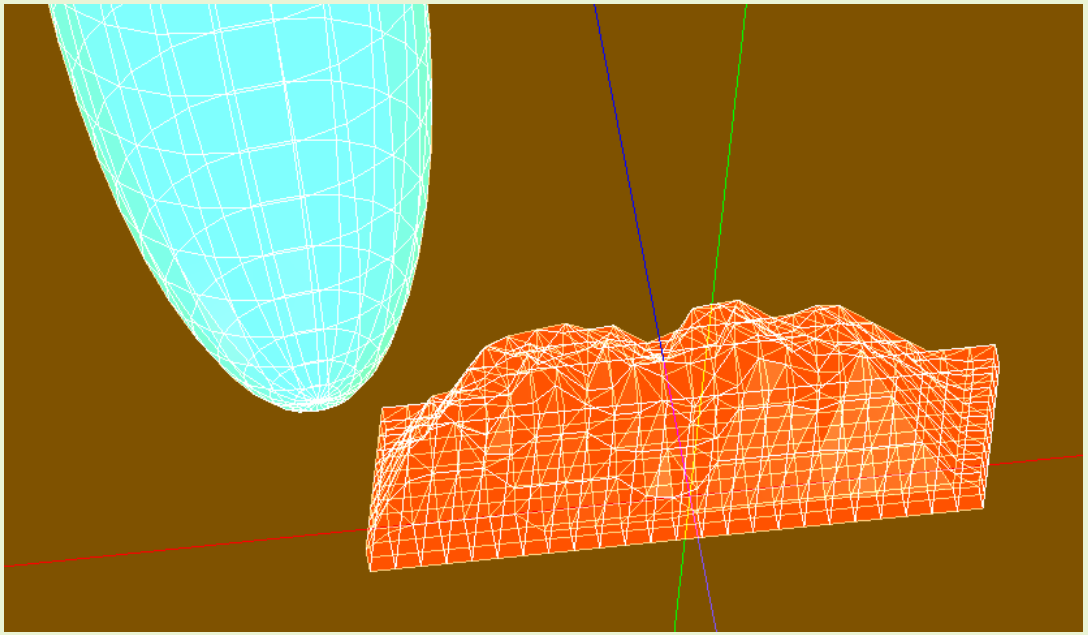
均一な表面電荷を持つDNA分子のLCPD像



DNAの分子構造図



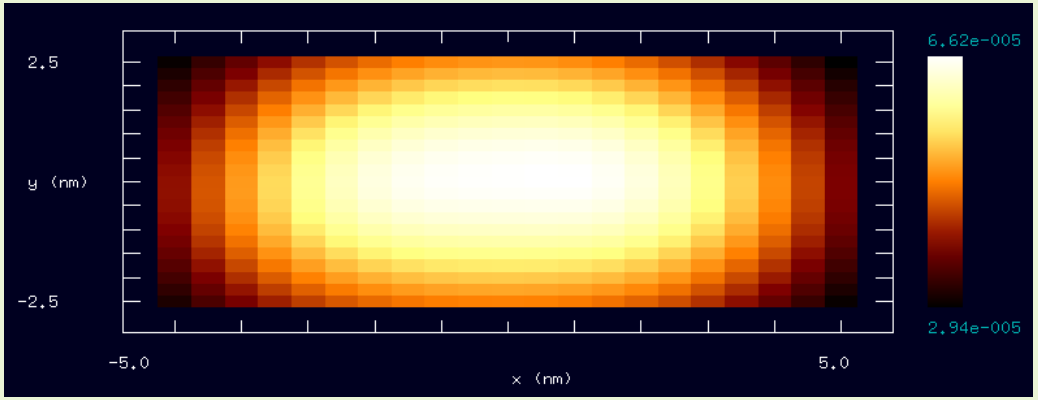
DNA分子に対して、0.4[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 0.875[nm]

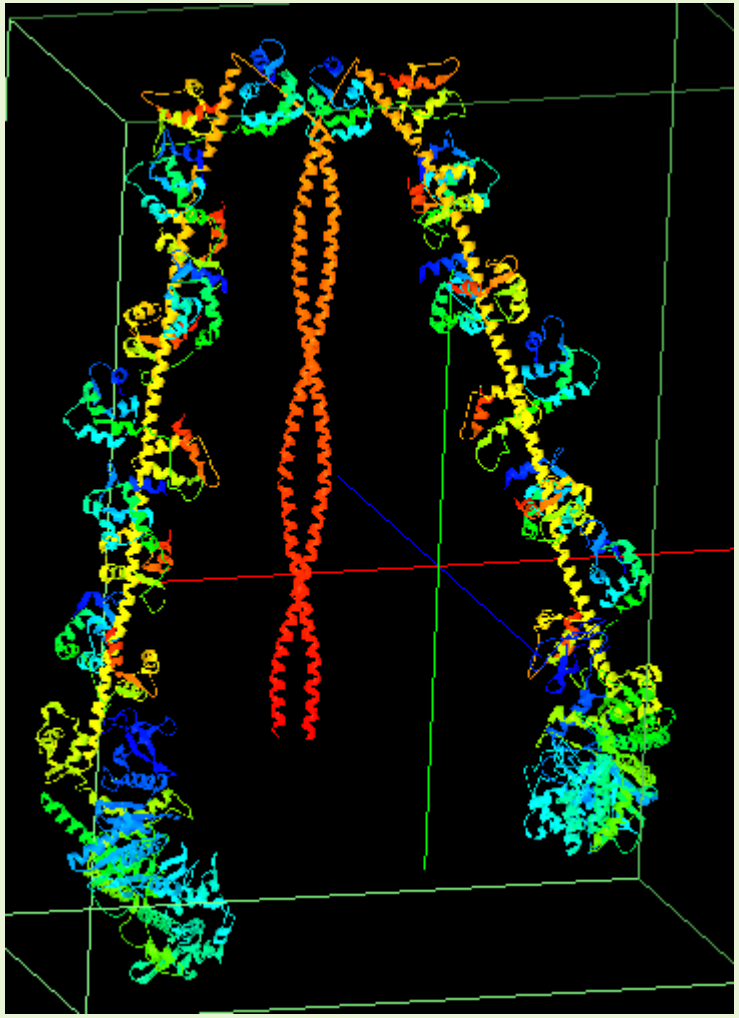
試料形状　横: 9.6[nm]
　　縦: 4[nm]
　　高さ: 2.63[nm]
試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
1.0E-6[C/m^2]



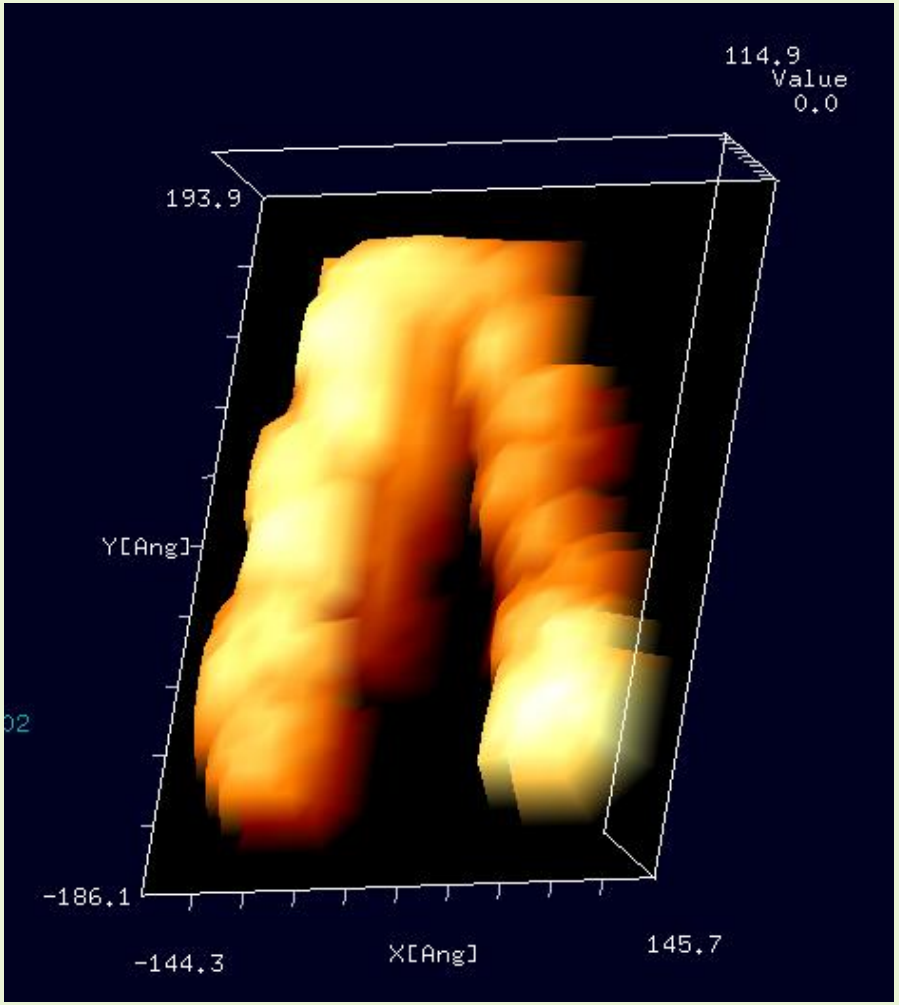
試料のLCPD像
最大値: 6.62E-5[V]
最小値: 2.94E-5[V]

macroKPFM

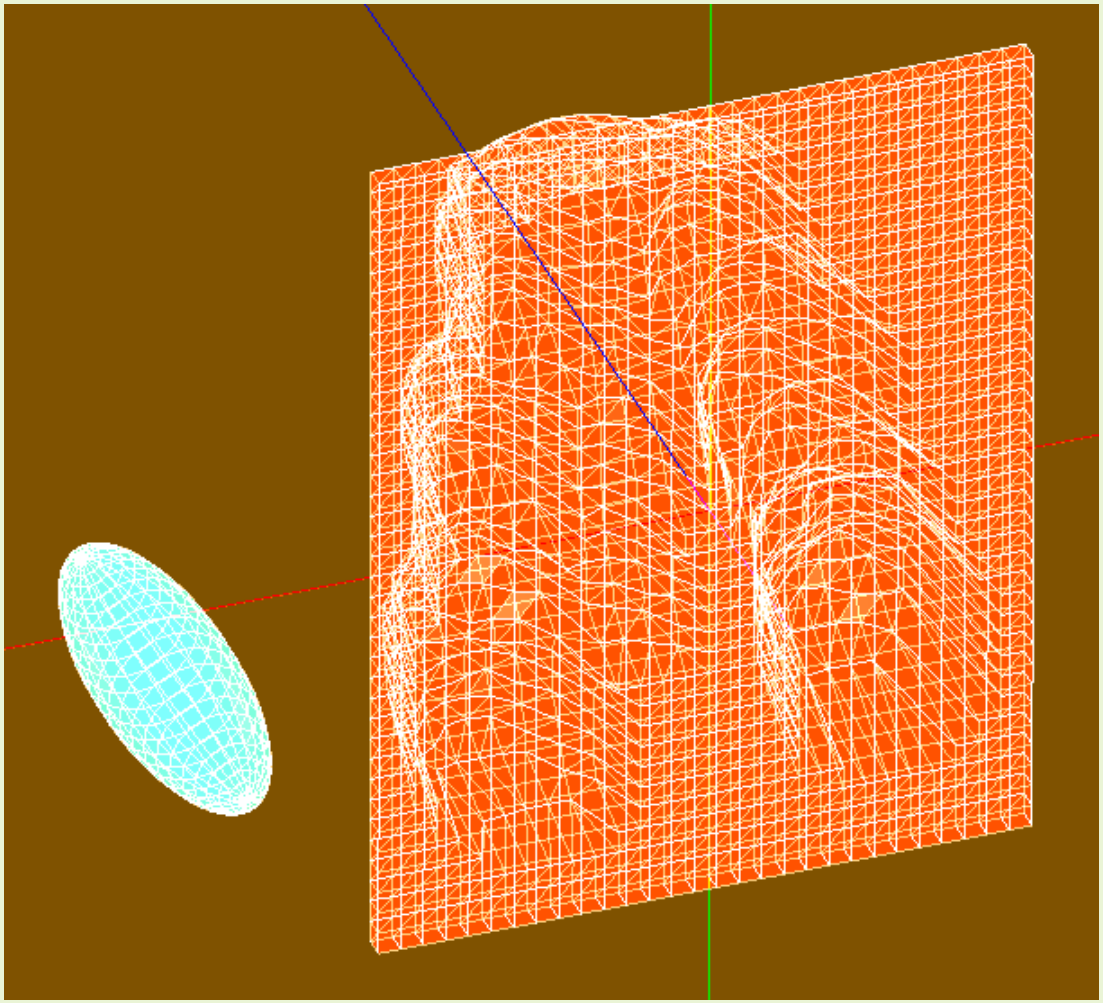
均一な表面電荷を持つミオシン分子に対して探針が感じる力の分布



DNAの分子構造図



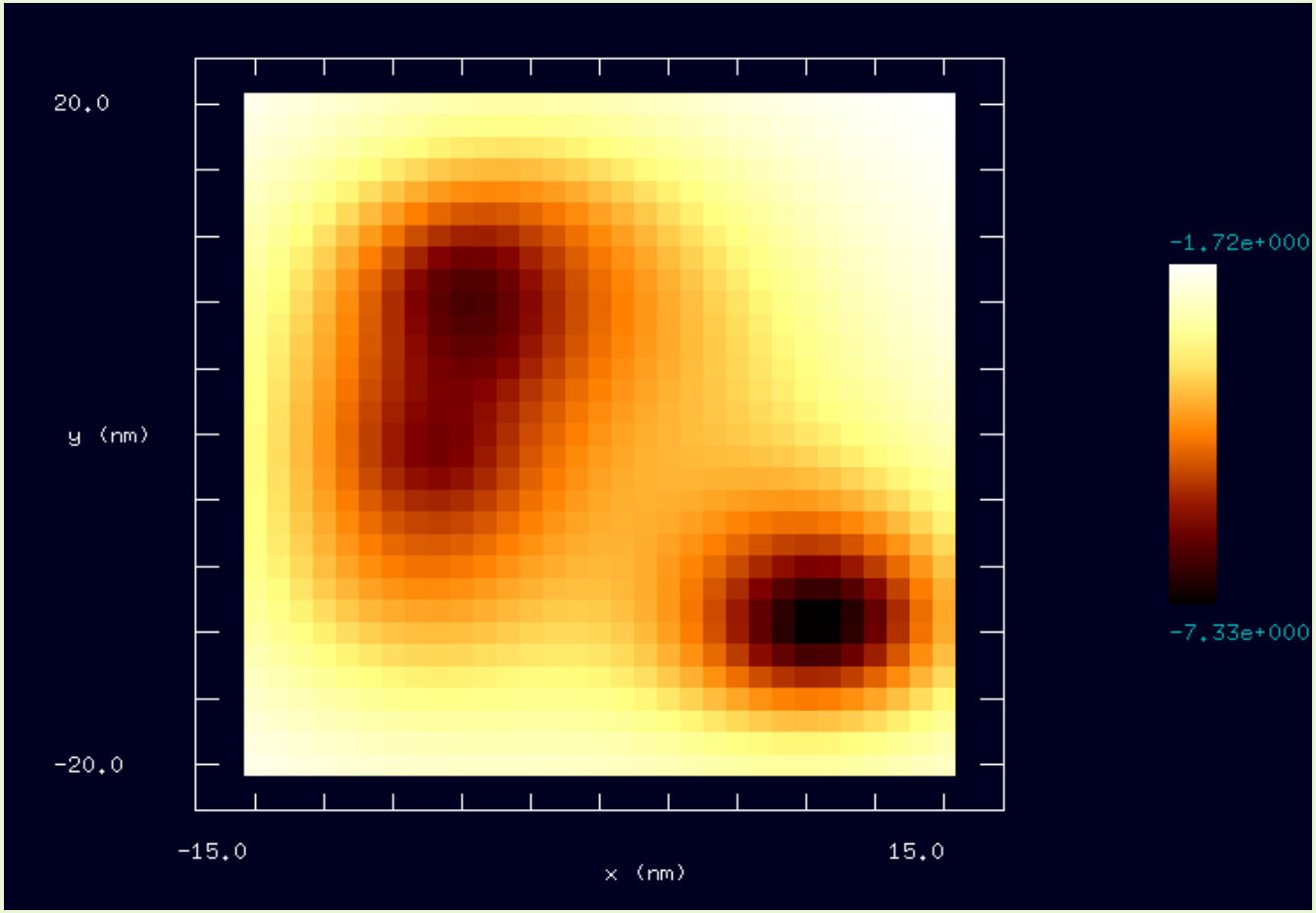
DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 2.01[nm]

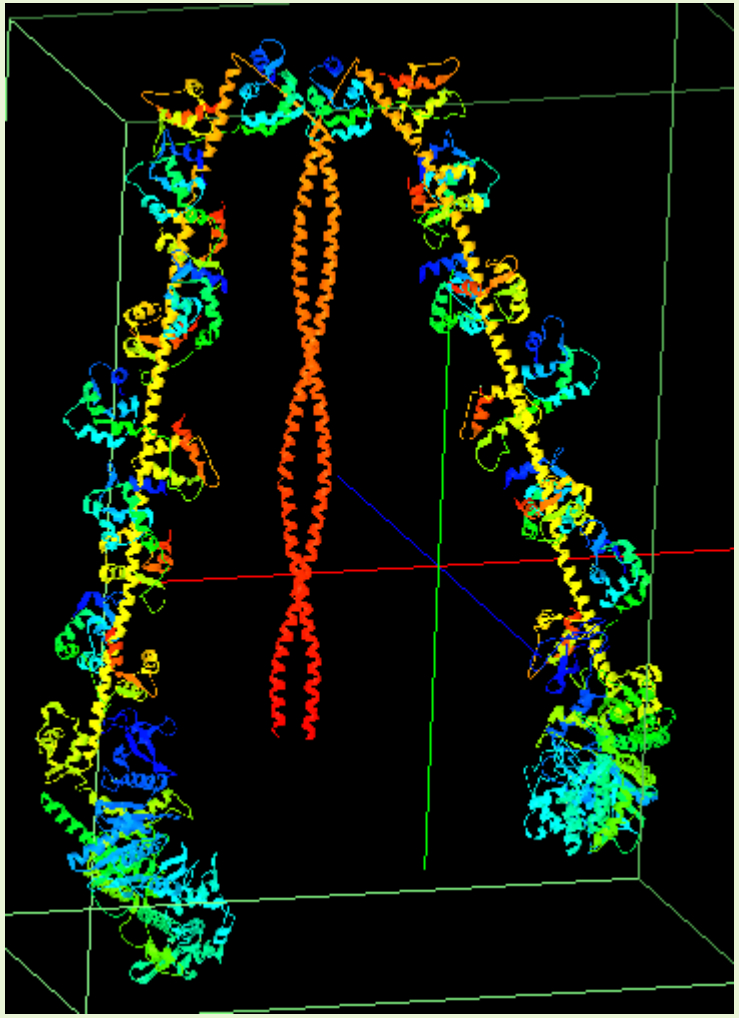
試料形状　横: 29[nm]
　　縦: 38[nm]
　　高さ: 12.5[nm]
試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
　　1.0E−6[C/m^2]



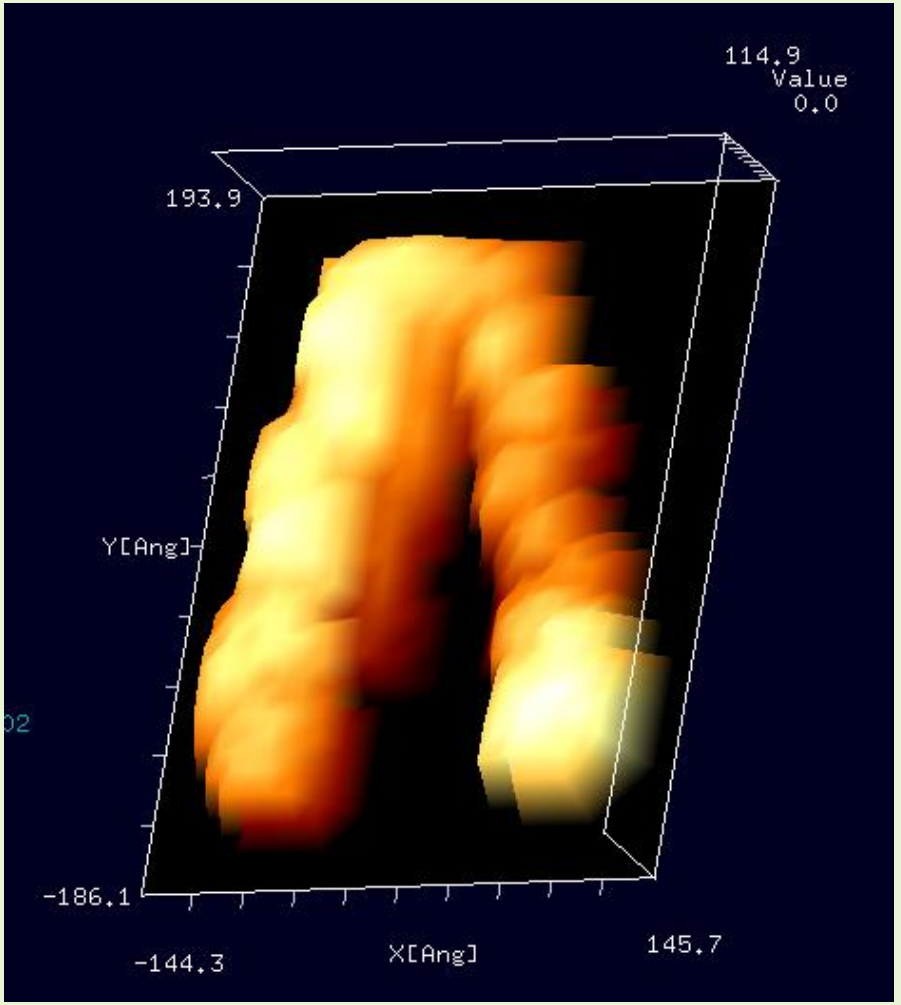
探針の感じるz方向の力の分布
最大値: −1.72[pN]
最小値: −7.33[pN]

macroKPFM

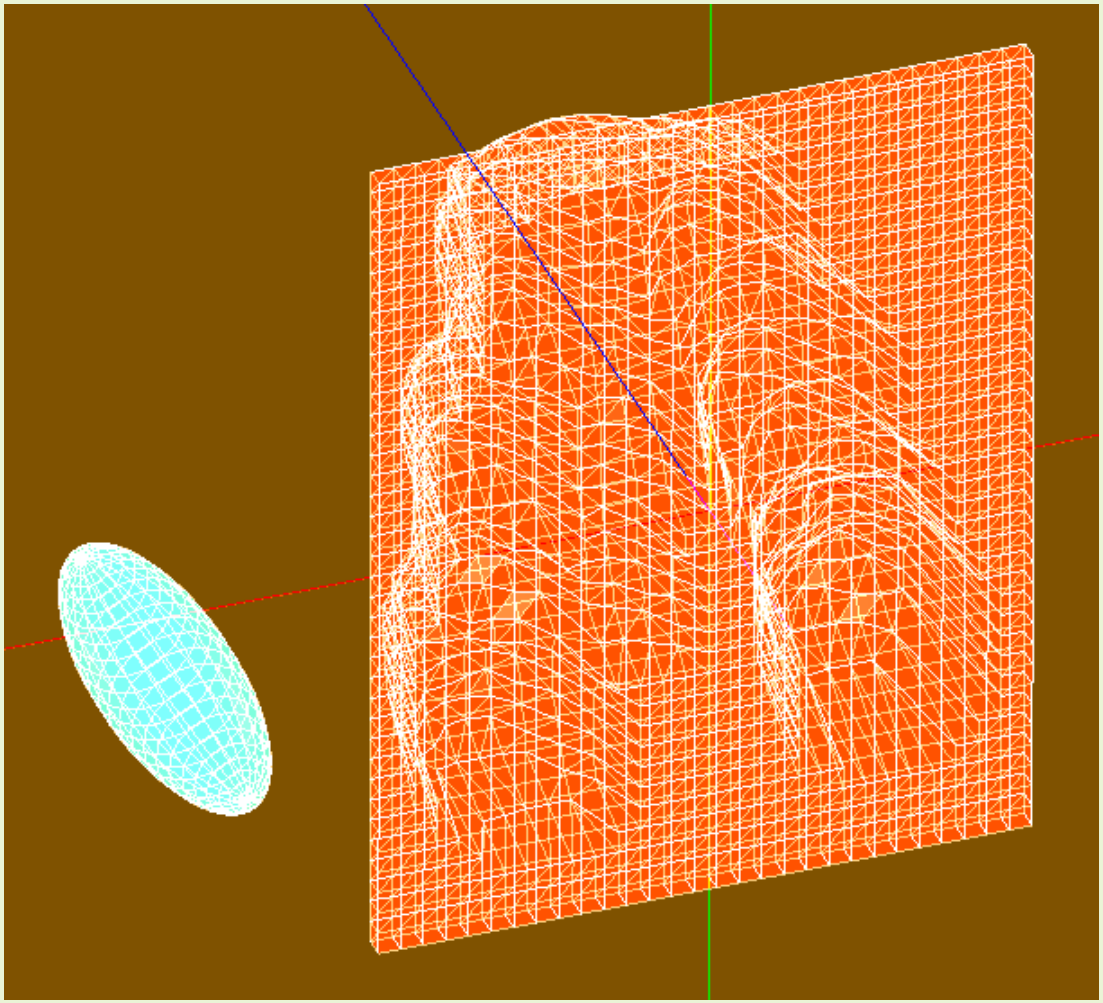
均一な表面電荷を持つミオシン分子のLCPD像



DNAの分子構造図



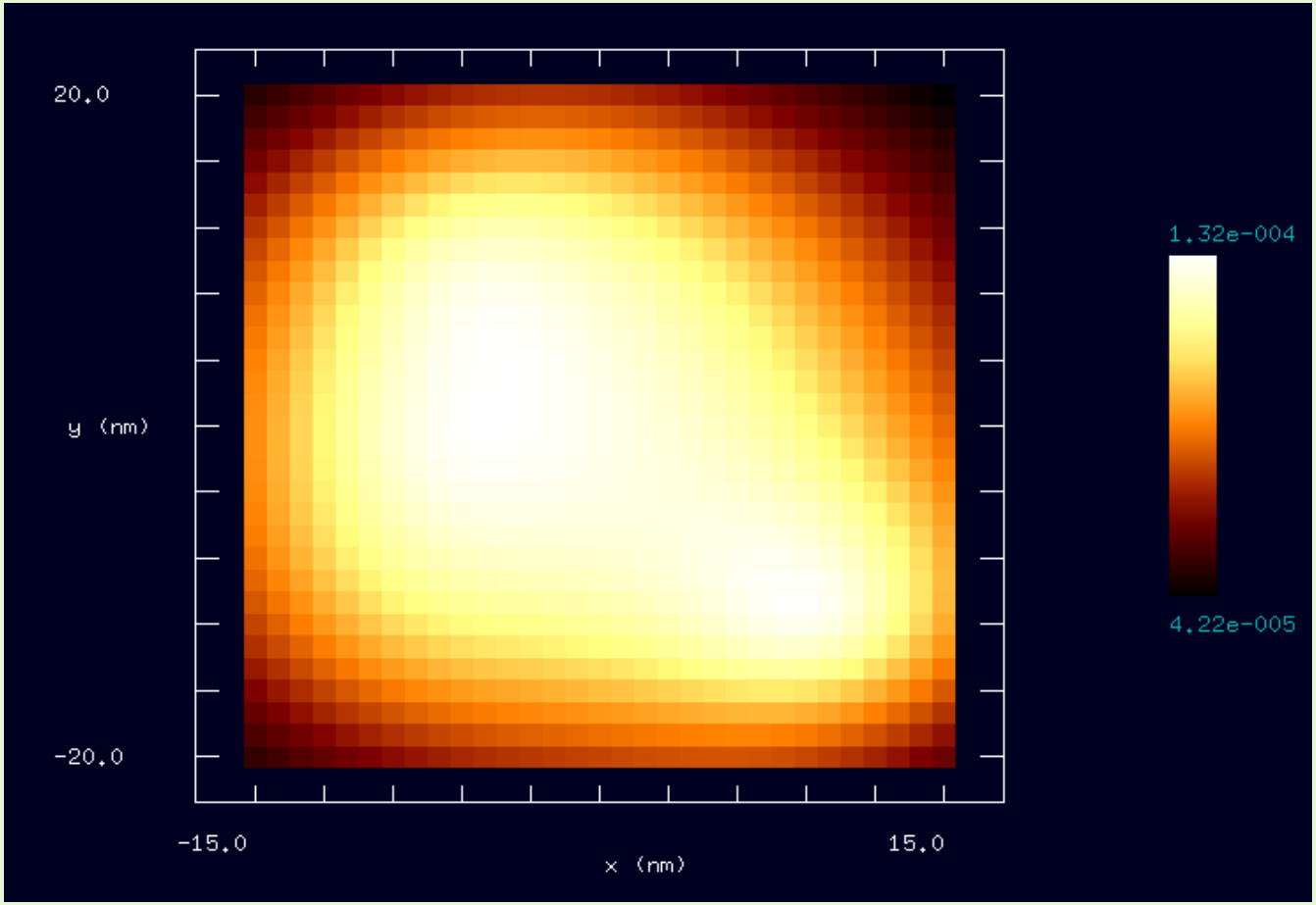
DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 2.01[nm]

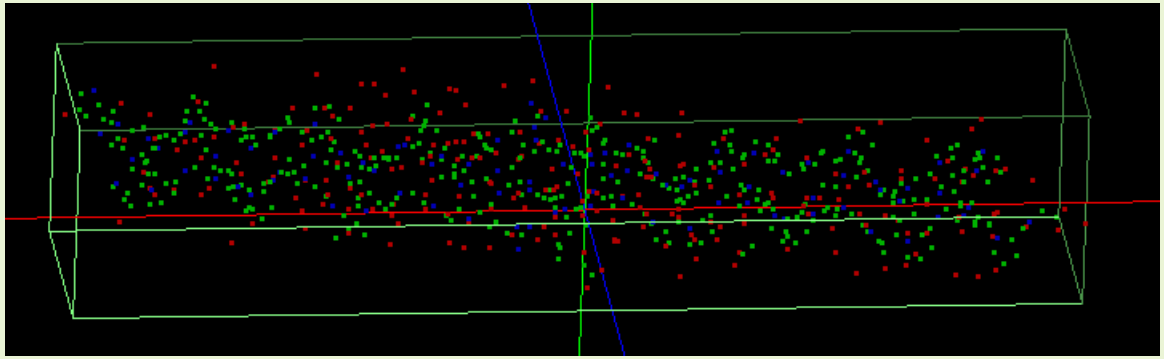
試料形状　横: 29[nm]
　　縦: 38[nm]
　　高さ: 12.5[nm]
試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
　　1.0E-6[C/m^2]



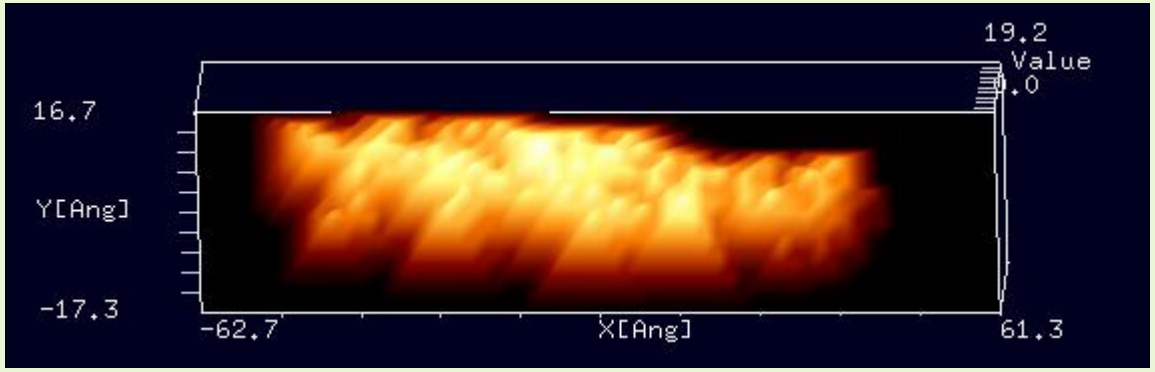
試料のLCPD像
最大値: 1.32E-4[V]
最小値: 4.22E-5[V]

macroKPFM

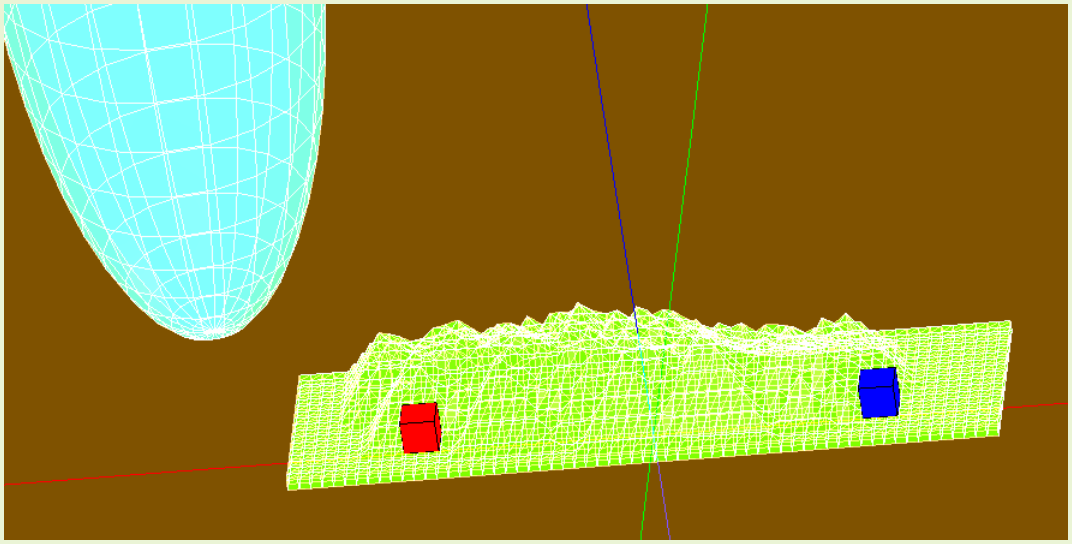
正負の電荷が埋め込まれたコラーゲン分子に対して探針が感じる力の分布



コラーゲンの分子構造図



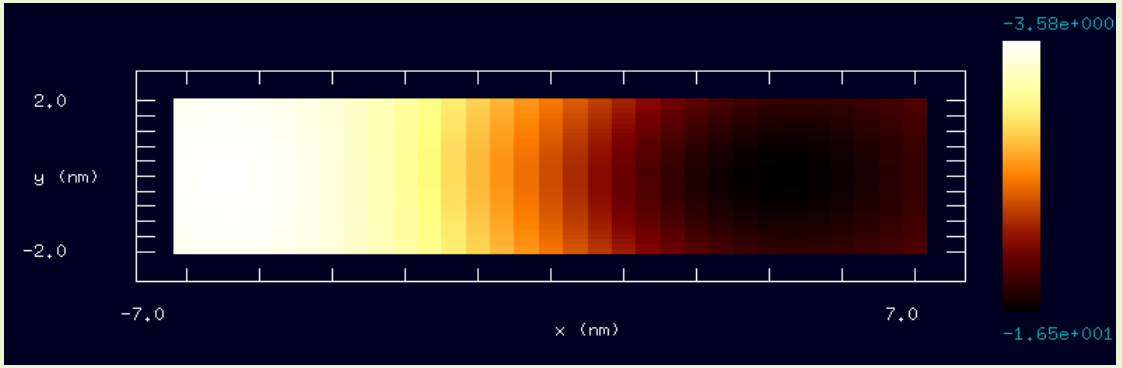
コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1.38[nm]

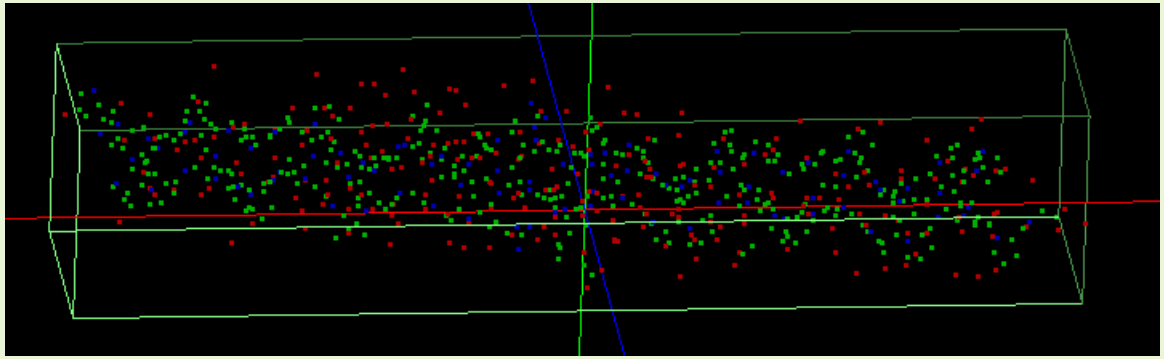
試料形状　横: 12.4[nm]
　　縦: 3.4[nm]
　　高さ: 2.12[nm]
試料の比誘電率: 80.4
試料内部に、正負二個の電荷が配置されている



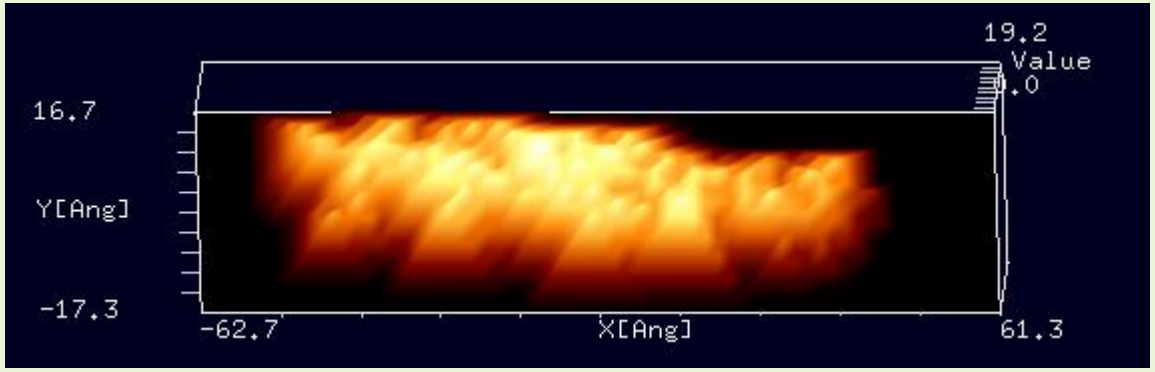
探針の感じるz方向の
力の分布
最大値: −3.58[pN]
最小値: −16.5[pN]

macroKPFM

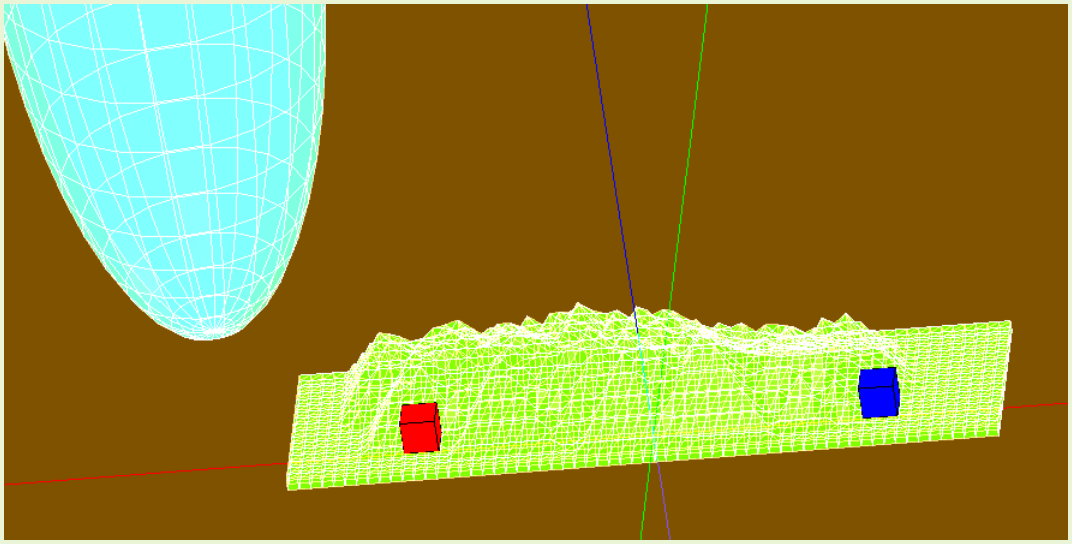
正負の電荷が埋め込まれたコラーゲン分子のLCPD像



コラーゲンの分子構造図



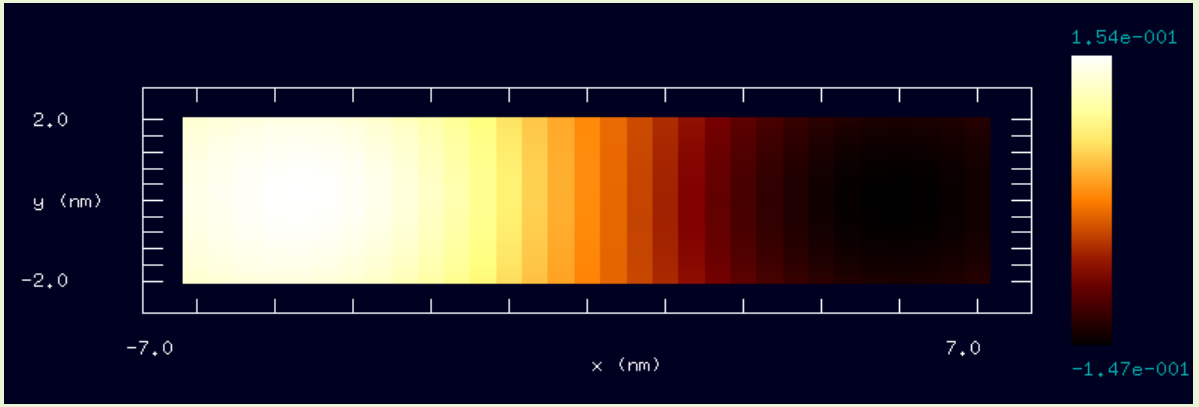
コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1.38[nm]

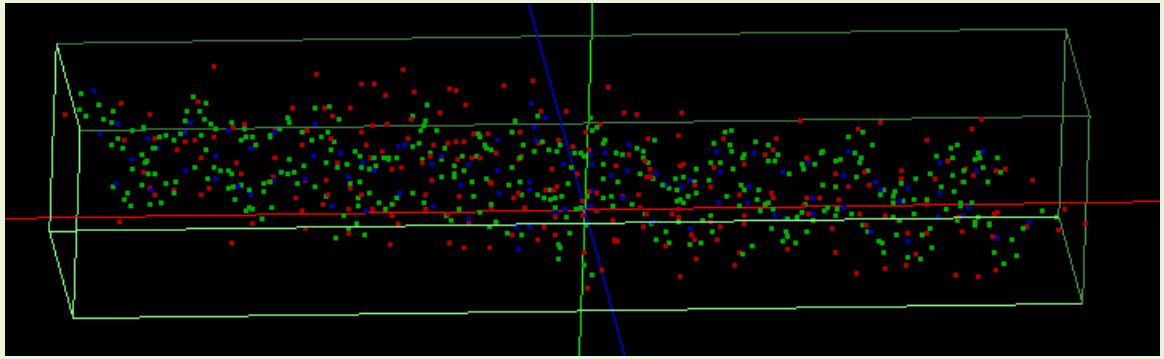
試料形状　横: 12.4[nm]
　　縦: 3.4[nm]
　　高さ: 2.12[nm]
試料の比誘電率: 80.4
試料内部に、正負二個の電荷が配置されている



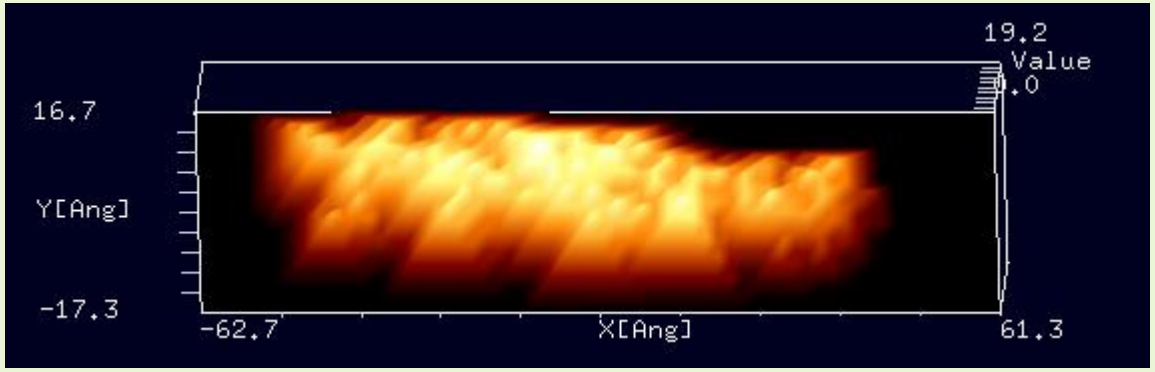
試料のLCPD像
最大値: 1.54E−1[V]
最小値: −1.47E−1[V]

macroKPFM

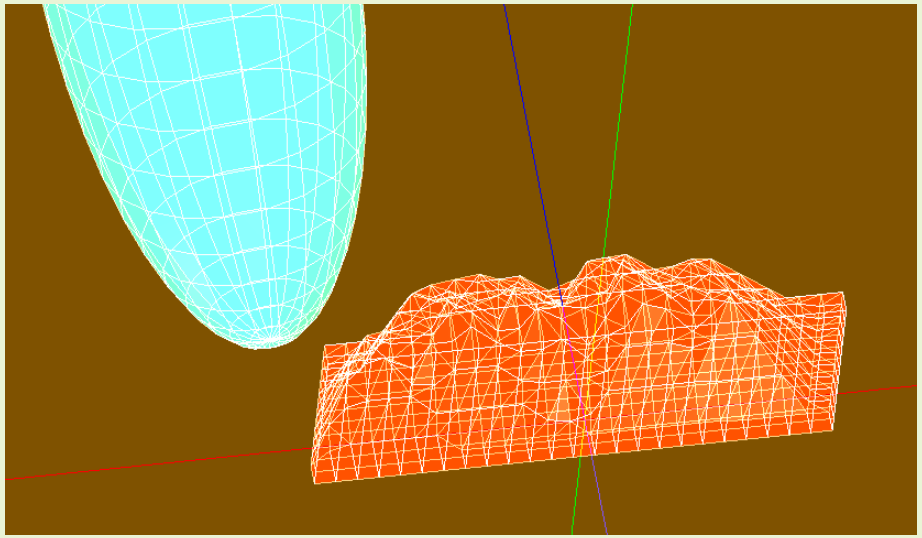
均一な表面電荷を持つコラーゲン分子に対して探針が感じる力の分布



コラーゲンの分子構造図



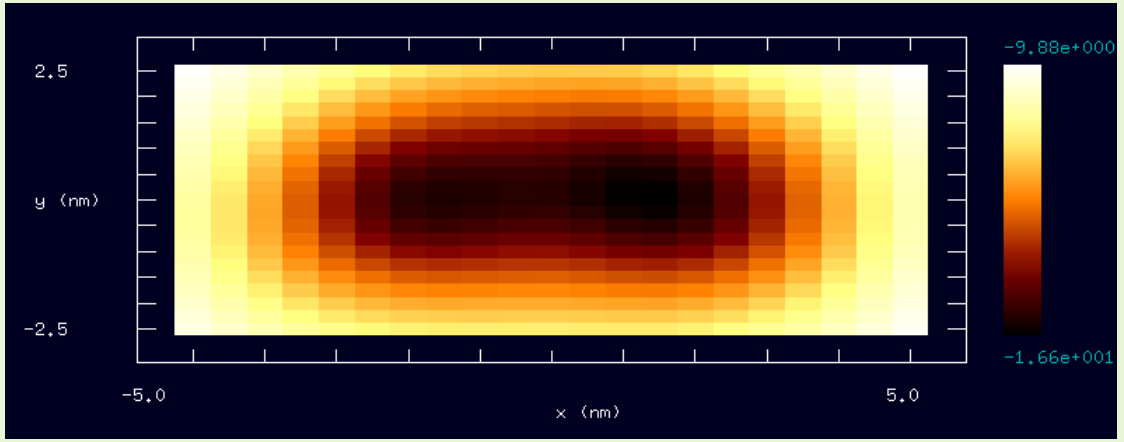
コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1.38[nm]

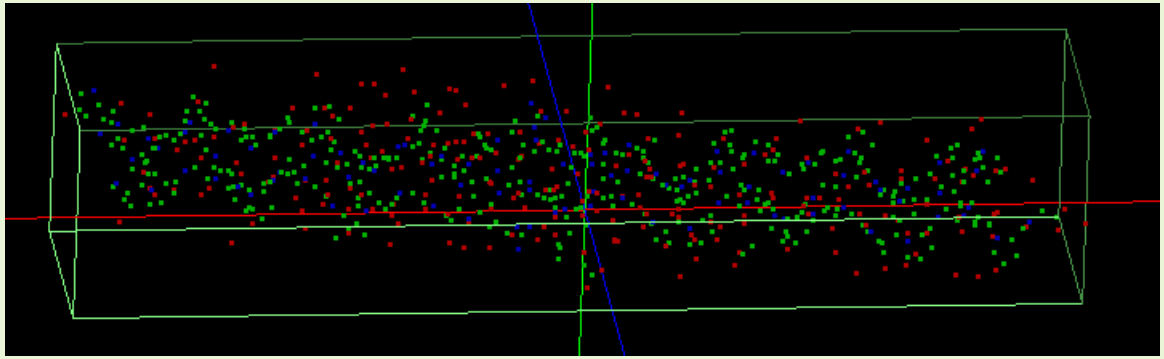
試料形状　横: 12.4[nm]
　　縦: 3.4[nm]
　　高さ: 2.12[nm]
試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
　　1.0E−6[C/m^2]



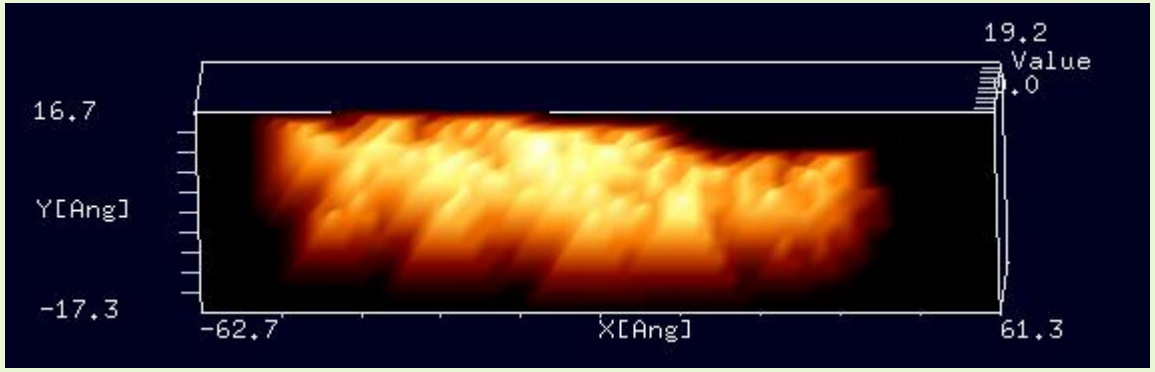
探針の感じるz方向の
力の分布
最大値: −9.88[pN]
最小値: −16.6[pN]

macroKPFM

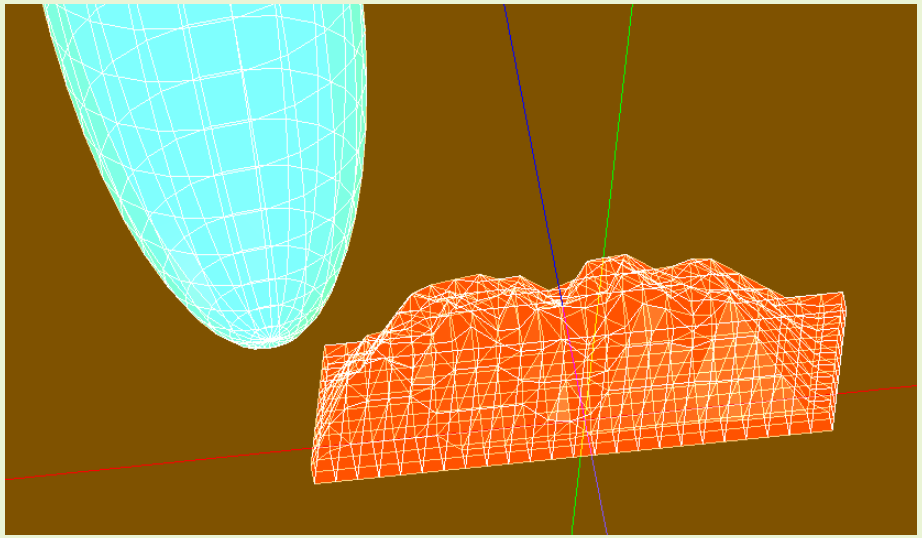
均一な表面電荷を持つコラーゲン分子のLCPD像



コラーゲンの分子構造図



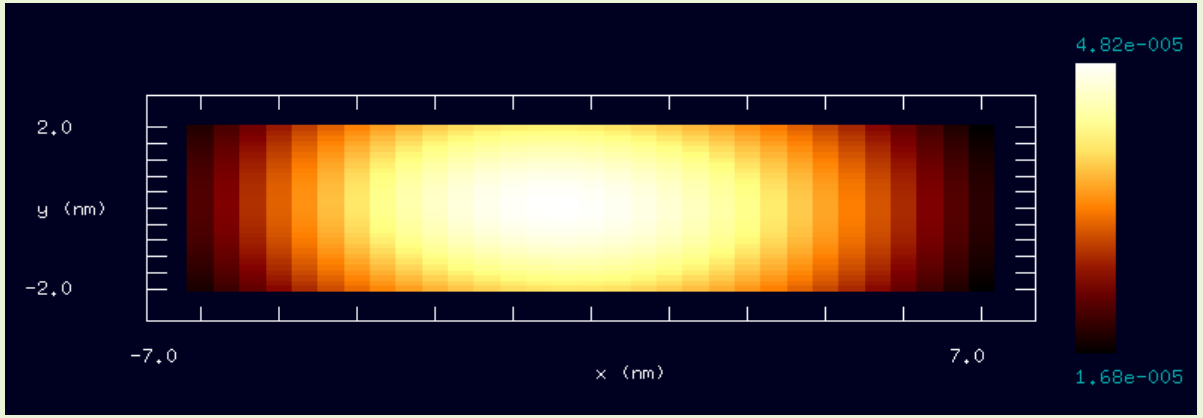
コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1.38[nm]

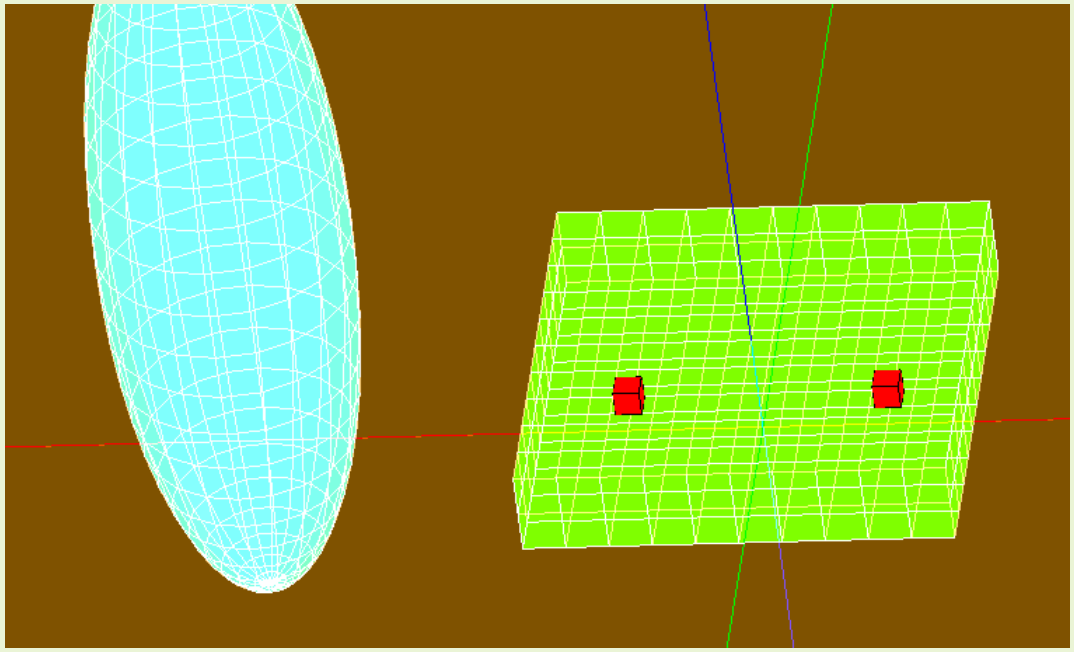
試料形状　横: 12.4[nm]
　　縦: 3.4[nm]
　　高さ: 2.12[nm]
試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
　　1.0E−6[C/m^2]



試料のLCPD像
最大値: 4.82E−5[V]
最小値: 1.68E−5[V]

macroKPFM

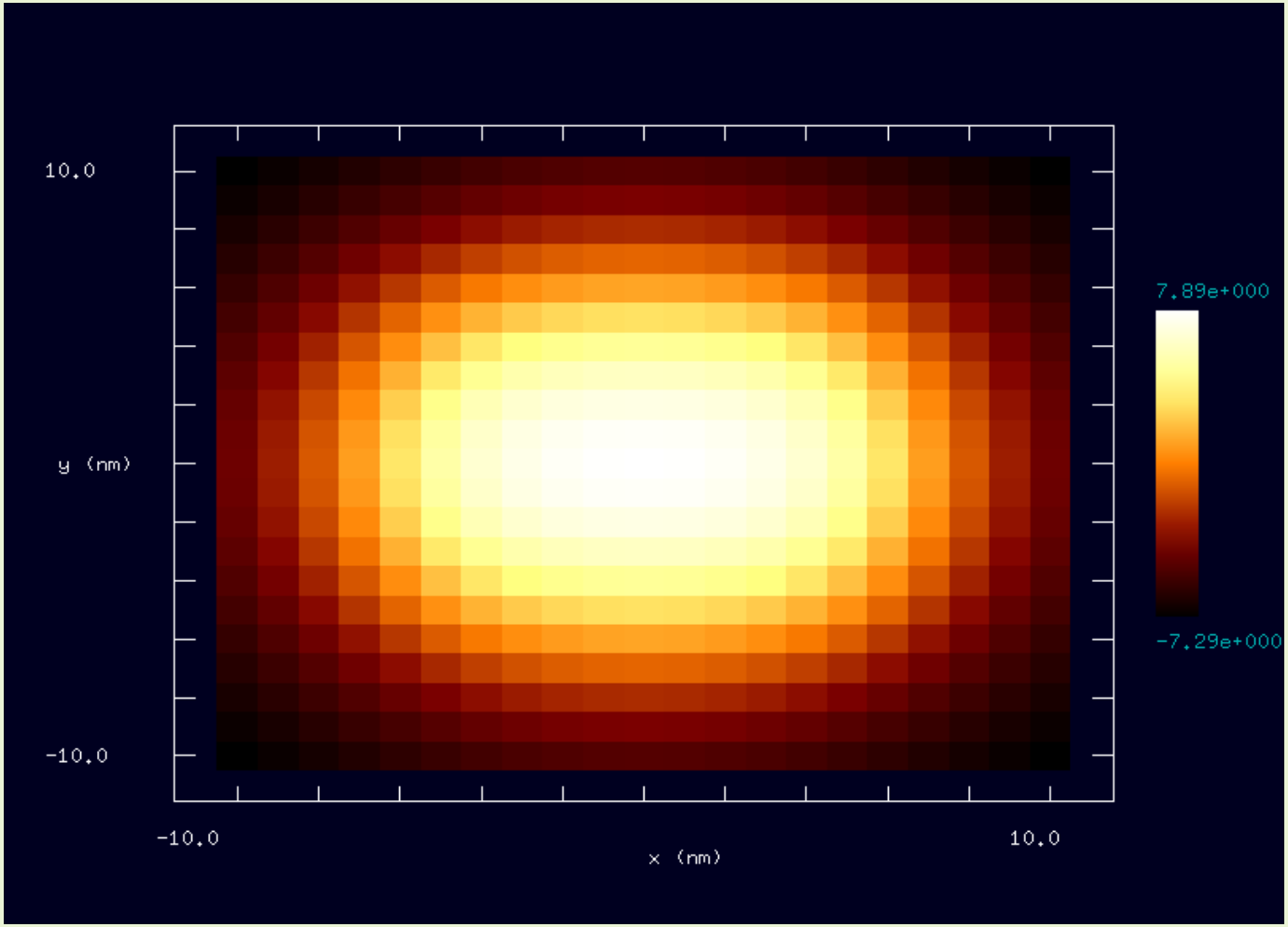
内部に二個の正電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO2)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1[nm]

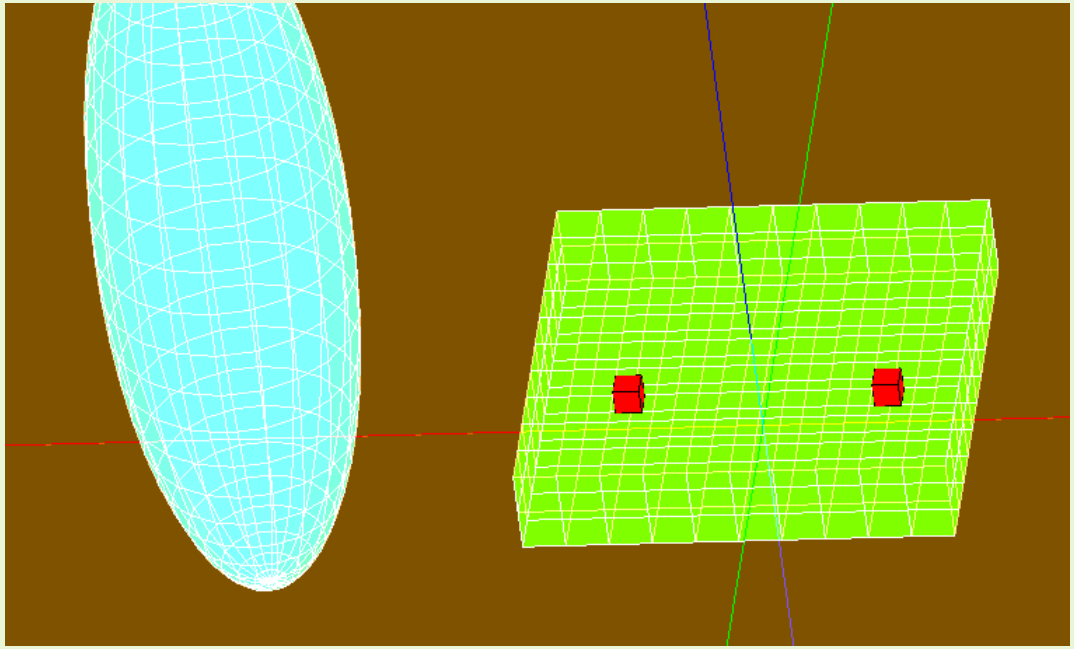
試料の縦、横長さ: 10[nm]
試料の高さ: 2[nm]
試料の比誘電率: 3.8
試料内部に、二個の正電荷が配置されている



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: 7.89[pN]
最小値: −7.29[pN]

macroKPFM

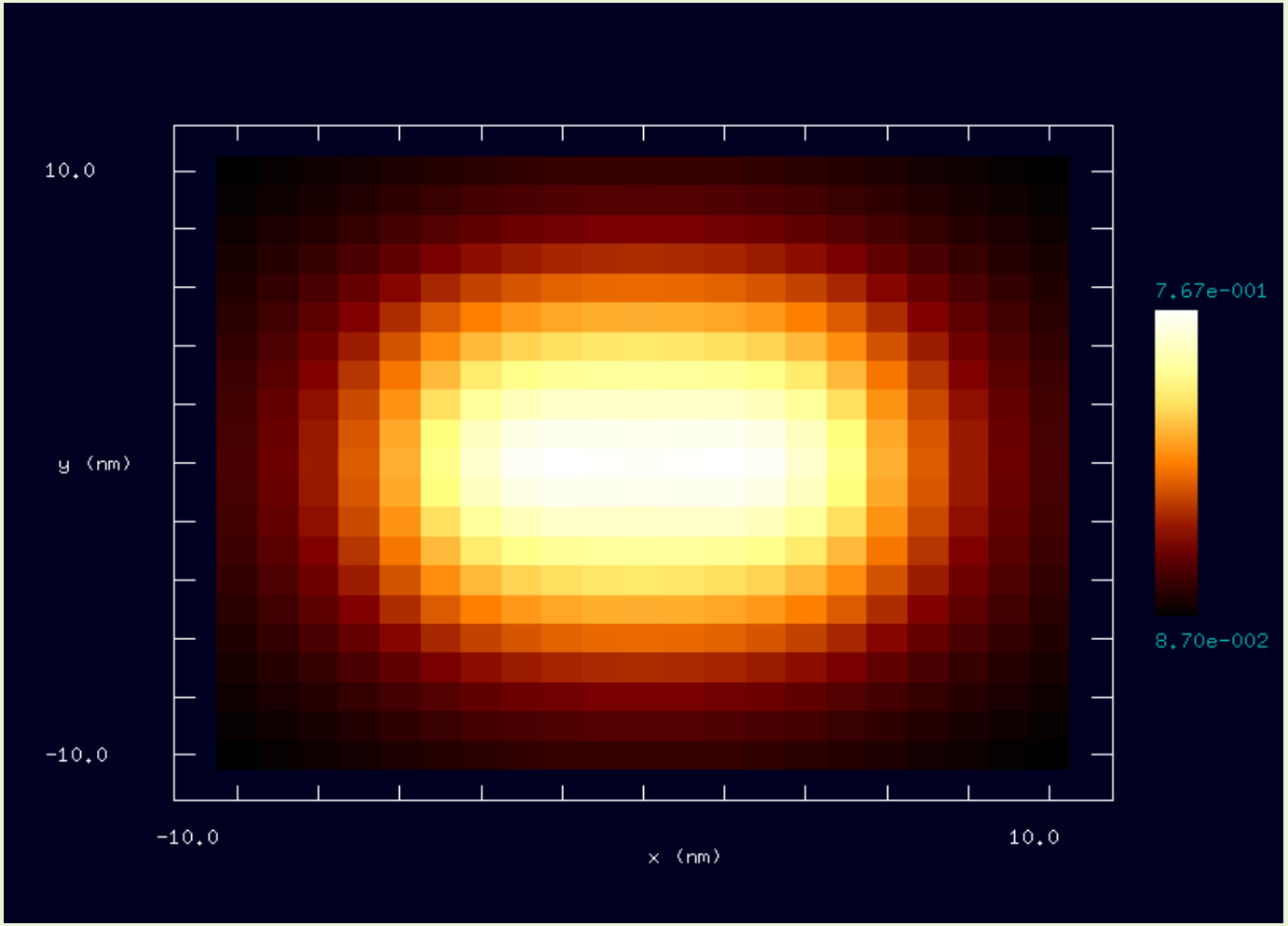
内部に二個の正電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO2)のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1[nm]

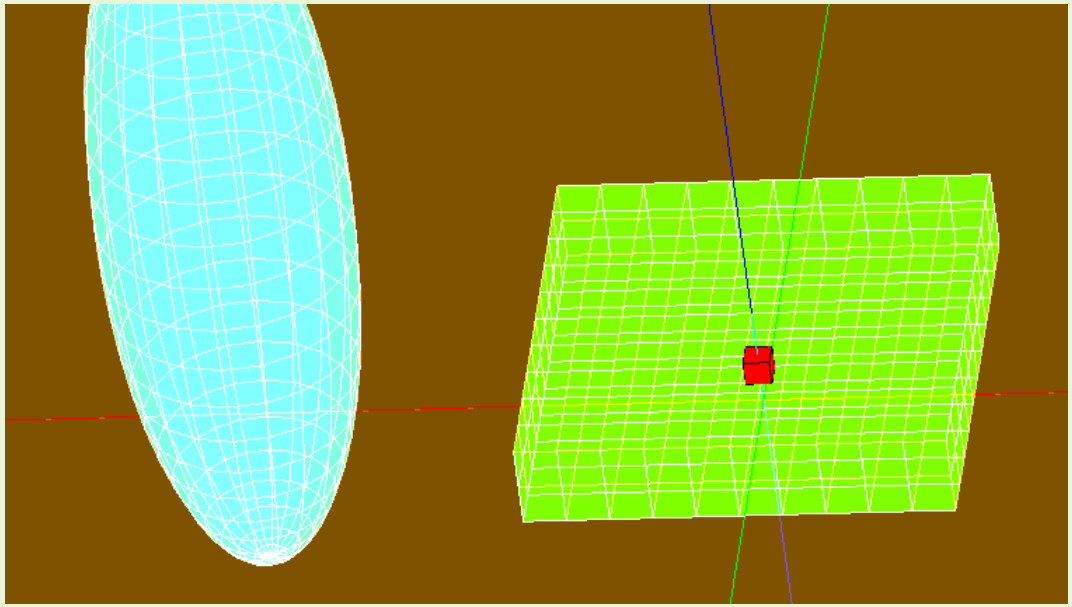
試料の縦、横長さ: 10[nm]
試料の高さ: 2[nm]
試料の比誘電率: 3.8
試料内部に、二個の正電荷が配置されている



試料のLCPD像
最大値: 7.67E-1[V]
最小値: 8.70E-2[V]

macroKPFM

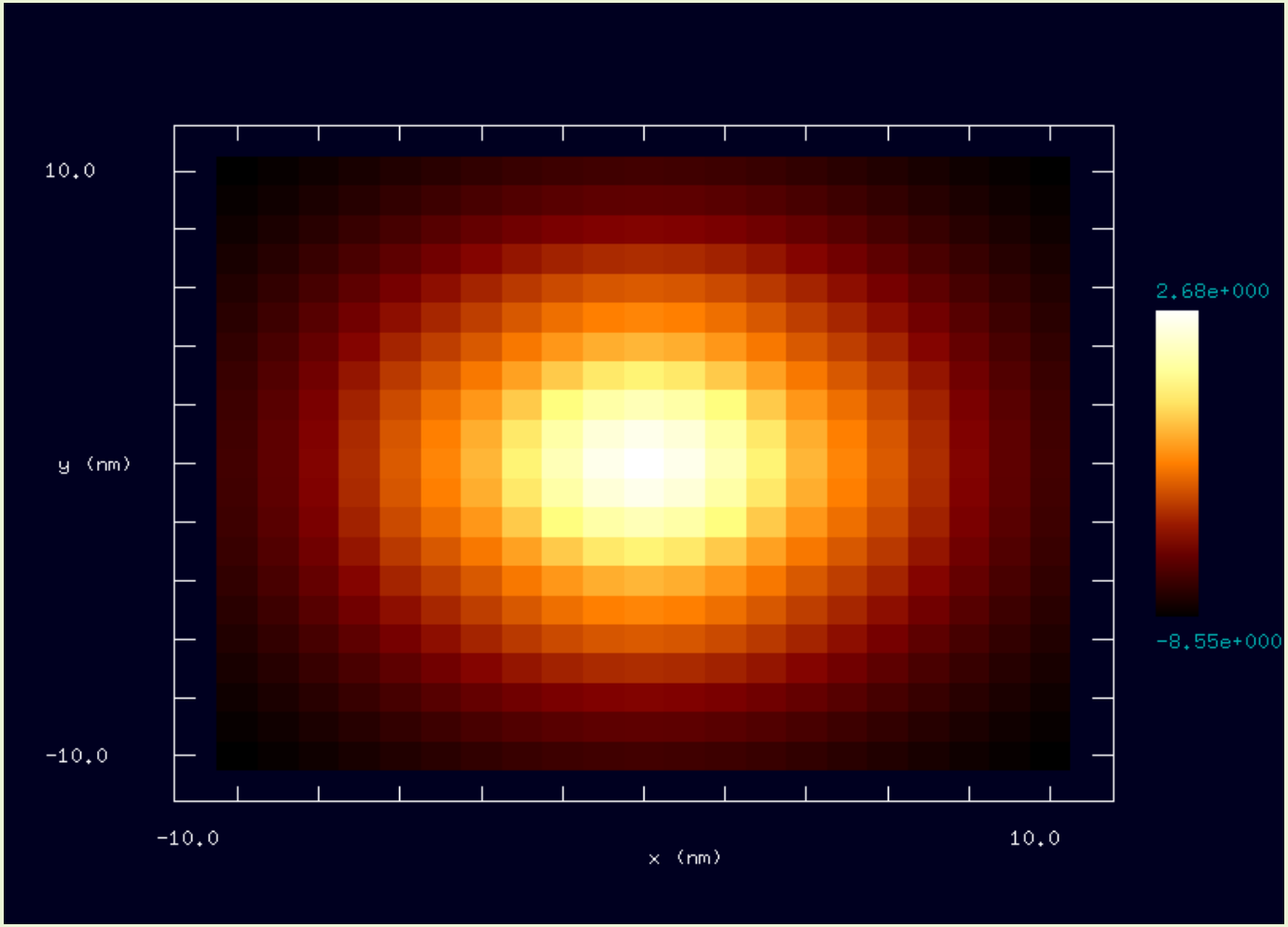
内部に一個の正電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO2)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1[nm]

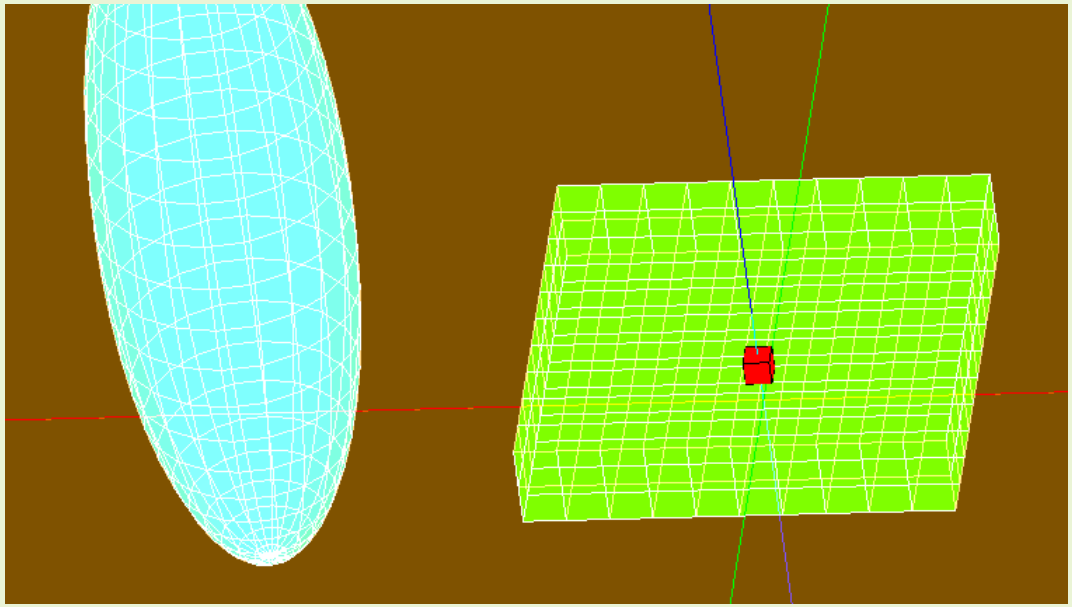
試料の縦、横長さ: 10[nm]
試料の高さ: 2[nm]
試料の比誘電率: 3.8
試料内部中央に、一個の正電荷が配置されている



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: 2.68[pN]
最小値: −8.55[pN]

macroKPFM

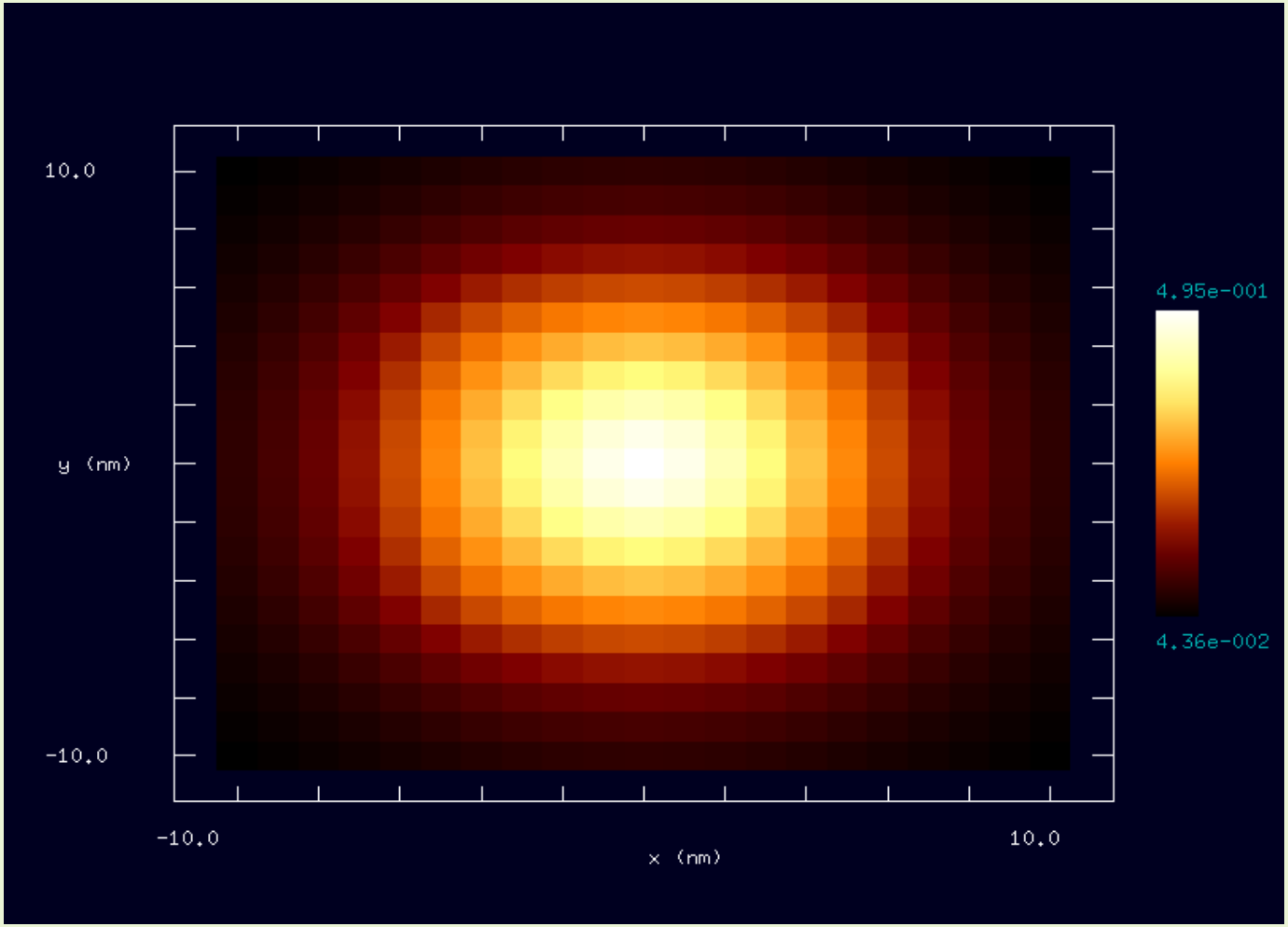
内部に一個の正電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO2)のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1[nm]

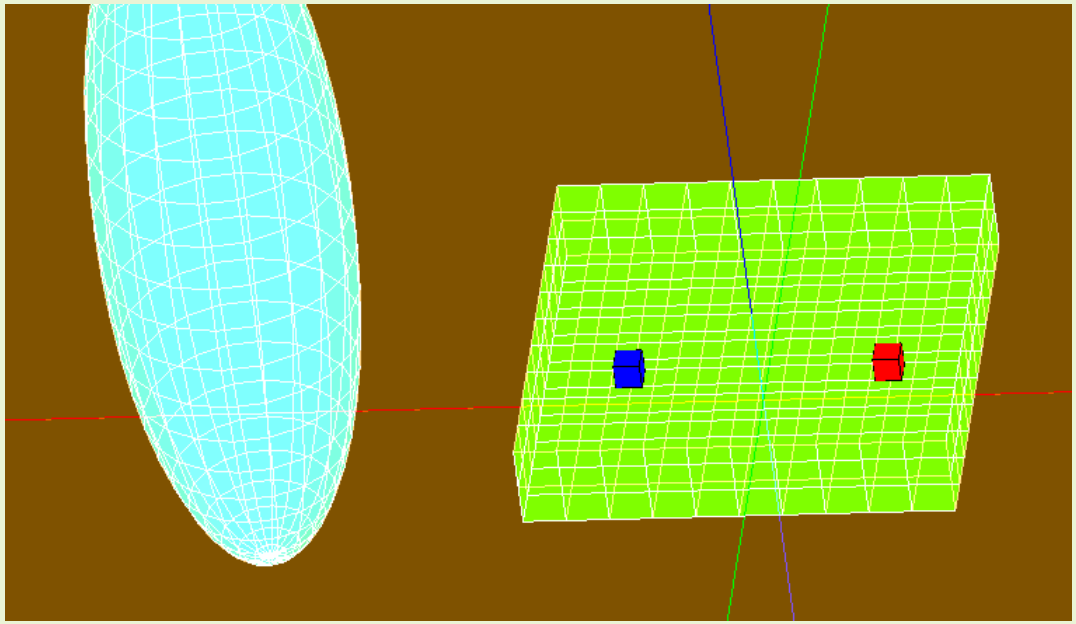
試料の縦、横長さ: 10[nm]
試料の高さ: 2[nm]
試料の比誘電率: 3.8
試料内部中央に、一個の正電荷が配置されている



試料のLCPD像
最大値: 4.95E-1[V]
最小値: 4.36E-2[V]

macroKPFM

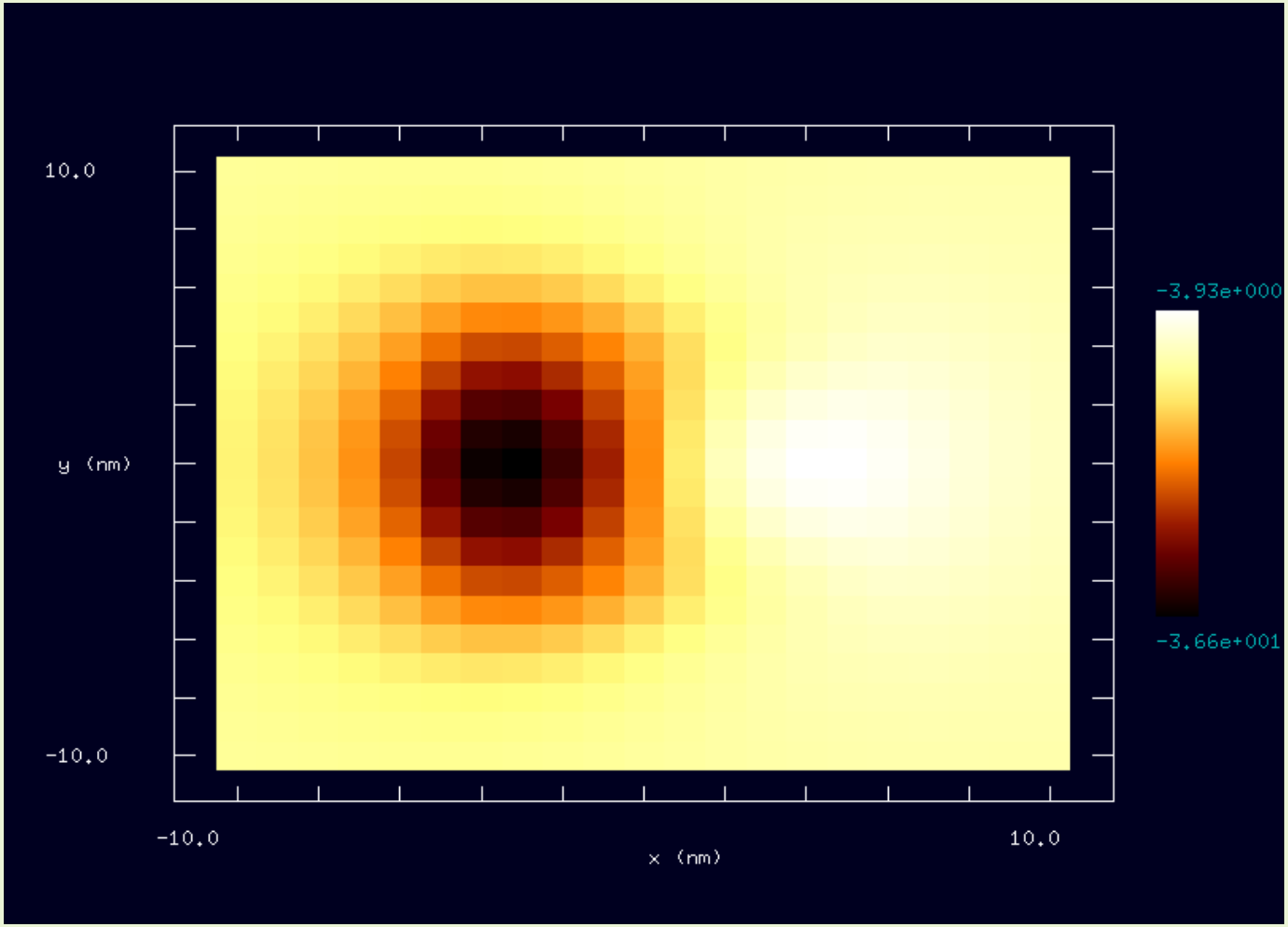
内部に正負二個の電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO2)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1[nm]

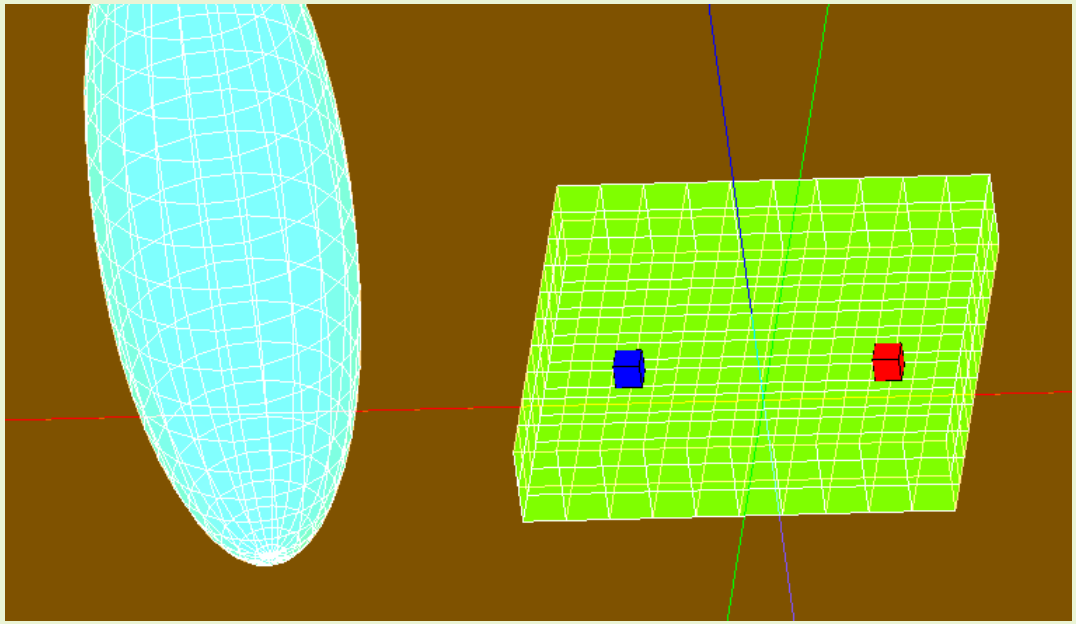
試料の縦、横長さ: 10[nm]
試料の高さ: 2[nm]
試料の比誘電率: 3.8
試料内部に、正負二個の電荷が配置されている



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: −3.93[pN]
最小値: −36.6[pN]

macroKPFM

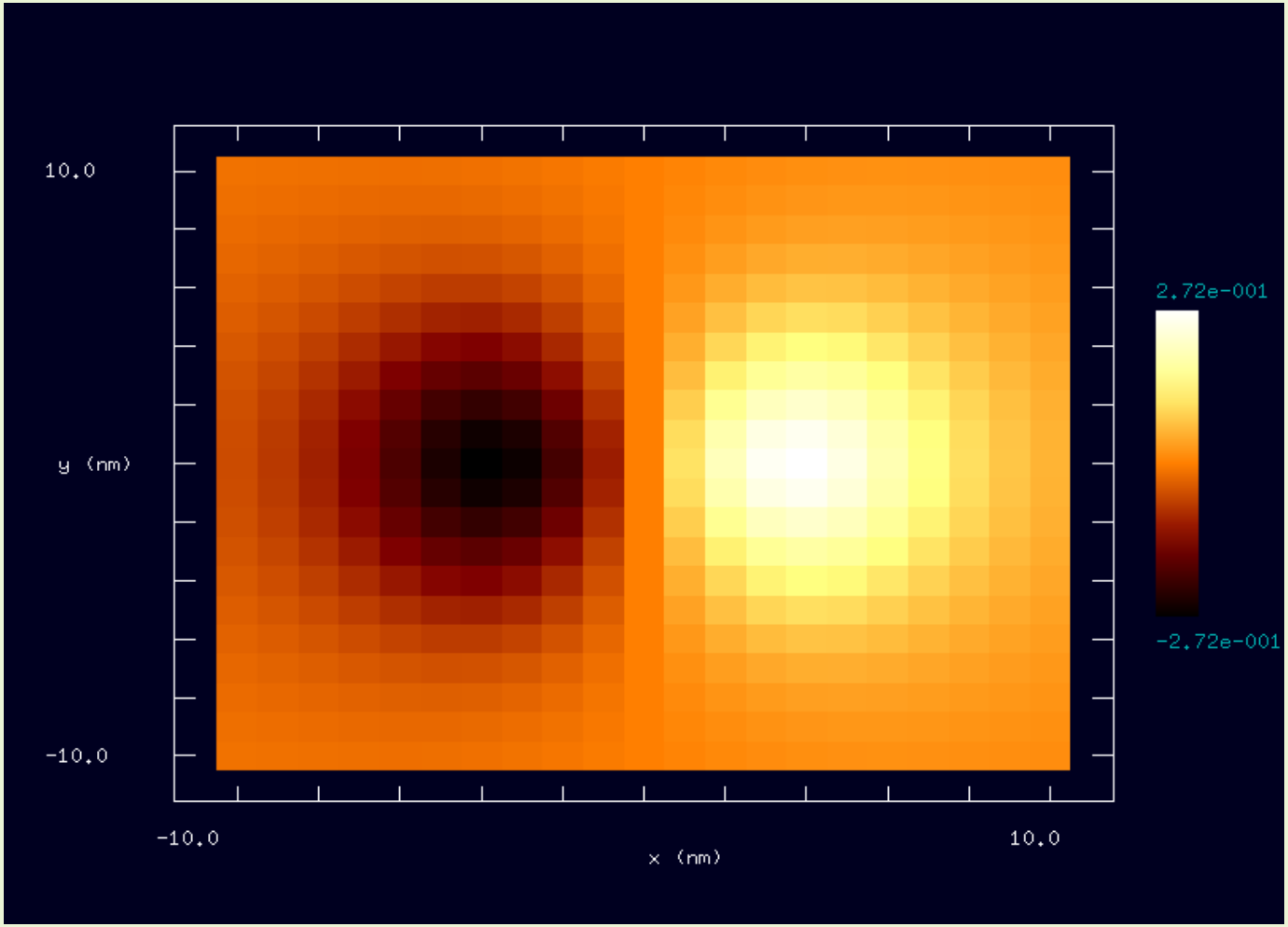
内部に正負二個の電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO2)のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1[nm]

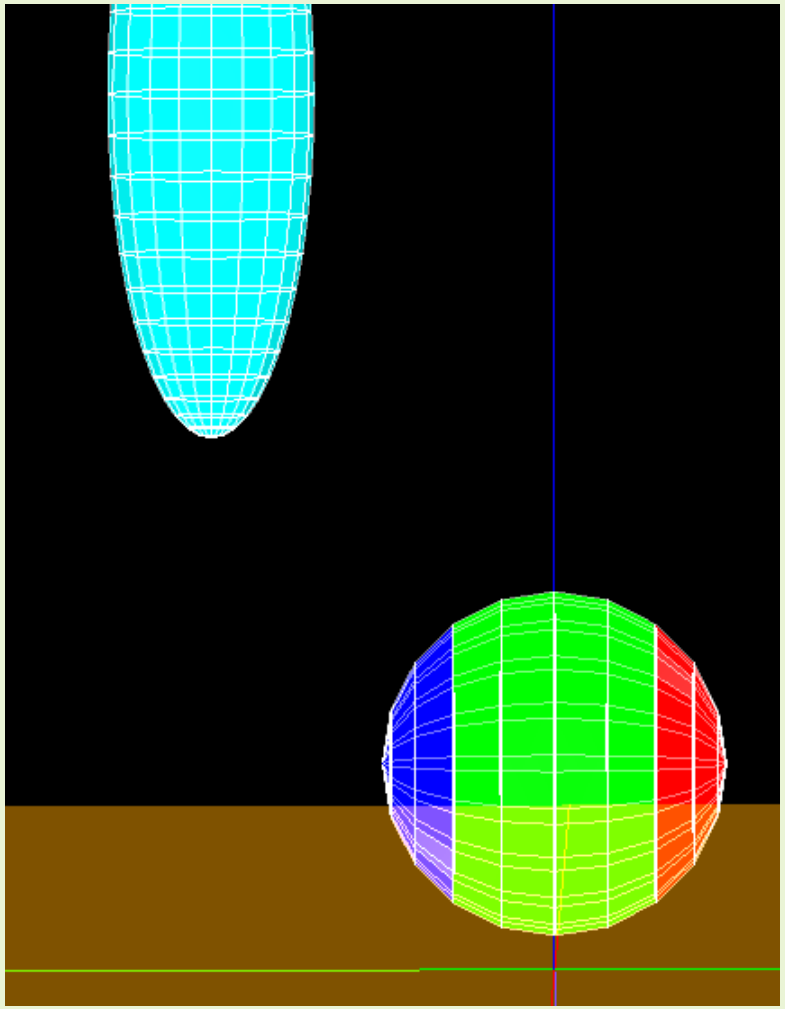
試料の縦、横長さ: 10[nm]
試料の高さ: 2[nm]
試料の比誘電率: 3.8
試料内部に、正負二個の電荷が配置されている



試料のLCPD像
最大値: 0.272[V]
最小値: −0.272[V]

macroKPFM

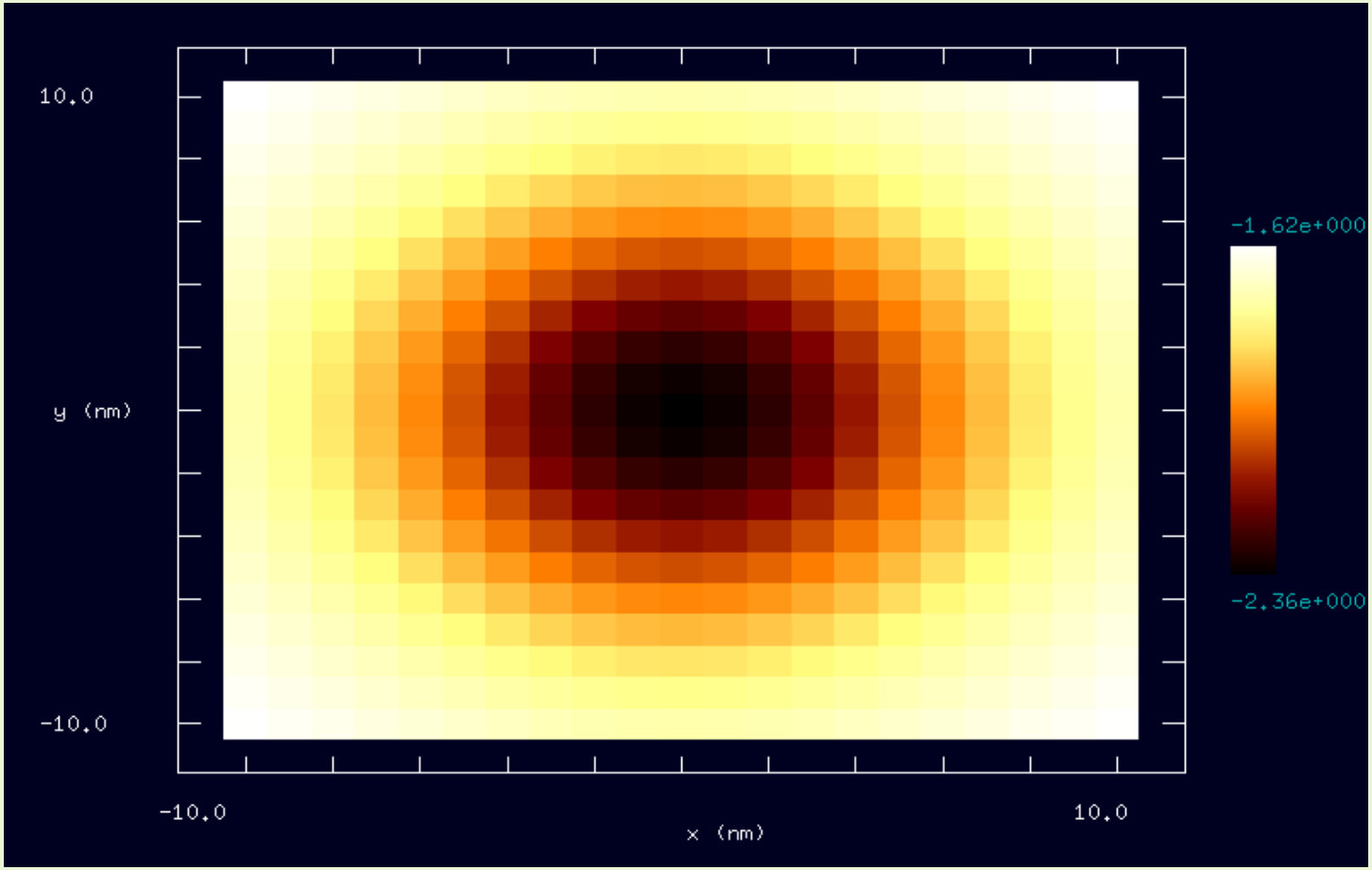
Y軸の正の側が正の、y軸の負の側が負の表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO2)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 4[nm]

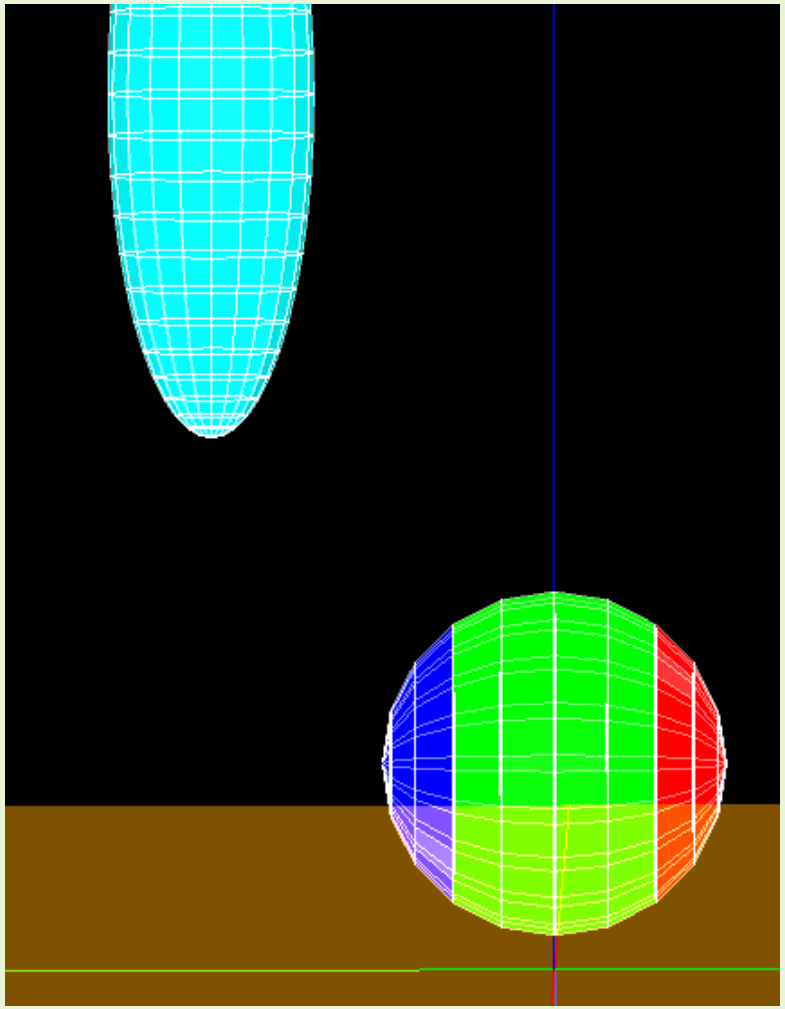
試料球面体の半径: 5[nm]
試料の比誘電率: 3.8
球体試料のy軸の正の側付近での、
表面の電荷密度: 1.0E−5[C/m^2]
球体試料のy軸の負の側付近での、
表面の電荷密度: −1.0E−5[C/m^2]



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: −1.62[pN]
最小値: −2.36[pN]

macroKPFM

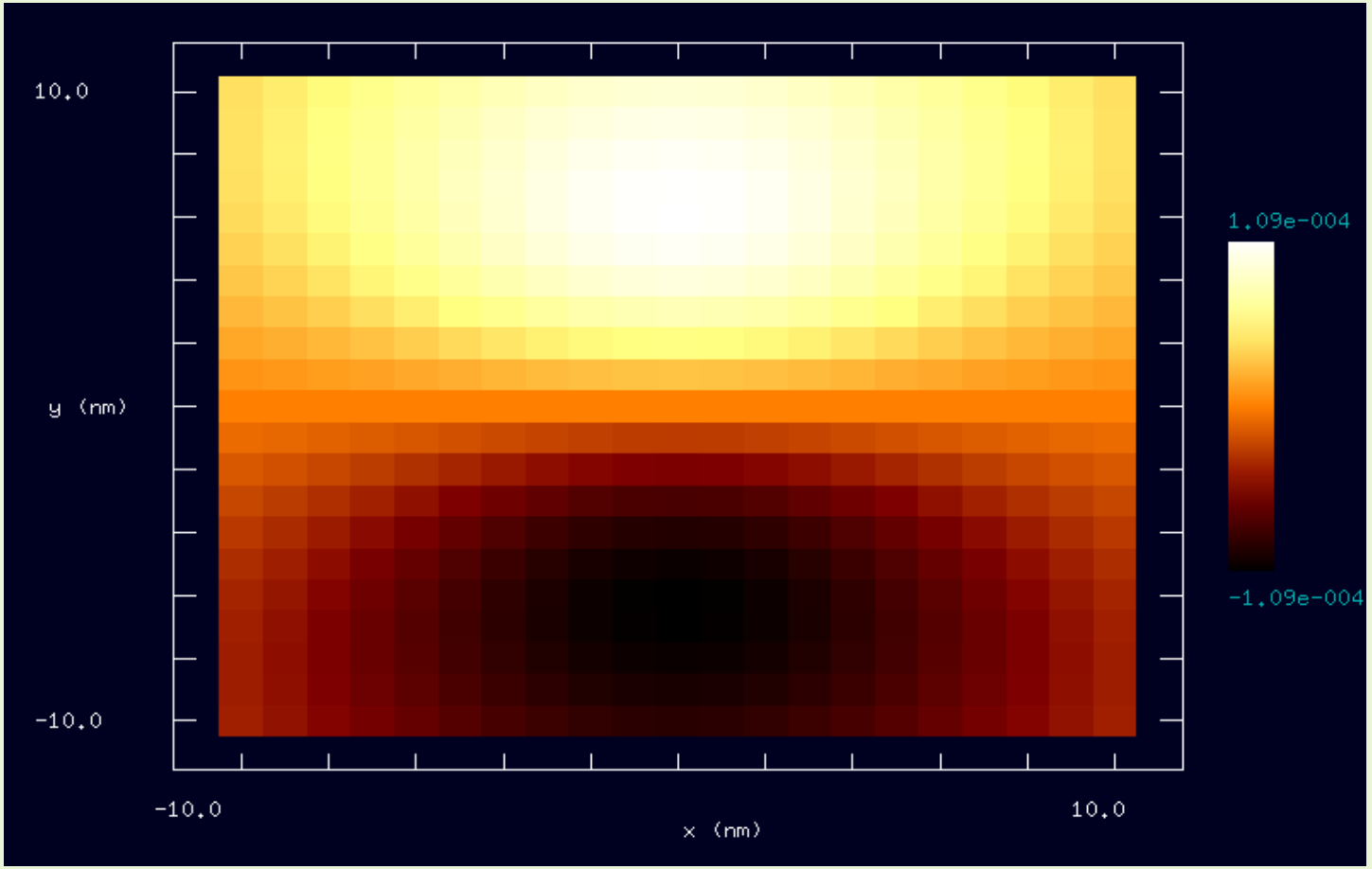
Y軸の正の側が正の、y軸の負の側が負の表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO2)のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 4[nm]

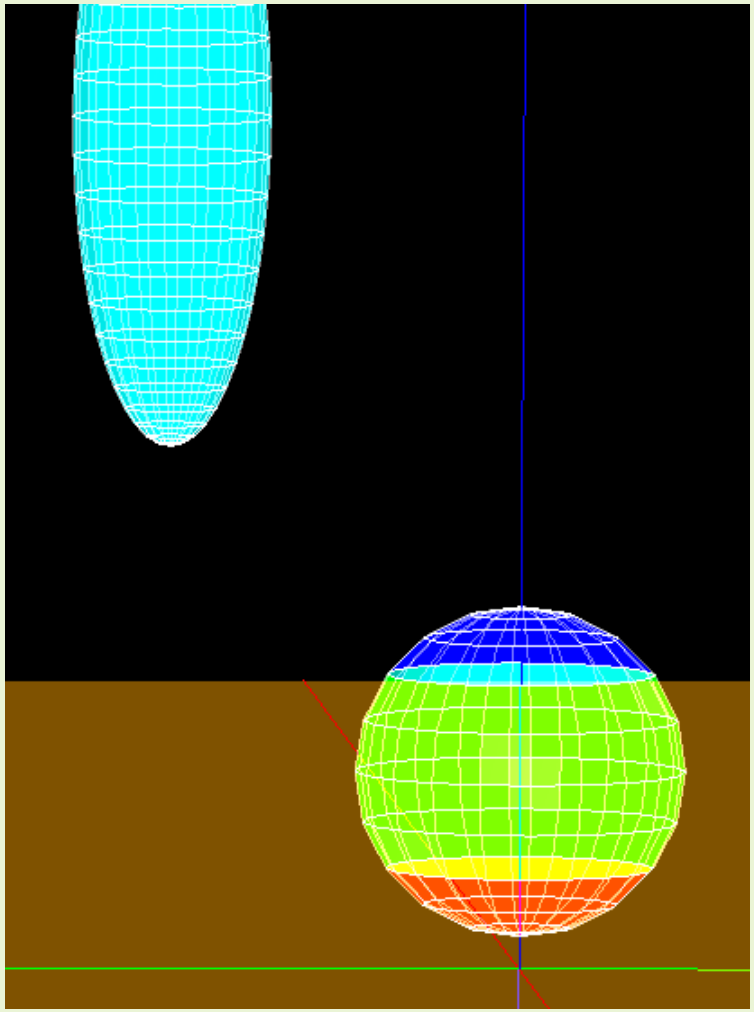
試料球体の半径: 5[nm]
試料の比誘電率: 3.8
球体試料のy軸の正の側付近での、
表面の電荷密度: 1.0E-5[C/m^2]
球体試料のy軸の負の側付近での、
表面の電荷密度: -1.0E-5[C/m^2]



試料のLCPD像
最大値: 1.09E-4[V]
最小値: -1.09E-4[V]

macroKPFM

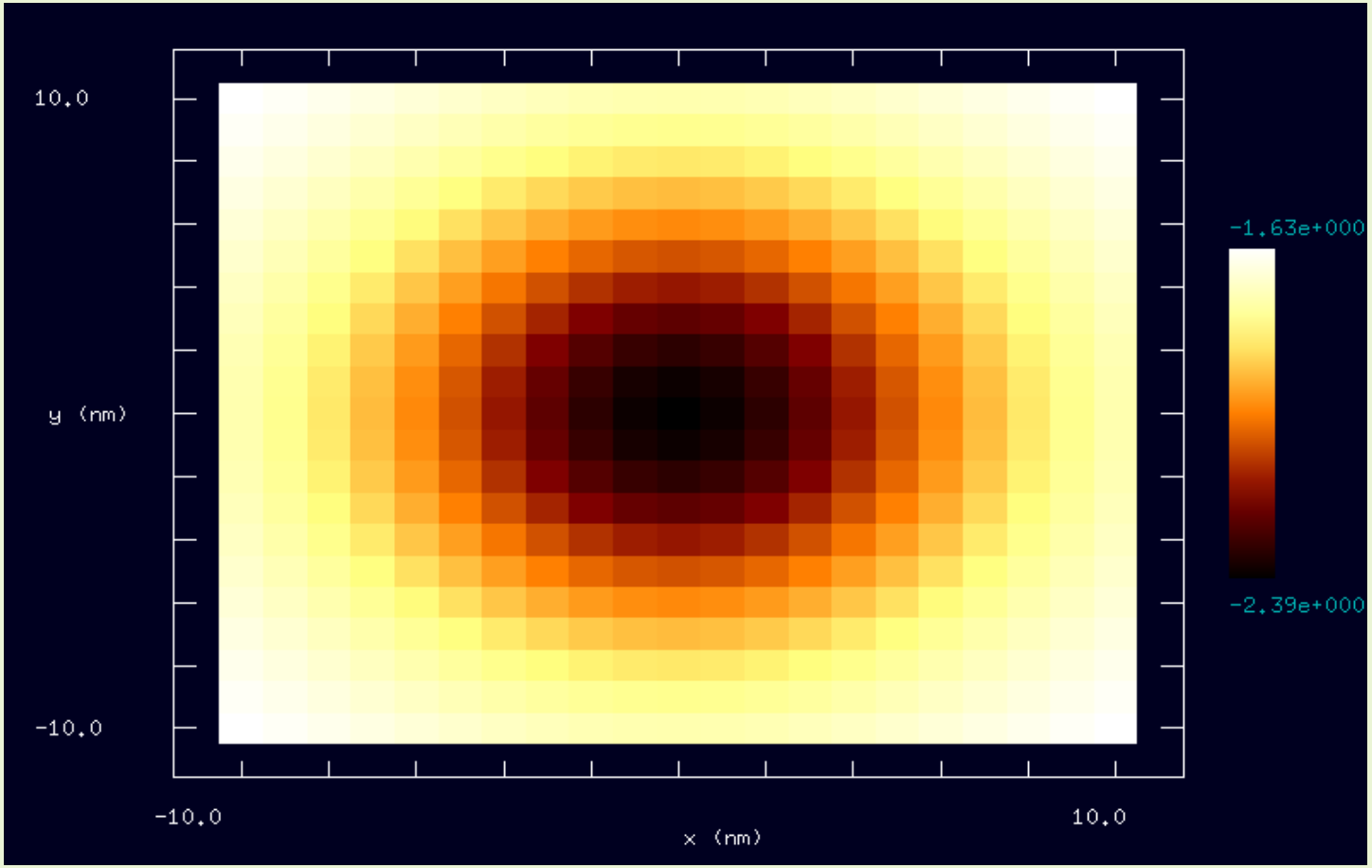
北極付近が負の、南極付近が正の表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO2)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 4[nm]

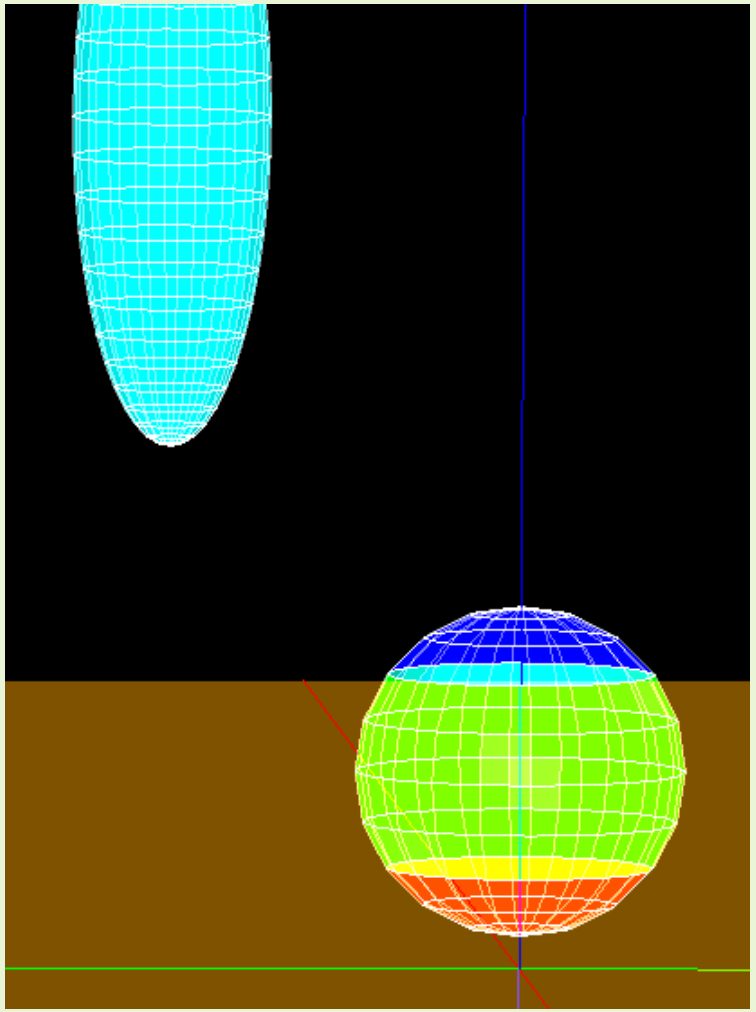
試料球体の半径: 5[nm]
試料の比誘電率: 3.8
球体試料の北極付近での、表面の
電荷密度: −1.0E−5[C/m^2]
球体試料の南極付近での、表面の
電荷密度: 1.0E−5[C/m^2]



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: −1.63[pN]
最小値: −2.39[pN]

macroKPFM

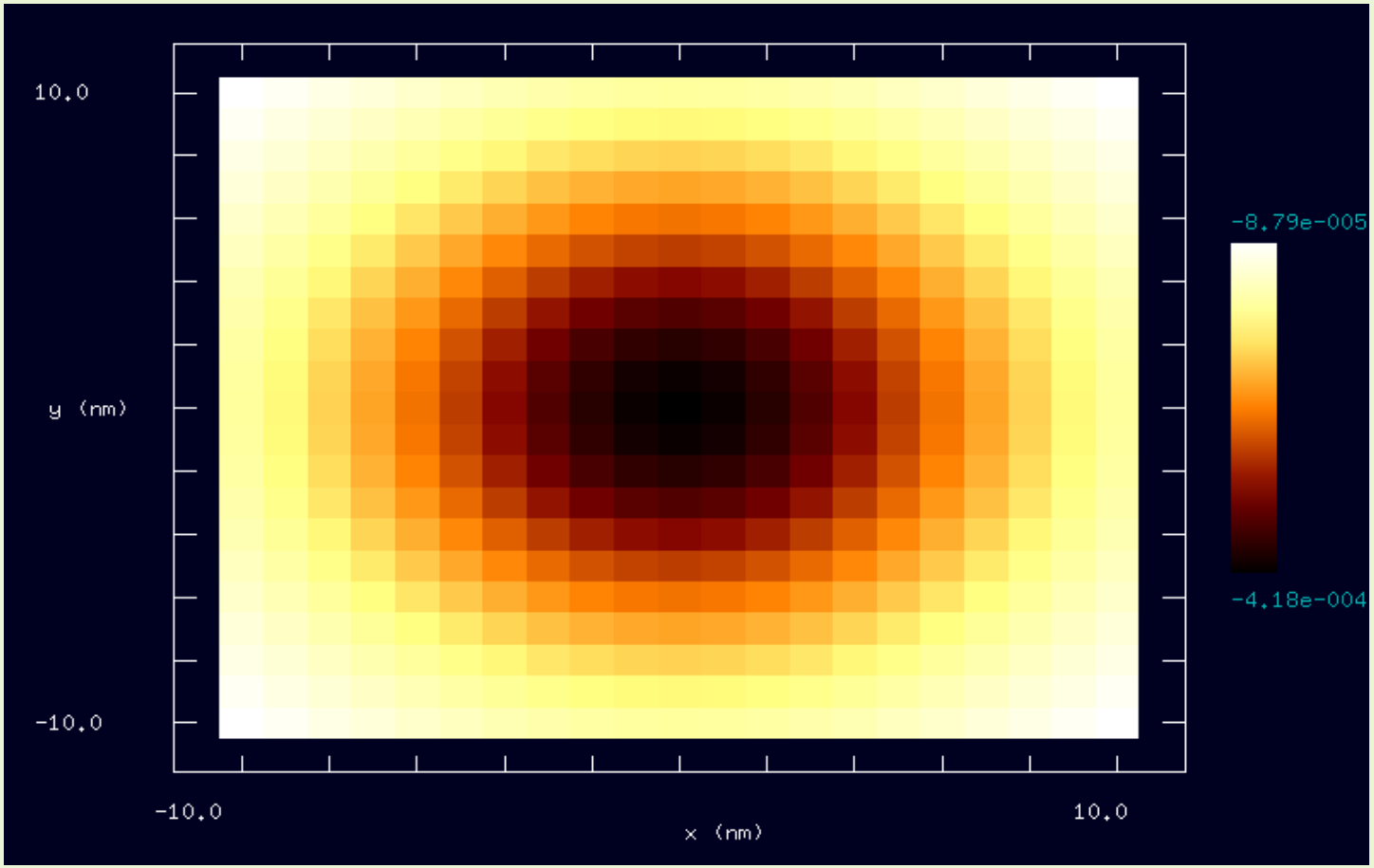
北極付近が負の、南極付近が正の表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO2)のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 4[nm]

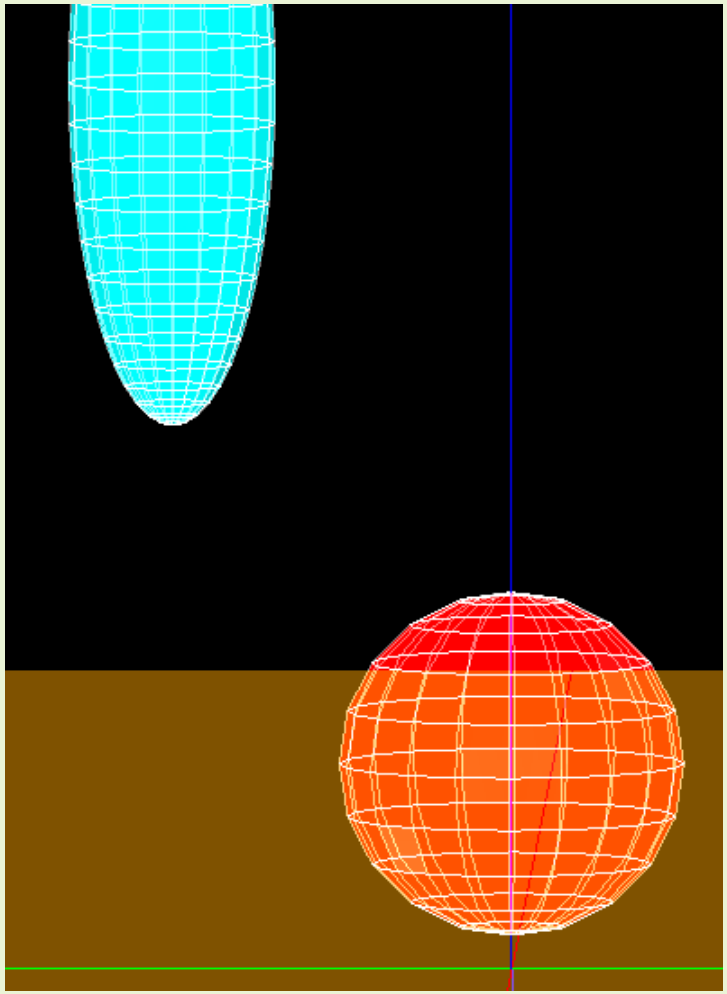
試料球体の半径: 5[nm]
試料の比誘電率: 3.8
球体試料の北極付近での、表面の
電荷密度: -1.0E-5[C/m^2]
球体試料の南極付近での、表面の
電荷密度: 1.0E-5[/m^2]



試料のLCPD像
最大値: −8.79E−5[V]
最小値: −4.18E−4[V]

macroKPFM

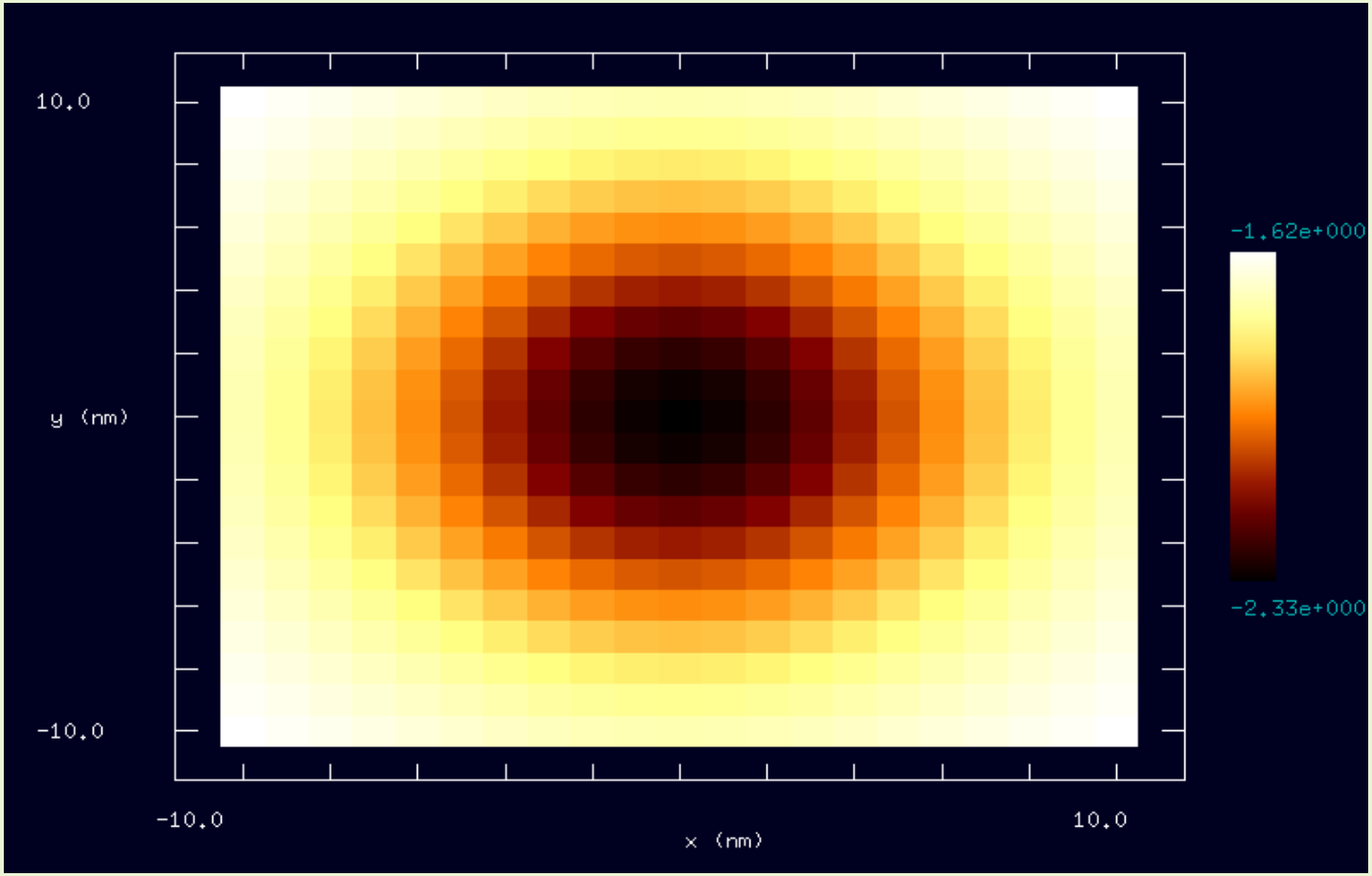
均一な表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO2)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 4[nm]

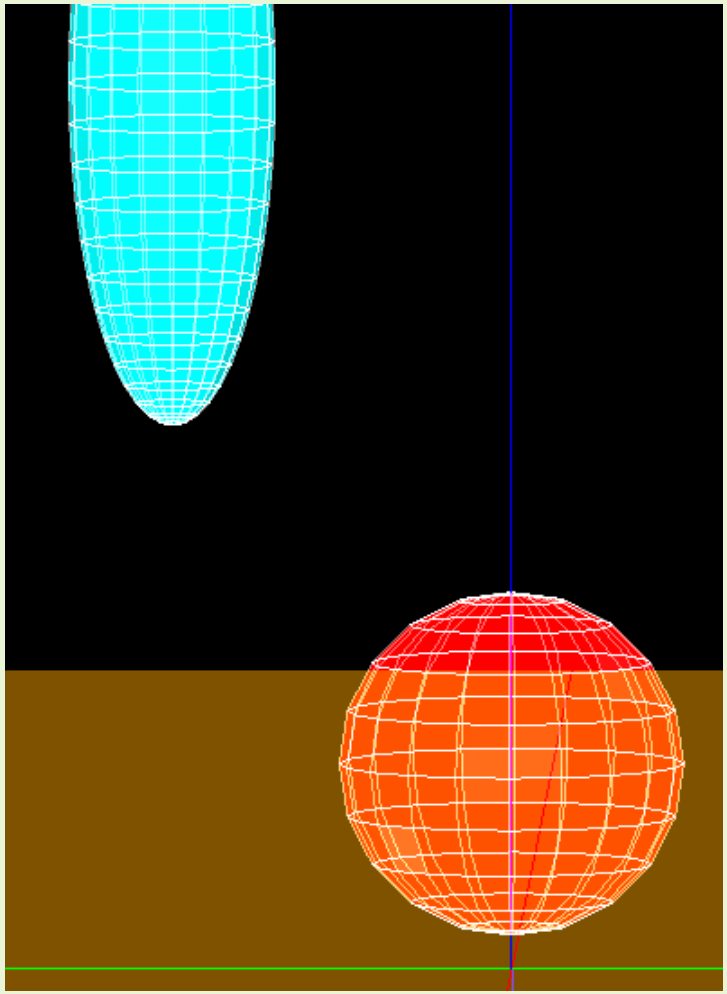
試料球体の半径: 5[nm]
試料の比誘電率: 3.8
電荷密度: 1.0E−5[C/m^2]



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: −1.62[pN]
最小値: −2.33[pN]

macroKPFM

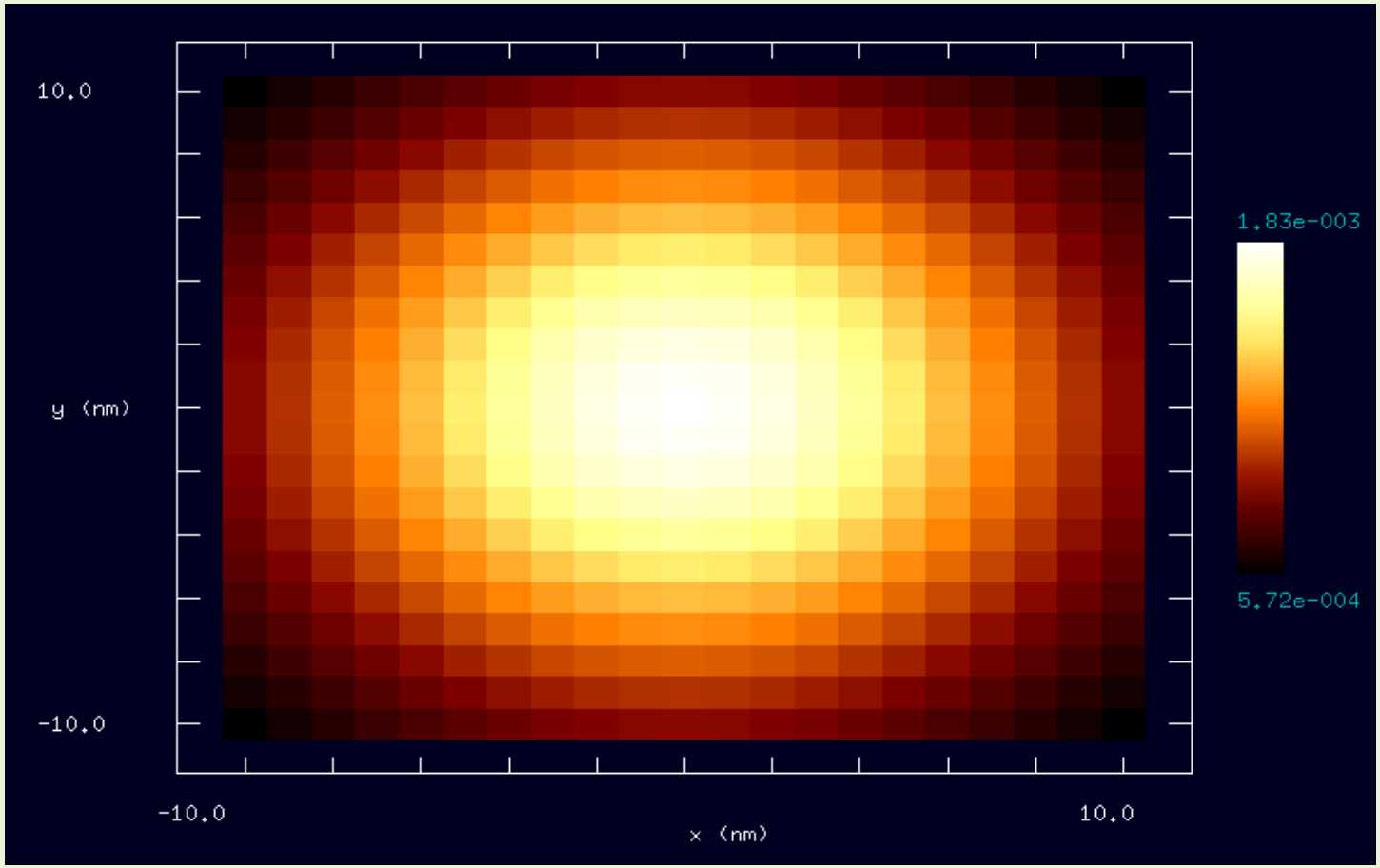
均一な表面電荷を持つ球体の二酸化ケイ素(SiO2)のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 4[nm]

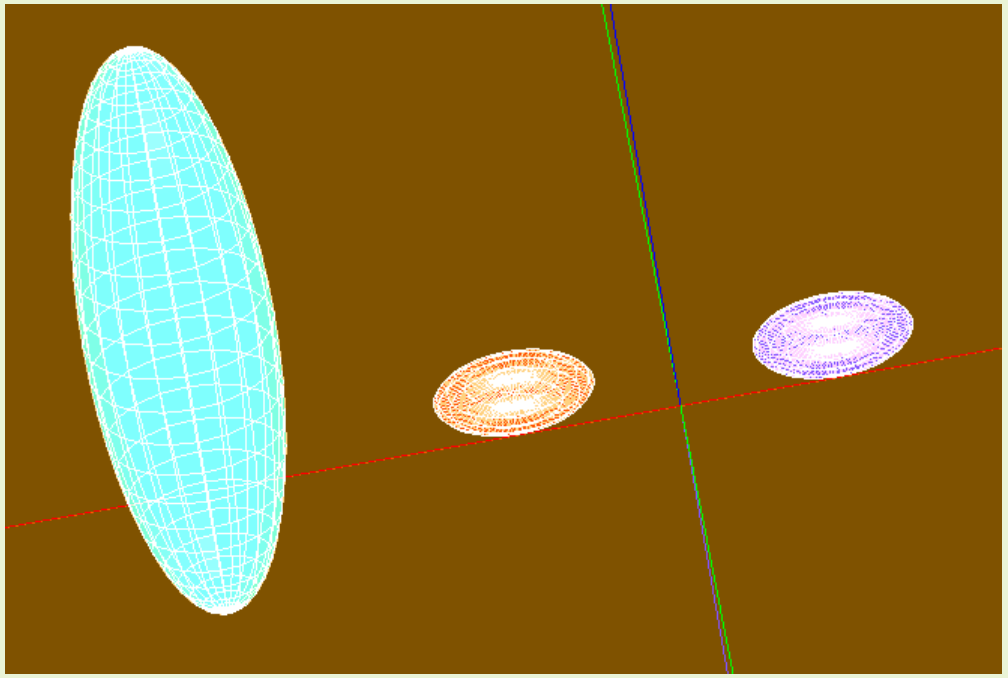
試料球体の半径: 5[nm]
試料の比誘電率: 3.8
電荷密度: 1.0E−5[C/m^2]



試料のLCPD像
最大値: 1.83E-3[V]
最小値: 5.72E-4[V]

macroKPFM

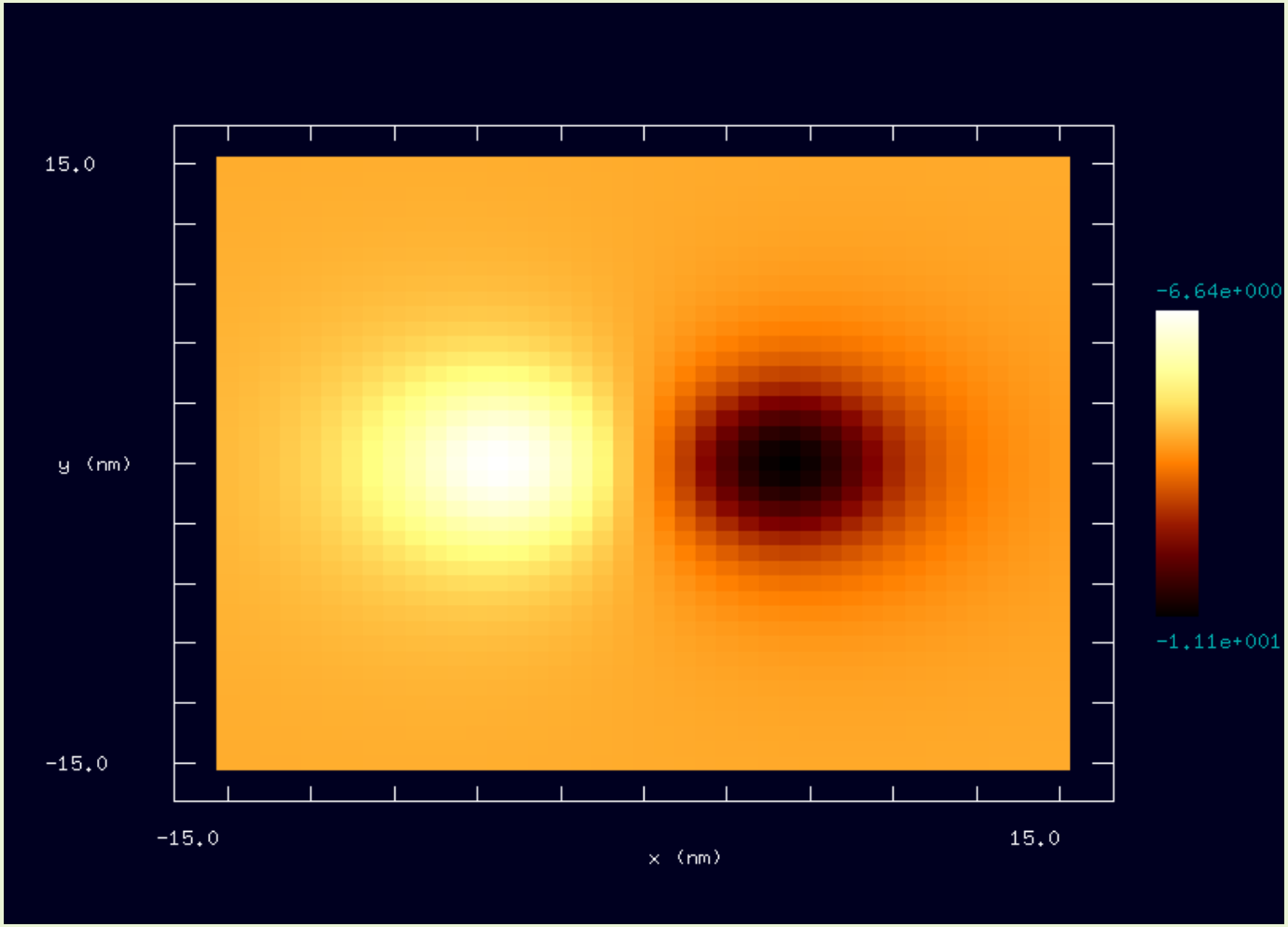
右側に負に帯電した誘電体、左側に正に帯電した誘電体を配置した場合の探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 2[nm]

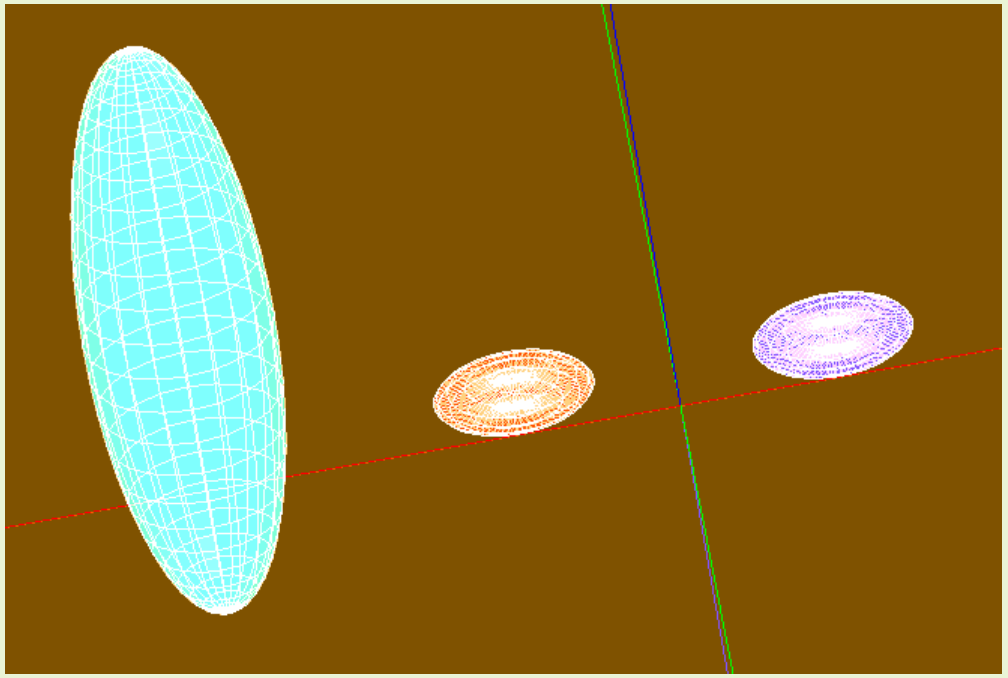
試料の形状は、横方向半径が2.5[nm]、縦方向半径が0.5[nm]の回転楕円体
試料の比誘電率: 1.5
右側の誘電体の電荷密度: −0.001[C/m^2]
左側の誘電体の電荷密度: 0.001[C/m^2]



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: −6.64[pN]
最小値: −11.1[pN]

macroKPFM

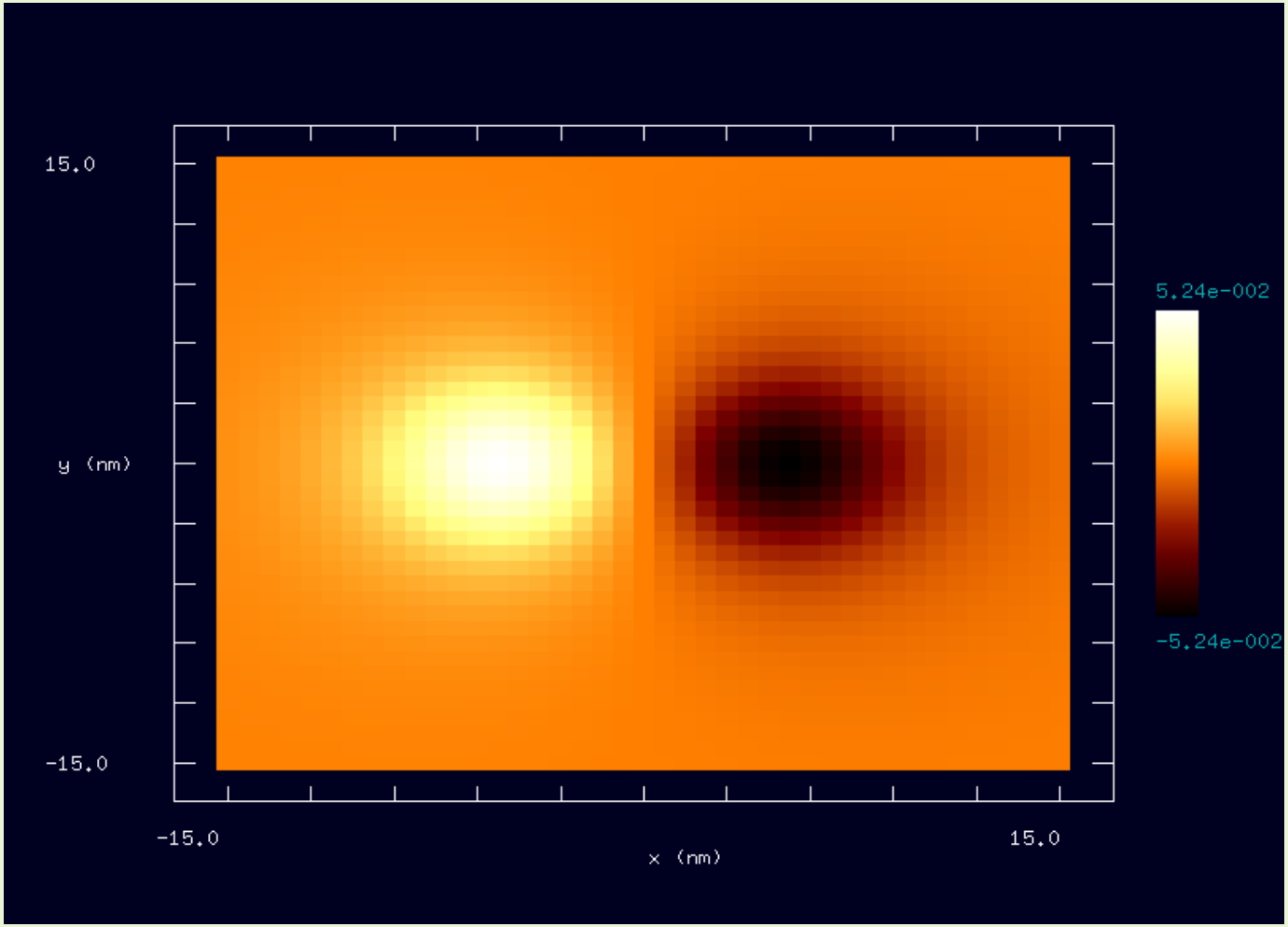
右側に負に帯電した誘電体、左側に正に帯電した誘電体を配置した場合のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、縦方向半径10[nm]の回転楕円体

基板の電位: 0[V]
探針-試料間の最短距離: 2[nm]

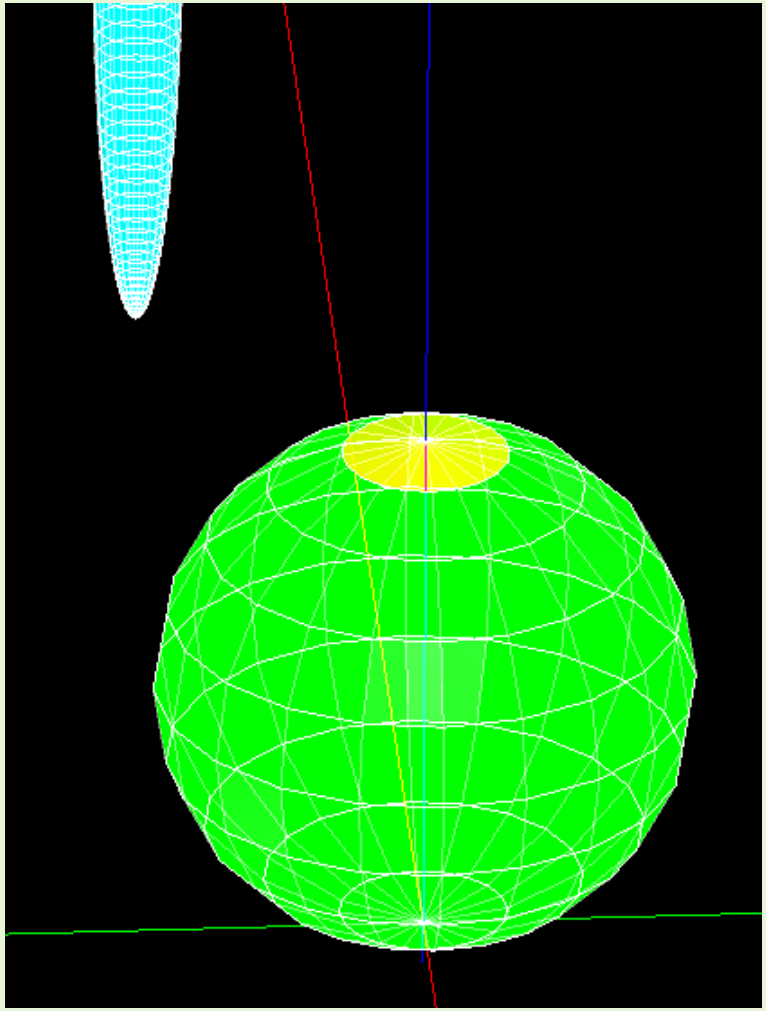
試料の形状は、横方向半径が2.5[nm]、縦方向半径が0.5[nm]の回転楕円体
試料の比誘電率: 1.5
右側の誘電体の電荷密度: -0.001[C/m^2]
左側の誘電体の電荷密度: 0.001[C/m^2]



試料のLCPD像
最大値: 5.24E-2[V]
最小値: -5.24E-2[V]

macroKPFM

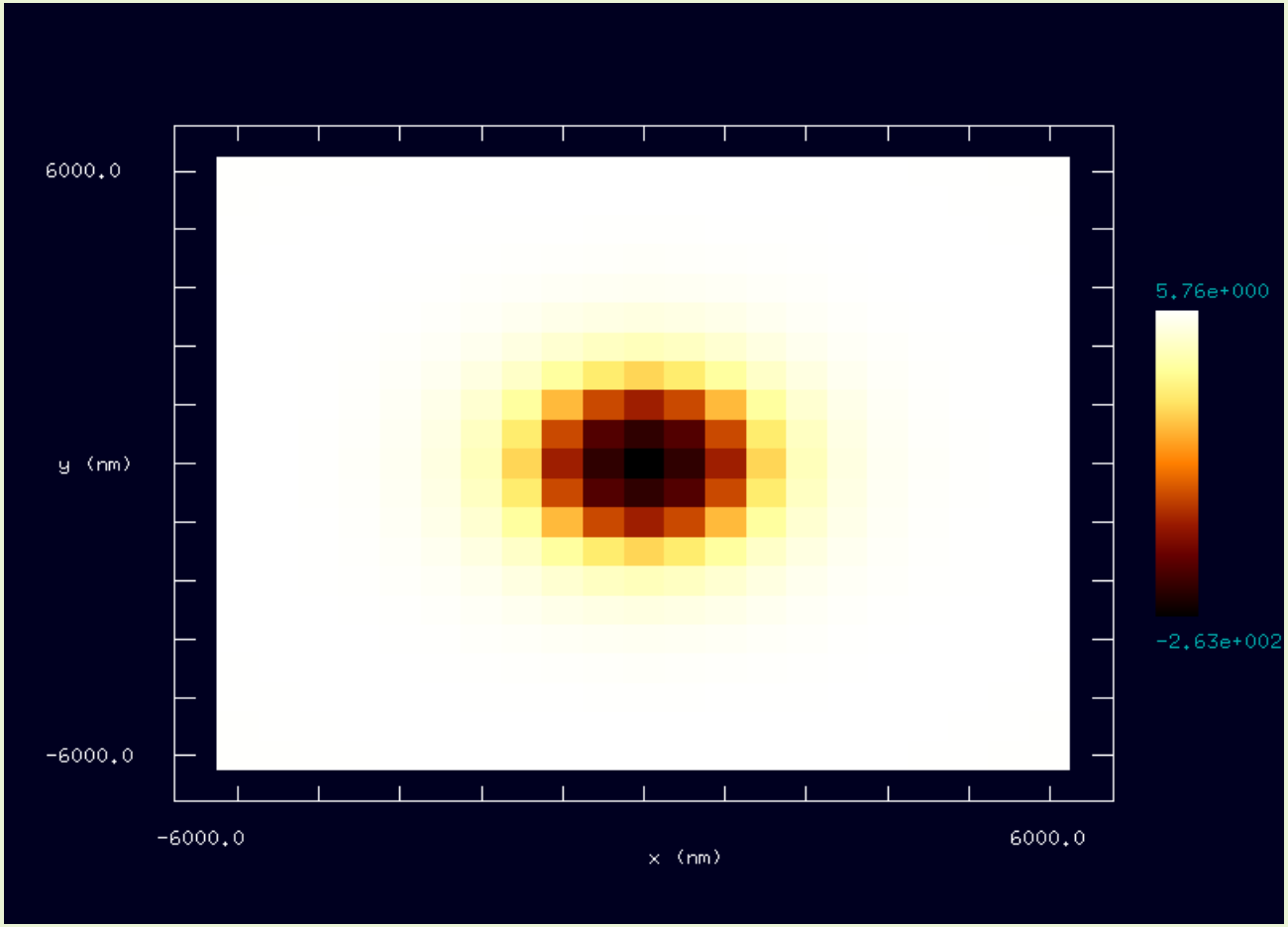
北極付近が正の表面電荷を持つトナー粒子に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径1[μm]、
縦方向半径10[μm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 100[nm]

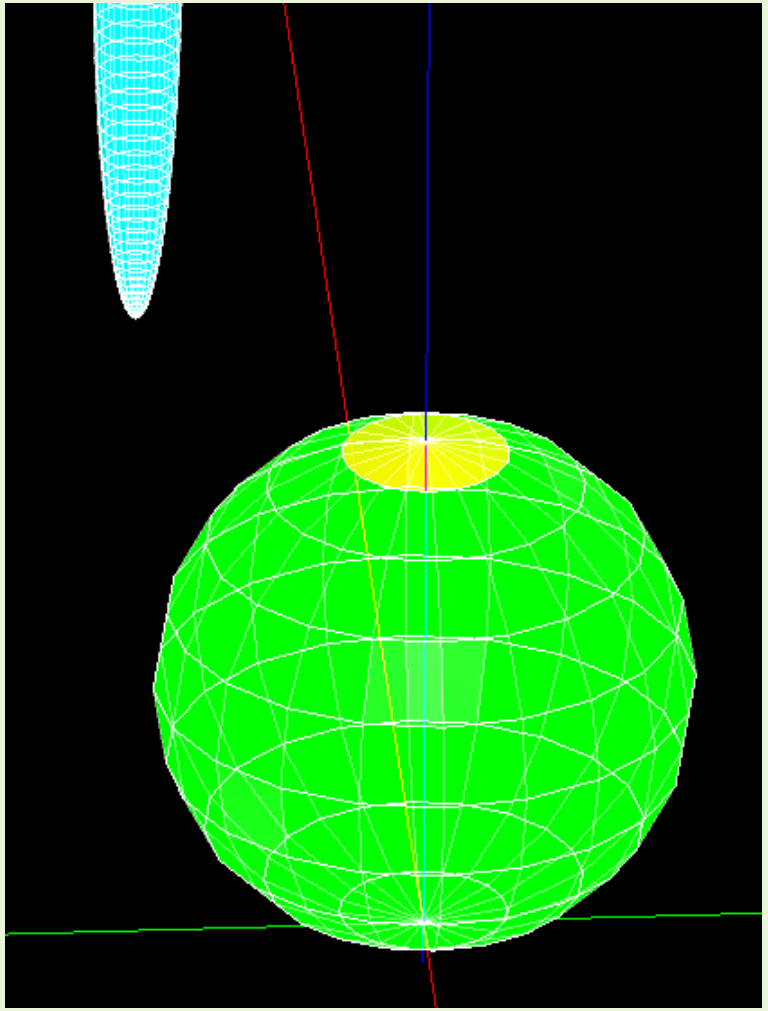
トナー粒子の半径: 6[μm]
試料の比誘電率: 3.8
トナー粒子の北極付近での、表面の
電荷密度: 1.0E−4[C/m^2]



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: 5.76[pN]
最小値: −2.63E+2[pN]

macroKPFM

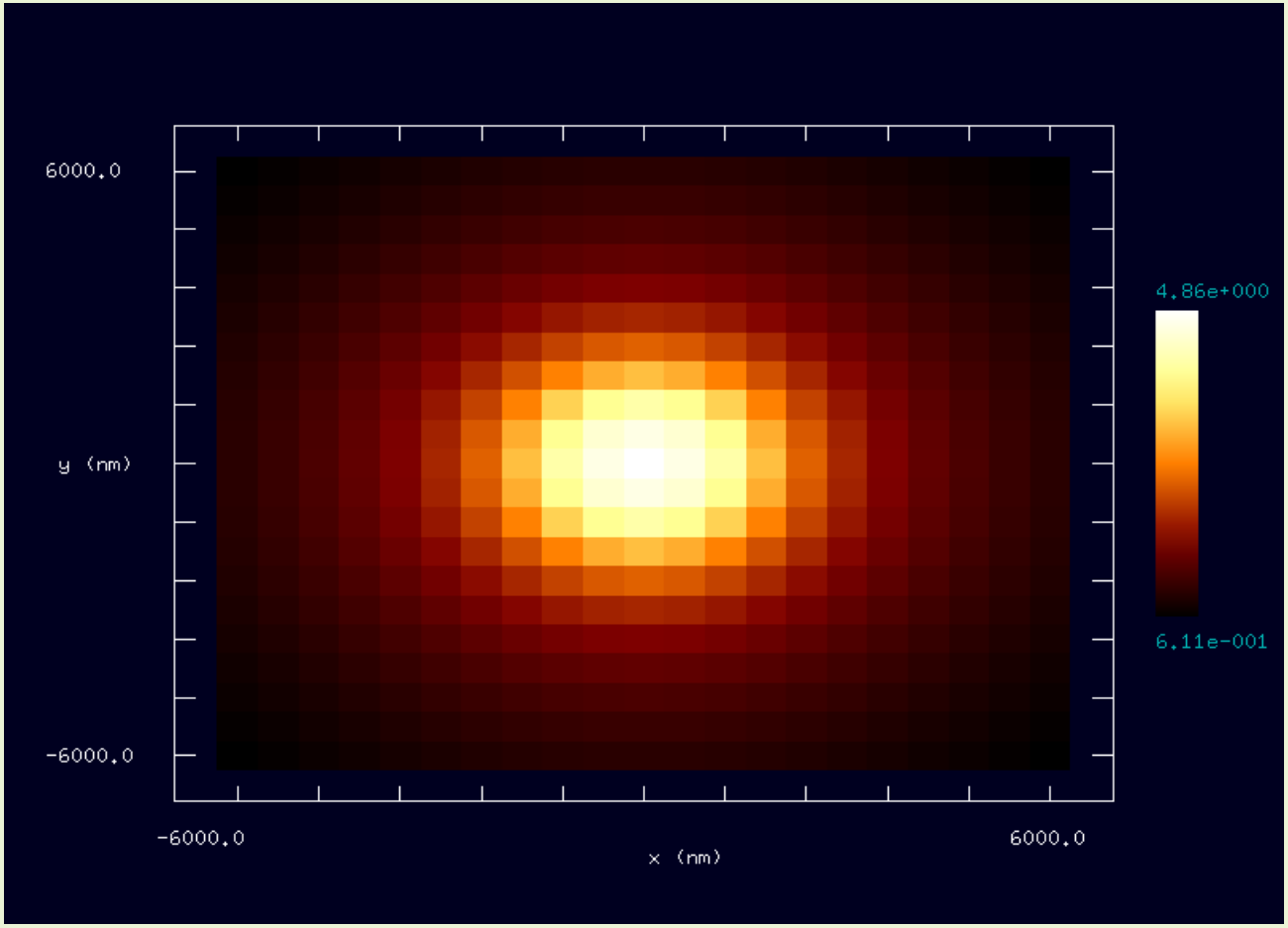
北極付近が正の表面電荷を持つトナー粒子のLCPD像



探針の形状は、横方向半径1[μm]、
縦方向半径10[μm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 100[nm]

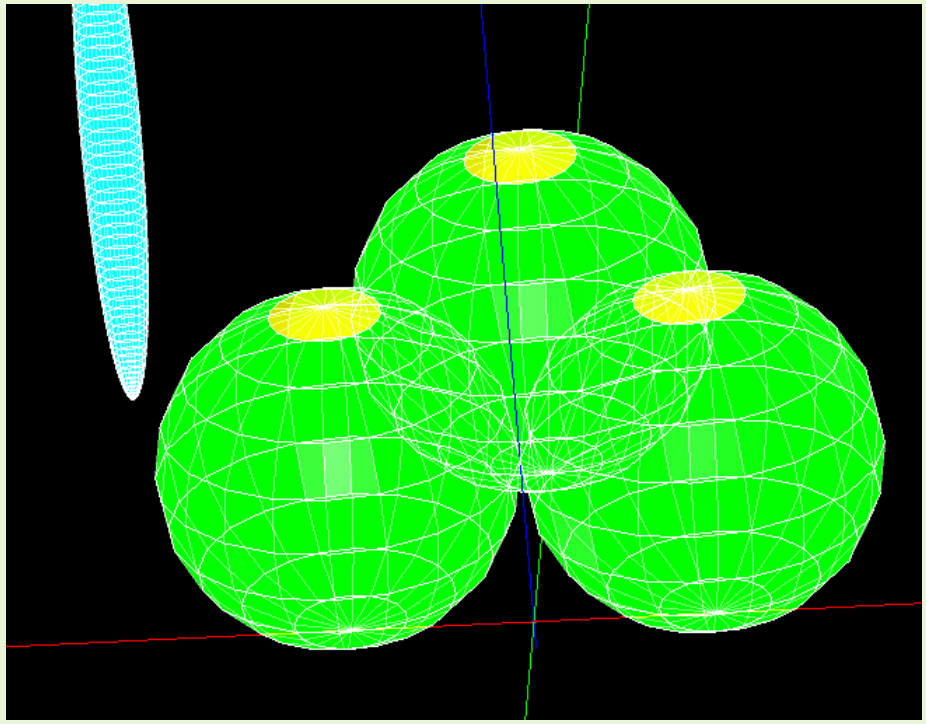
トナー粒子の半径: 6[μm]
試料の比誘電率: 3.8
トナー粒子の北極付近での、表面の
電荷密度: 1.0E−4[C/m^2]



試料のLCPD像
最大値: 4.86[V]
最小値: 0.611[V]

macroKPFM

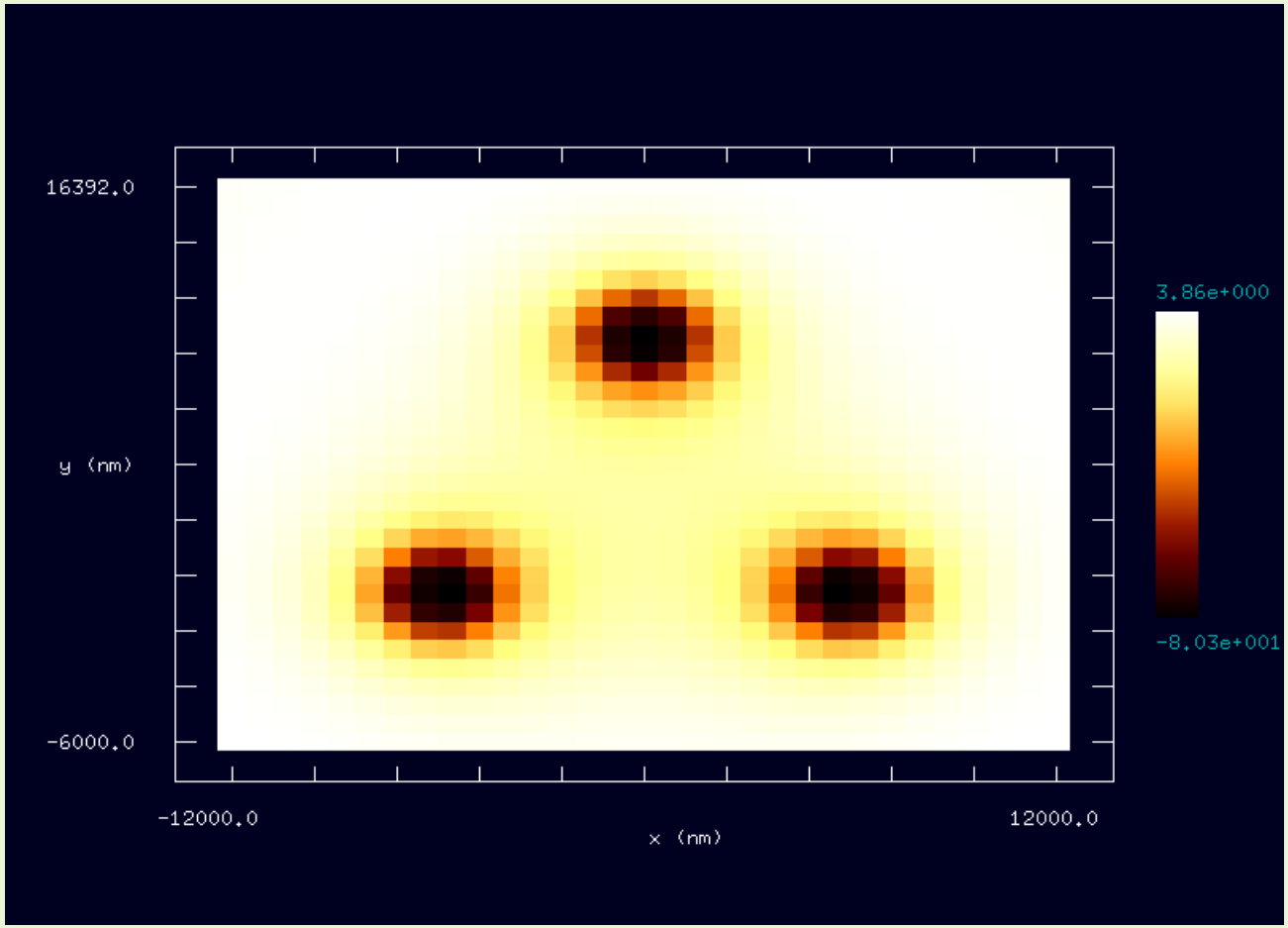
北極付近が正の表面電荷を持つトナー粒子3個に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径1[μm]、
縦方向半径10[μm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 100[nm]

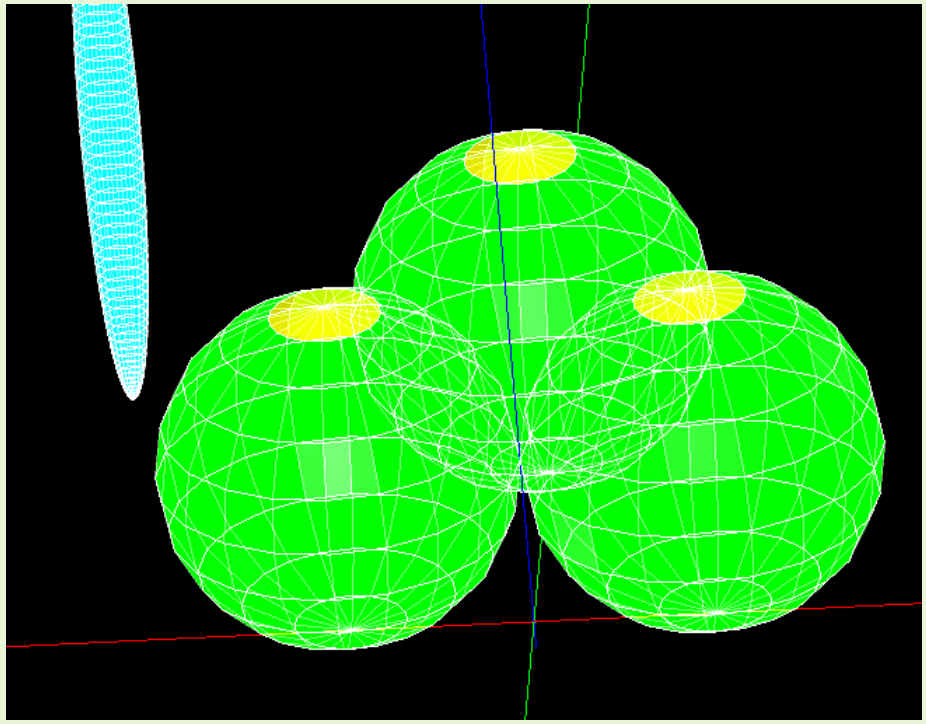
トナー粒子の半径: 6[μm]
試料の比誘電率: 3.8
トナー粒子の北極付近での、表面の
電荷密度: 1.0E−4[C/m^2]



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: 3.86[pN]
最小値: −80.3[pN]

macroKPFM

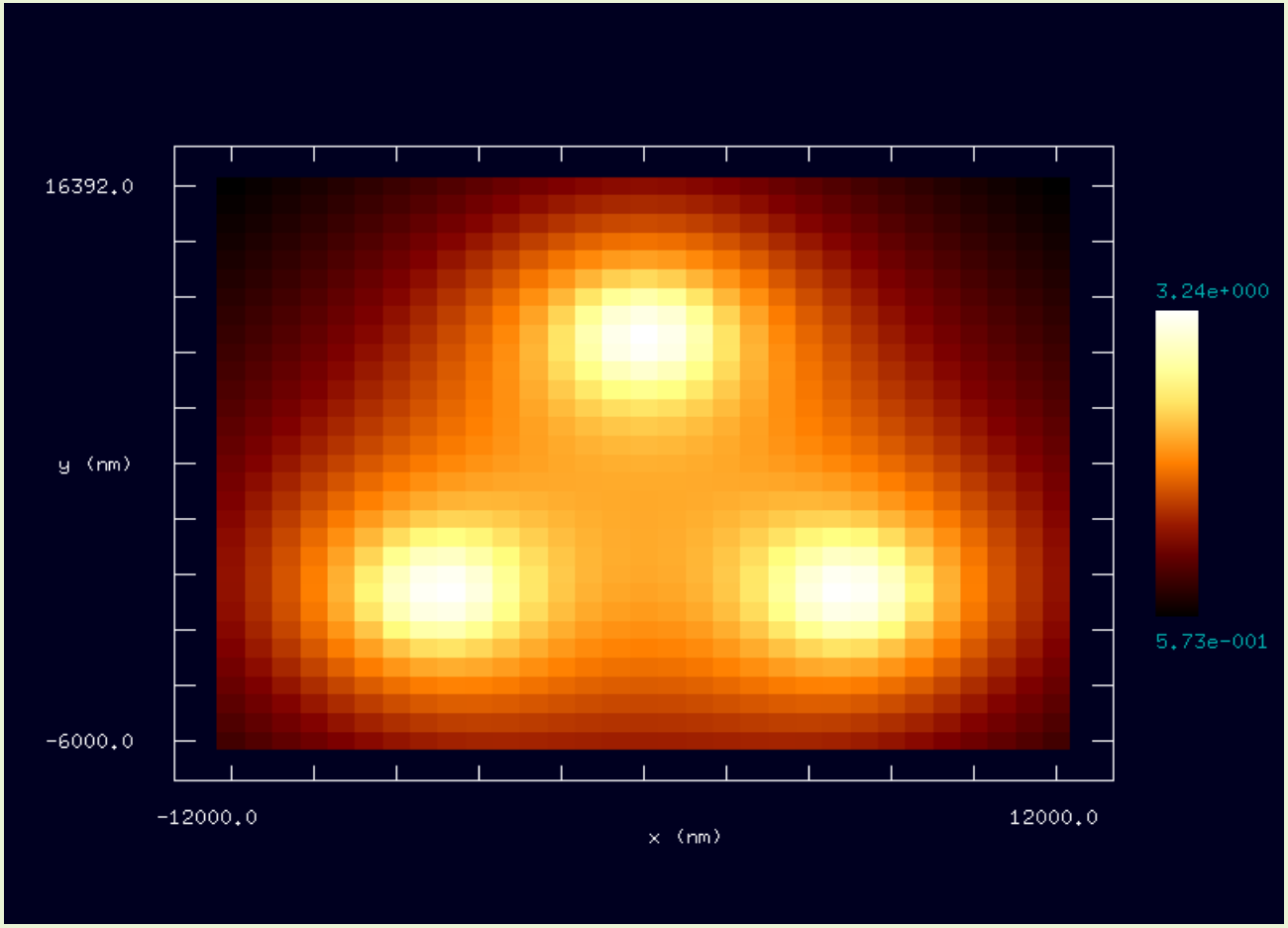
北極付近が正の表面電荷を持つトナー粒子3個に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径1[μm]、
縦方向半径10[μm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 100[nm]

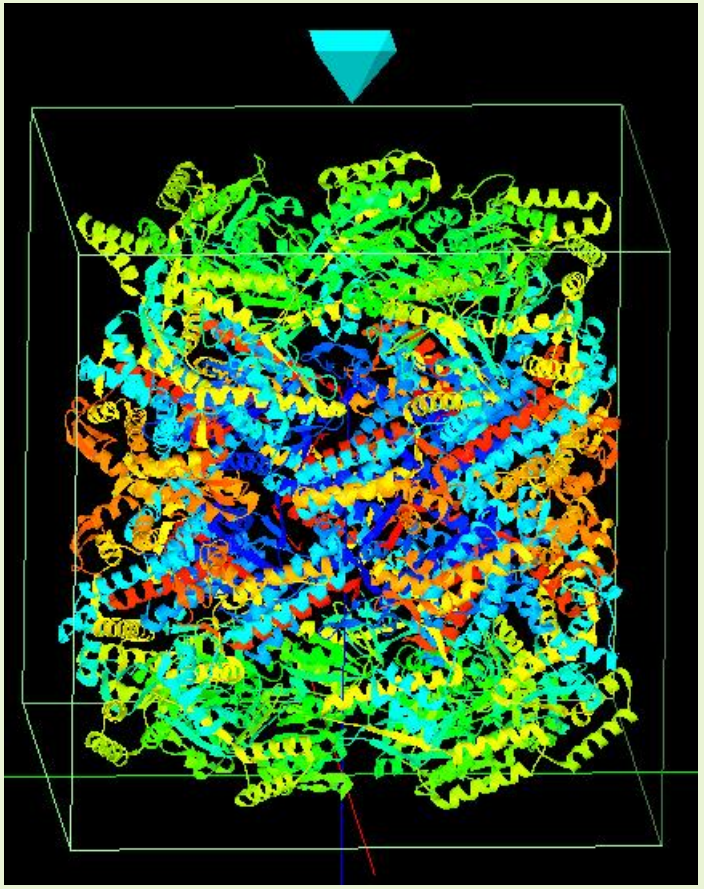
トナー粒子の半径: 6[μm]
試料の比誘電率: 3.8
トナー粒子の北極付近での、表面の
電荷密度: 1.0E−4[C/m^2]



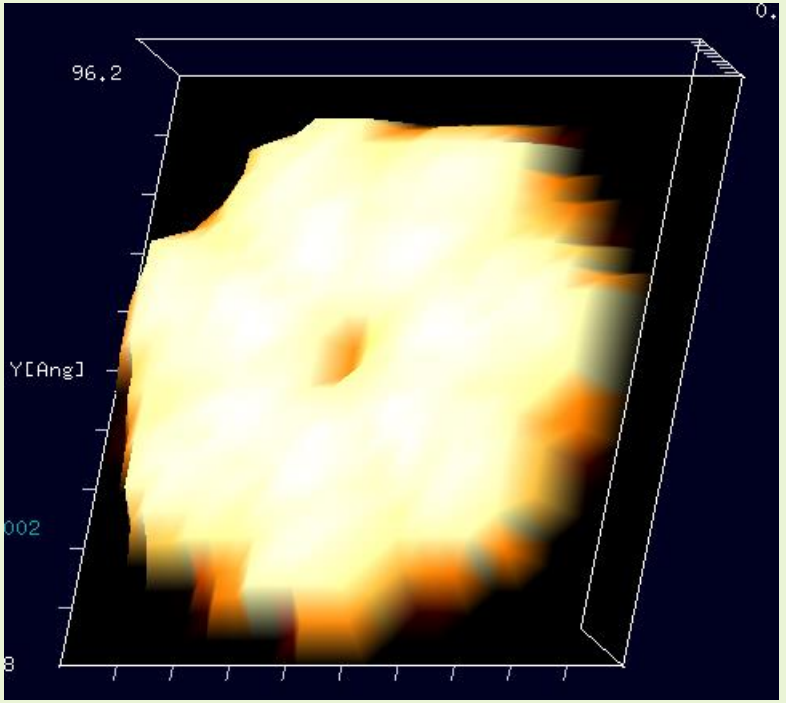
試料のLCPD像
最大値: 3.24[V]
最小値: 0.573[V]

macroKPFM

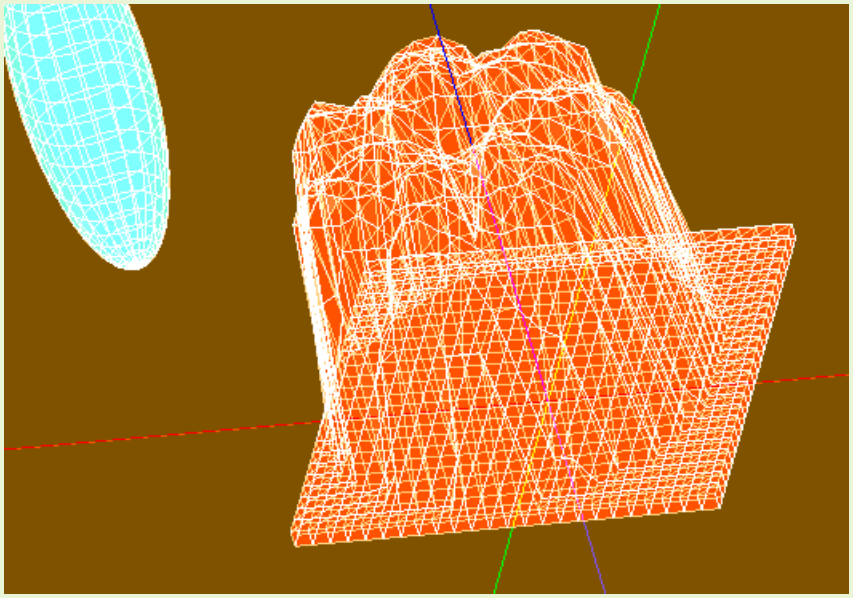
均一な表面電荷を持つシャペロニンGroEL分子に対して探針が感じる力の分布



シャペロニンGroELの分子構造図



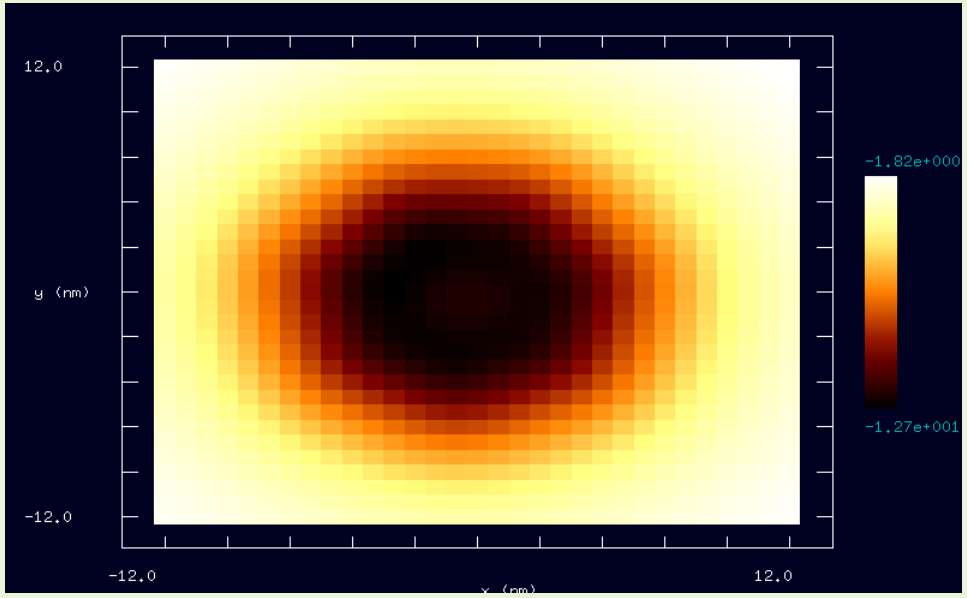
シャペロニンGroEL分子に対して、
0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1.62[nm]

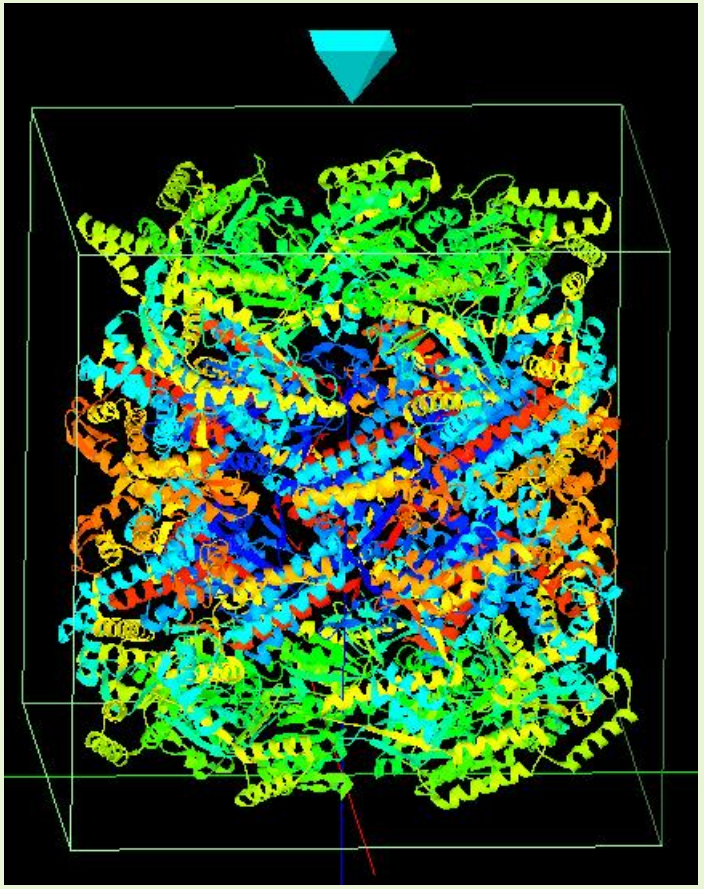
試料形状　横: 19.2[nm]
　　縦: 19.2[nm]
　　高さ: 15.9[nm]
試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
1.0E−6[C/m^2]



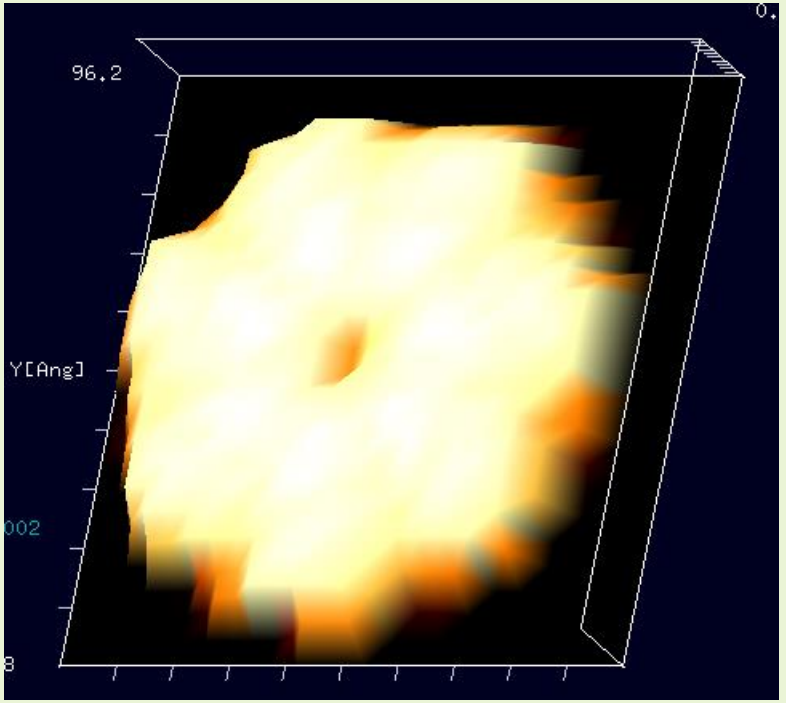
探針の感じるz方向の
力の分布
最大値: −1.82[pN]
最小値: −12.7[pN]

macroKPFM

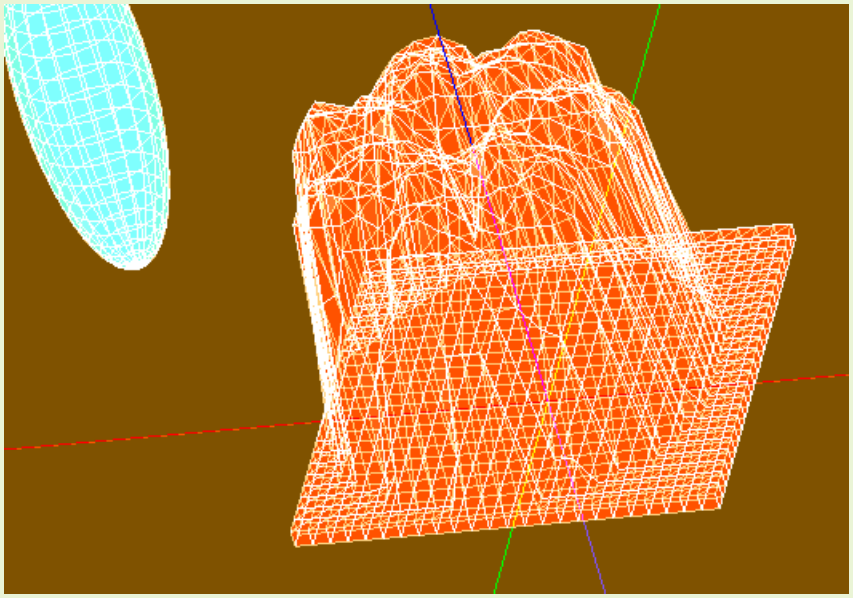
均一な表面電荷を持つシャペロニンGroEL分子のLCPD像



シャペロニンGroELの分子構造図



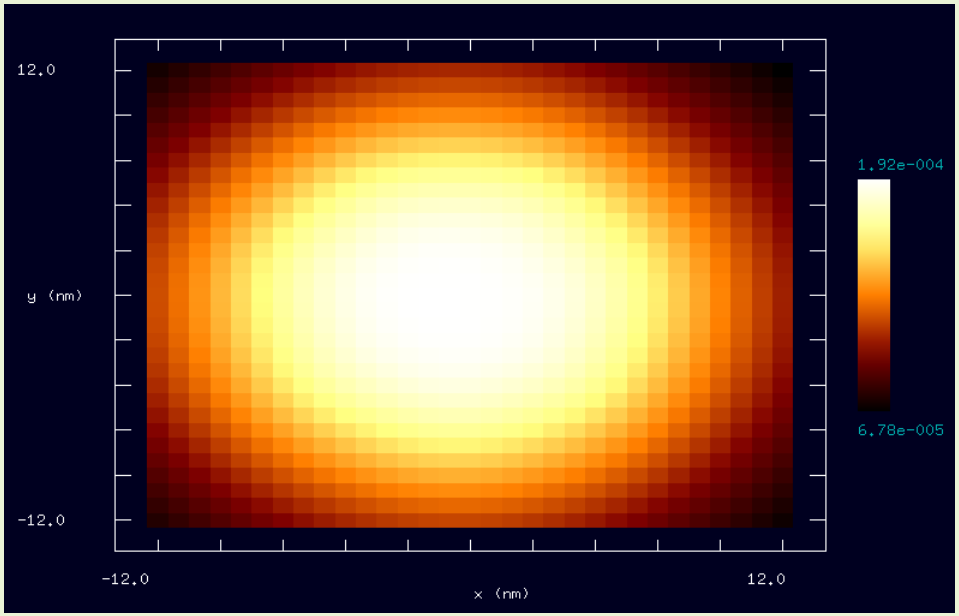
シャペロニンGroEL分子に対して、
0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1.62[nm]

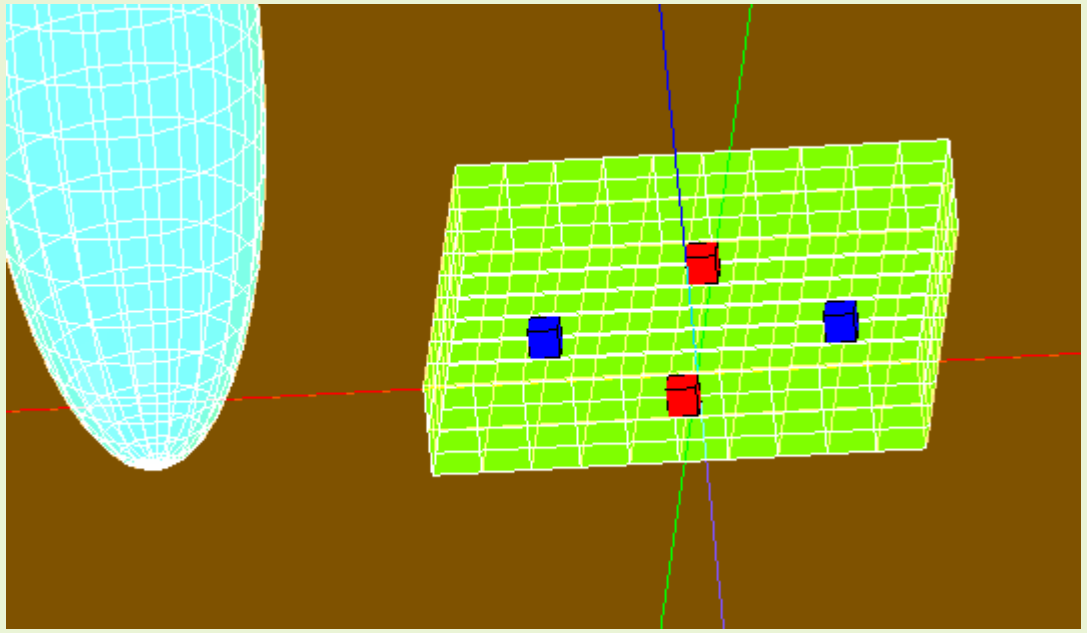
試料形状　横: 19.2[nm]
　　縦: 19.2[nm]
　　高さ: 15.9[nm]
試料の比誘電率: 80.4
試料表面の電荷密度:
1.0E−6[C/m^2]



試料のLCPD像
最大値: 1.92E−4[V]
最小値: 6.78E−5[V]

macroKPFM

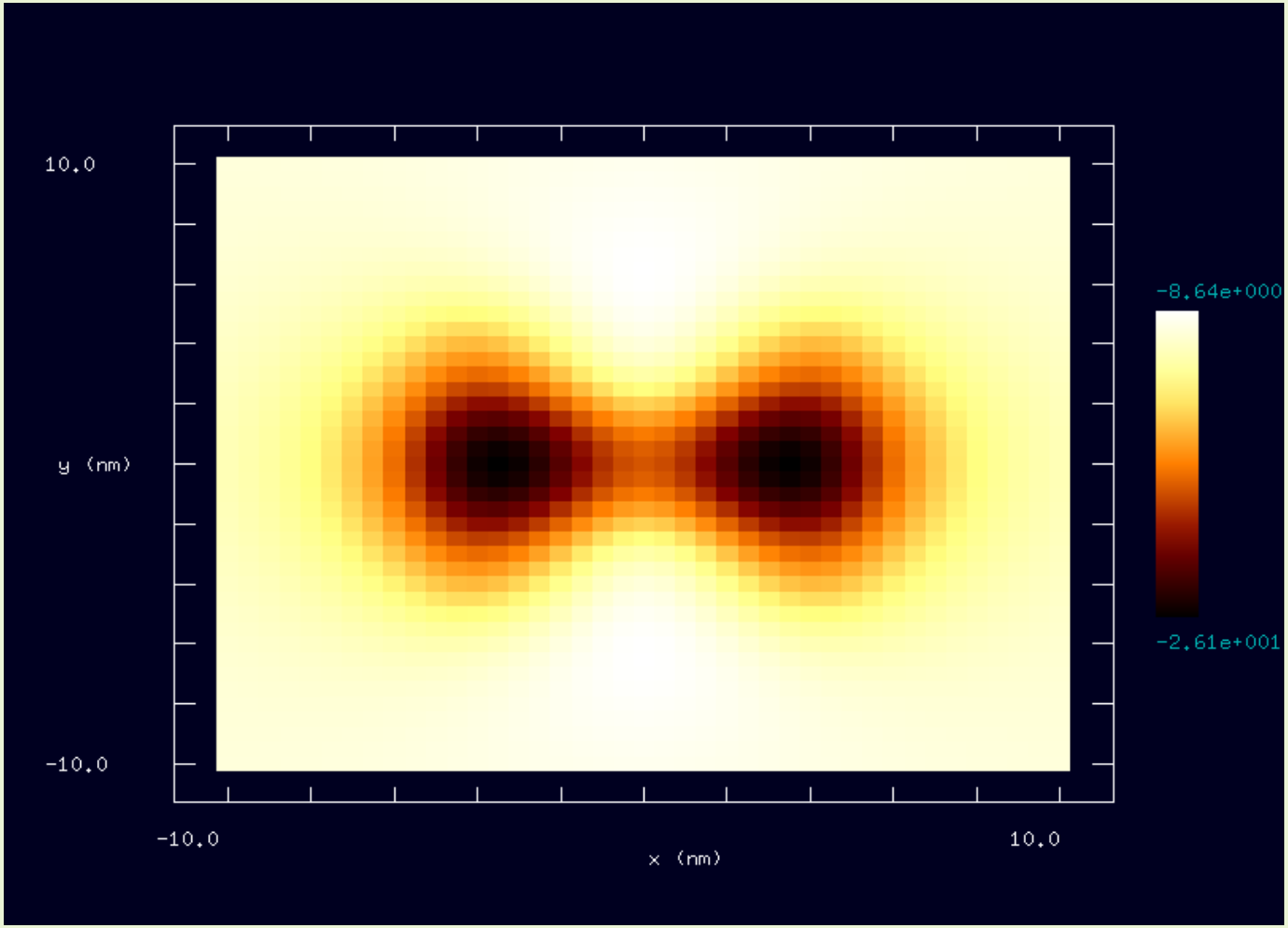
内部に正負四個の電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO2)に対して探針が感じる力の分布



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1[nm]

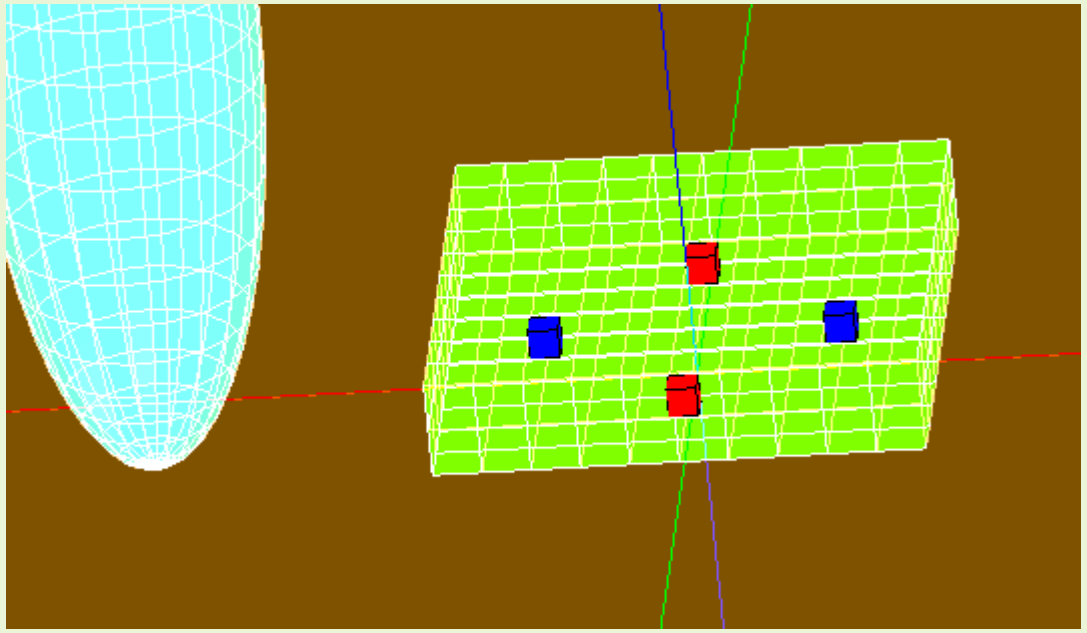
試料の縦、横長さ: 10[nm]
試料の高さ: 2[nm]
試料の比誘電率: 3.8
試料内部に、正負四個の電荷が配置されている



探針の感じるz方向の力の分布
最大値: −8.64[pN]
最小値: −26.1[pN]

macroKPFM

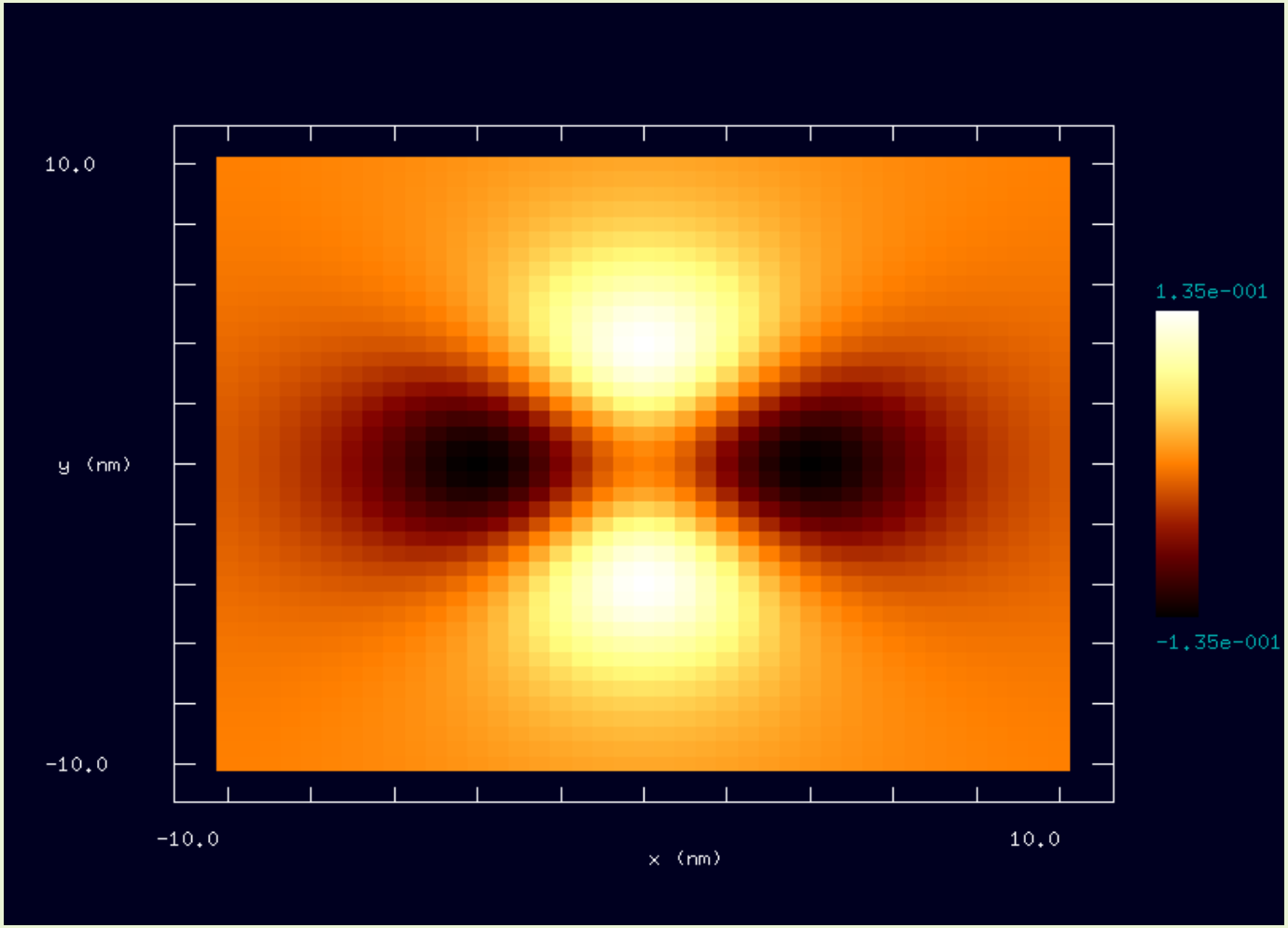
内部に正負四個の電荷を持つ直方体の二酸化ケイ素(SiO2)のLCPD像



探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

探針の電位: 1[V]
基板の電位: 0[V]
探針−試料間の最短距離: 1[nm]

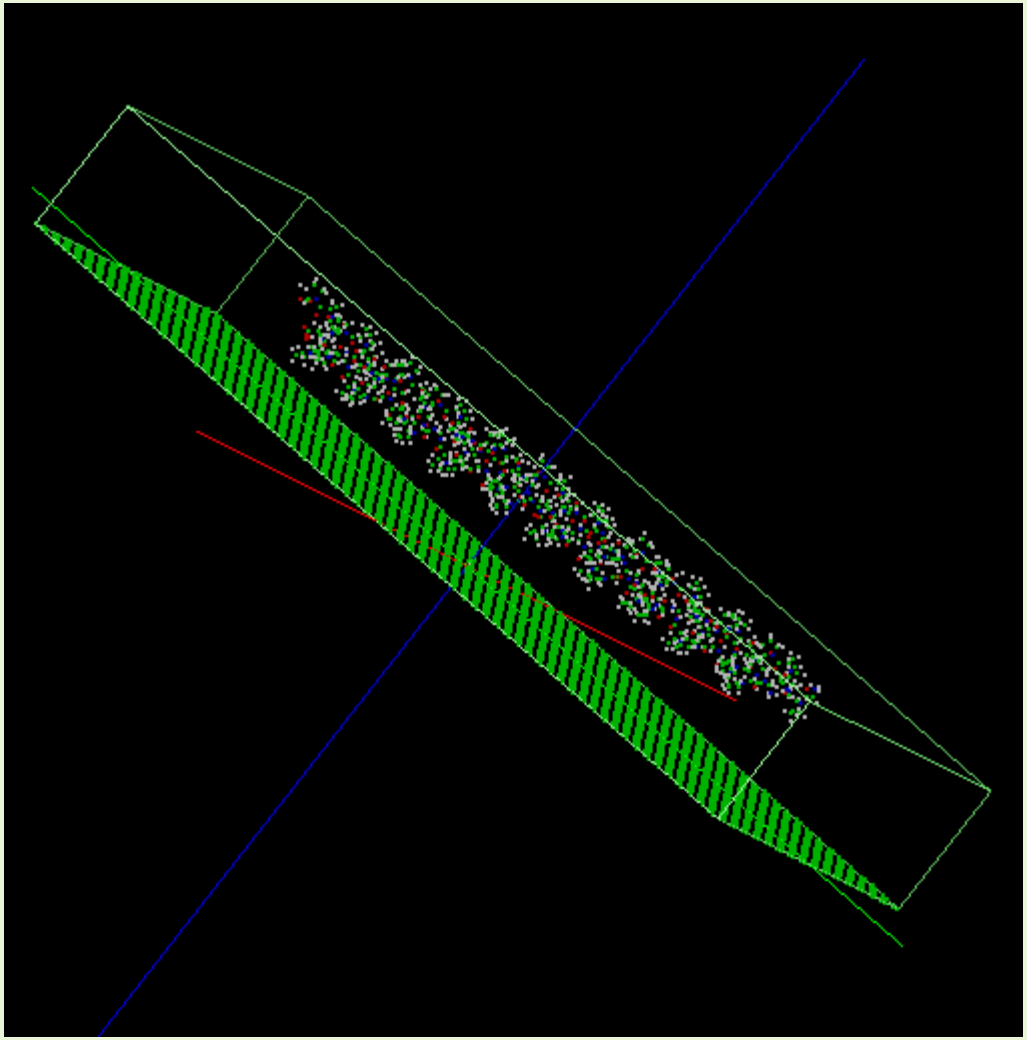
試料の縦、横長さ: 10[nm]
試料の高さ: 2[nm]
試料の比誘電率: 3.8
試料内部に、正負四個の電荷が配置されている



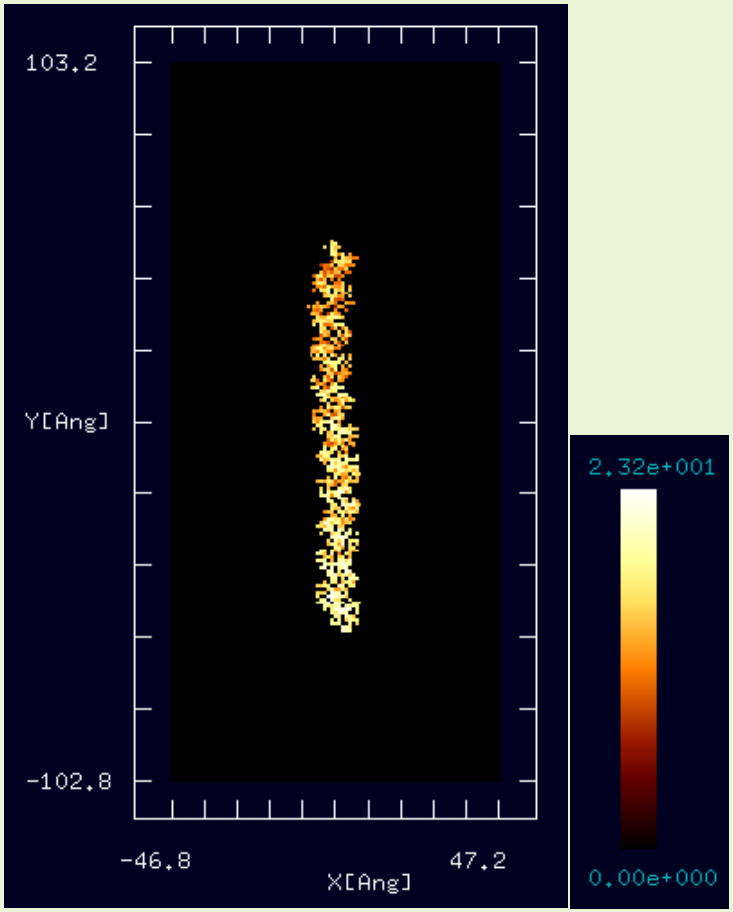
試料のLCPD像
最大値: 0.135[V]
最小値: −0.135[V]

LiqAFMタッピング機能

コラーゲン分子の周波数シフト・位相シフトAFM像



HOPG上のコラーゲン
の分子構造図



コラーゲン分子表面の高さ情報を表した図

カンチレバーの振動:
周波数: 20.0[kHz]
振幅: 30.0[nm]

流体:
動粘性係数: 0.25e-6[m^2/s]
密度: 200.0[kg/m^3]

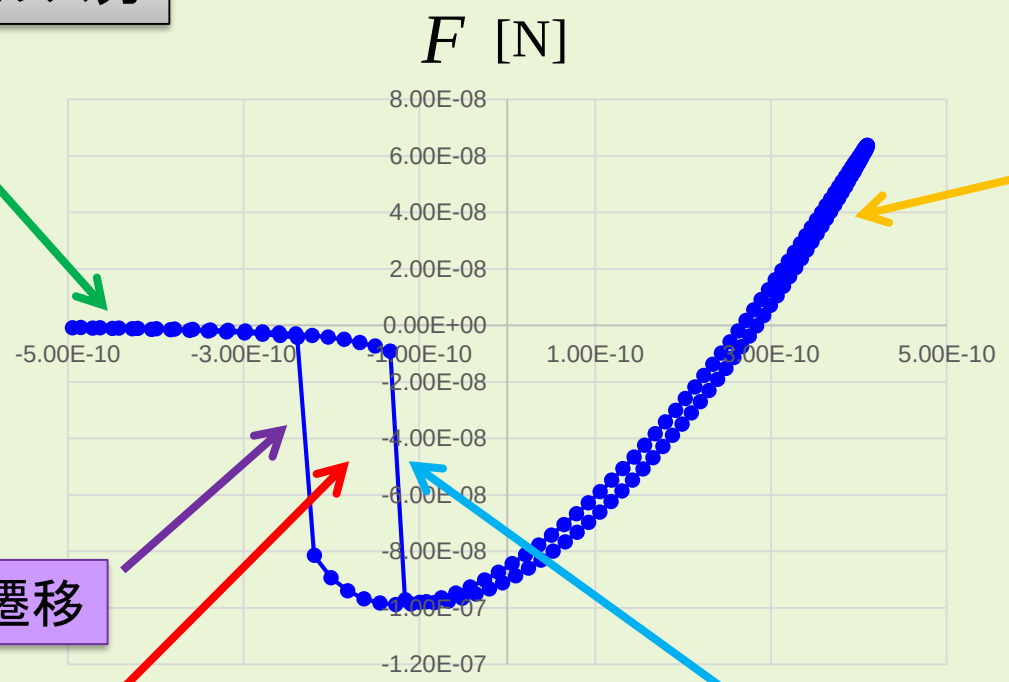
試料(コラーゲン分子):
ヤング率: 76.5[GPa]
ポアソン比: 0.22
ハーマーカー定数: 5.0e-20[J]
表面張力: 0.4[N/m]
粘性抵抗: 10.0[Pa s]

カンチレバー:
密度: 2200.0 [kg/m^3]
ヤング率: 6000.0[GPa]
ポアソン比: 0.22
長さ、幅、深さ:
400.0, 50.0, and 4.0[μ m]
ばね定数: 75.0[N/m]
探針のハーマーカー定数:
5.0e-20[J]

フォースカーブ：探針―試料間の距離 vs 探針の感じる力

真空中での場合

ファンデルワールス力



JKRモデル

決定論的状態遷移

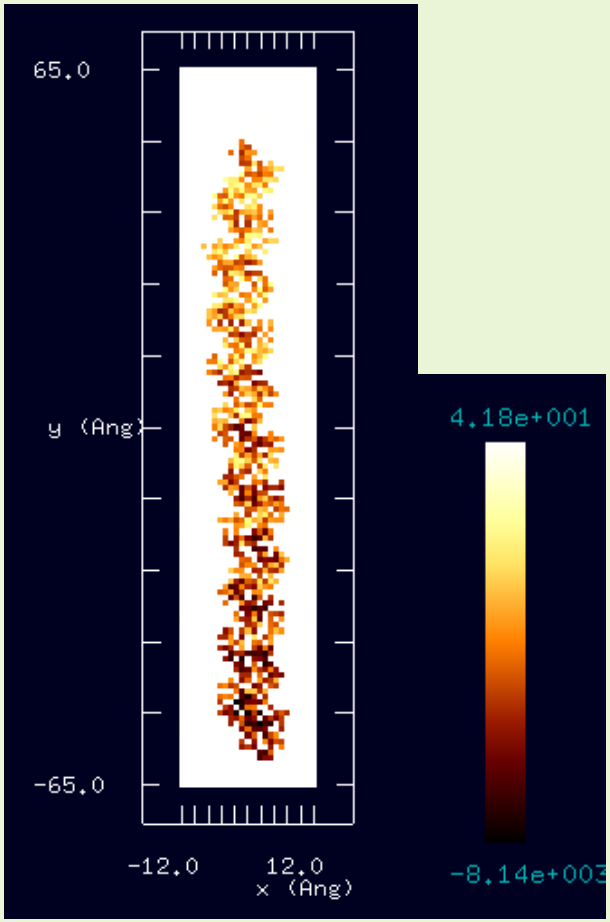
ヒステリシスが生じている

確率的状態遷移

真空中でのシミュレーション

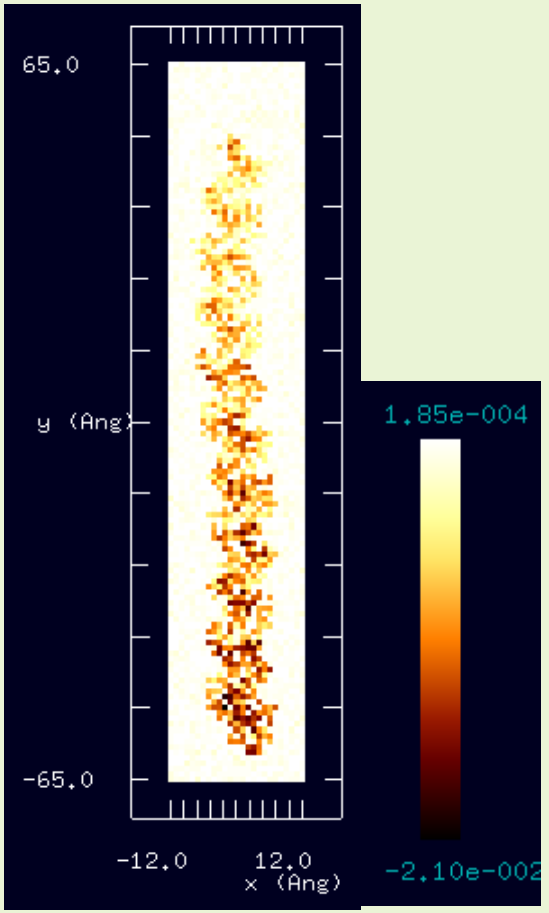
周波数シフト像

最大値: 0.0418[kHz]
最小値: −8.14[kHz]



位相シフト像

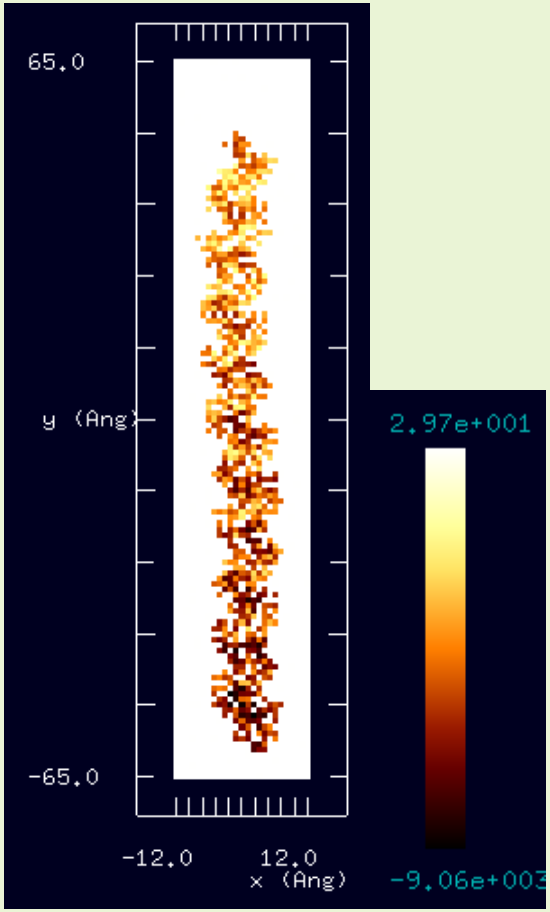
最大値: 1.85e−4[radian]
最小値: −2.10e−2[radian]



液中環境下でのシミュレーション

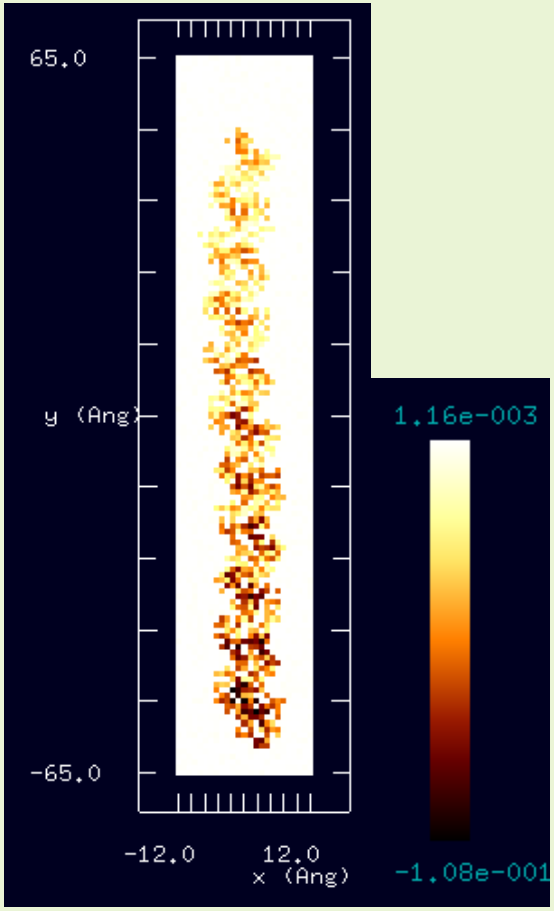
周波数シフト像

最大値: 0.0297[kHz]
最小値: −9.06[kHz]



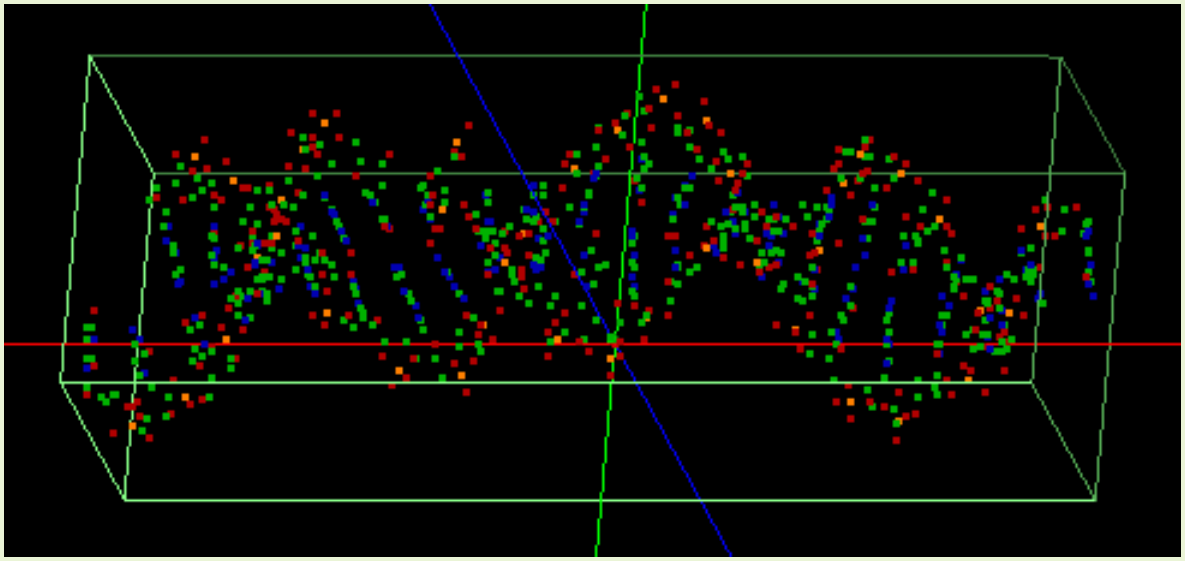
位相シフト像

最大値: 1.16e−3[radian]
最小値: −1.08e−1[radian]



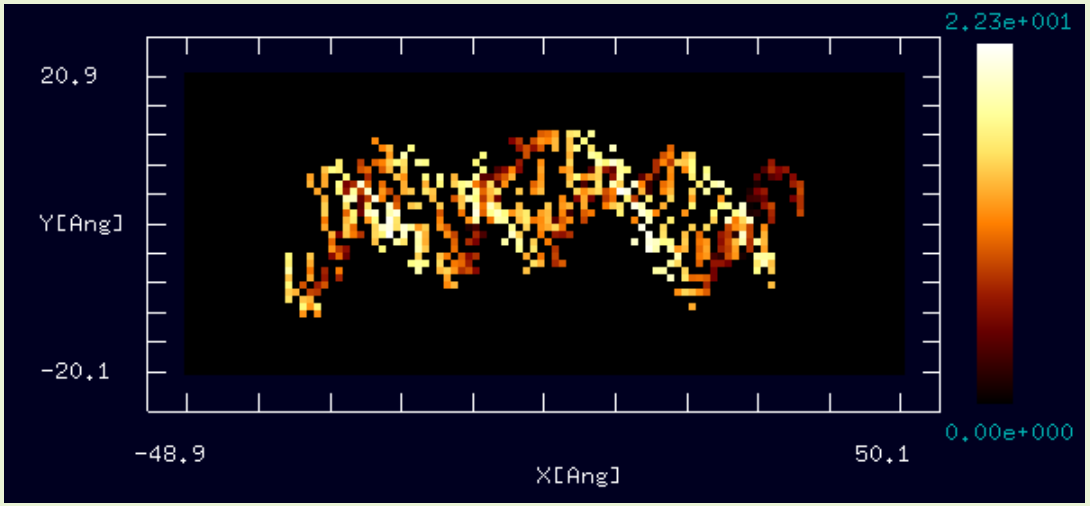
LiqAFMタッピング機能

DNA分子の周波数シフト・位相シフトAFM像



DNAの分子構造図

DNA分子表面の高さ情報を表した図



カンチレバーの振動:
周波数: 20.0[kHz]
振幅: 30.0[nm]

流体:
動粘性係数: 0.25e-6[m^2/s]
密度: 200.0[kg/m^3]

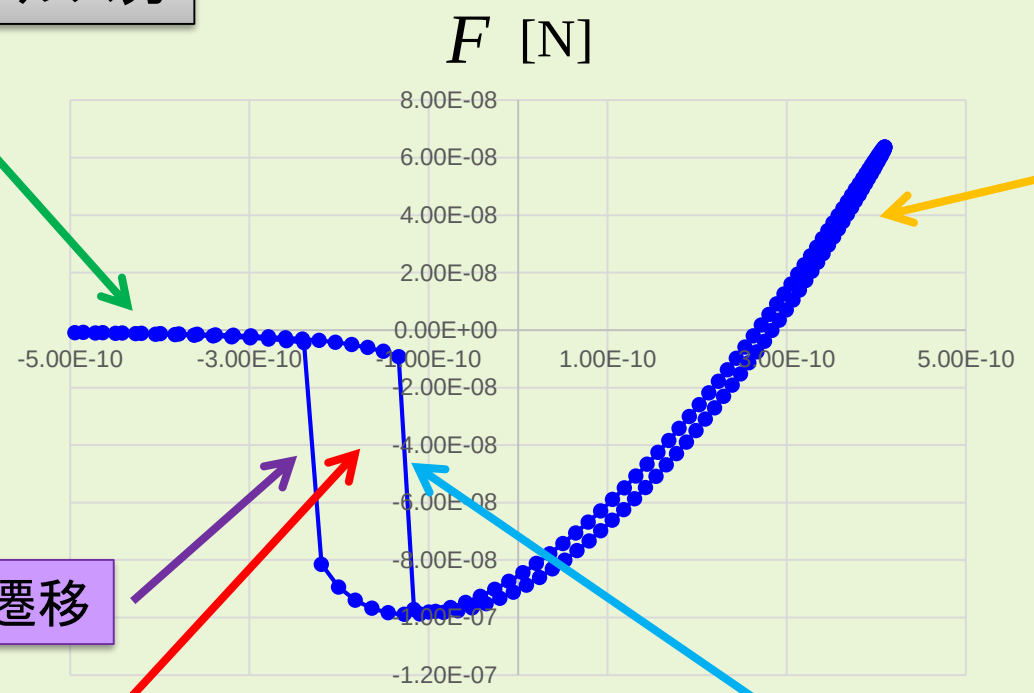
試料(DNA分子):
ヤング率: 76.5[GPa]
ポアソン比: 0.22
ハーマーカー定数: 5.0e-20[J]
表面張力: 0.4[N/m]
粘性抵抗: 10.0[Pa s]

カンチレバー:
密度: 2200.0 [kg/m^3]
ヤング率: 6000.0[GPa]
ポアソン比: 0.22
長さ、幅、深さ:
400.0, 50.0, and 4.0[μm]
ばね定数: 75.0[N/m]
探針のハーマーカー定数:
5.0e-20[J]

フォースカーブ：探針―試料間の距離 vs 探針の感じる力

真空中での場合

ファンデルワールス力



JKRモデル

決定論的状態遷移

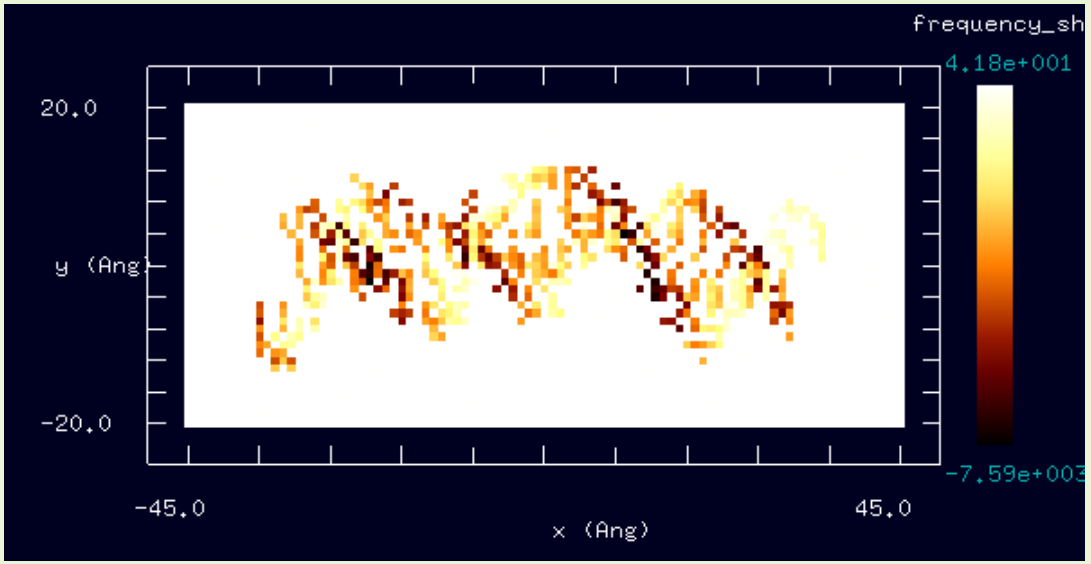
ヒステリシスが生じている

確率的状態遷移

真空中でのシミュレーション

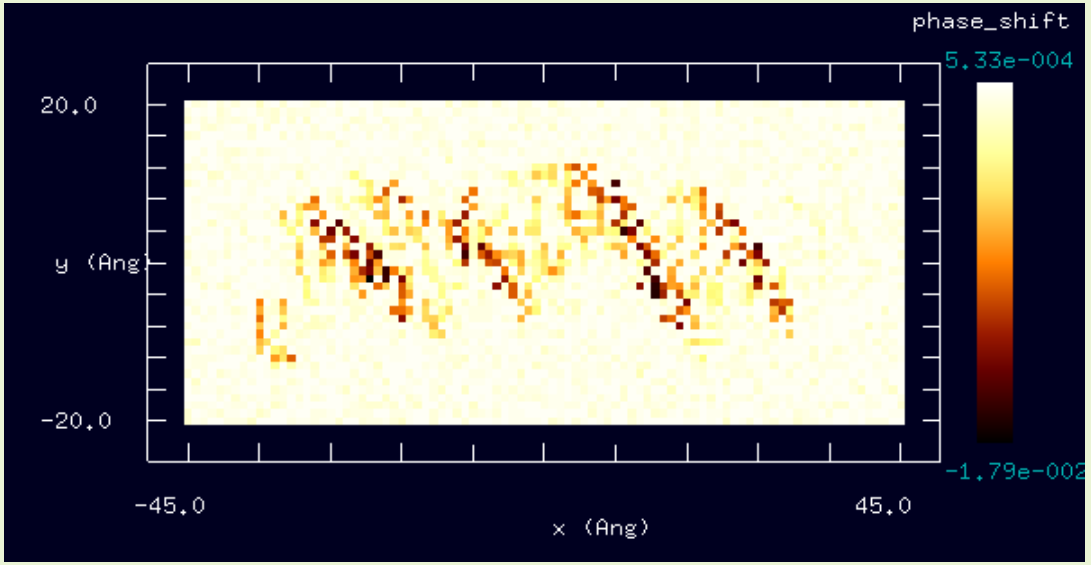
周波数シフト像

最大値: 0.0418[kHz]
最小値: −7.59[kHz]



位相シフト像

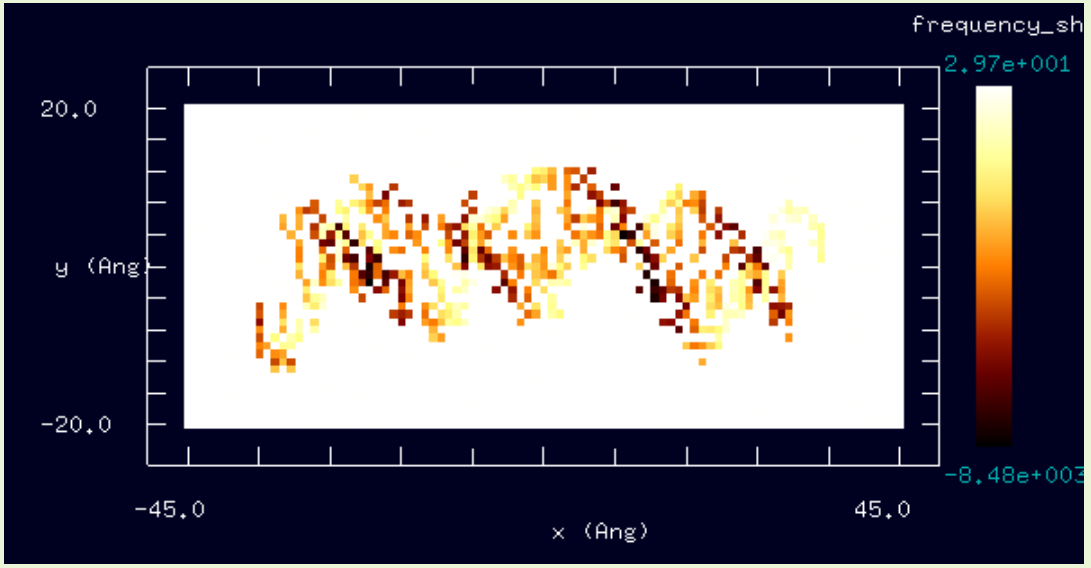
最大値: 5.33e−4[radian]
最小値: −1.79e−2[radian]



液中環境下でのシミュレーション

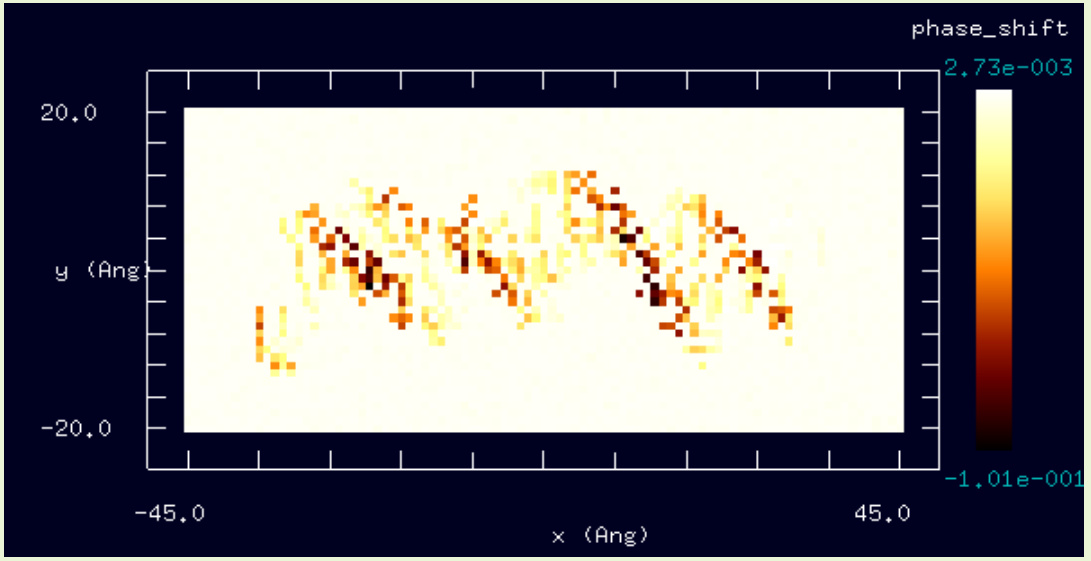
周波数シフト像

最大値: 0.0297[kHz]
最小値: −8.48[kHz]



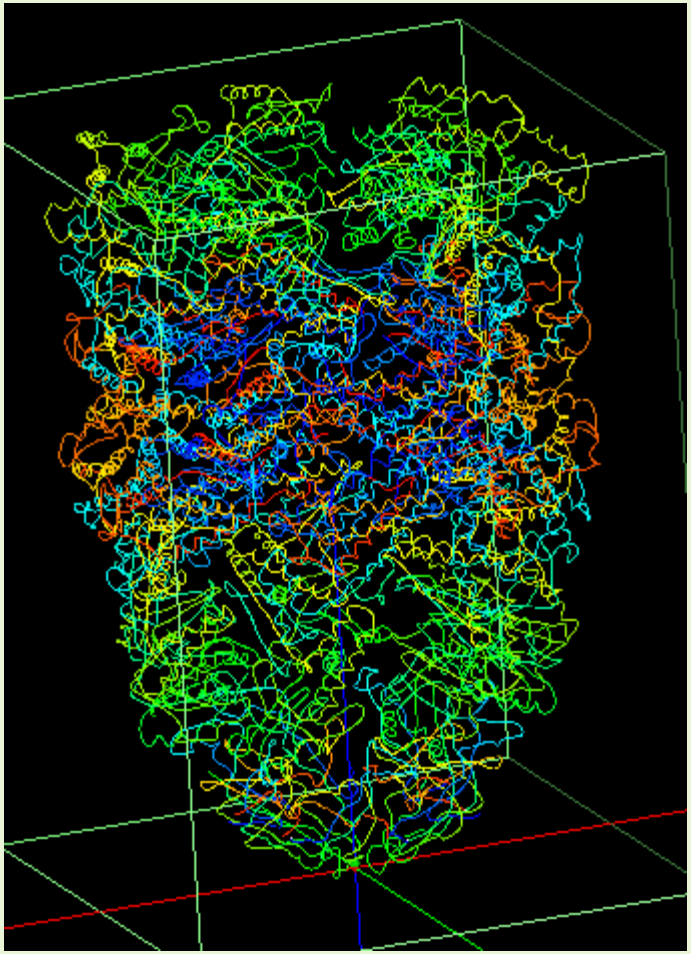
位相シフト像

最大値: 2.73e−3[radian]
最小値: −1.01e−1[radian]



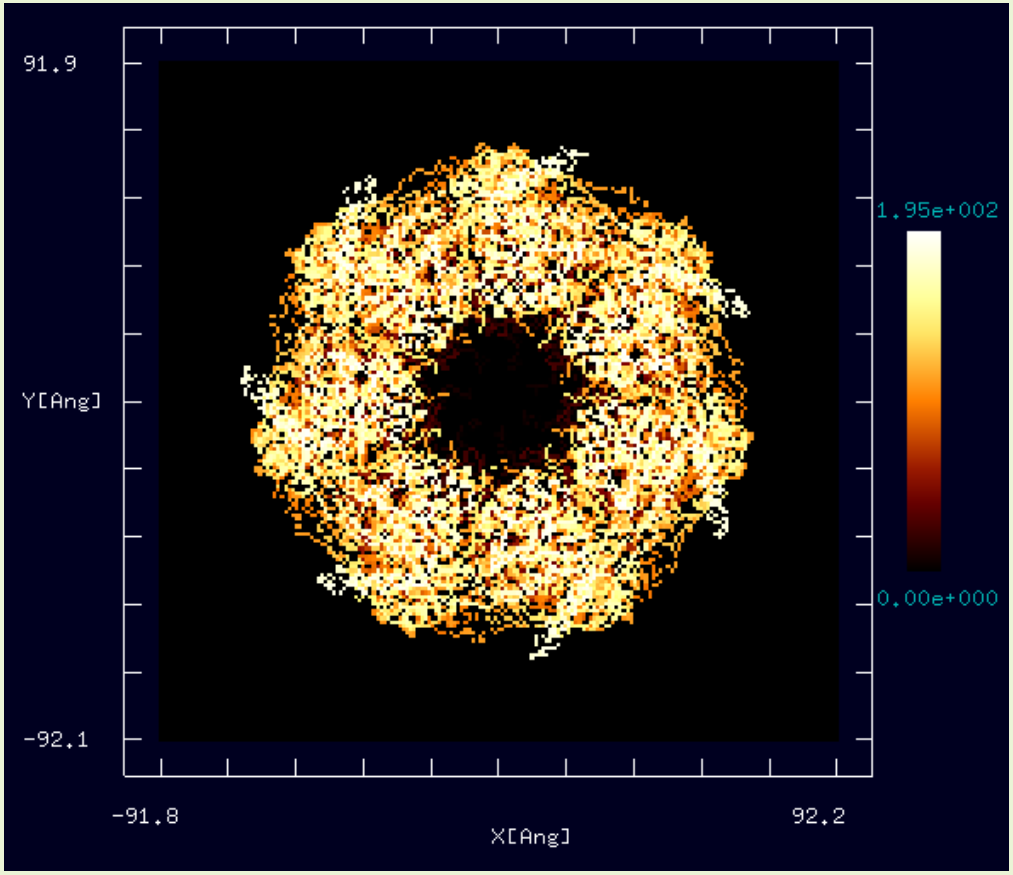
LiqAFMタッピング機能

GroEL(シャペロニン)分子の周波数シフト・位相シフトAFM像



GroEL(シャペロニン)の分子構造図

GroEL(シャペロニン)分子表面の高さ情報を表した図



カンチレバーの振動:
周波数: 20.0[kHz]
振幅: 30.0[nm]

カンチレバー:
密度: 2200.0 [kg/m^3]
ヤング率: 6000.0[GPa]
ポアソン比: 0.22
長さ、幅、深さ:
400.0, 50.0, and 4.0[μm]
ばね定数: 75.0[N/m]
探針のハーマーカー定数:
5.0e-20[J]

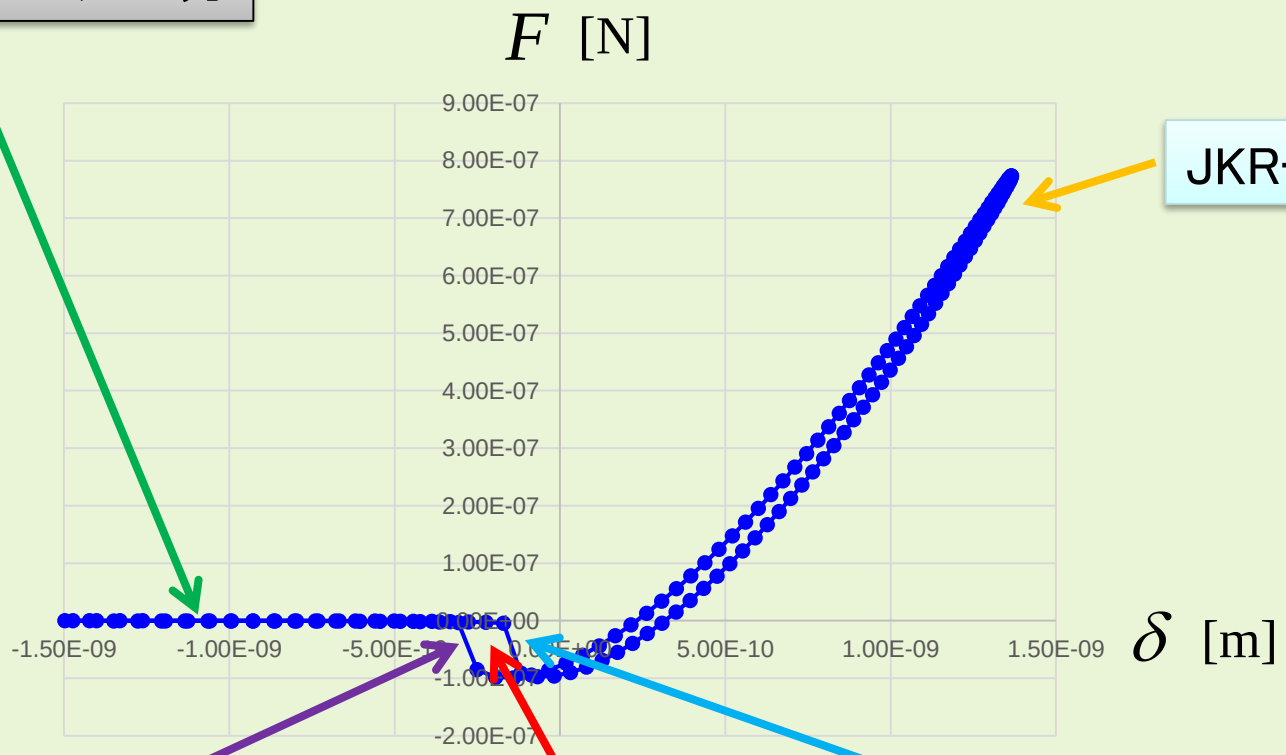
試料(GroEL分子):
ヤング率: 76.5[GPa]
ポアソン比: 0.22
ハーマーカー定数: 5.0e-20[J]
表面張力: 0.4[N/m]
粘性抵抗: 10.0[Pa s]

流体:
動粘性係数: 0.25e-6[m^2/s]
密度: 200.0[kg/m^3]

フォースカーブ：探針―試料間の距離 vs 探針の感じる力

真空中での場合

ファンデルワールス力



JKRモデル

決定論的状態遷移

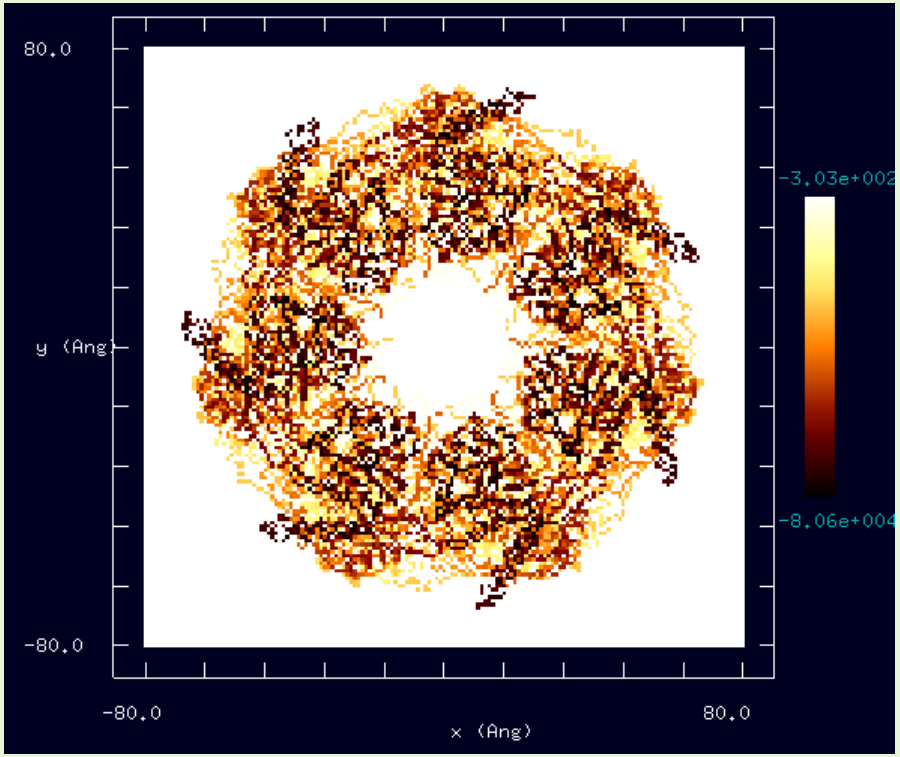
確率的状態遷移

ヒステリシスが生じている

真空中でのシミュレーション

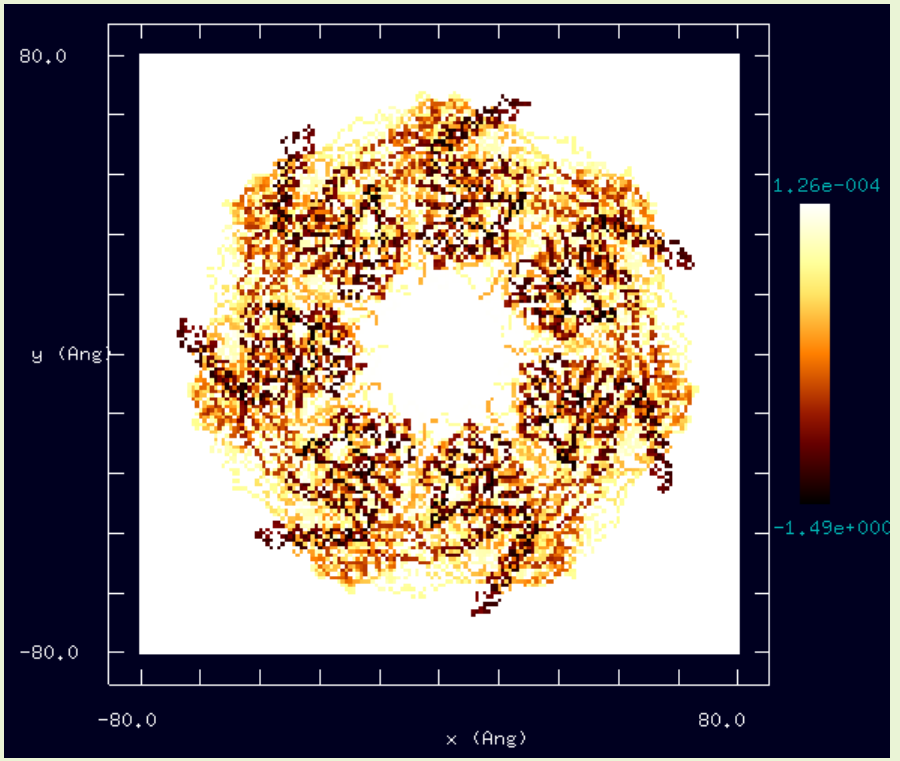
周波数シフト像

最大値: −0.303[kHz]
最小値: −80.6[kHz]



位相シフト像

最大値: 1.26e−4[radian]
最小値: −1.49[radian]



LiqAFM tapping逆問題(global_mode)

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率：76.5[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比：0.22
- 観測値を再現する表面張力：0.4[N/m]
- 観測値を再現する粘性率：10.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.0[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：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

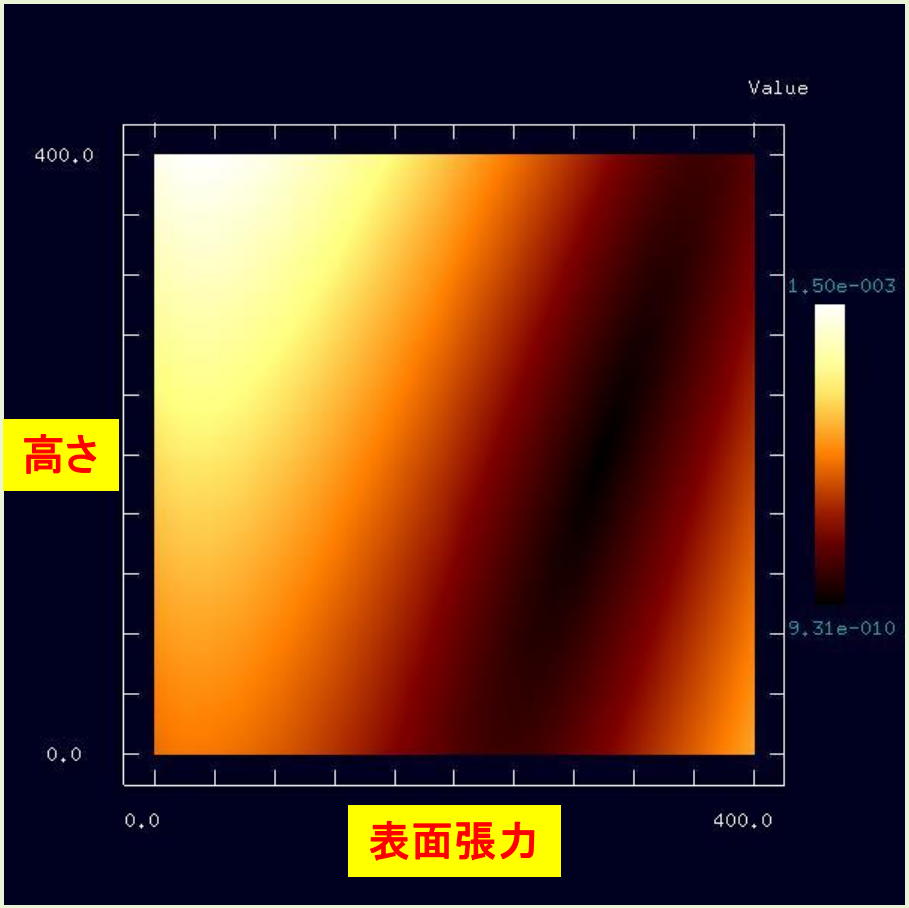
Φ_{obs} ：観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: 24.888Hz
位相シフトの観測値: -0.00123181(radian)

表面張力と基板からの高さの2種類のパラメータ平面上でのずれ関数値の分布

カンチレバーの振動の1周期を2048分割した場合

表面張力と基板からの高さのパラメータ平面上に、ずれ関数をプロットしたグラフ
表面張力：0.1～0.5[N/m](400分割)
高さ：-0.05～0.05[nm](400分割)



ずれ関数を最小にするパラメータの組は、
表面張力：0.4[N/m]
高さ：0.0[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode)

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率、表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率：76.5[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比：0.22
- 観測値を再現する表面張力：0.4[N/m]
- 観測値を再現する粘性率：10.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.0[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：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

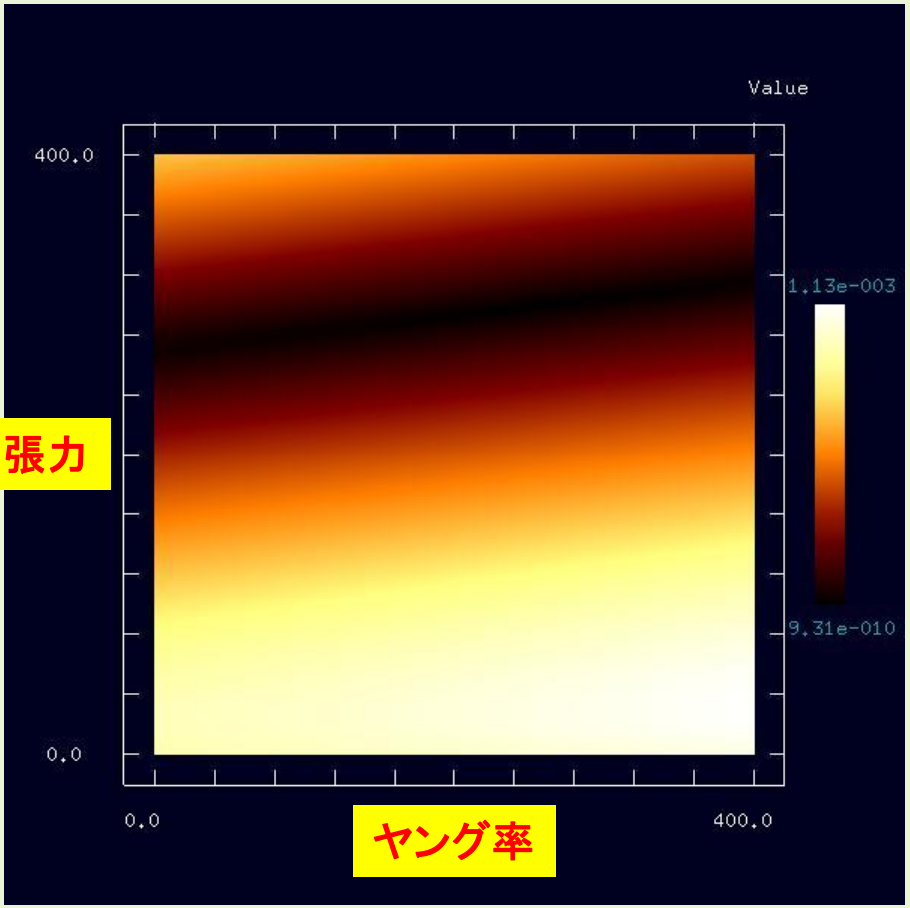
Φ_{obs} ：観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: 24.888Hz
位相シフトの観測値: -0.00123181(radian)

ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ平面上でのずれ関数値の分布

カンチレバーの振動の1周期を2048分割した場合

ヤング率と表面張力のパラメータ平面上に、ずれ関数をプロットしたグラフ
ヤング率：70.0～80.0[GPa](400分割)
表面張力：0.1～0.5[N/m](400分割)



ずれ関数を最小にするパラメータの組は、
ヤング率：76.5[Gpa]
表面張力：0.4[N/m]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode)

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率、基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率：76.5[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比：0.22
- 観測値を再現する表面張力：0.4[N/m]
- 観測値を再現する粘性率：10.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.0[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：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

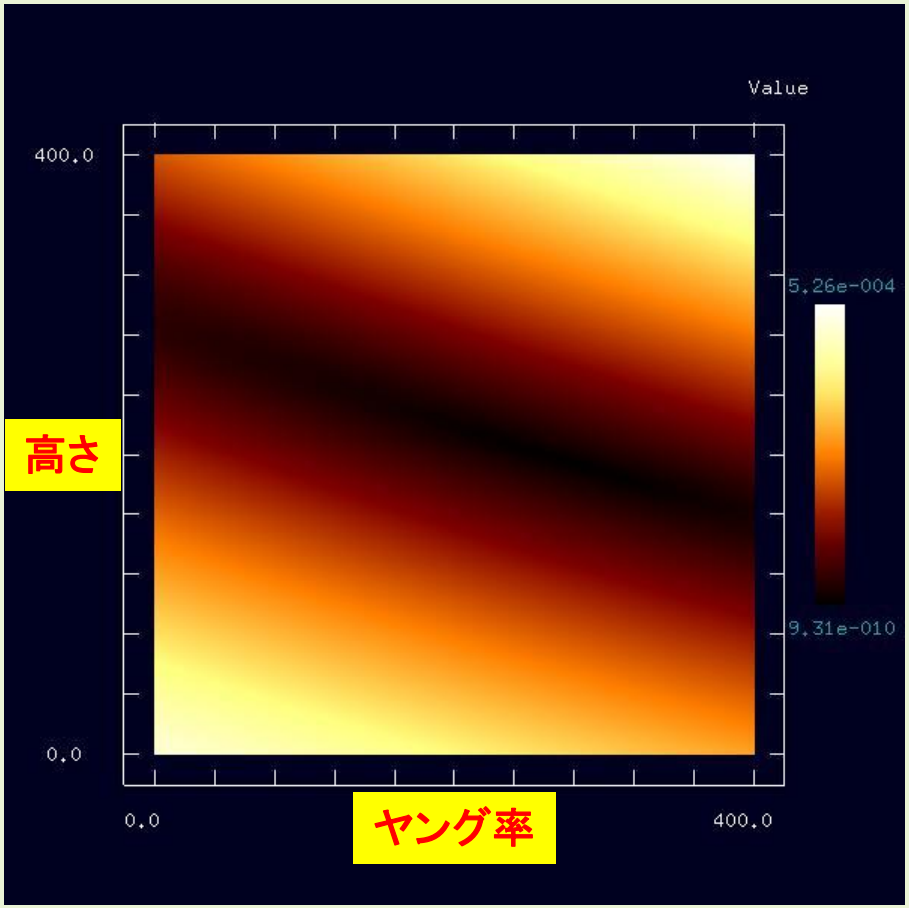
Φ_{obs} ：観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: 24.888Hz
位相シフトの観測値: -0.00123181(radian)

ヤング率と基板からの高さの2種類のパラメータ平面上でのずれ関数値の分布

カンチレバーの振動の1周期を2048分割した場合

ヤング率と基板からの高さのパラメータ平面上に、ずれ関数をプロットしたグラフ
ヤング率：70.0～80.0[GPa](400分割)
高さ：-0.05～0.05[nm](400分割)



ずれ関数を最小にするパラメータの組は、
ヤング率：76.5[Gpa]
高さ：0.0[nm]

LiqAFM tapping逆問題(local_mode)

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率：76.5[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比：0.22
- 観測値を再現する表面張力：0.4[N/m]
- 観測値を再現する粘性率：10.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.0[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：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

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: 24.888Hz
位相シフトの観測値: -0.00123181(radian)

表面張力と基板からの高さの2種類のパラメータに初期値を設定して、ずれ関数値が局所的に小さくなるパラメータ値の組を探索する

カンチレバーの振動の1周期を2048分割した場合

初期値
表面張力：0.65[N/m]
基板からの高さ：1.1[nm]

周波数シフトと位相シフトのずれ関数値が局所的に最小値となったと判断する収束値
5.0e-6

1ステップでランダムに変化するパラメータ値の幅
表面張力は、初期値の2.0e-3倍
基板からの高さは、0.1[Å]

7280ステップ目で収束
ずれ関数を局所的に最小にするパラメータの組は、
表面張力：0.4004[N/m]→(正解は0.4[N/m])
基板からの高さ：2.0001e-24[Å]→(正解は0.0[Å])

LiqAFM tapping逆問題(local_mode)

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率：76.5[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比：0.22
- 観測値を再現する表面張力：0.4[N/m]
- 観測値を再現する粘性率：10.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.0[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：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

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: 24.888Hz
位相シフトの観測値: -0.00123181(radian)

ヤング率と表面張力の2種類のパラメータに初期値を設定して、ずれ関数値が局所的に小さくなるパラメータ値の組を探索する

カンチレバーの振動の1周期を2048分割した場合

初期値
ヤング率：78.2[GPa]
表面張力：0.52[N/m]

周波数シフトと位相シフトのずれ関数値が局所的に最小値となったと判断する収束値
2.0e-6

1ステップでランダムに変化するパラメータ値の幅
ヤング率、表面張力ともに、初期値の2.0e-3倍

2979ステップ目で収束
ずれ関数を局所的に最小にするパラメータの組は、
ヤング率：76.7924[GPa]→(正解は76.5[GPa])
表面張力：0.40144[N/m]→(正解は0.4[N/m])

LiqAFM tapping逆問題(local_mode)

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率：76.5[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比：0.22
- 観測値を再現する表面張力：0.4[N/m]
- 観測値を再現する粘性率：10.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.0[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：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

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: 24.888Hz
位相シフトの観測値: -0.00123181(radian)

ヤング率と基板からの高さの2種類のパラメータに初期値を設定して、ずれ関数値が局所的に小さくなるパラメータ値の組を探索する

カンチレバーの振動の1周期を2048分割した場合

初期値
ヤング率：74.0[GPa]
基板からの高さ：-0.12[N/m]

周波数シフトと位相シフトのずれ関数値が局所的に最小値となったと判断する収束値
5.0e-7

1ステップでランダムに変化するパラメータ値の幅
ヤング率は、初期値の1.0e-3倍
基板からの高さは、0.1[Å]

139ステップ目で収束
ずれ関数を局所的に最小にするパラメータの組は、
ヤング率：76.516[GPa]→(正解は76.5[GPa])
基板からの高さ：1.61559e-26[Å]→(正解は0.0[Å])

FemAFM(DLVO理論解析モード)

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画像シミュレーション

水分子の電気双極子モーメント

$$p = 6.1\times10^{-30}[\mathrm{C}\cdot\mathrm{m}]$$

水分子の大きさを1.0[Å]とする

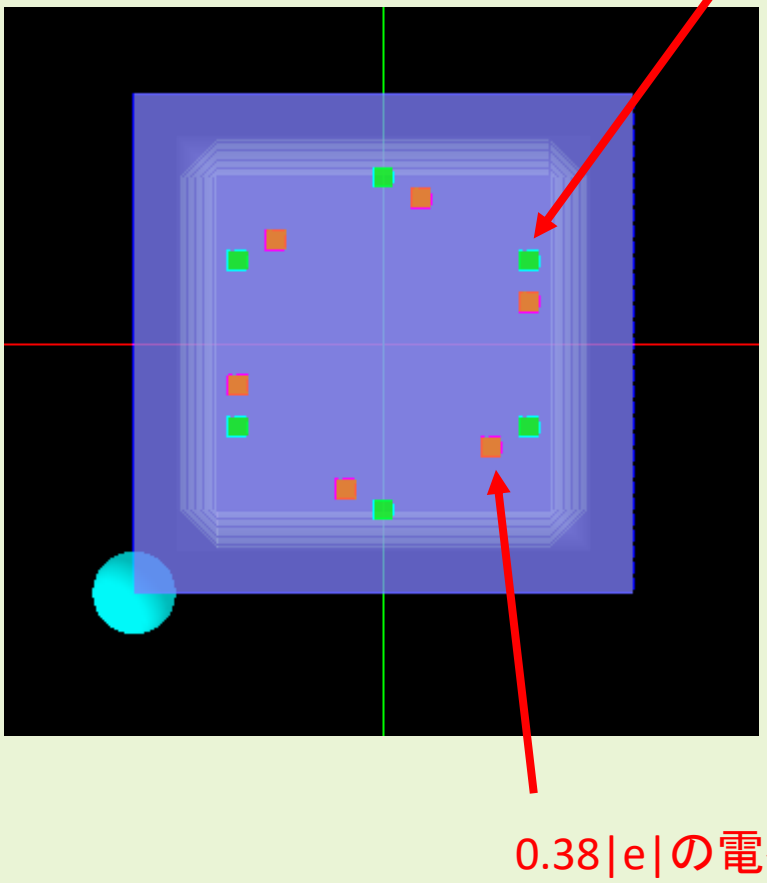
電荷の値は

$$6.1\times10^{-20}[\mathrm{C}] = 0.38|e|$$ ⇒ 素電荷の0.38倍

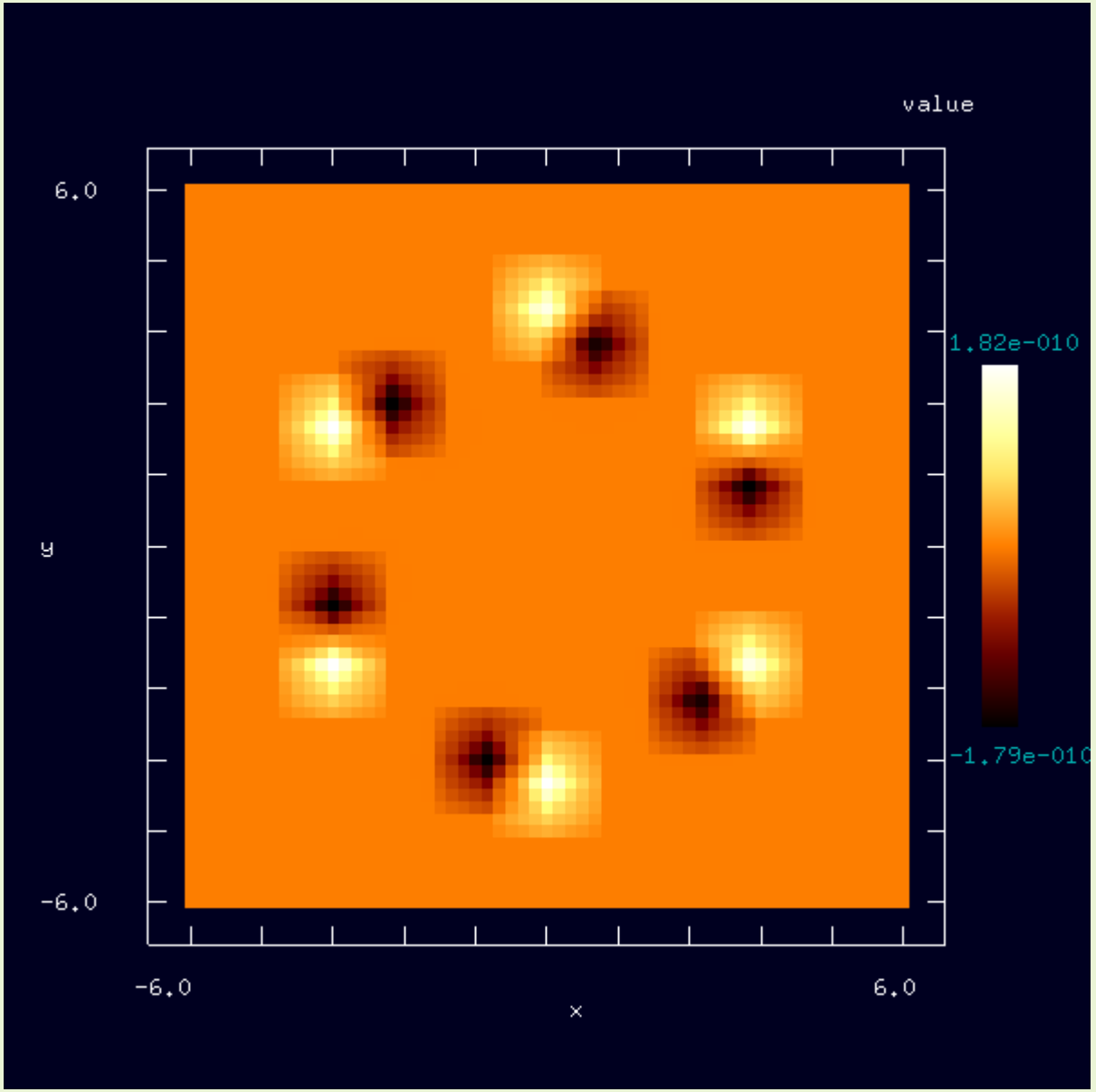
探針・試料間の、ファンデルワールス力と、DLVO理論による電気二重層間斥力とを、同時に考慮してAFM画像をシミュレートする。

SiO2基板試料：縦・横10.0[Å]、高さ0.4[Å]
SiO2球形の探針：直径2.0[Å]
高さ一定モード
探針と試料の最短距離：3.6[Å]

イオン溶液濃度：0.01[M]
イオン電荷：z=±1
温度：300[K]
溶液の比誘電率：80.4
探針の表面電位(バックグランド一定値)：
- 0.05[V]
表面電位に由来する探針の表面電荷密度：
-0.0115[C/m2]
試料の表面電位(バックグランド一定値)：
- 0.05[V]
表面電位に由来する試料の表面電荷密度：
-0.0115[C/m2]
デバイ長さ：3.09E-9[m]
基板試料の中央に、一辺が4[Å]の正六角形を考え、その六角形の各辺上に、長さ1[Å]、電荷が0.38|e|と-0.38|e|の電気双極子を置く



DLVO理論によるAFM画像



FemAFM(DLVO理論解析モード)

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画像シミュレーション

水分子の電気双極子モーメント

$$p = 6.1\times10^{-30}[\mathrm{C}\cdot\mathrm{m}]$$

水分子の大きさを1.0[Å]とする

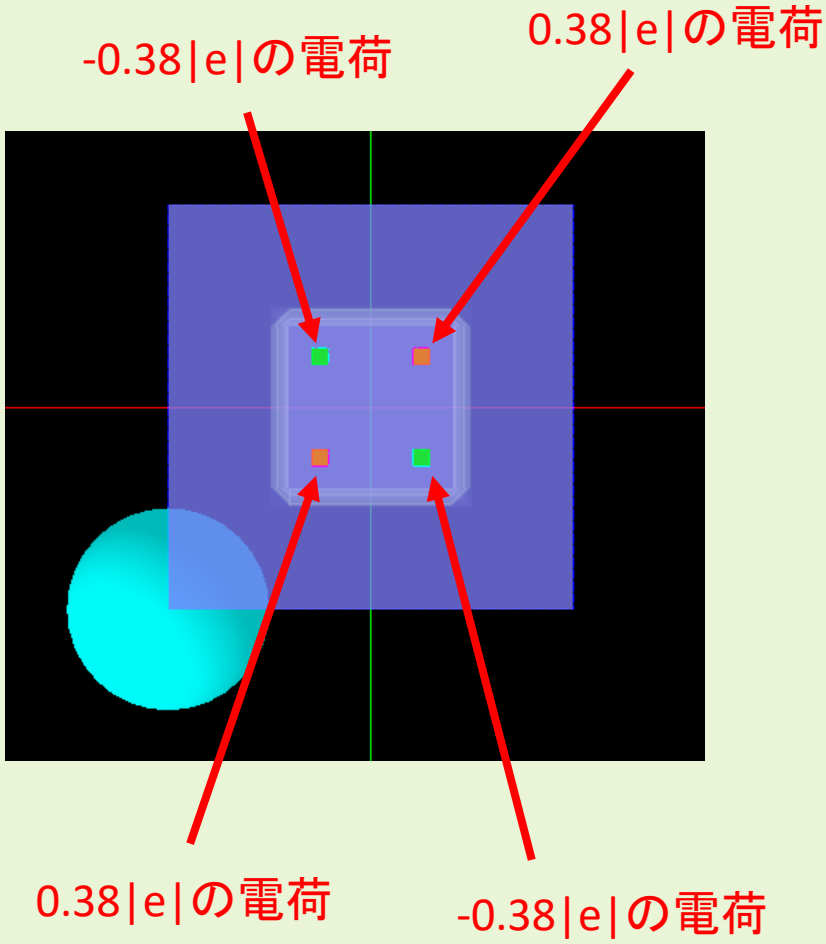
電荷の値は

$$6.1\times10^{-20}[\mathrm{C}] = 0.38|e|$$ ⇒ 素電荷の0.38倍

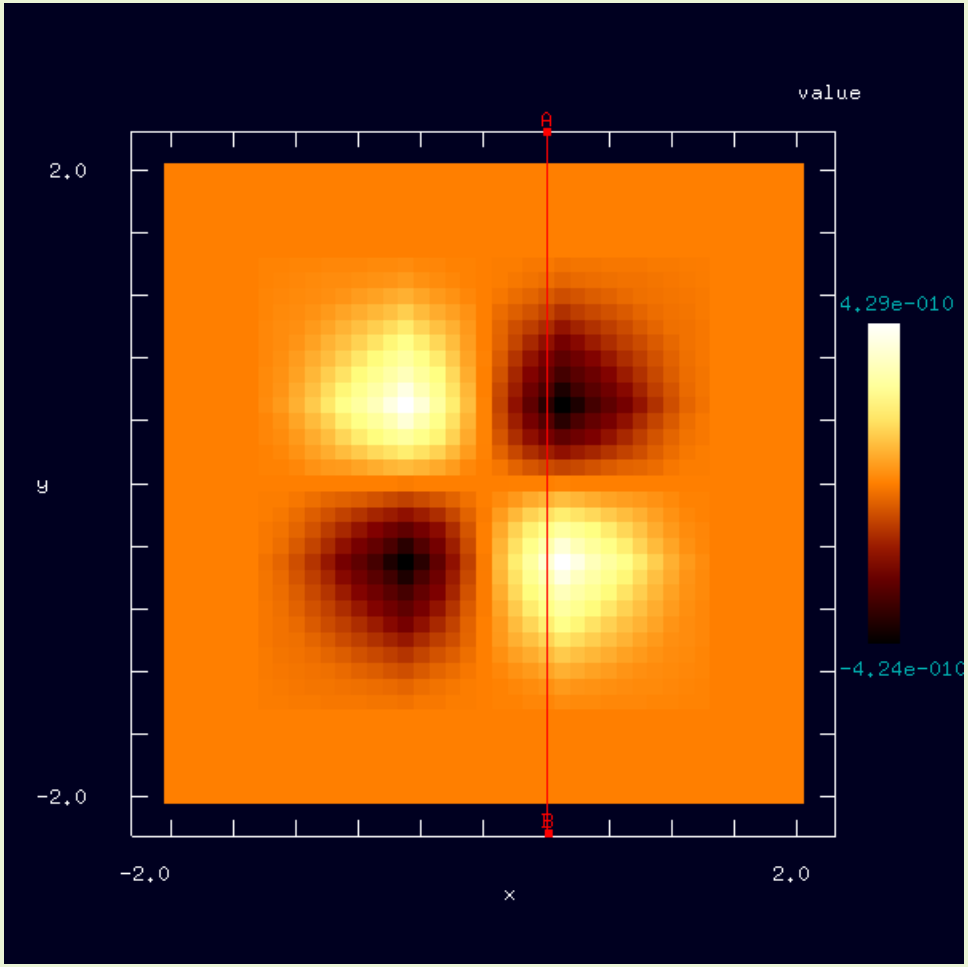
探針・試料間の、ファンデルワールス力と、DLVO理論による電気二重層間斥力とを、同時に考慮してAFM画像をシミュレートする。

SiO2基板試料：縦・横2.0[Å]、高さ0.4[Å]
SiO2球形の探針：直径2.0[Å]
高さ一定モード
探針と試料の最短距離：3.6[Å]

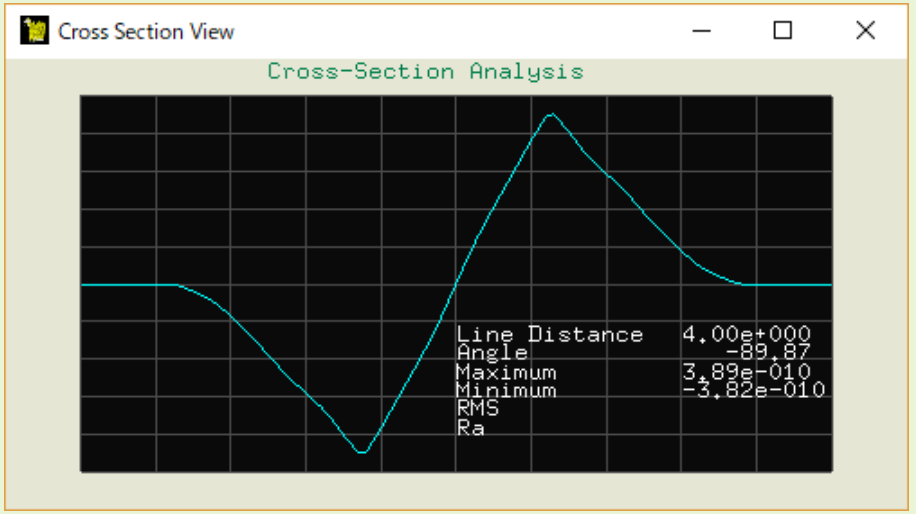
イオン溶液濃度：0.01[M]
イオン電荷：z=±1
温度：300[K]
溶液の比誘電率：80.4
探針の表面電位(バックグランド一定値)：－0.05[V]
表面電位に由来する探針の表面電荷密度：-0.0115[C/m2]
試料の表面電位(バックグランド一定値)：－0.2[V]
表面電位に由来する試料の表面電荷密度：-0.0461[C/m2]
デバイ長さ：3.09E-9[m]
基板試料の中心を原点として、
(x,y)=(0.5[Å], 0.5[Å])に0.38|e|、
(x,y)=(0.5[Å], -0.5[Å])に-0.38|e|、
(x,y)=(-0.5[Å], 0.5[Å])に-0.38|e|、
(x,y)=(-0.5[Å], -0.5[Å])に0.38|e|の電荷を置く



DLVO理論によるAFM画像



直線ABに沿った断面図



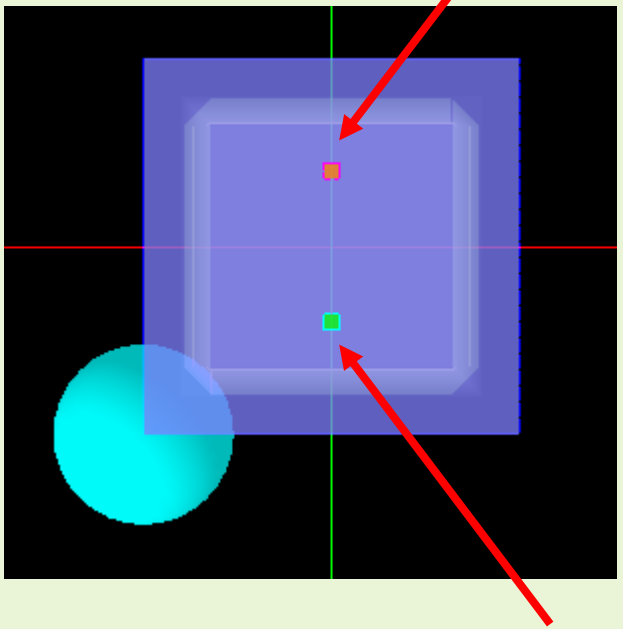
FemAFM(DLVO理論解析モード)

酸化シリコン基板上に付着している電気双極子のAFM画像シミュレーション

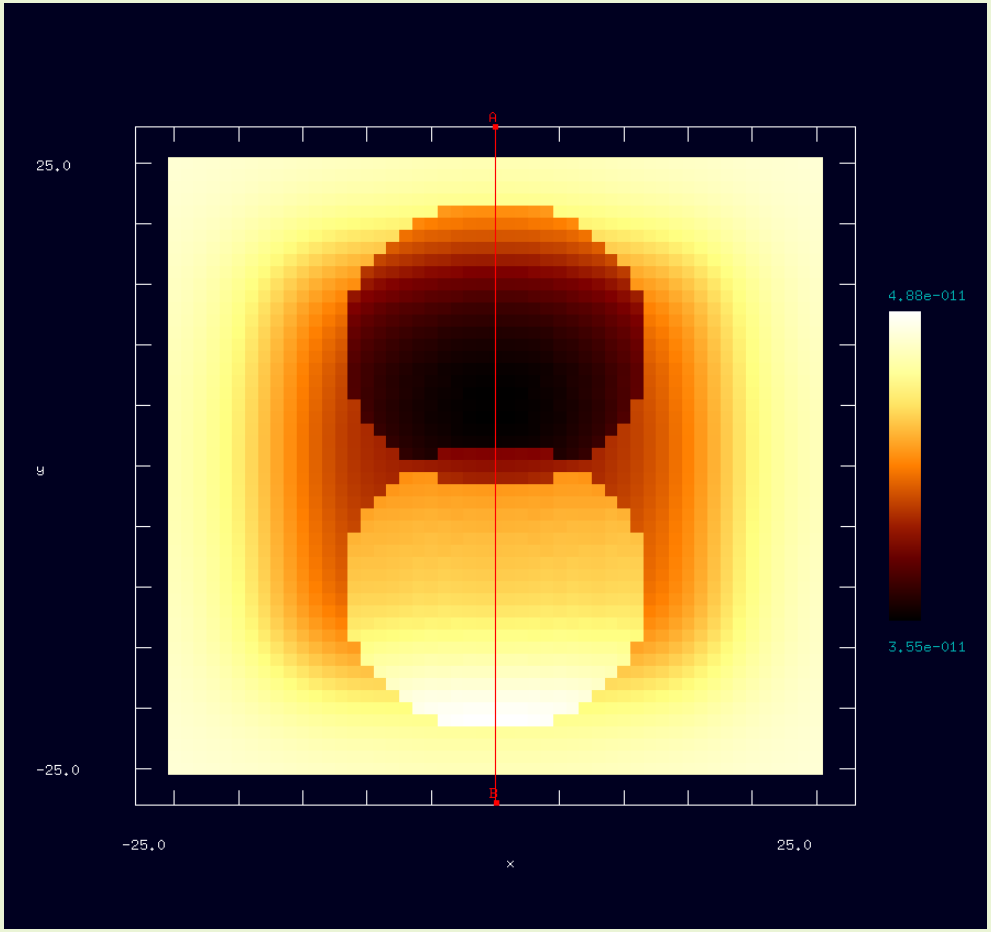
SiO2基板試料：縦・横40.0[Å]、高さ4.0[Å]
SiO2球形の探針：直径24.0[Å]
高さ一定モード
探針と試料の最短距離：6.0[Å]

電気双極子を、分極した分子と見立てている

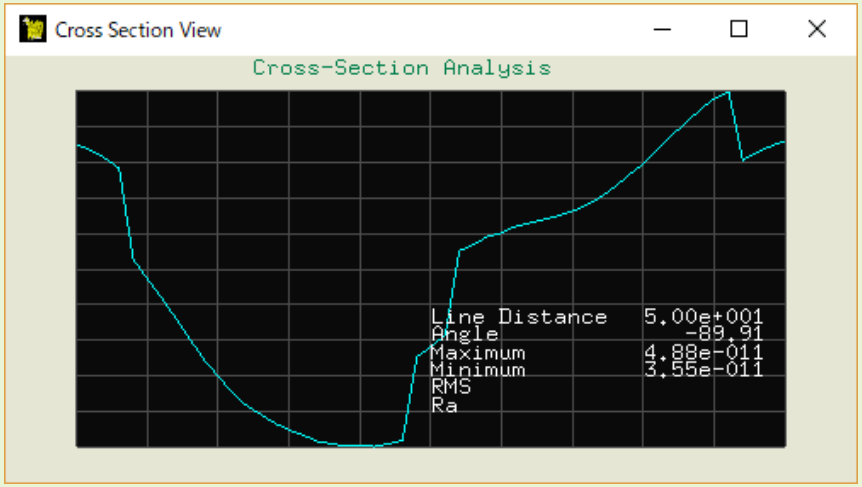
イオン溶液濃度：0.01[M]
イオン電荷：z=±1
温度：300[K]
溶液の比誘電率：80.4
探針の表面電荷密度(バックグランド一定値)：
- 0.05[C/m2]
一定値の表面電荷密度に由来する探針の表面電位：-0.217[V]
試料の表面電荷密度(バックグランド一定値)：
- 0.06[C/m2]
一定値の表面電荷密度に由来する試料の表面電位：-0.260[V]
デバイ長さ：3.09E-9[m]
試料の中心からy軸方向に10[Å]と - 10[Å]の二か所の位置の表面上に、それぞれ、0.1|e|と-0.1|e|の電荷を置く



DLVO理論によるAFM画像



直線ABに沿った断面図



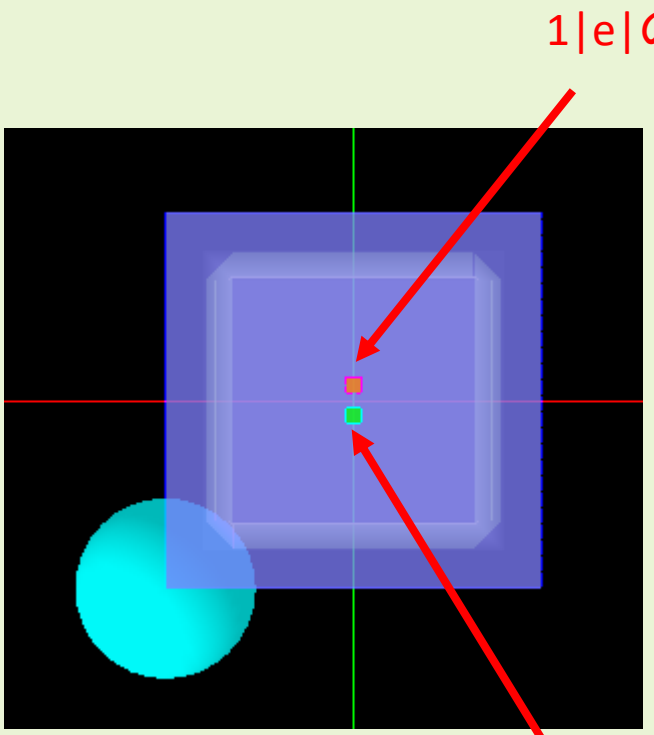
FemAFM(DLVO理論解析モード)

酸化シリコン基板上に付着している電気双極子のAFM画像シミュレーション

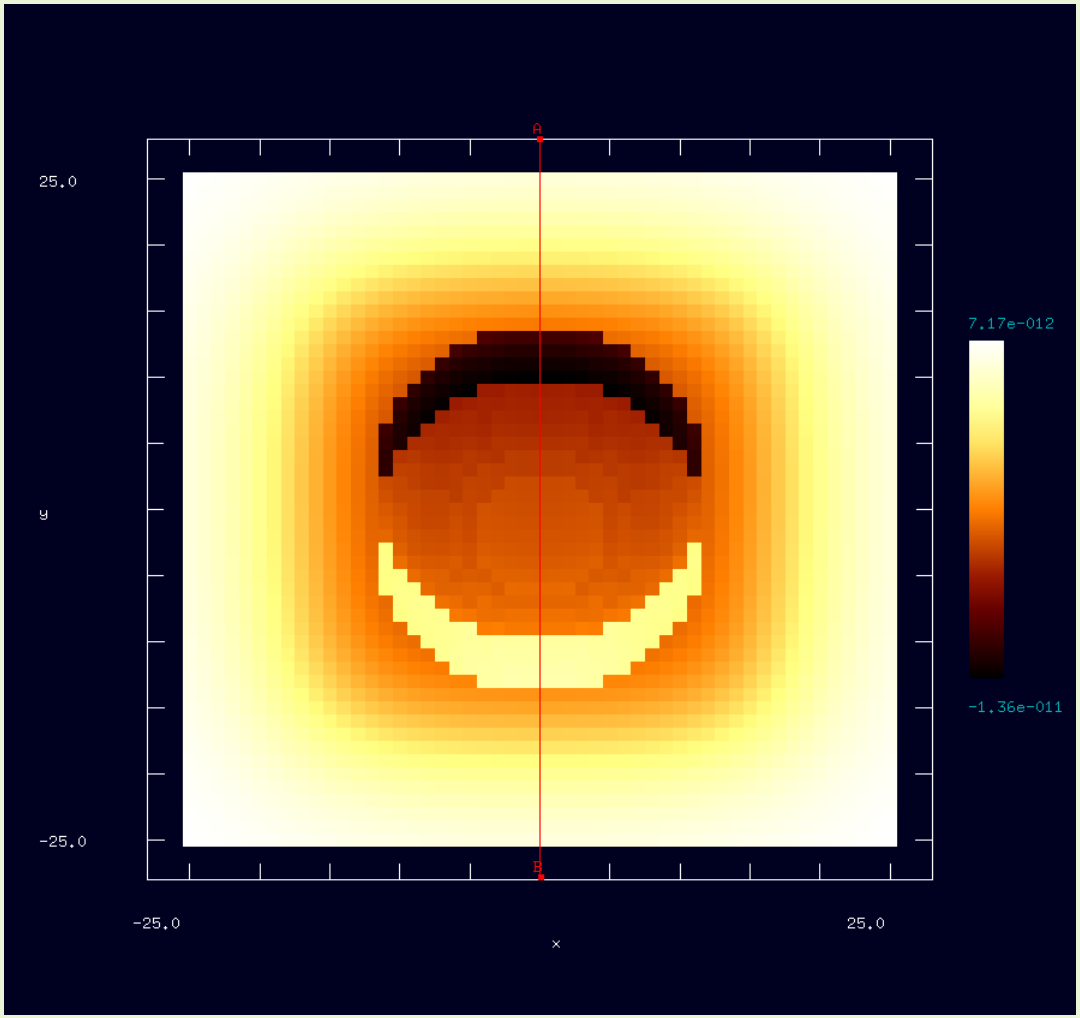
SiO2基板試料：縦・横40.0[Å]、高さ4.0[Å]
SiO2球形の探針：直径24.0[Å]
高さ一定モード
探針と試料の最短距離：6.0[Å]

電気双極子を、分極した分子と見立てている

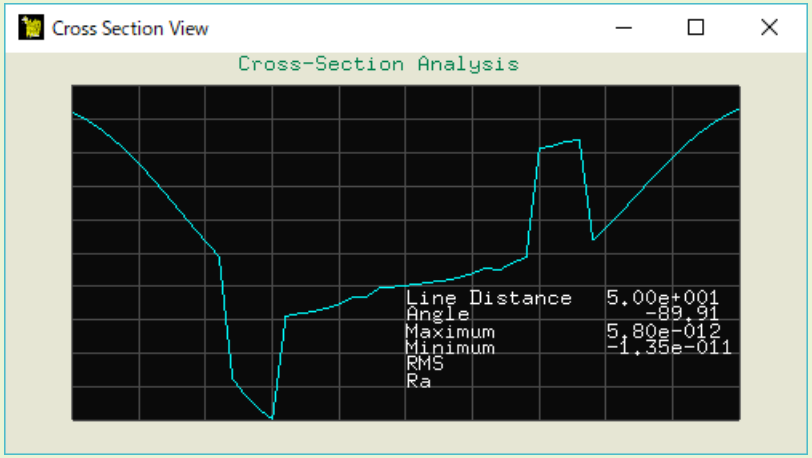
イオン溶液濃度：0.01[M]
イオン電荷：z=±1
温度：300[K]
溶液の比誘電率：80.4
探針の表面電位： - 0.05[V]
表面電位に由来する探針のバックグランド表面電荷密度：-0.0115[C/m2]
試料の表面電位： - 0.175[V]
表面電位に由来する試料のバックグランド表面電荷密度：-0.0403[C/m2]
デバイ長さ：3.09E-9[m]
試料の中心からy軸方向に2[Å] と-2[Å]の二か所の位置の表面上に、それぞれ、1|e|と-1|e|の電荷を置く



DLVO理論によるAFM画像

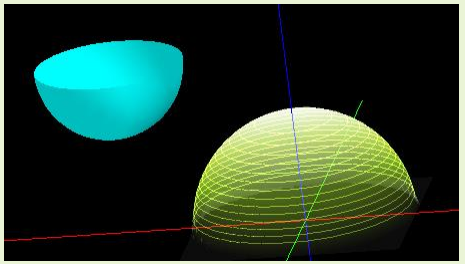


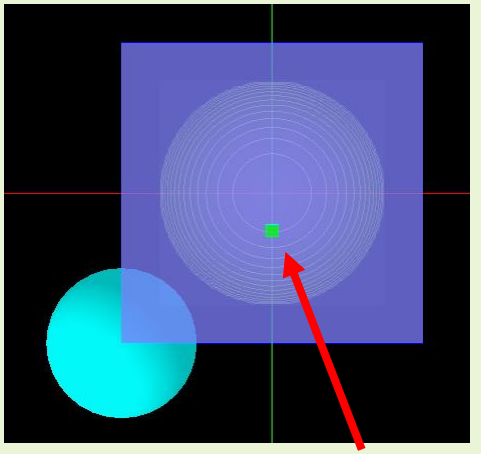
直線ABに沿った断面図



FemAFM(DLVO理論解析モード)

酸化シリコンの球面上に付着している電荷のAFM画像シミュレーション



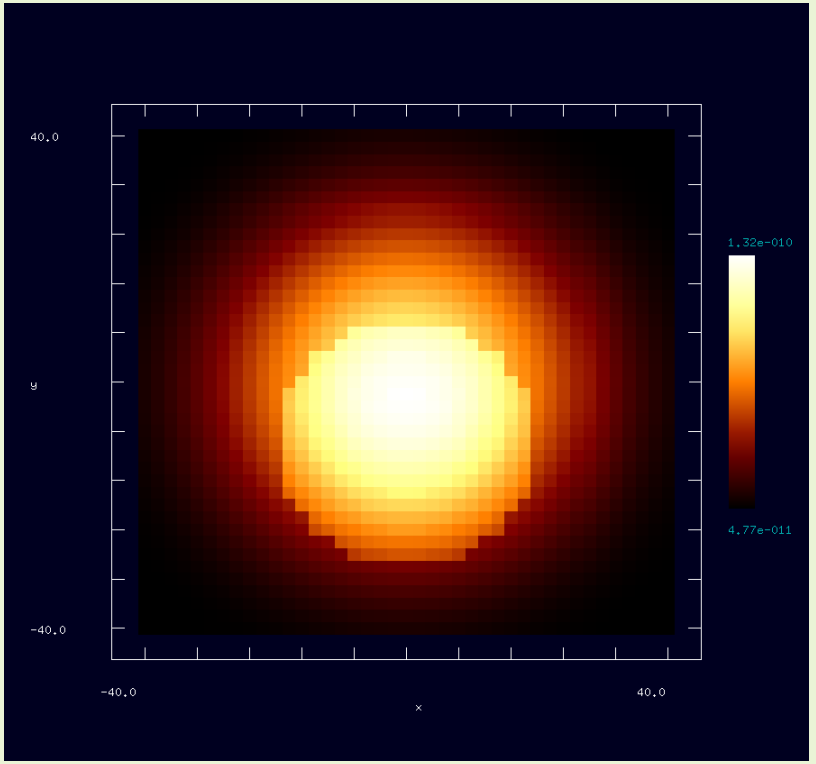


-0.5|e|の電荷

SiO2球形の試料：直径60.0 [Å]
SiO2球形の探針：直径40.0 [Å]
高さ一定モード
探針と試料の最短距離：10.0[Å]

イオン溶液濃度：0.01[M]
イオン電荷：z=±1
温度：300[K]
溶液の比誘電率：80.4
探針の表面電荷密度(バックグランド一定値)：
- 0.05[C/m2]
一定値の表面電荷密度に由来する探針の表面電位：-0.217[V]
試料の表面電荷密度(バックグランド一定値)：
- 0.06[C/m2]
一定値の表面電荷密度に由来する試料の表面電位：-0.260[V]
デバイ長さ：3.09E-9[m]
試料の中心からy軸方向に - 10 [Å]の位置の表面上に、-0.5|e|の電荷を置く

DLVO理論によるAFM画像

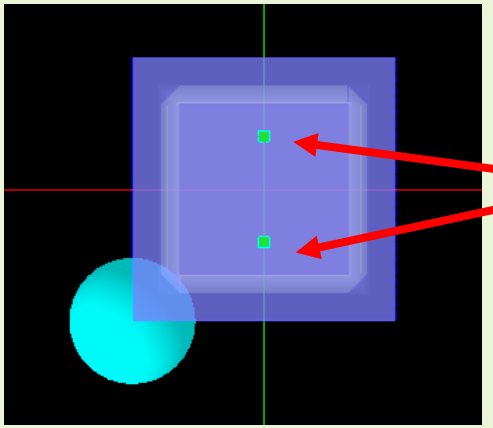


FemAFM(DLVO理論解析モード)

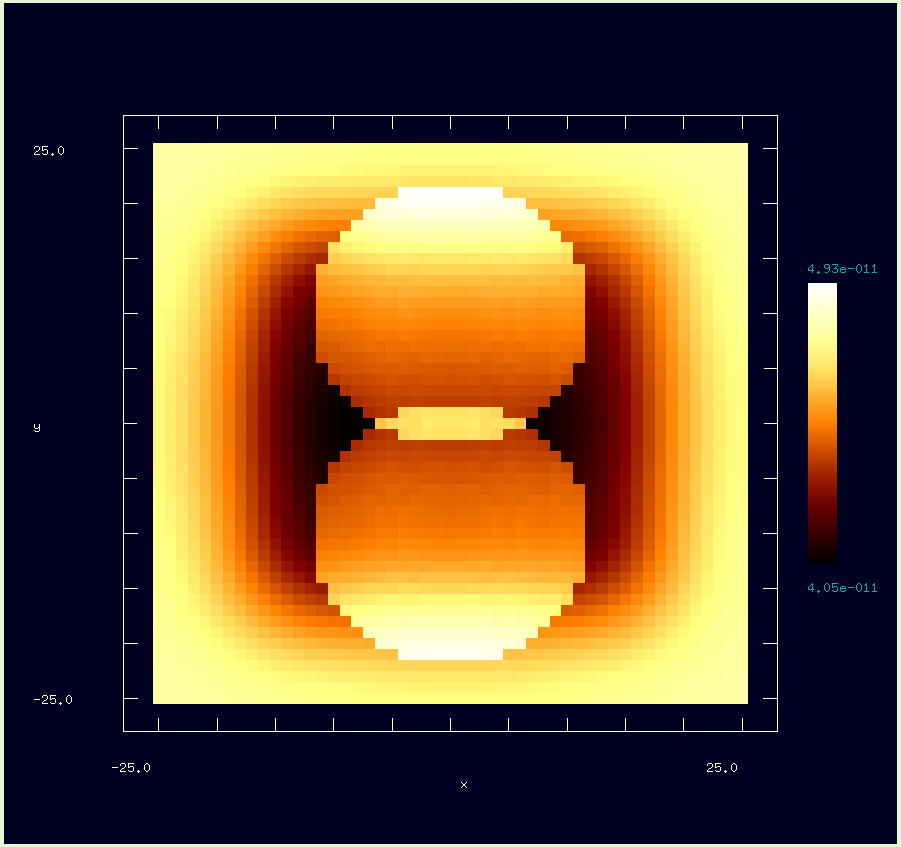
酸化シリコン基板上に付着している二つの電荷のAFM画像シミュレーション

SiO2直方体の試料：縦・横40.0 [Å]、高さ4.0 [Å]
SiO2球形の探針：直径24.0 [Å]
高さ一定モード
探針と試料の最短距離：6.0[Å]

イオン溶液濃度：0.01[M]
イオン電荷：z=±1
温度：300[K]
溶液の比誘電率：80.4
探針の表面電荷密度(バックグランド一定値)：
- 0.05[C/m2]
一定値の表面電荷密度に由来する探針の表面電位：-0.217[V]
試料の表面電荷密度(バックグランド一定値)：
- 0.06[C/m2]
一定値の表面電荷密度に由来する試料の表面電位：-0.260[V]
デバイ長さ：3.09E-9[m]
試料の中心からy軸方向に+10 [Å]と-10 [Å]の二か所の位置の表面上に、-0.1|e|の電荷を置く

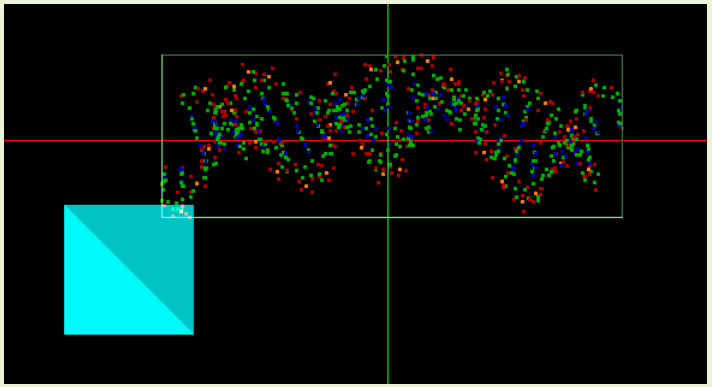


DLVO理論によるAFM画像



FemAFM(DLVO理論解析モード)

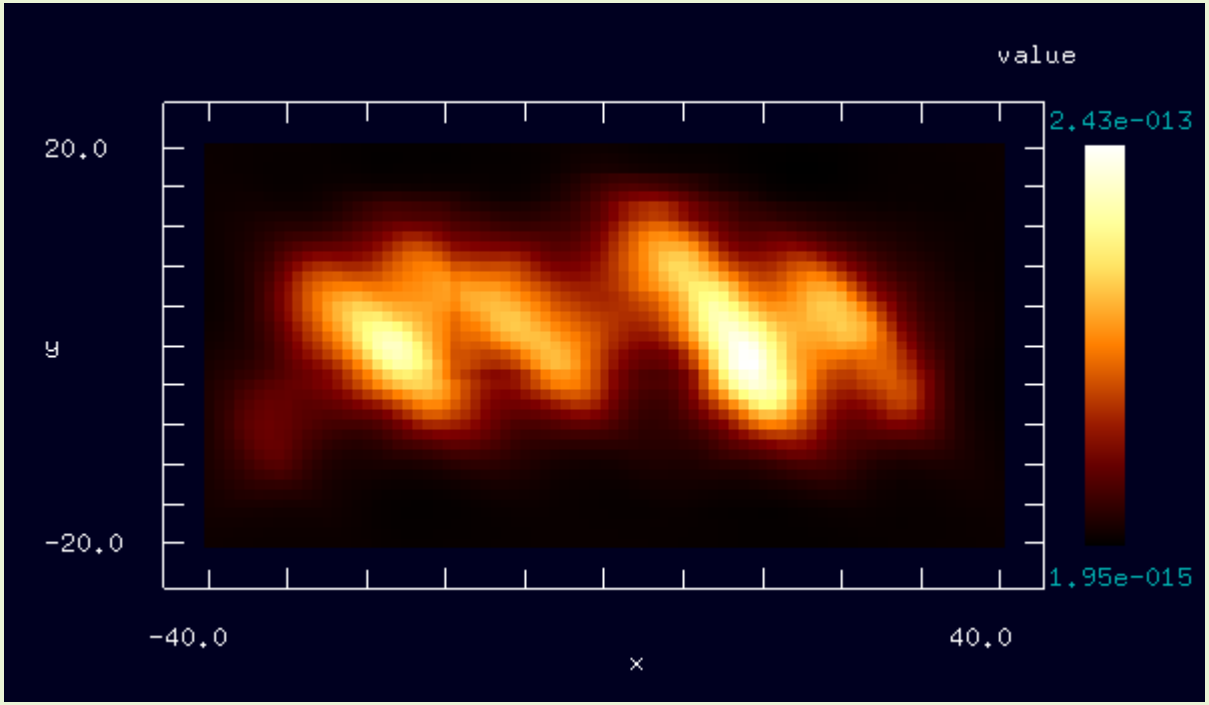
高さ一定モード
ピラミッド型SiO2探針
探針と試料の最短距離:7.75[Å]



DNA分子のらせん構造が
良く表れている

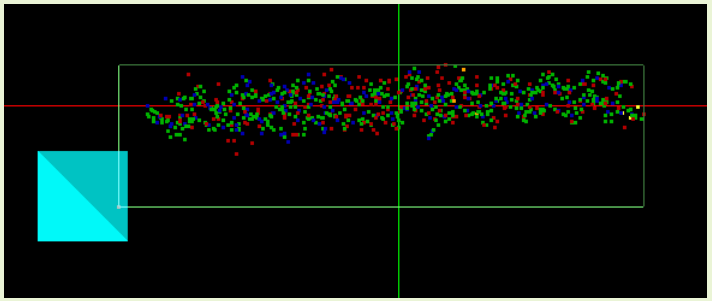
DNA分子のAFM画像シミュレーション

イオン溶液濃度:0.5[M]
イオン電荷:z=±1
温度:300[K]
溶液の比誘電率:80.4
探針の表面電位(バックグランド一定値): - 0.025[V]
表面電位に由来する探針の表面電荷密度:-0.0407[C/m2]
試料の表面電位(バックグランド一定値): - 0.025[V]
表面電位に由来する試料の表面電荷密度:-0.0407[C/m2]
デバイ長さ:4.37E-10[m]



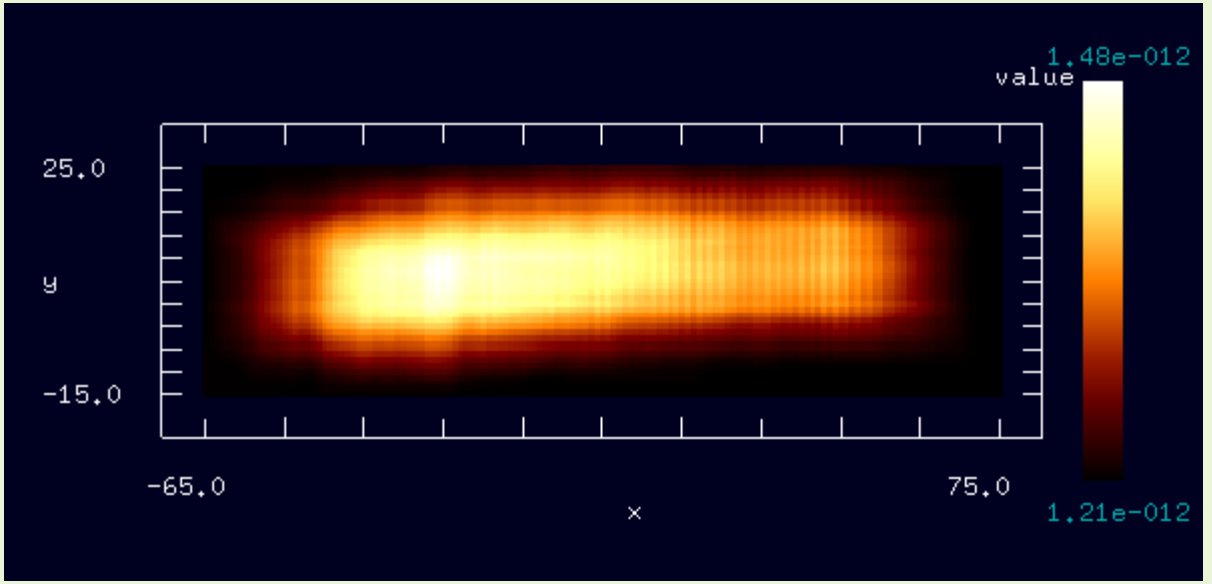
FemAFM(DLVO理論解析モード)

高さ一定モード
ピラミッド型SiO2探針
探針と試料の最短距離:8.29[Å]



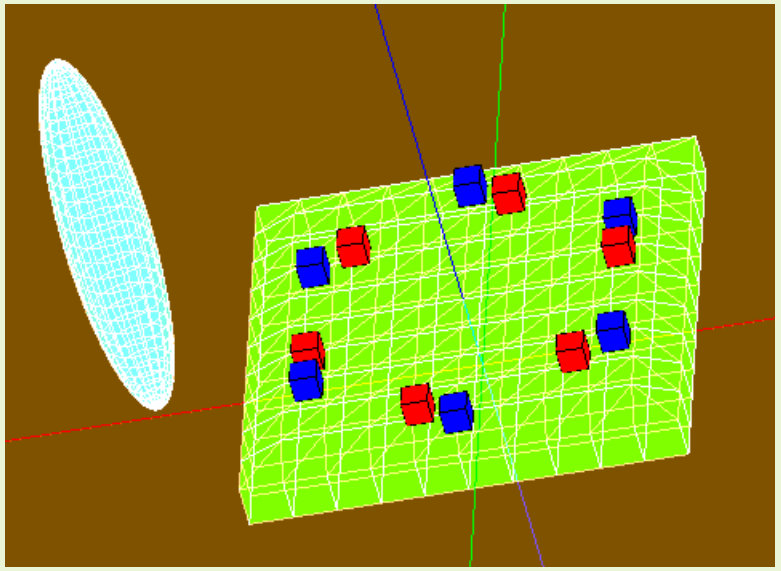
コラーゲン分子のAFM画像シミュレーション

イオン溶液濃度:0.01[M]
イオン電荷:z=±1
温度:300[K]
溶液の比誘電率:80.4
探針の表面電位(バックグランド一定値): - 0.05[V]
表面電位に由来する探針の表面電荷密度:-0.0115[C/m2]
試料の表面電位(バックグランド一定値): - 0.05[V]
表面電位に由来する試料の表面電荷密度:-0.0115[C/m2]
デバイ長さ:3.09E-9[m]



macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

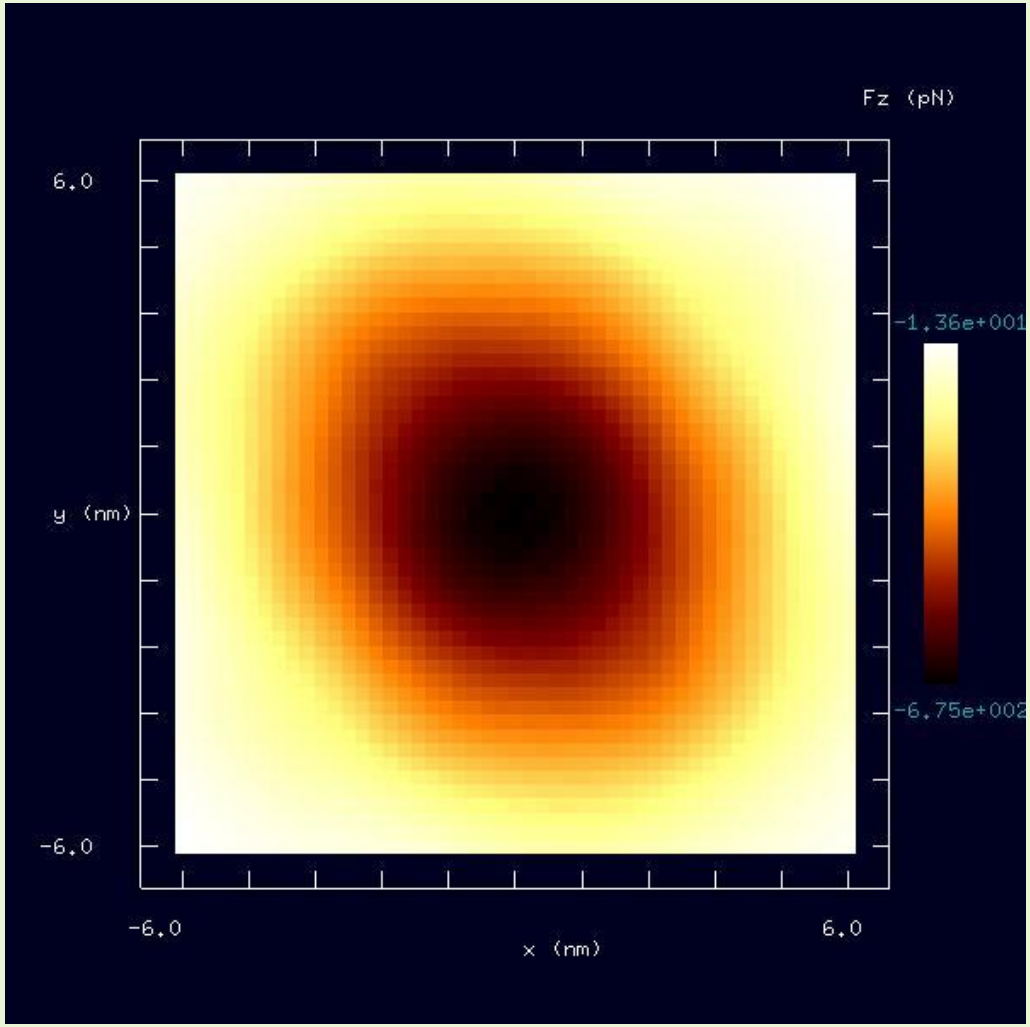
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

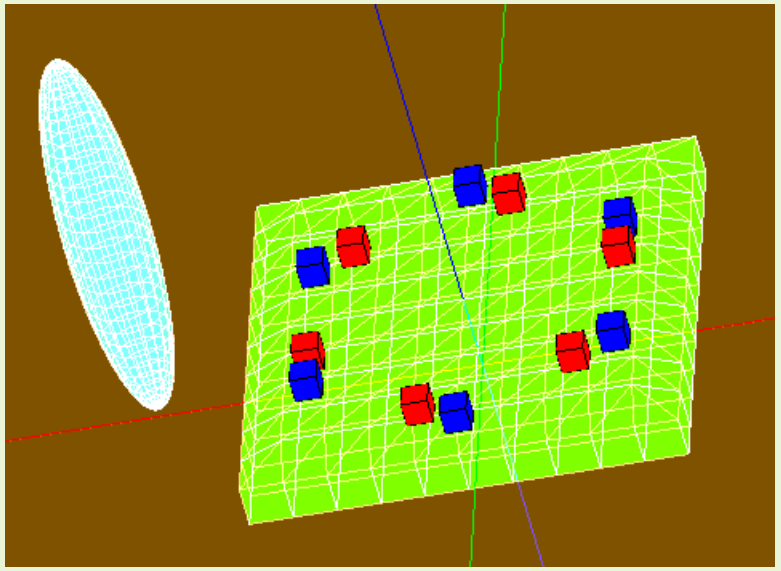
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-1.36E+1[pN]
力の最小値:-6.75E+2[pN]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

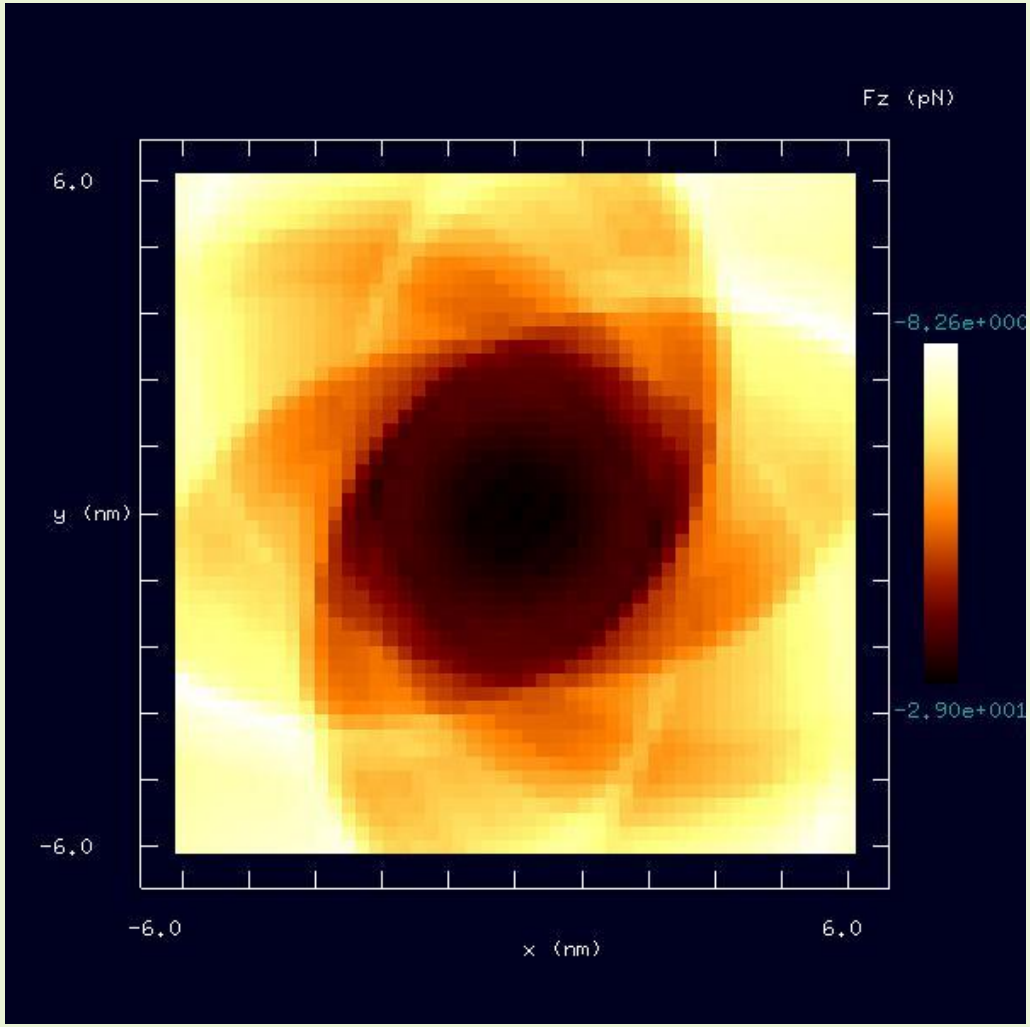
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

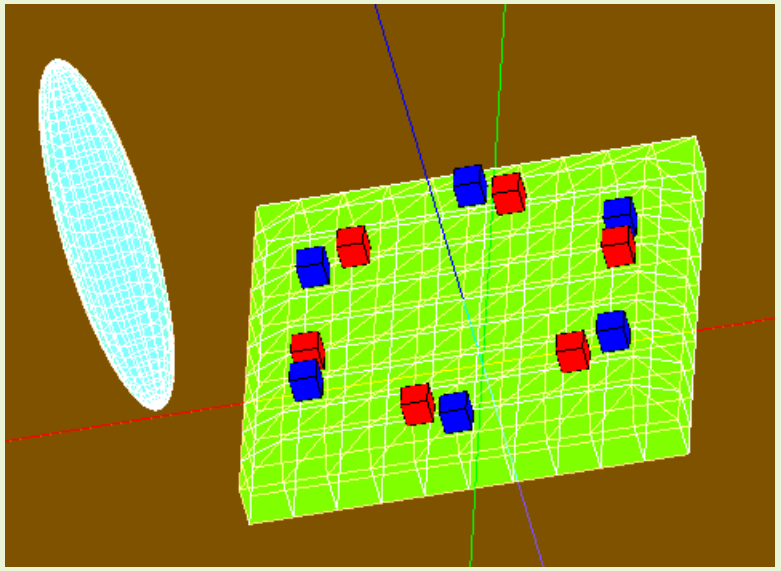
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-8.26E+0[pN]
力の最小値:-2.90E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

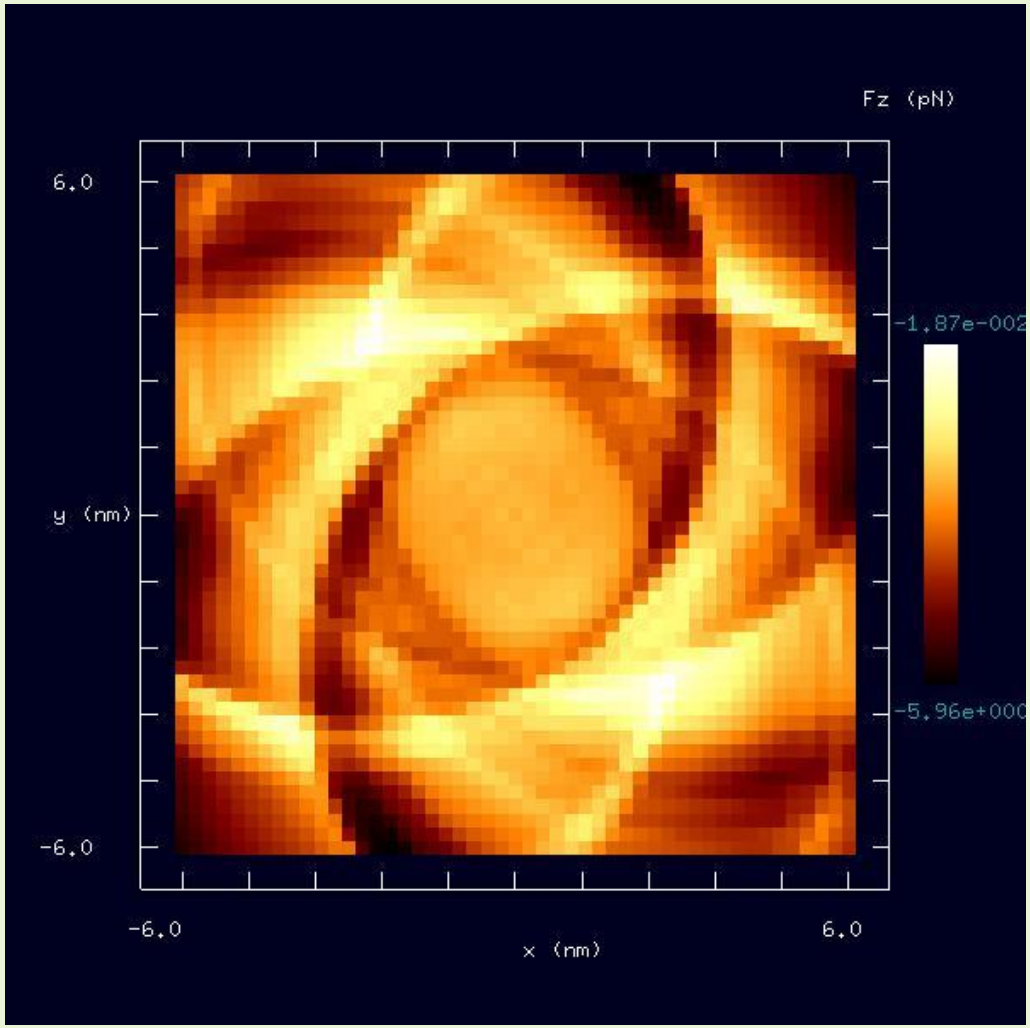
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

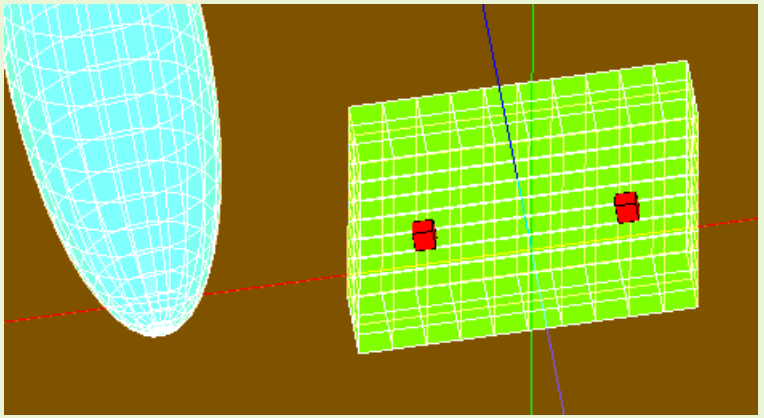
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-1.87E-2[pN]
力の最小値:-5.96E+0[pN]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板内部に2個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ2[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

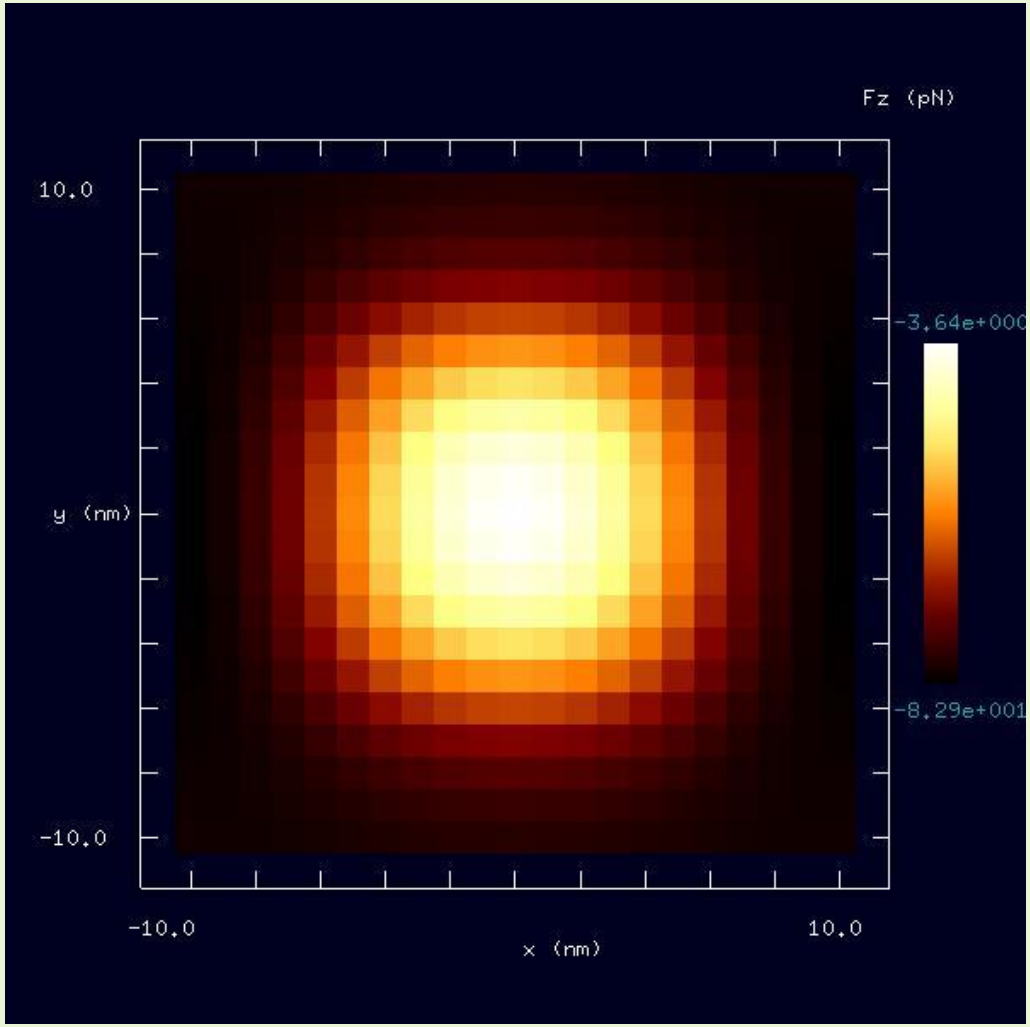
探針は導体とする
探針に電圧-0.5[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|の電荷を2個、配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.001[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：9.77[nm]

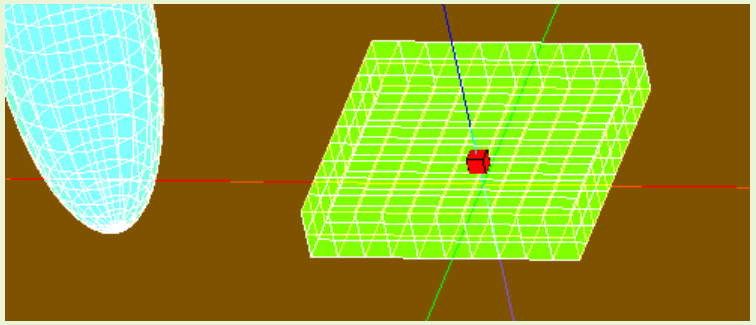
探針に電圧-0.5[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-3.64E+0[pN]
力の最小値:-8.29E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板内部に1個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ2[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

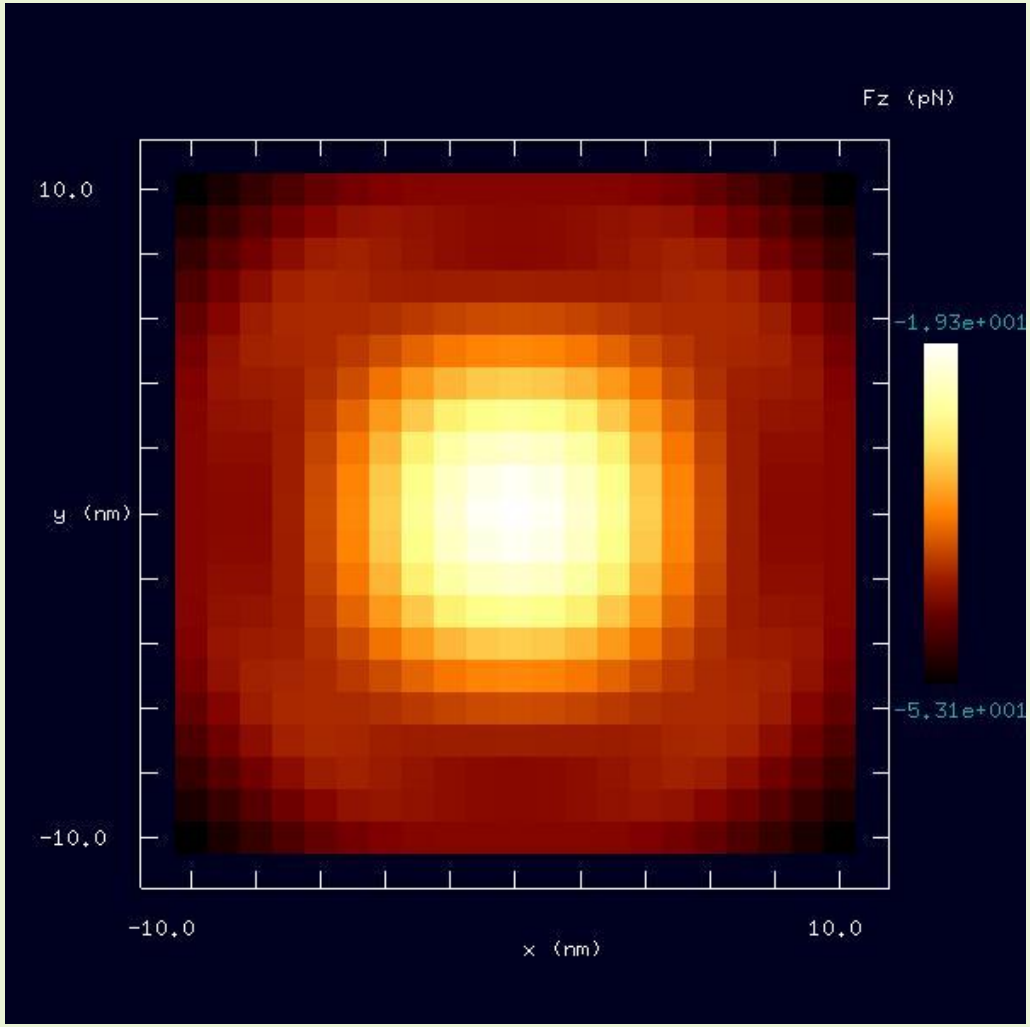
探針は導体とする
探針に電圧-0.5[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|の電荷を1個、配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

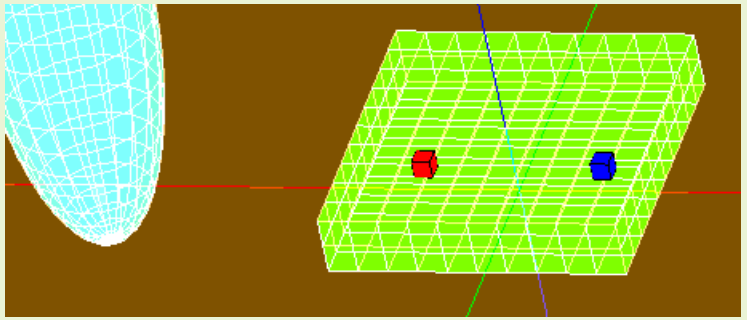
探針に電圧-0.5[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-1.93E+1[pN]
力の最小値:-5.31E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板内部に正負の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ2[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

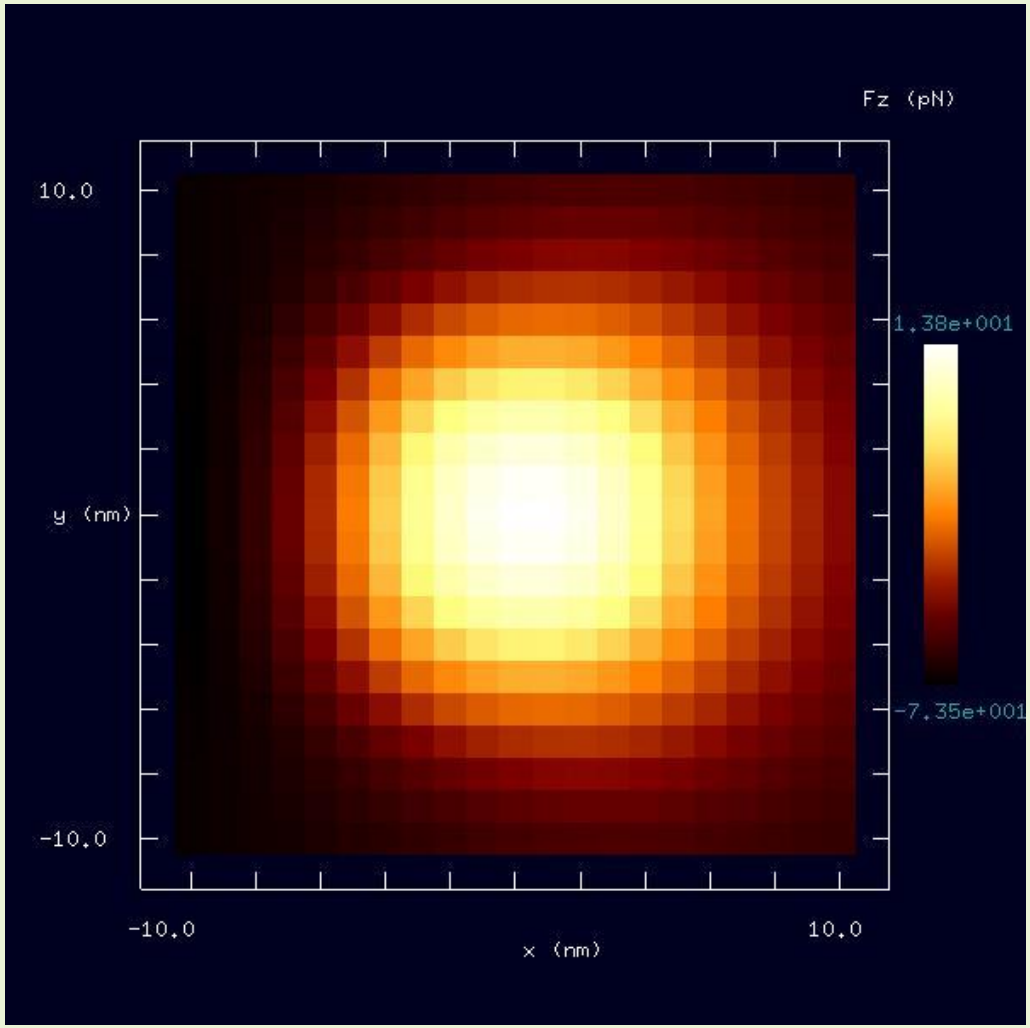
探針は導体とする
探針に電圧-0.5[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|と-1.0|e|の正負の電荷を1個ずつ、配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.001[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：9.77[nm]

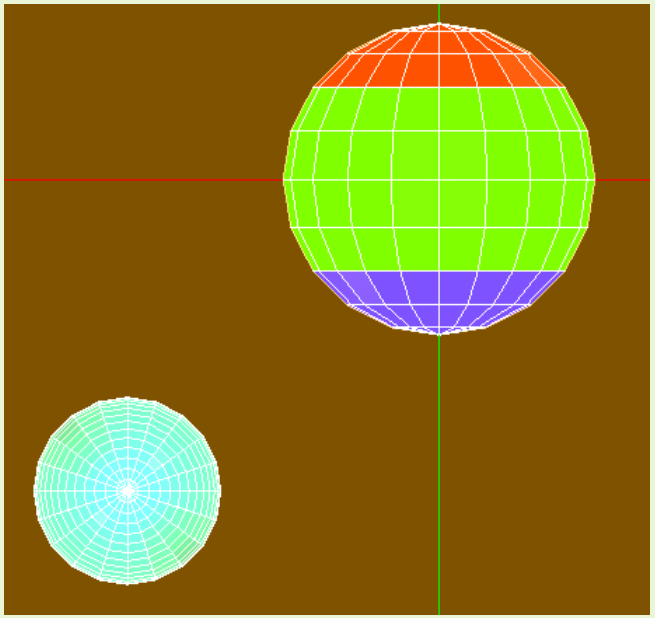
探針に電圧-0.5[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:1.38E+1[pN]
力の最小値:-7.35E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素球体上に正負の電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：直径10[nm]の酸化ケイ素の球体

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

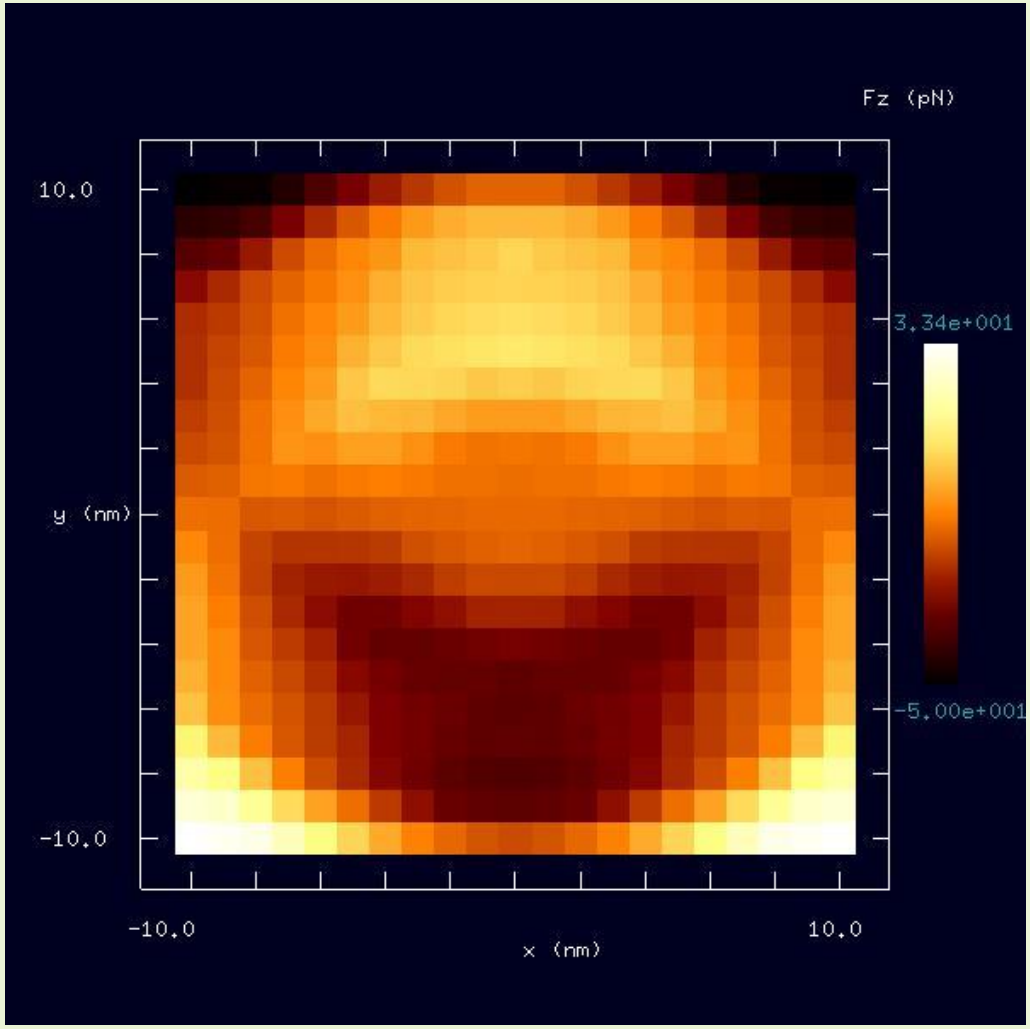
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料球体表面の、y軸方向の正の側に
3.0E-1[C/m^2]、負の側に-3.0E-1[C/m^2]
の 電荷を分布させた

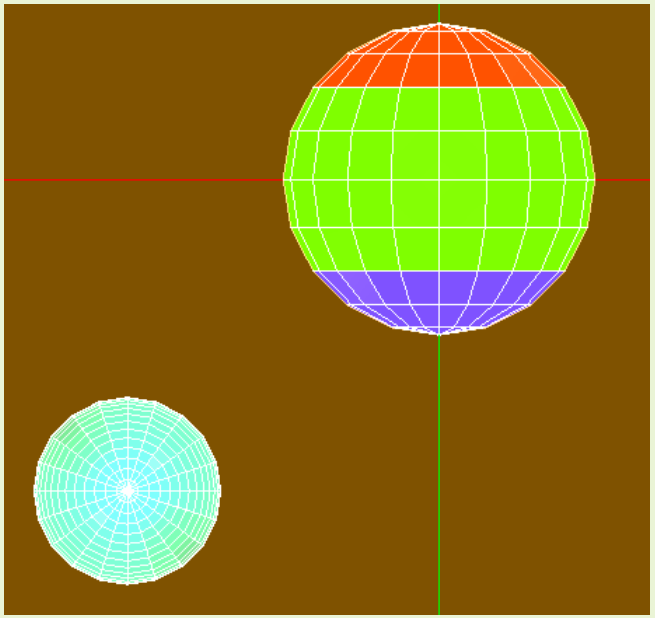
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:3.34E+1[pN]
力の最小値:-5.00E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素球体上に正負の電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：直径10[nm]の酸化ケイ素の球体

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

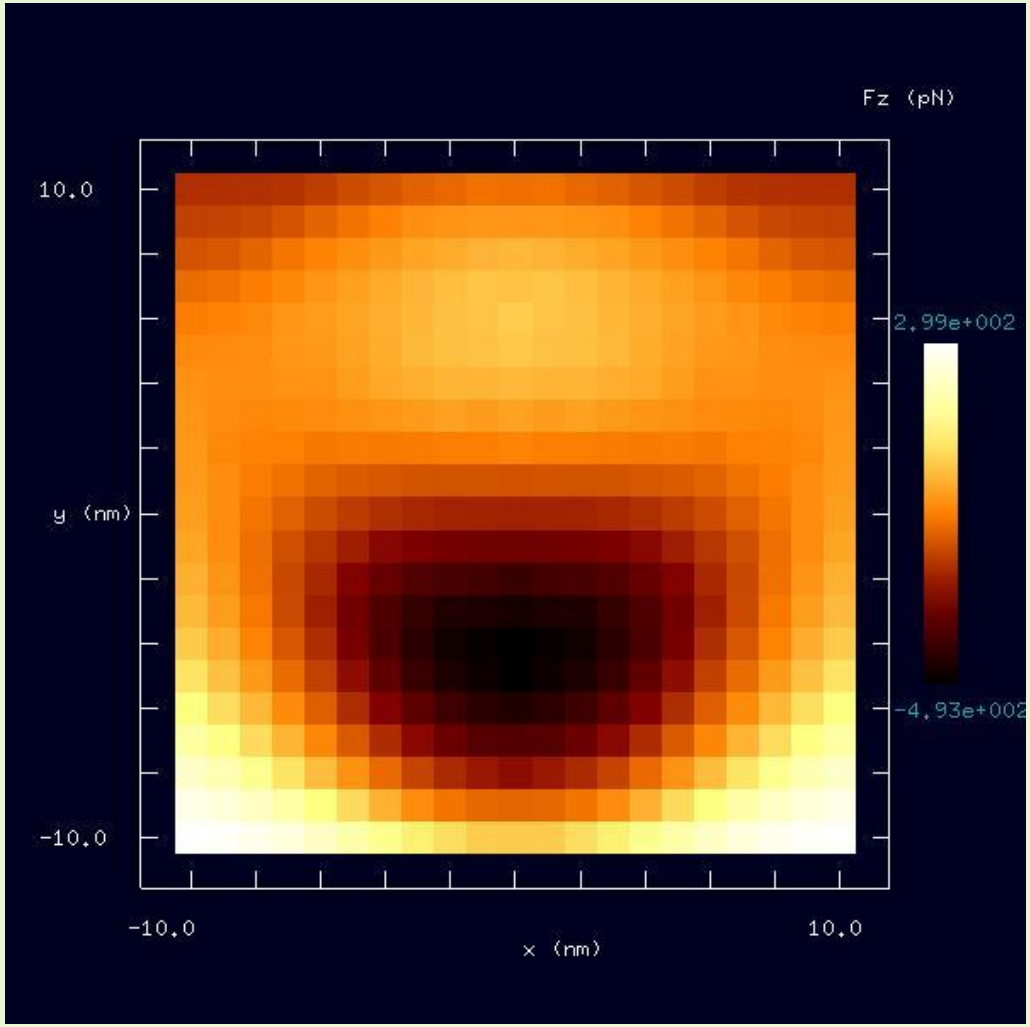
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料球体表面の、y軸方向の正の側に
3.0E-1[C/m^2]、負の側に-3.0E-1[C/m^2]
の 電荷を分布させた

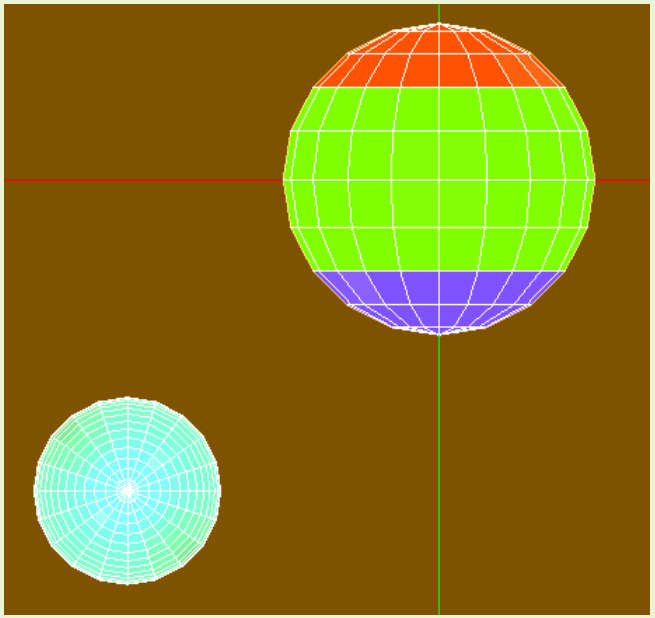
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:2.99E+2[pN]
力の最小値:-4.93E+2[pN]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素球体上に正負の電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：直径10[nm]の酸化ケイ素の球体

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

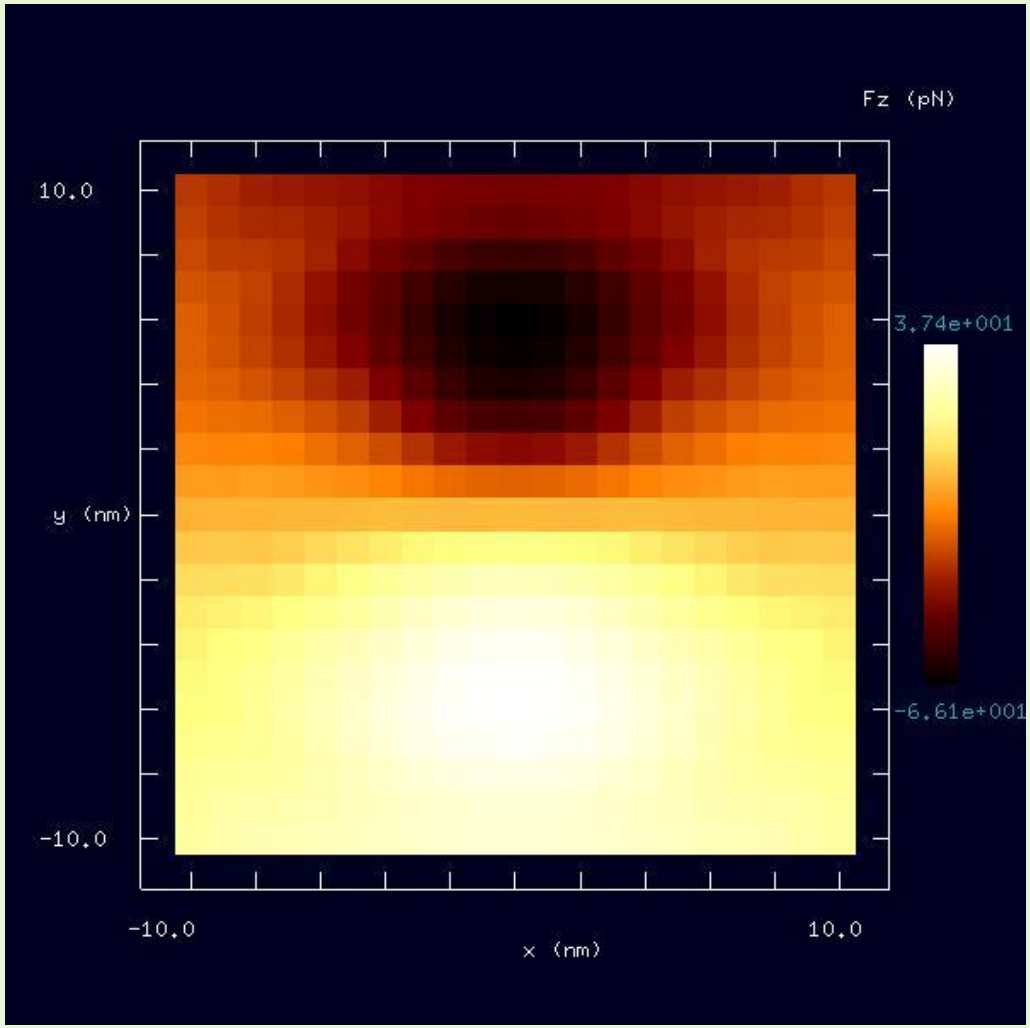
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.001[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：9.77[nm]

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料球体表面の、y軸方向の正の側に
3.0E-1[C/m^2]、負の側に-3.0E-1[C/m^2]
の 電荷を分布させた

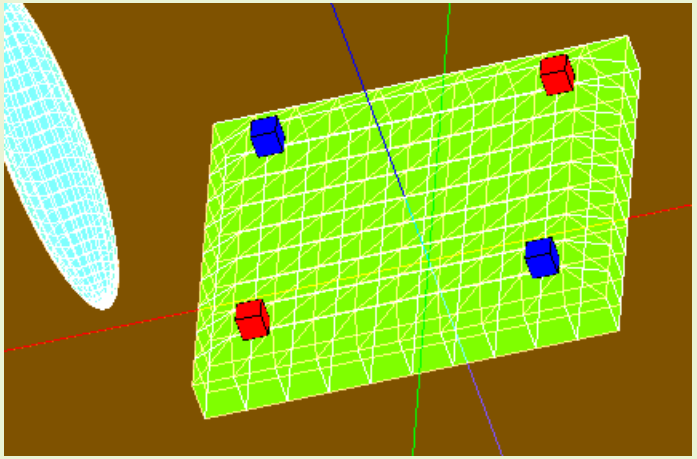
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:3.74E+1[pN]
力の最小値:-6.61E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板上に正負の電荷4個を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

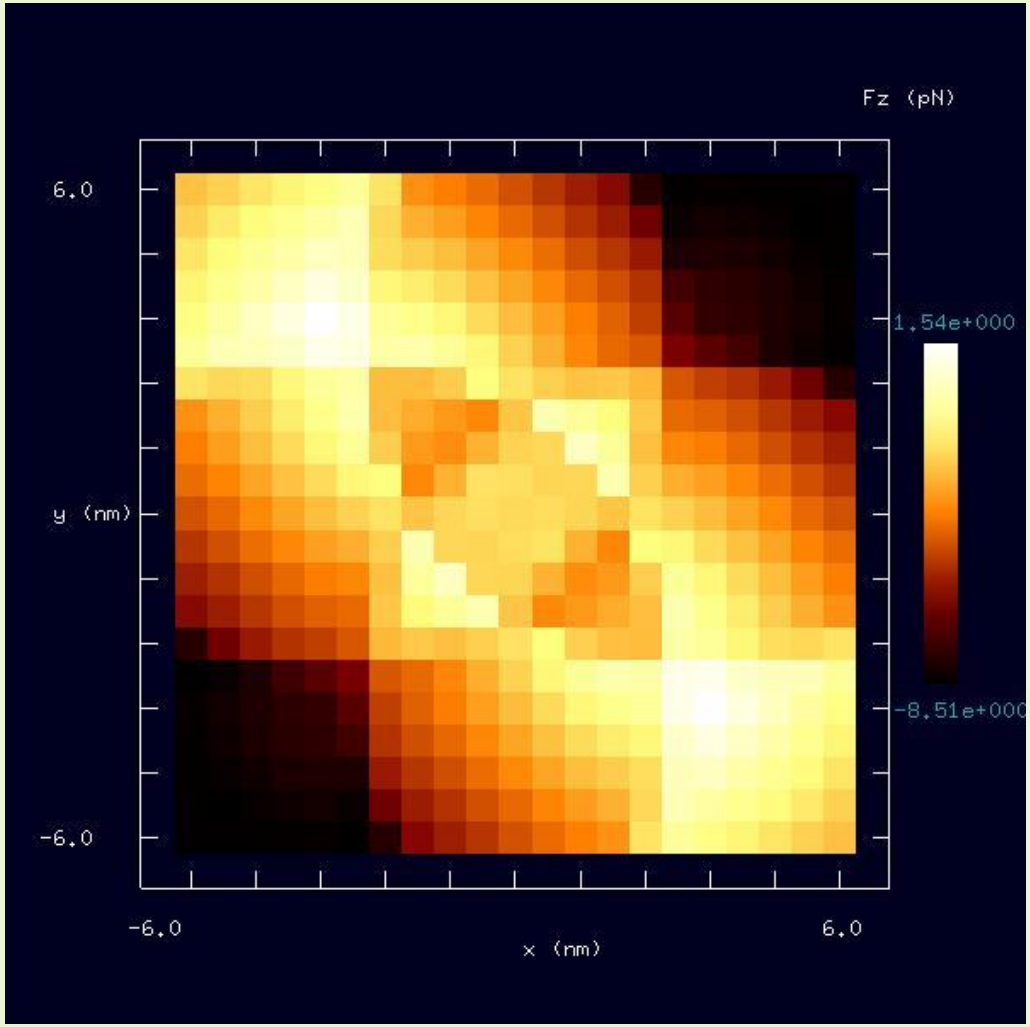
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を2個ずつ、配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

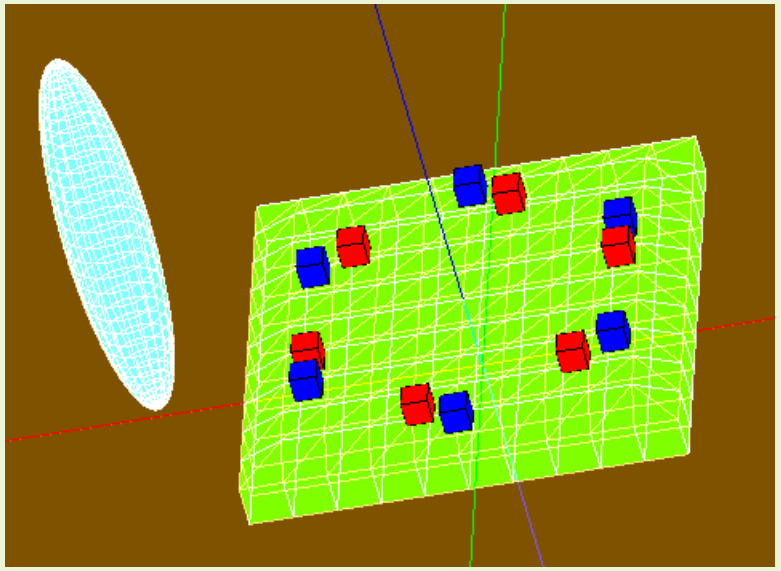
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:1.54E+0[pN]
力の最小値:-8.51E+0[pN]

macroKPFM_DLVO

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

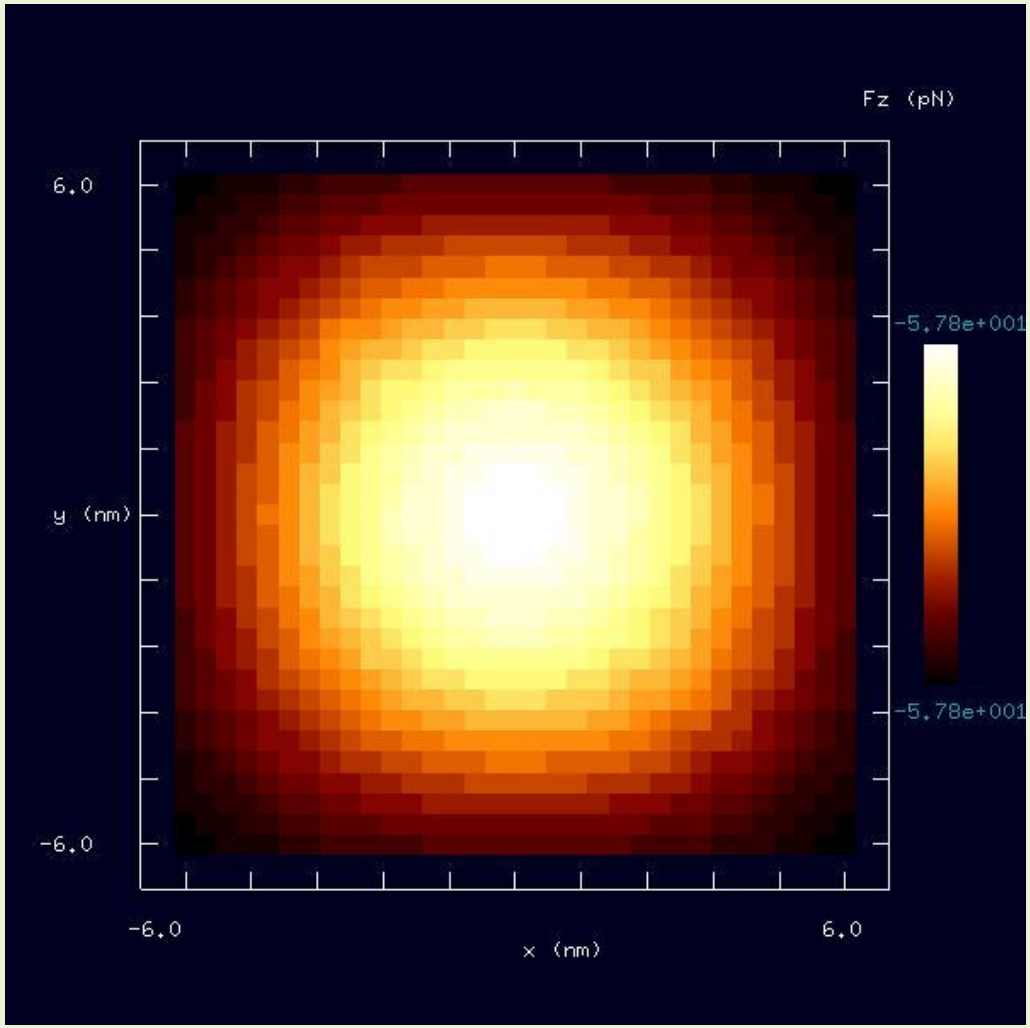
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

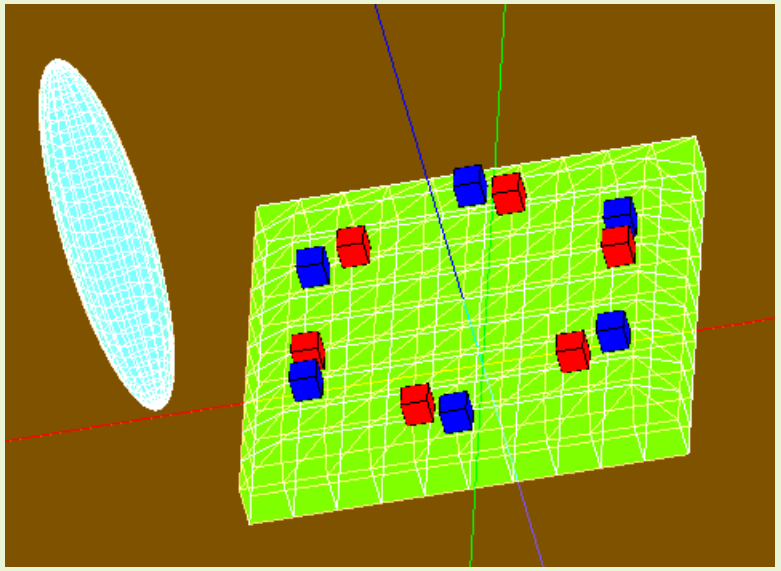
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-5.78E+1[pN]
力の最小値:-5.78E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

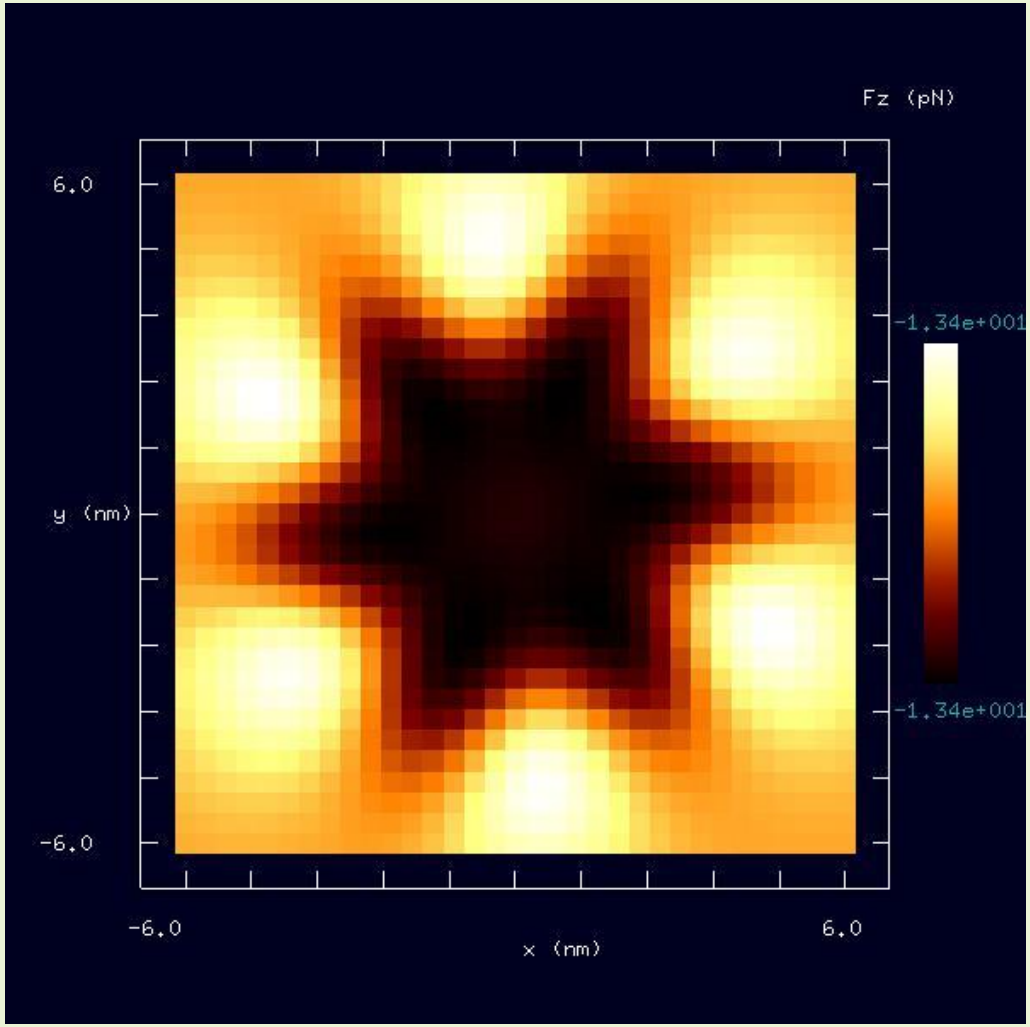
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

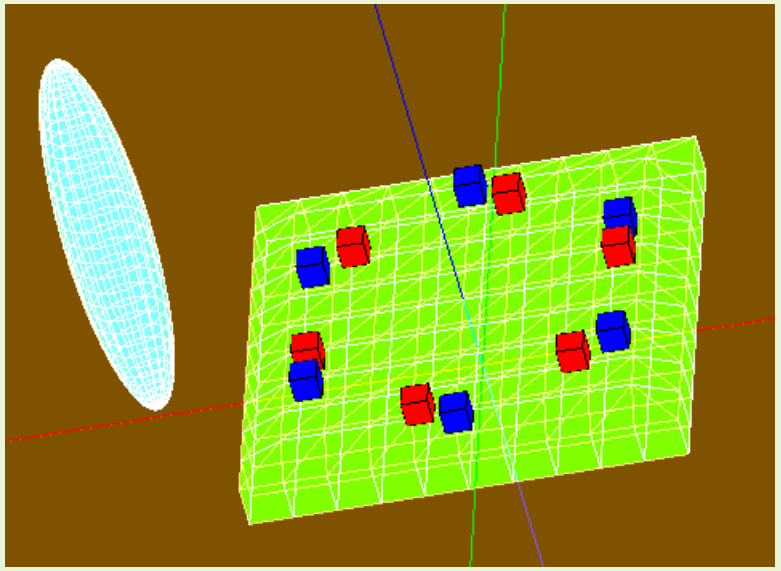
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-1.34E+1[pN]
力の最小値:-1.34E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

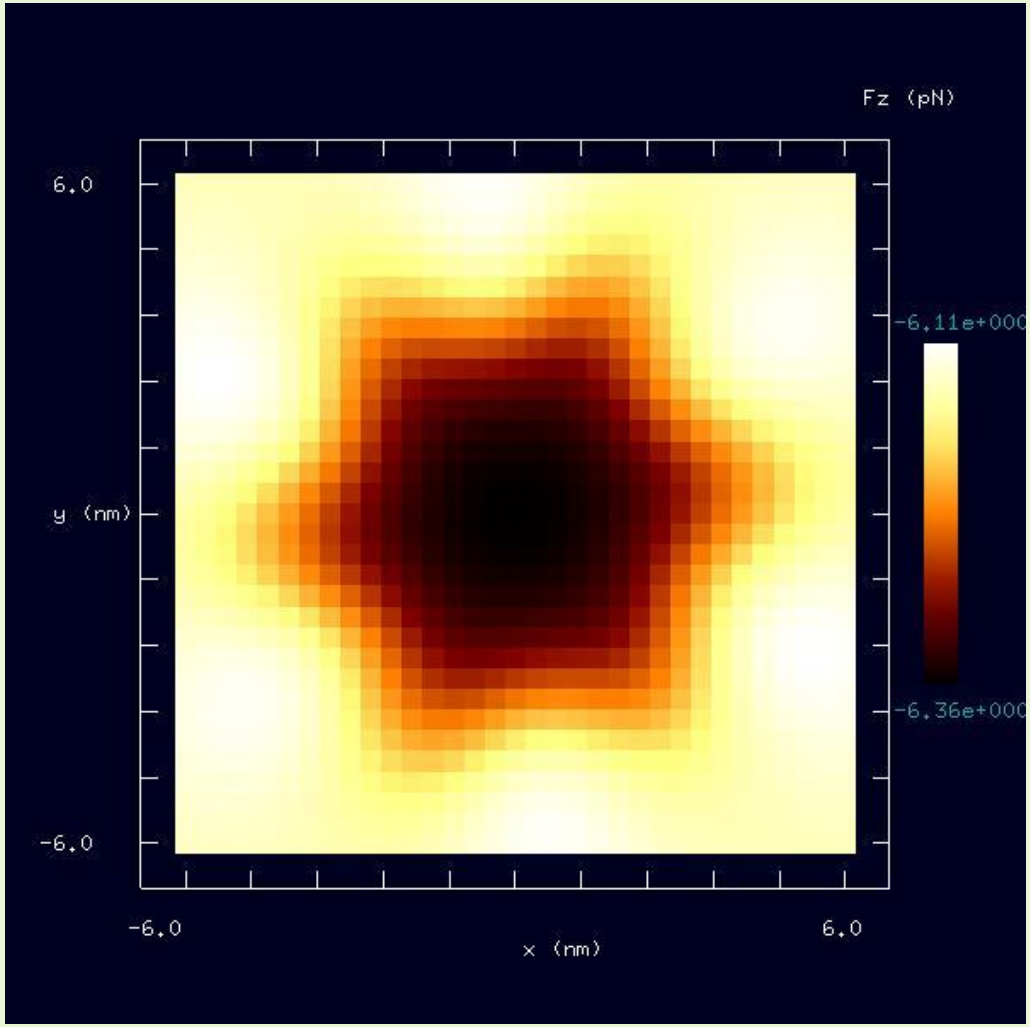
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

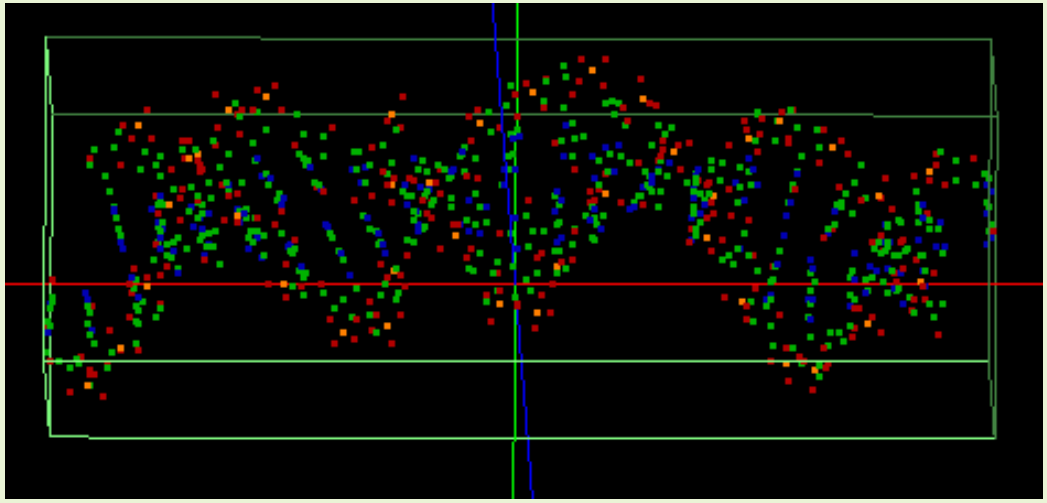
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



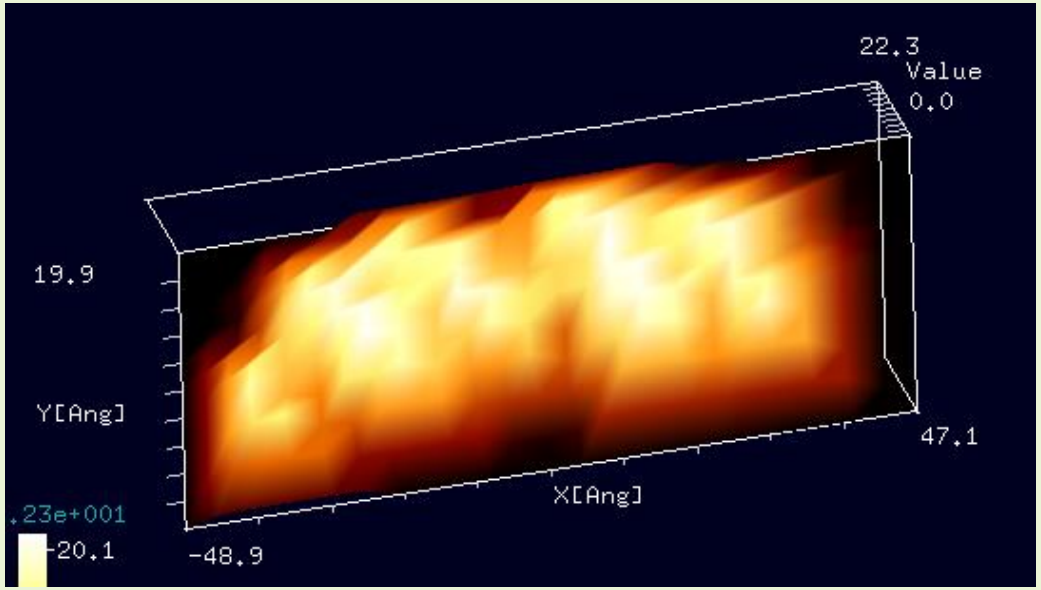
力の最大値:-6.11E+0[pN]
力の最小値:-6.36E+0[pN]

macroKPFM_DLVO

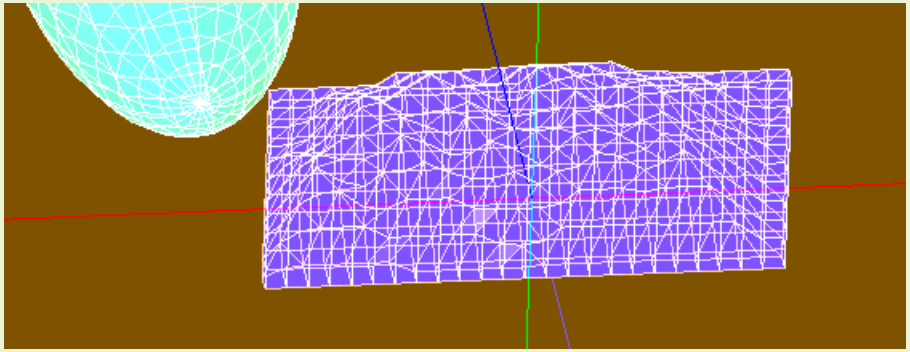
DNA分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



DNAの分子構造図



DNA分子に対して、0.4[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅9.6[nm]、深さ4[nm]、高さ2.63[nm]のDNA分子

試料のメッシュ幅は0.4[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：4.87[nm]

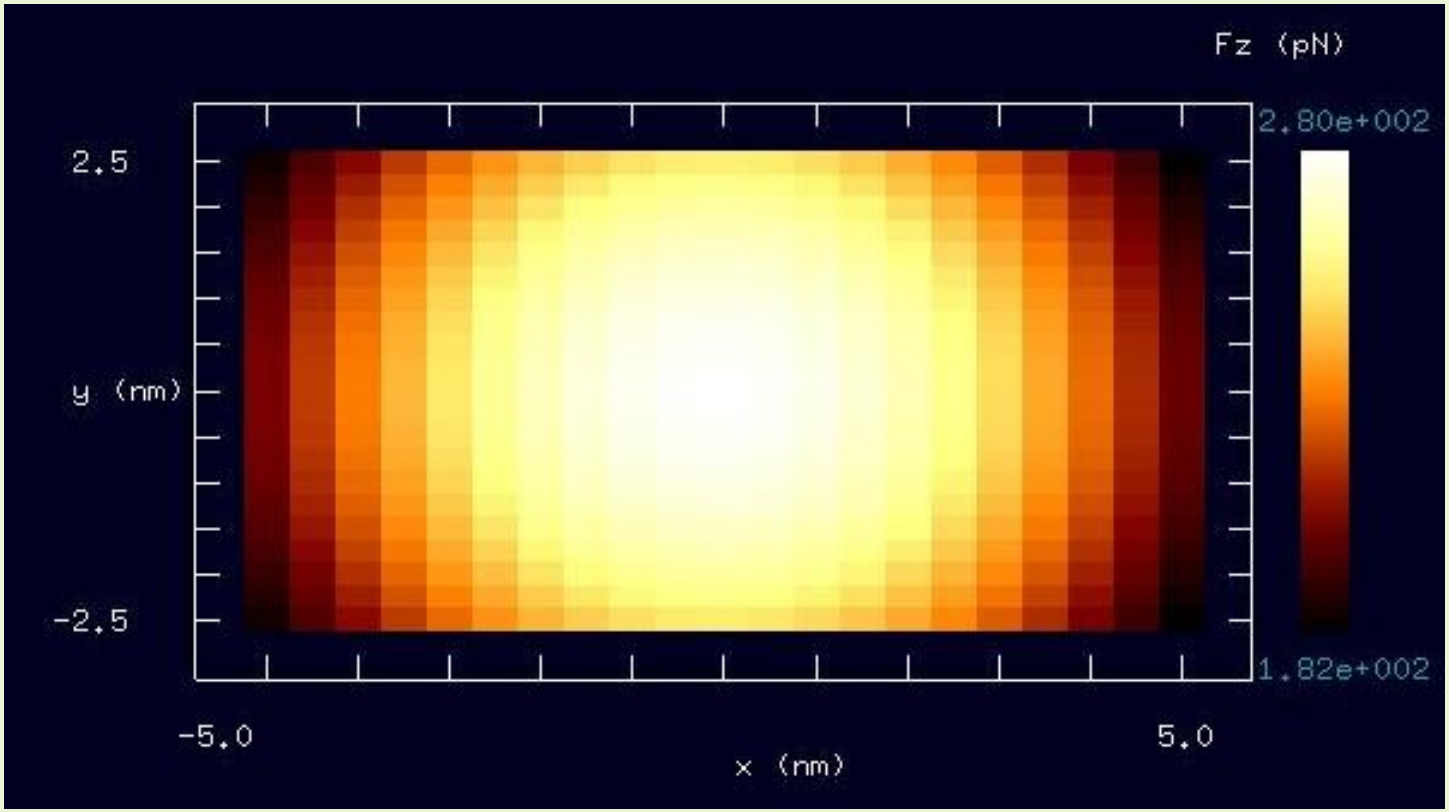
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.5[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-3.0E-1[C/m^2]の電荷を分布させる

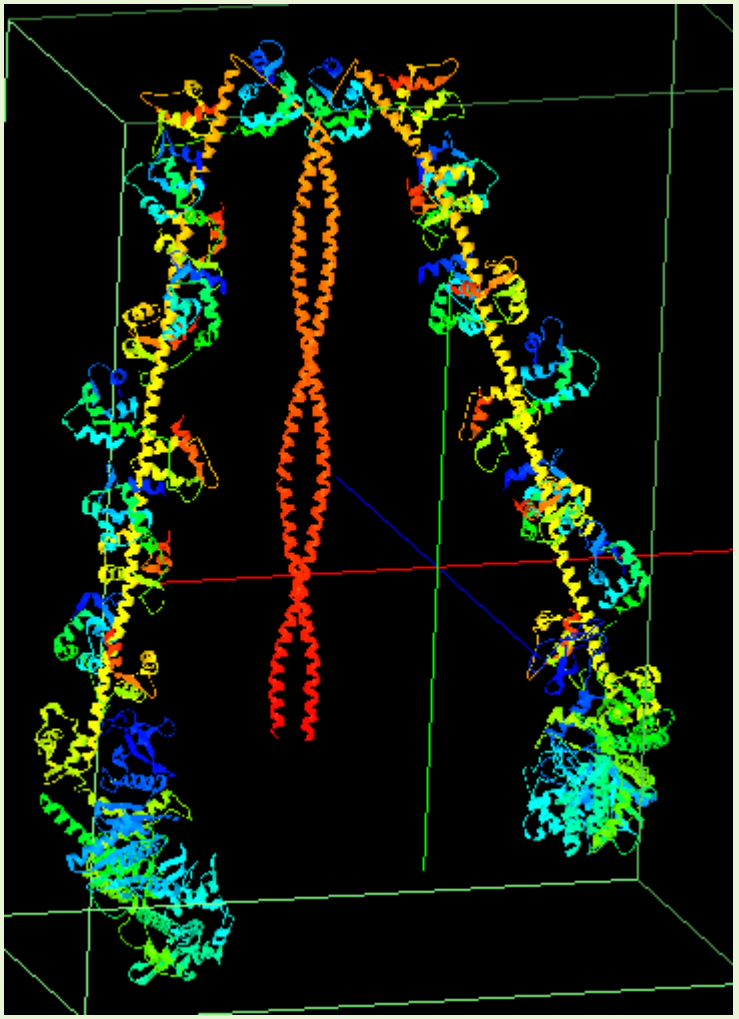
探針に電圧-0.5[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布

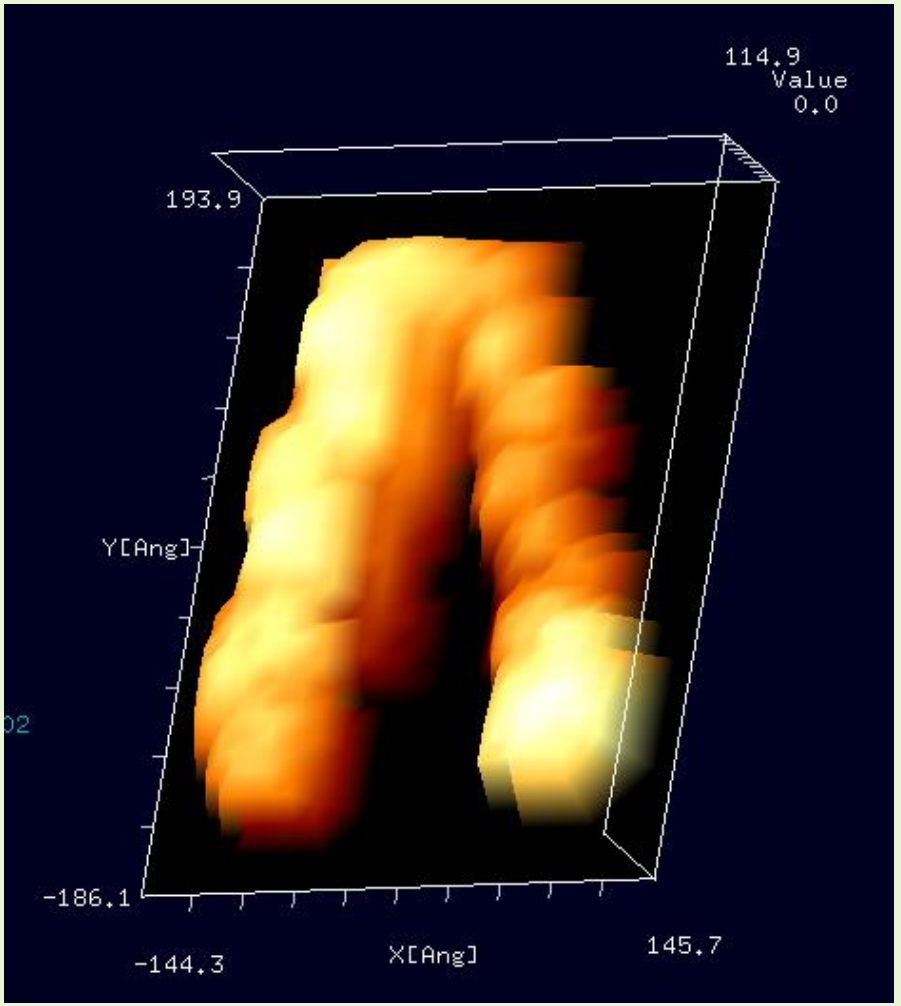


力の最大値:2.80E+2[pN]
力の最小値:1.82E+2[pN]

macroKPFM_DLVO

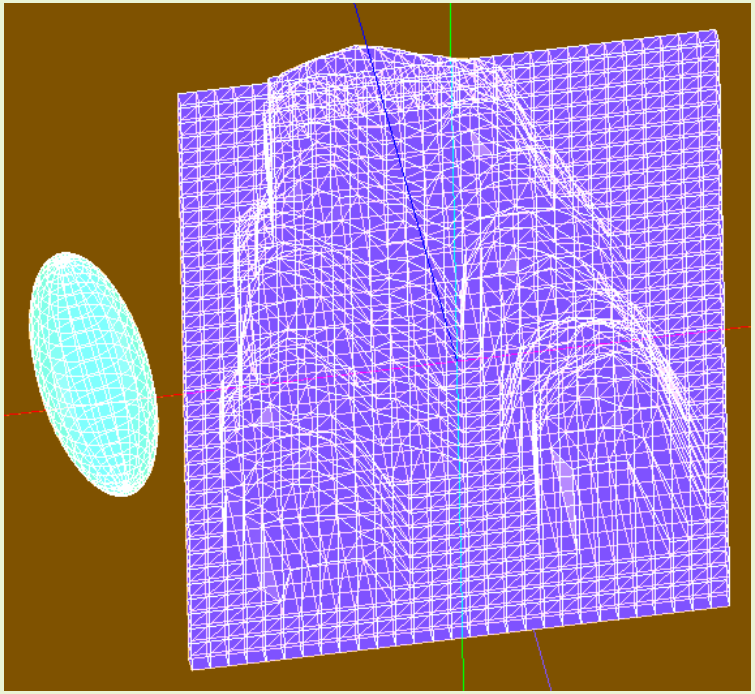
ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像





DNAの分子構造図

DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]のミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

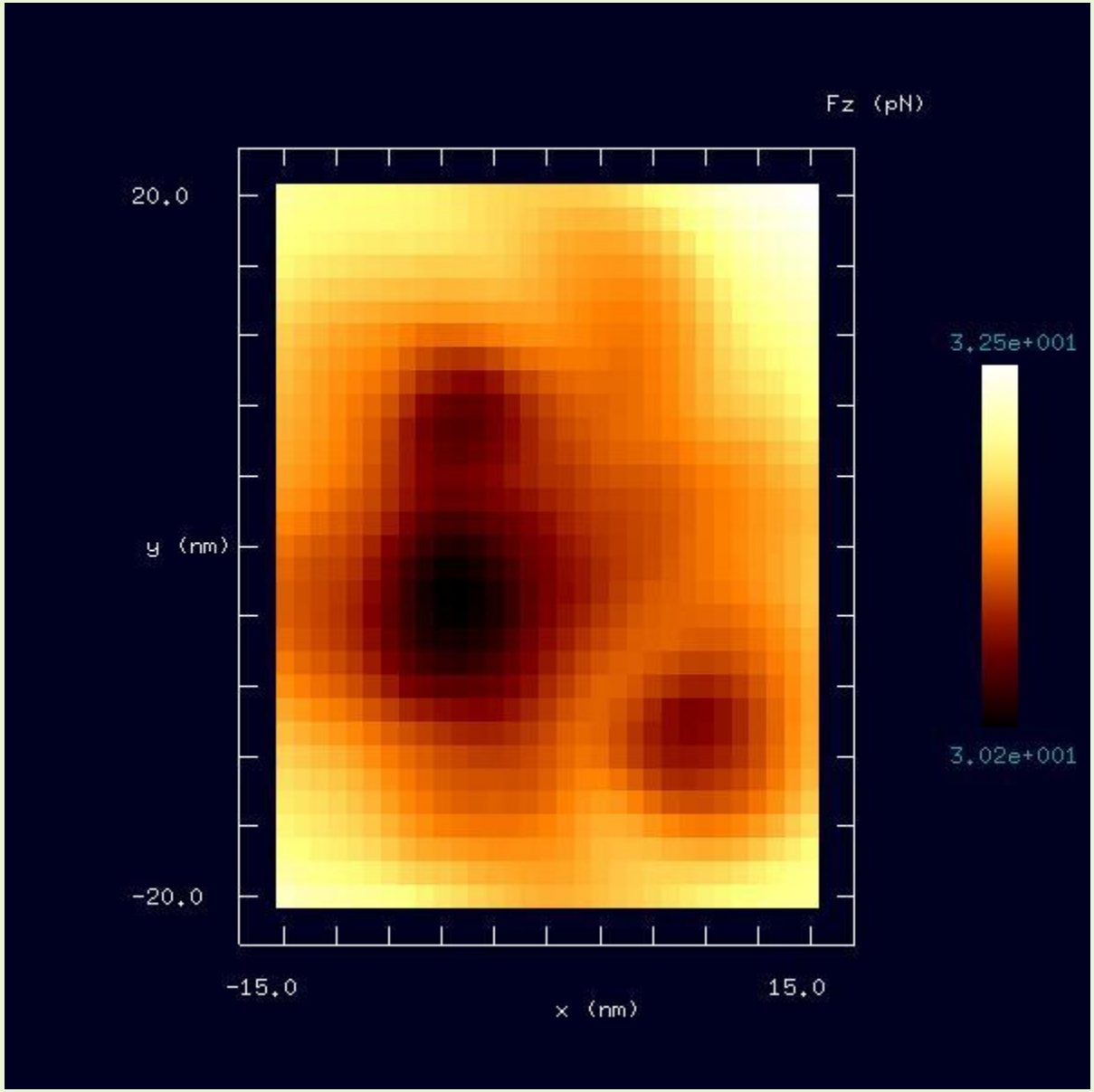
探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

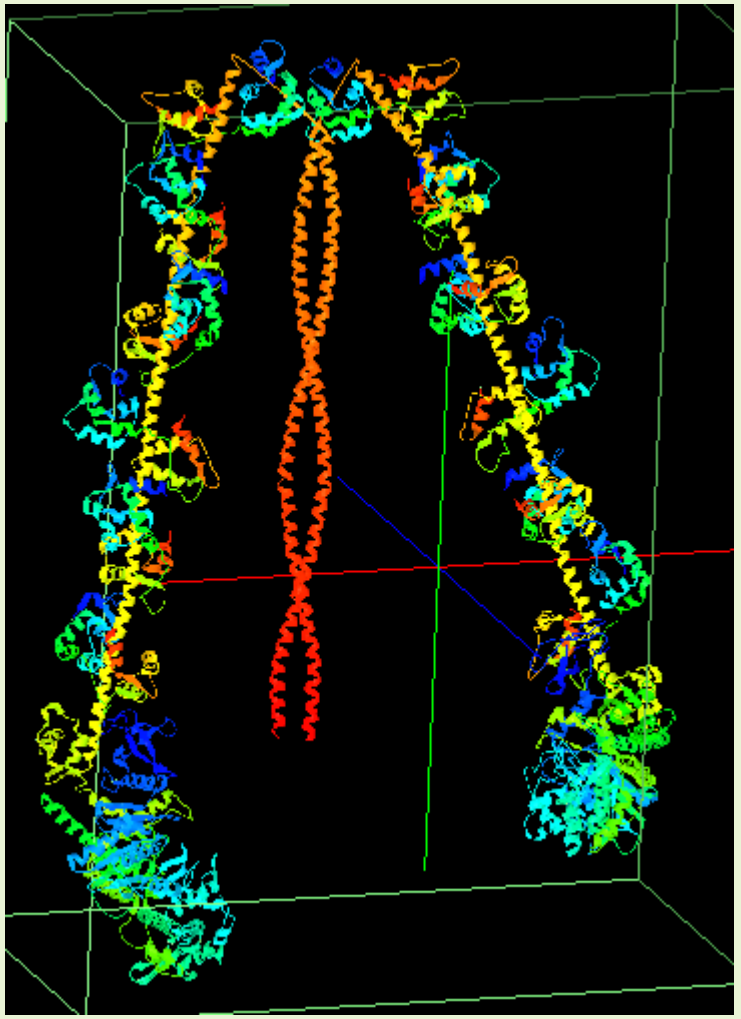
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



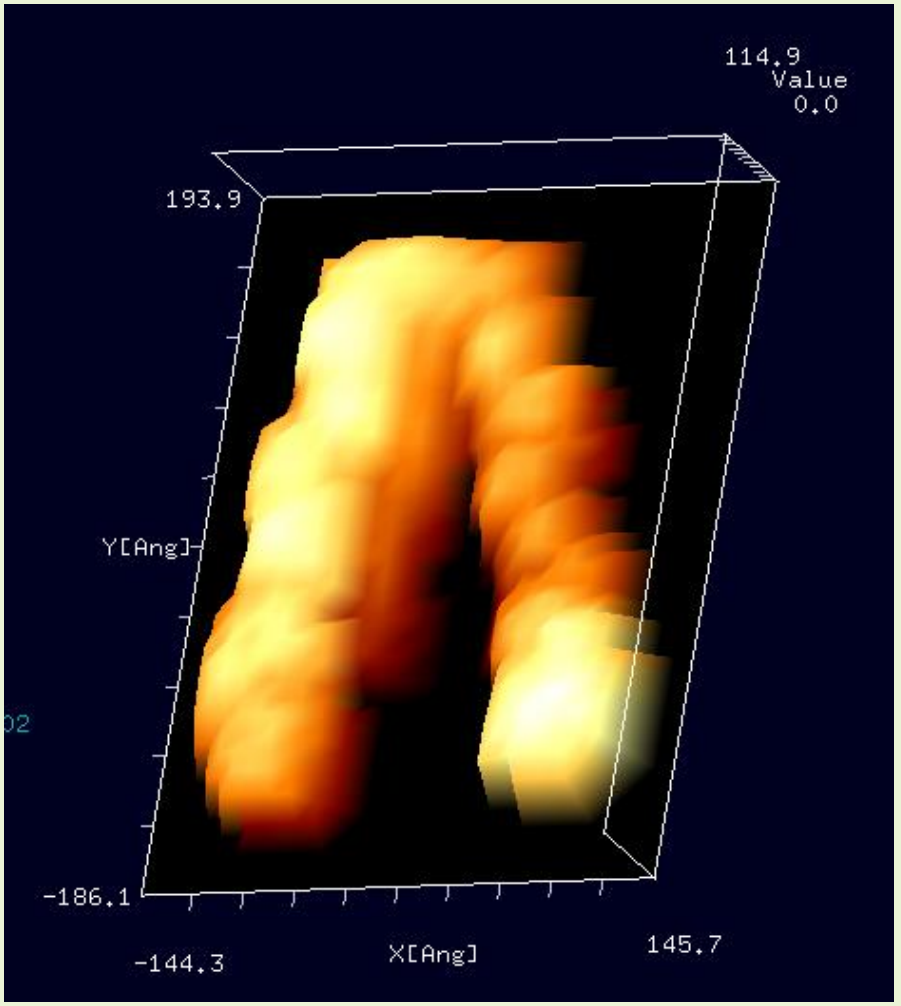
力の最大値:3.25E+1[pN]
力の最小値:3.02E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

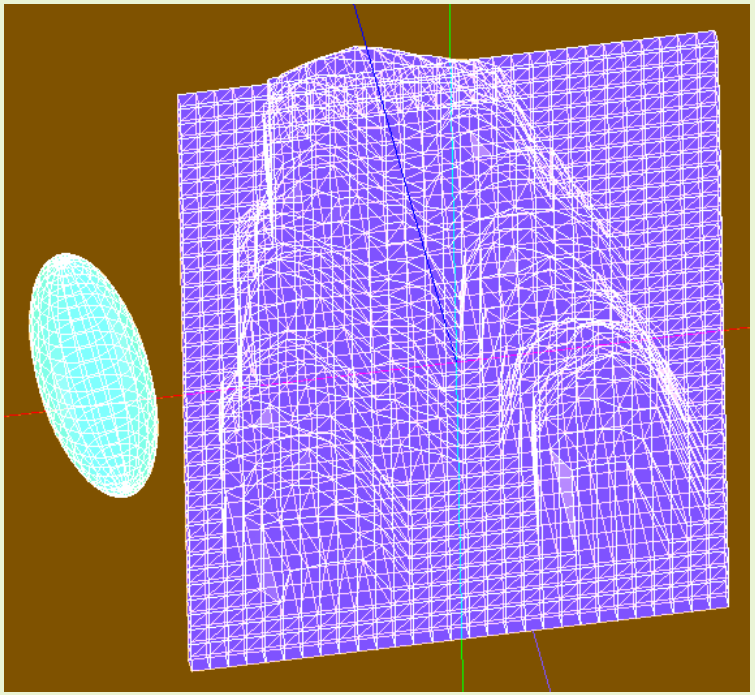
ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



DNAの分子構造図



DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の
回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]の
ミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

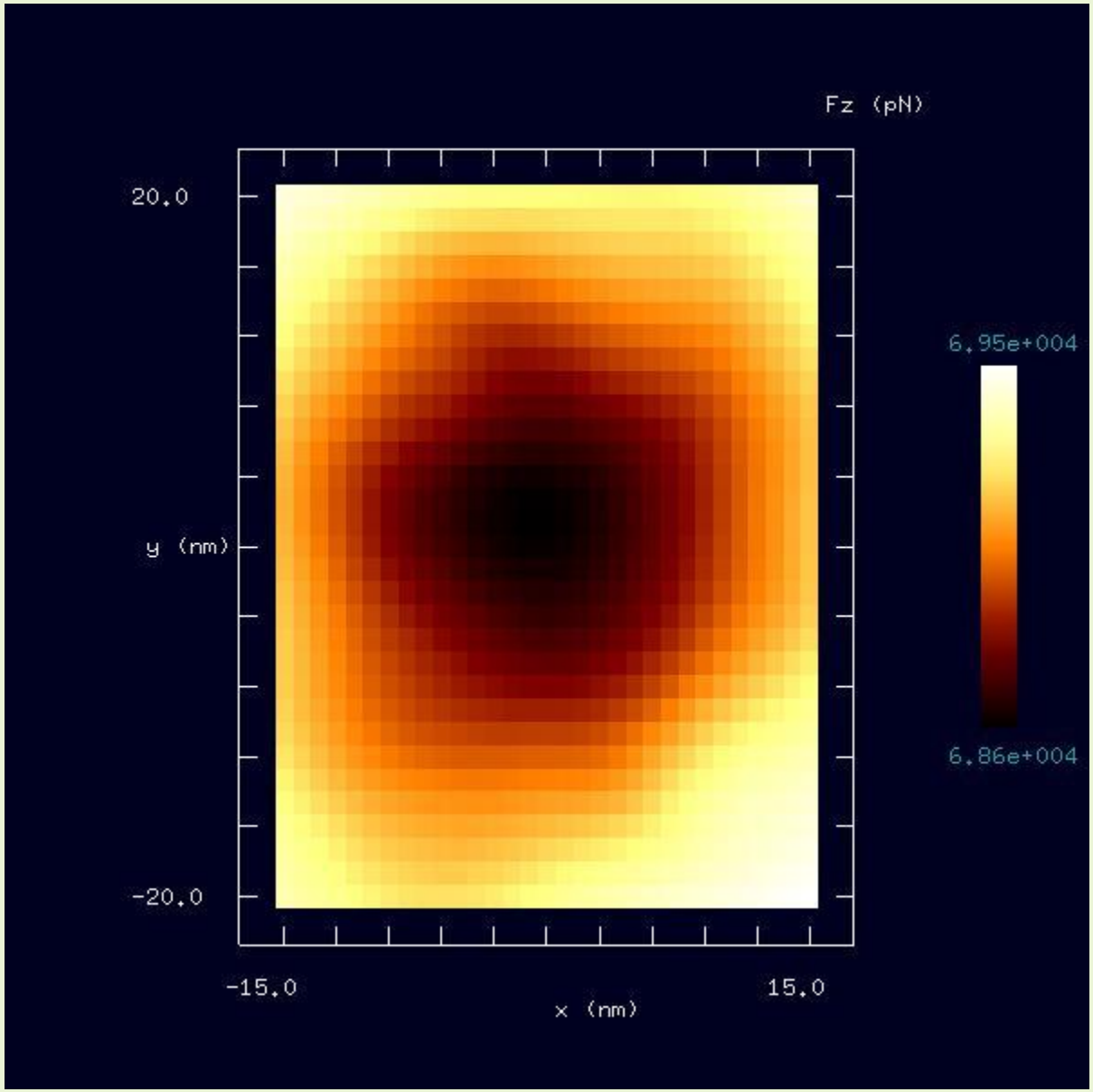
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

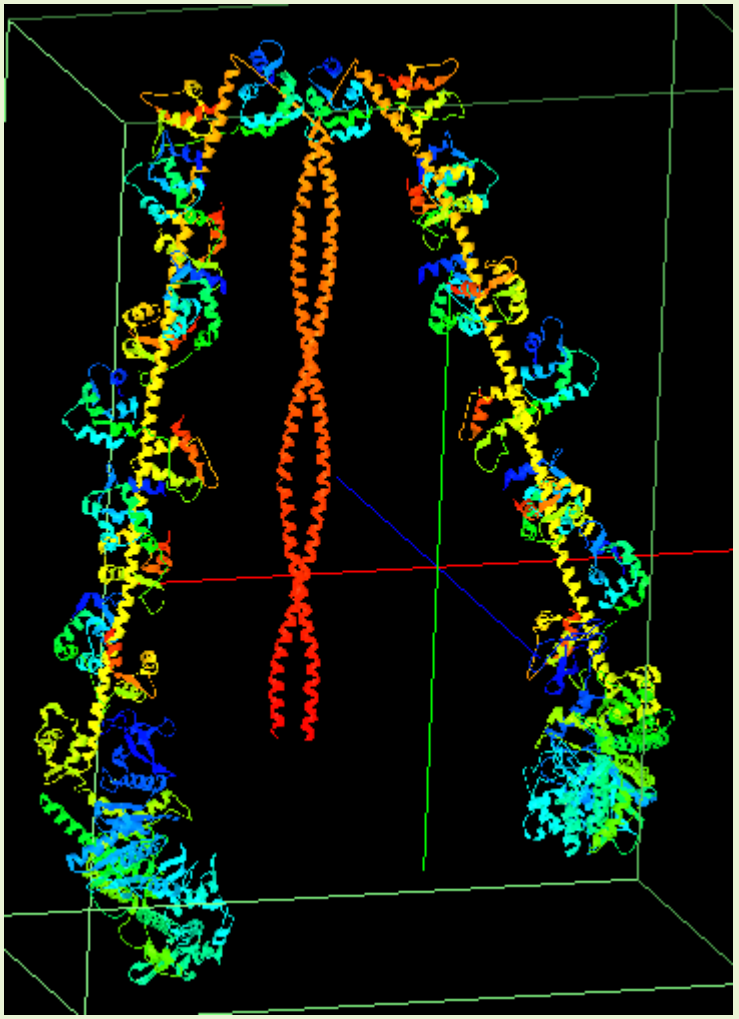
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布

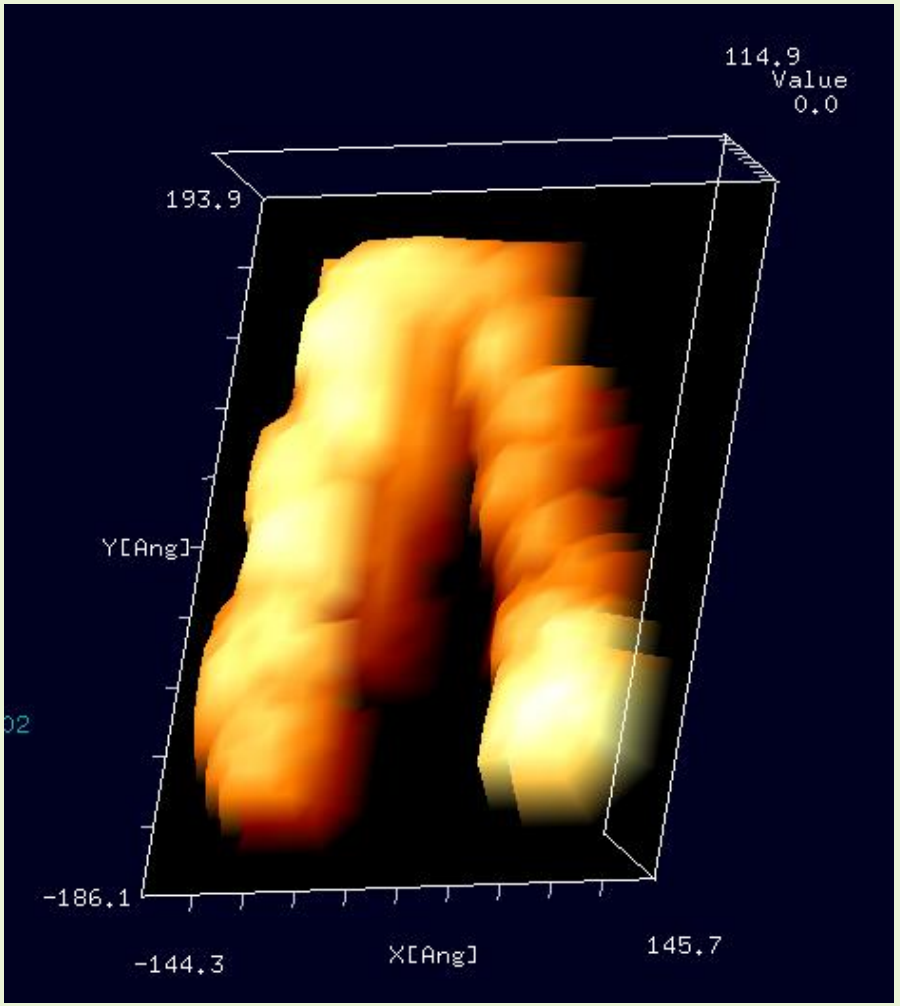


力の最大値:6.95E+4[pN]
力の最小値:6.86E+4[pN]

macroKPFM_DLVO

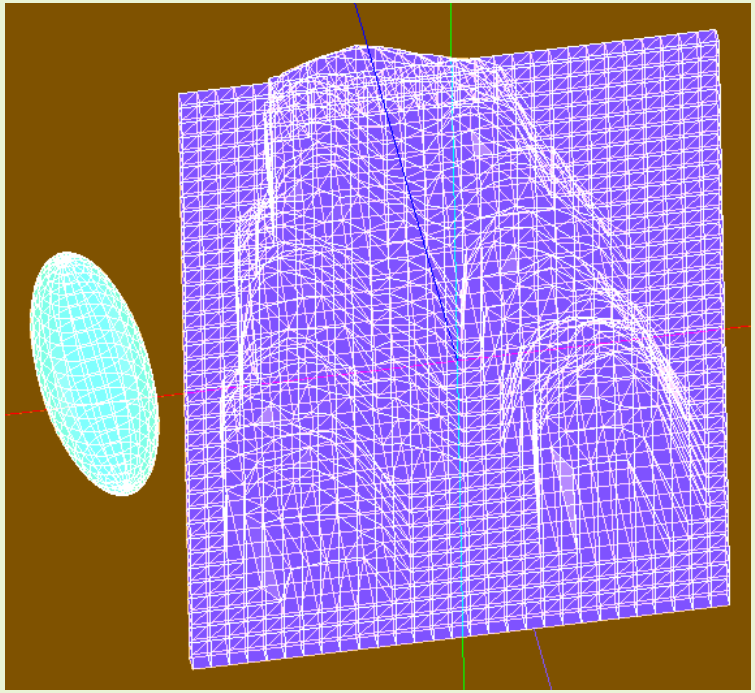
ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像





DNAの分子構造図

DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の
回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]の
ミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

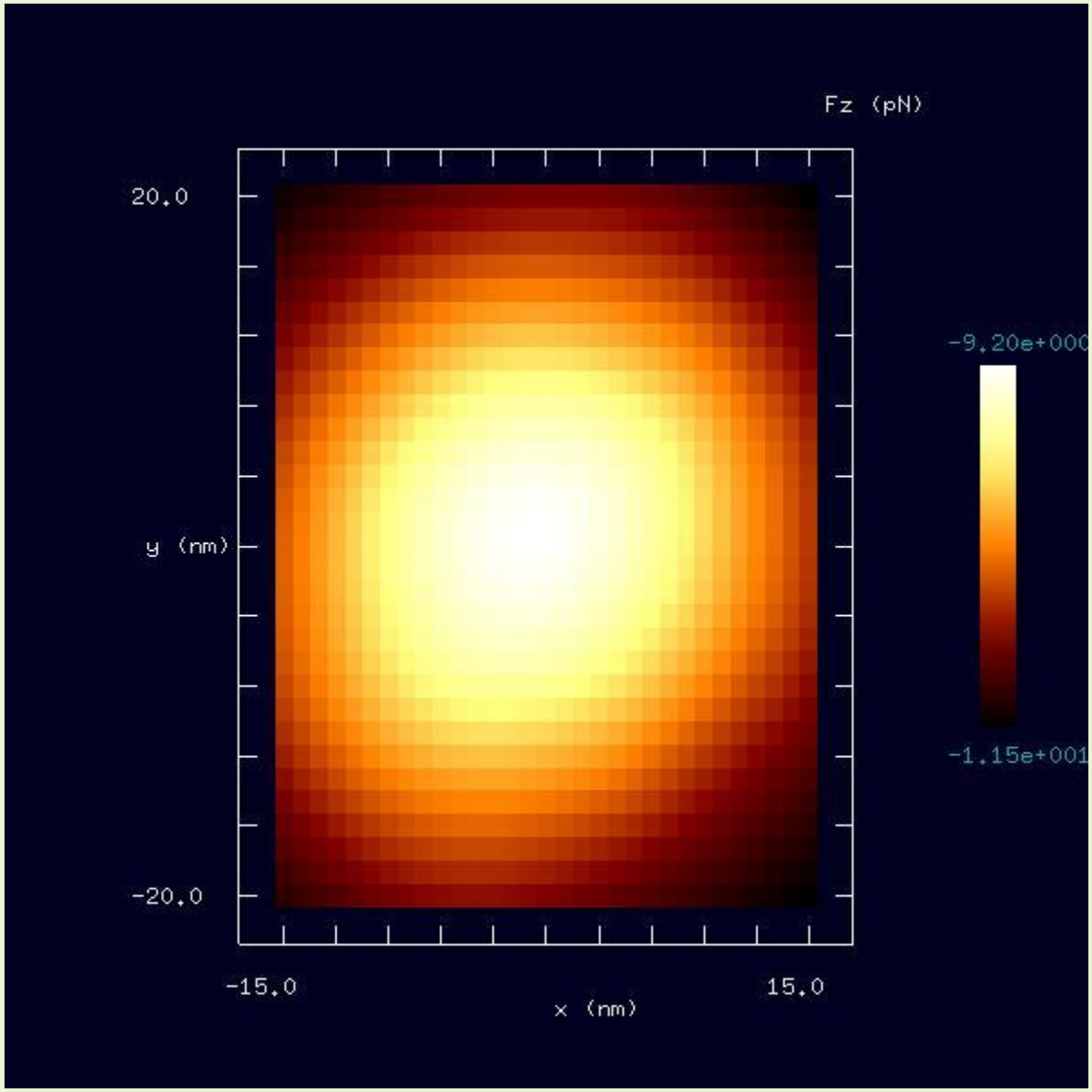
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

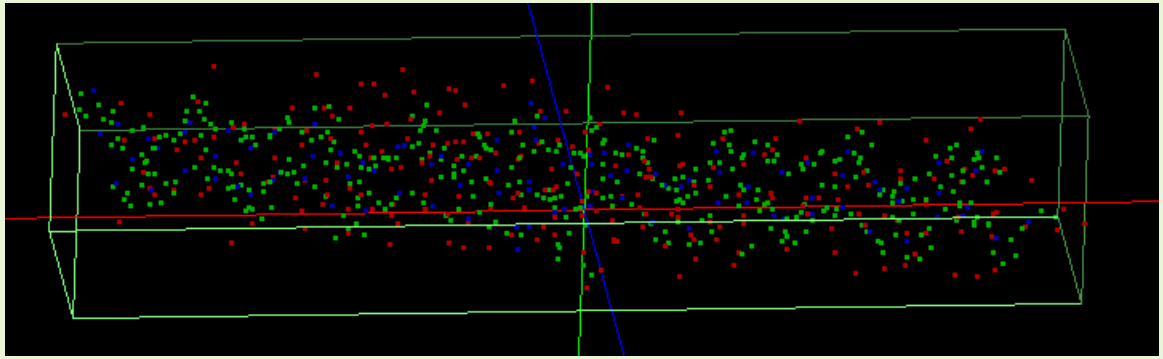
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



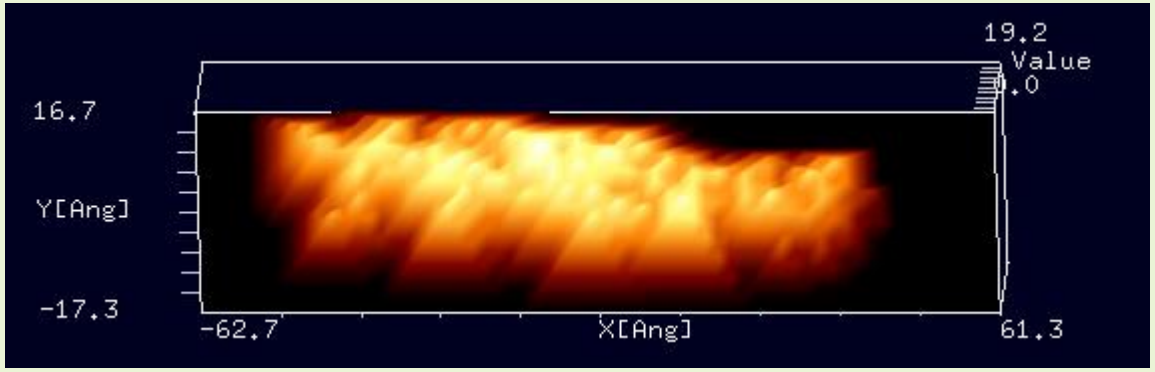
力の最大値:-9.20E+0[pN]
力の最小値:-1.15E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

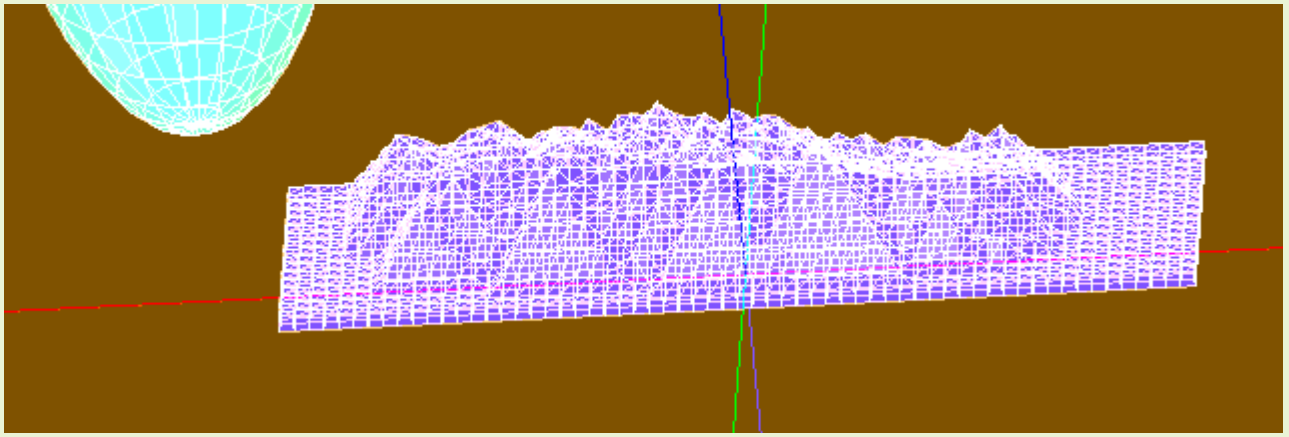
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、
高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]
とした

探針先端と試料の最短距離：
1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]の
コラーゲン分子

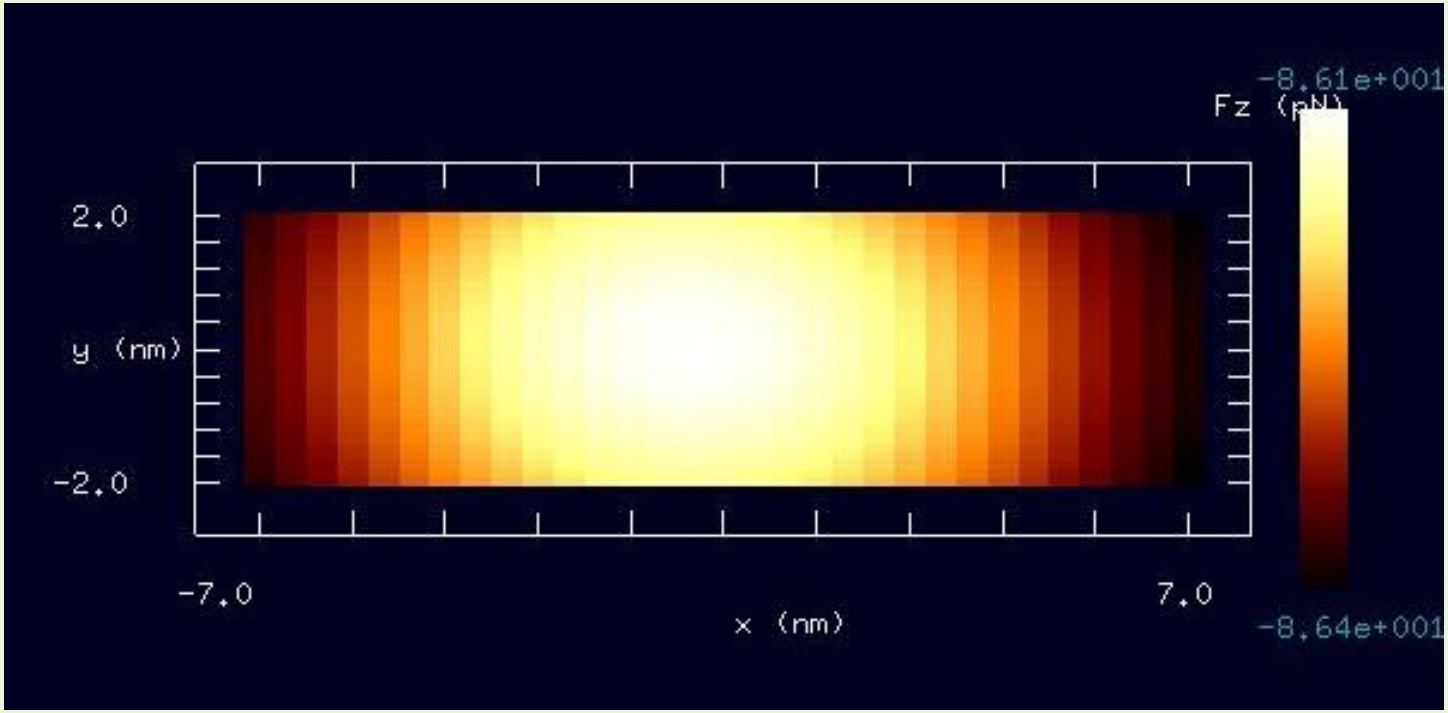
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

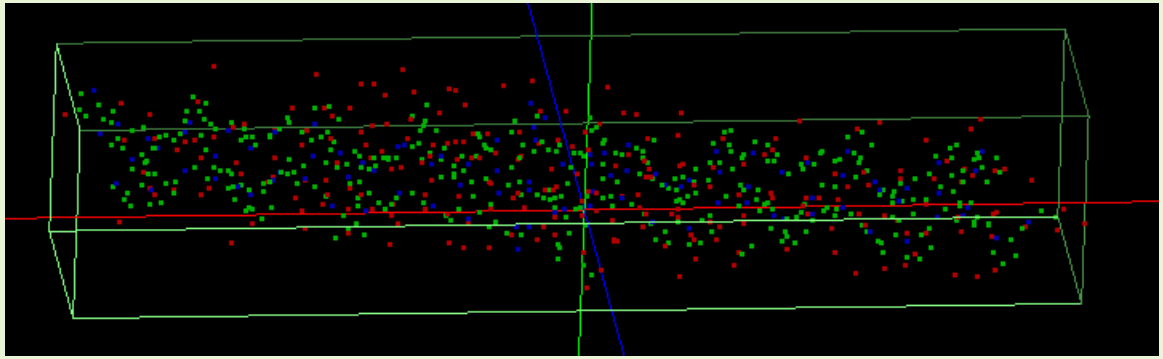
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



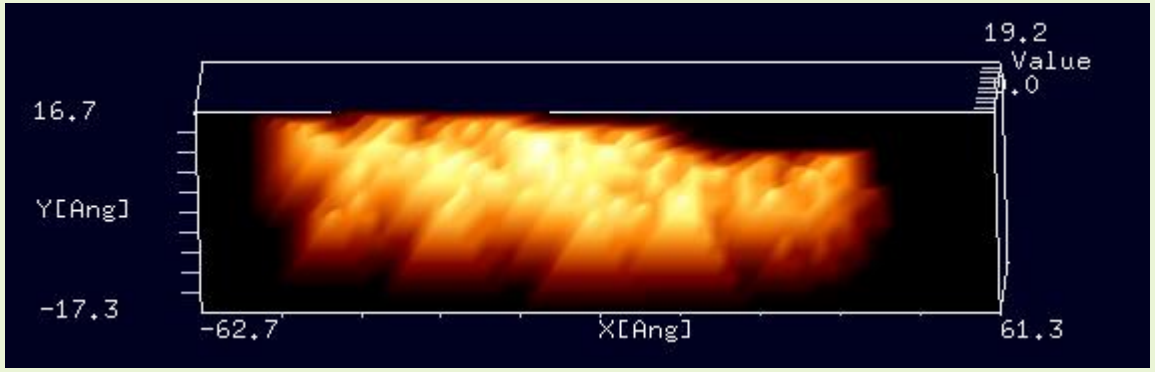
力の最大値:-8.61E+1[pN]
力の最小値:-8.64E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

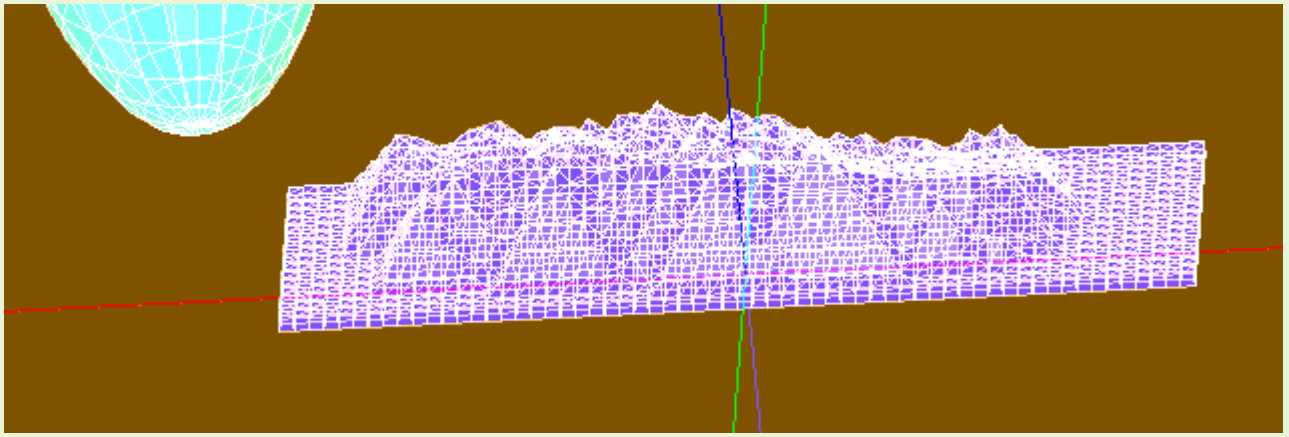
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、
高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]
とした

探針先端と試料の最短距離：
1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]の
コラーゲン分子

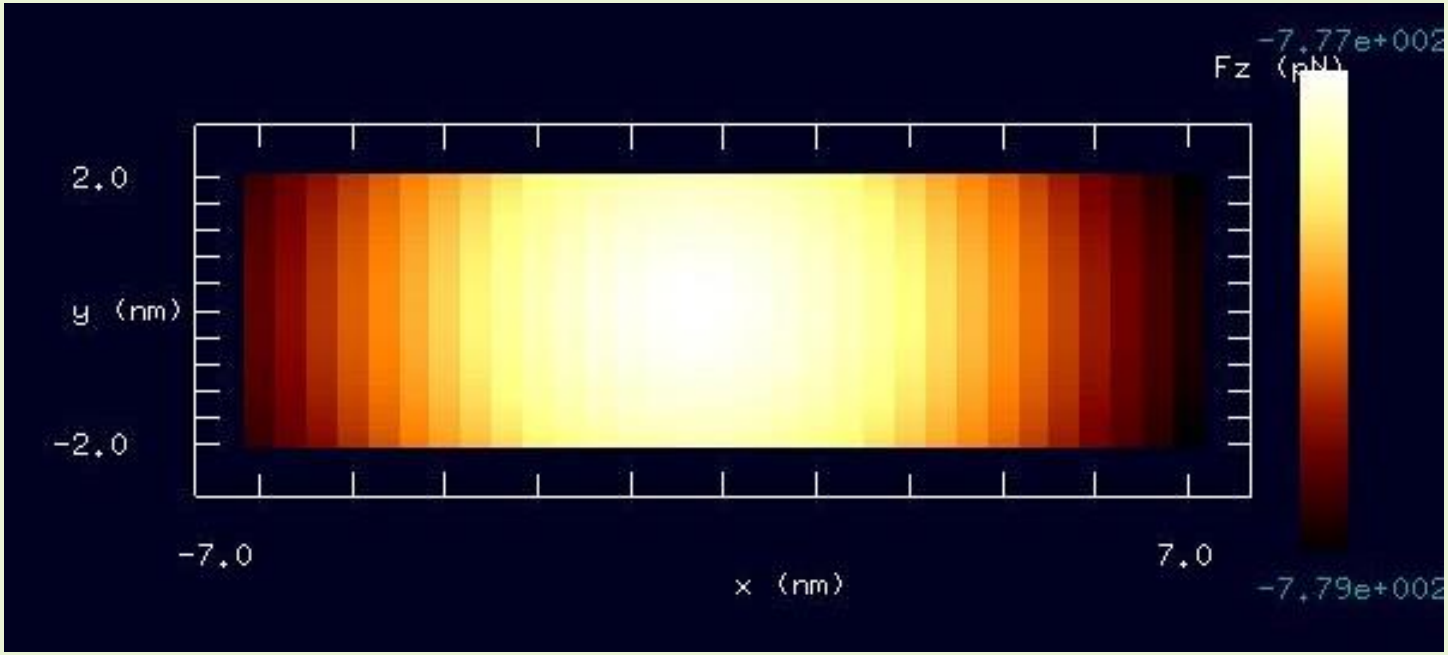
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

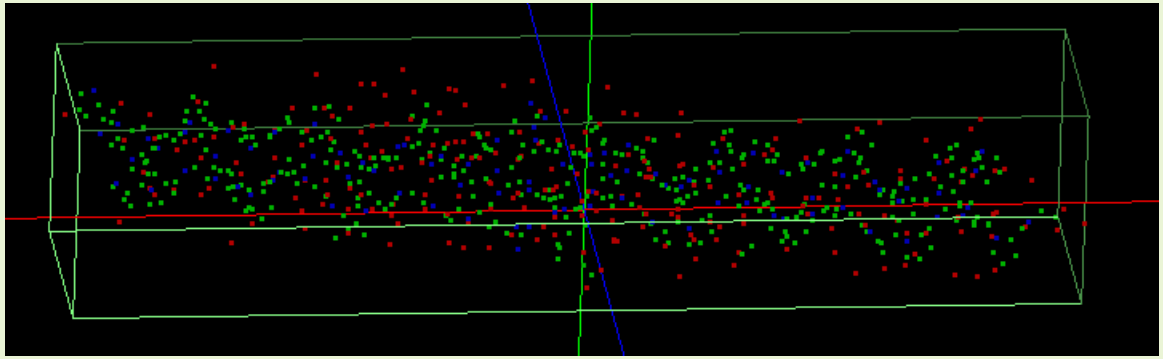
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



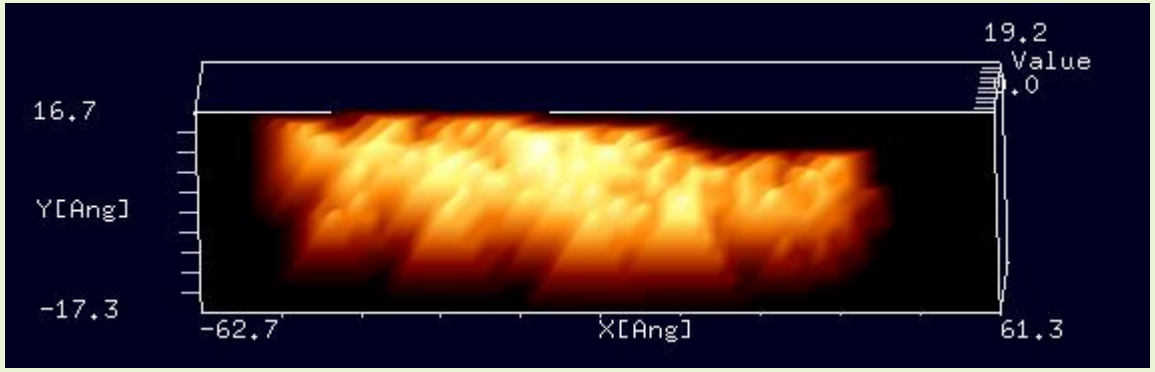
力の最大値:-7.77E+2[pN]
力の最小値:-7.79E+2[pN]

macroKPFM_DLVO

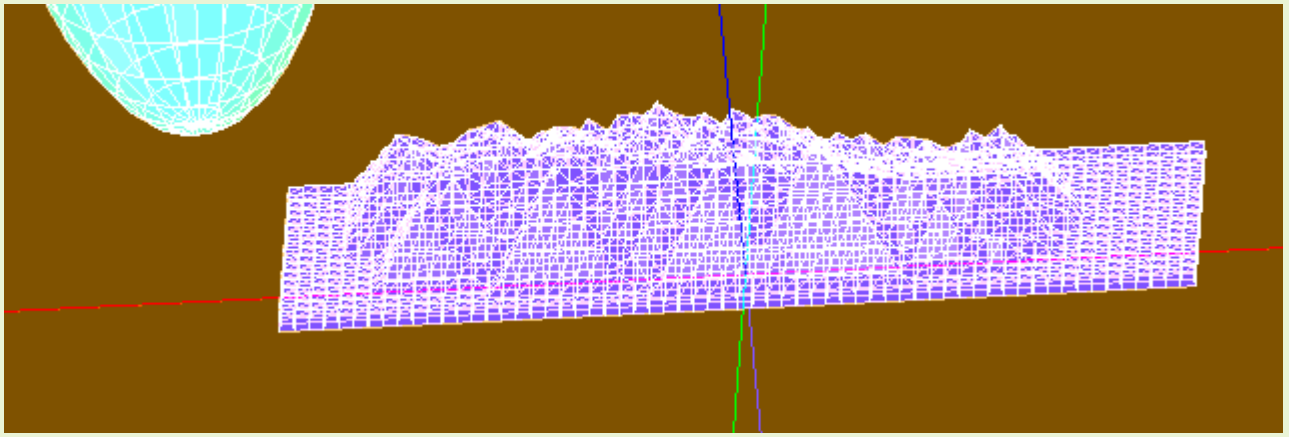
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、
高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]
とした

探針先端と試料の最短距離：
1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]の
コラーゲン分子

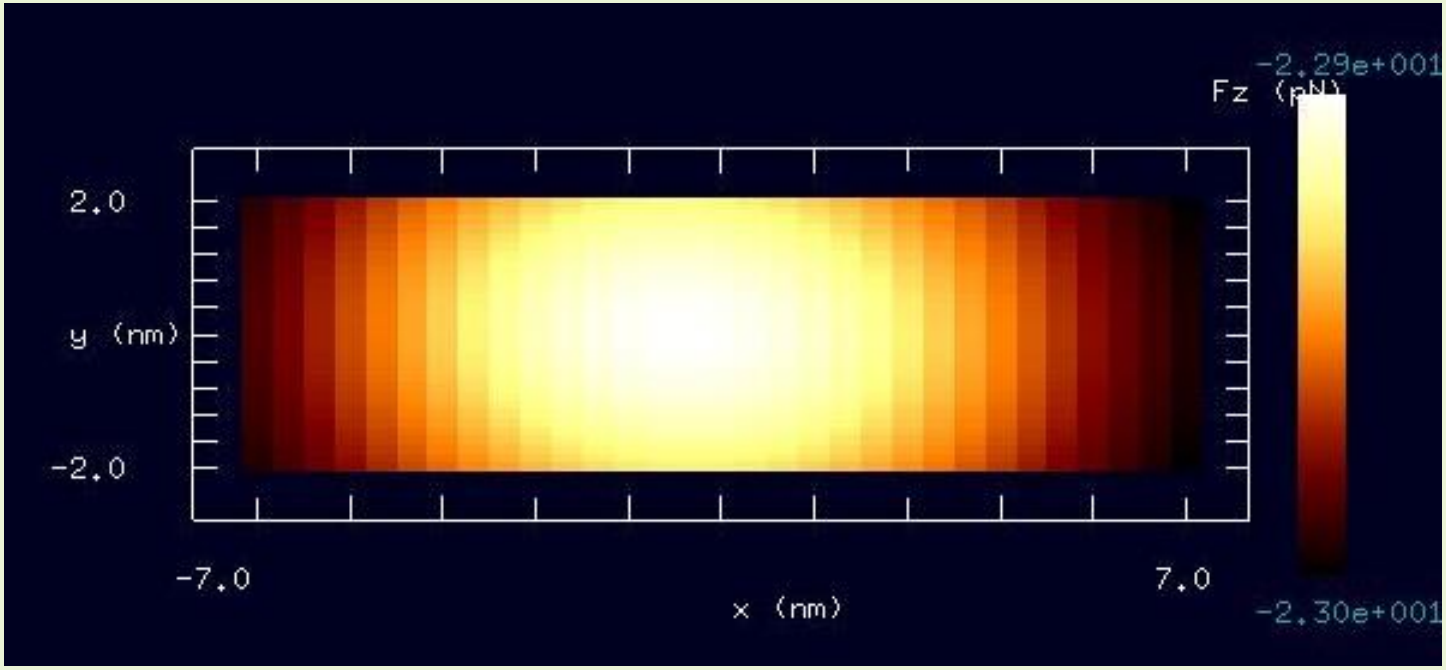
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

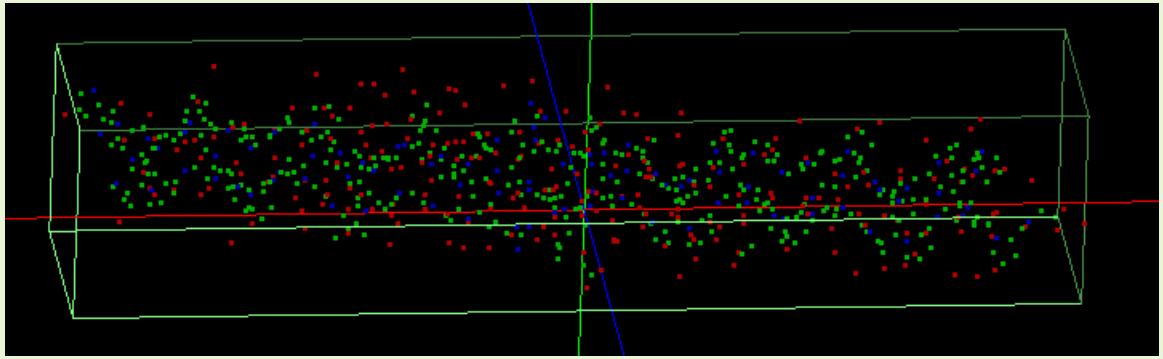
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



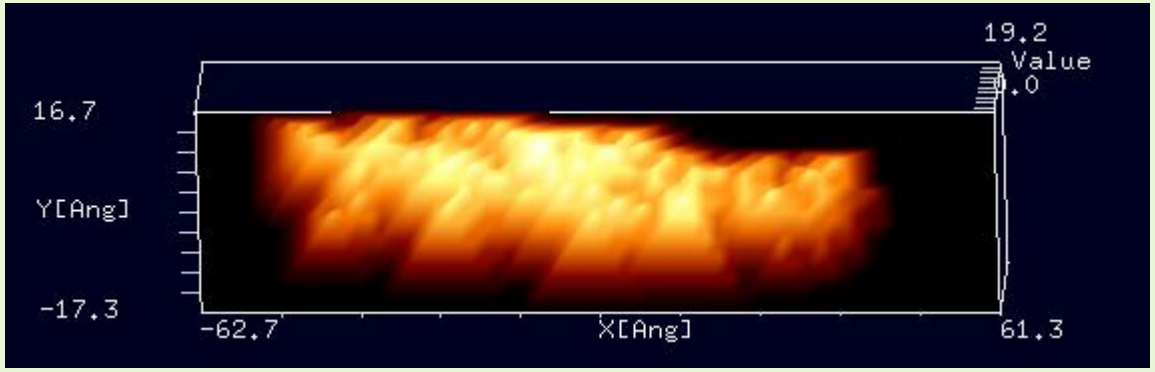
力の最大値:-2.29E+1[pN]
力の最小値:-2.30E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

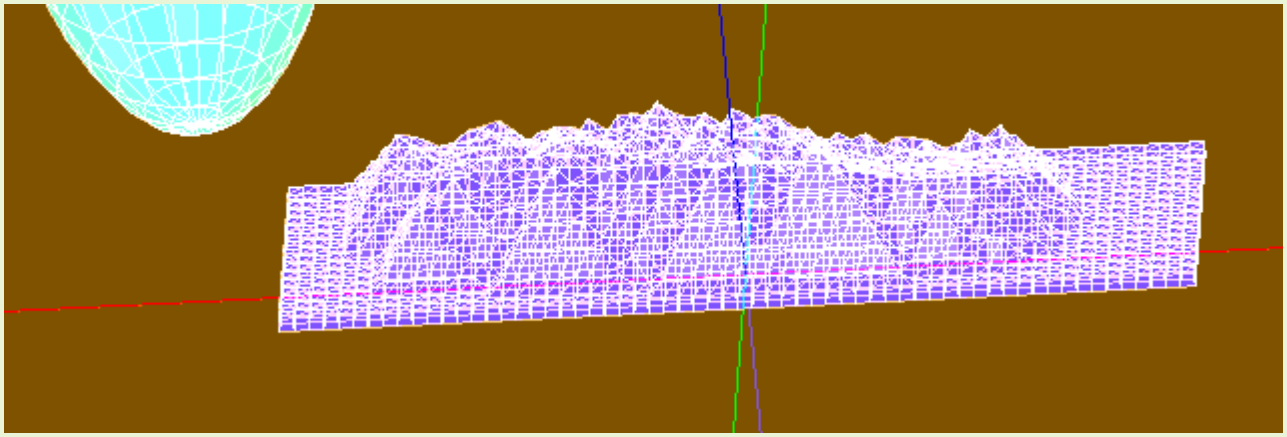
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、
高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]
とした

探針先端と試料の最短距離：
1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]の
コラーゲン分子

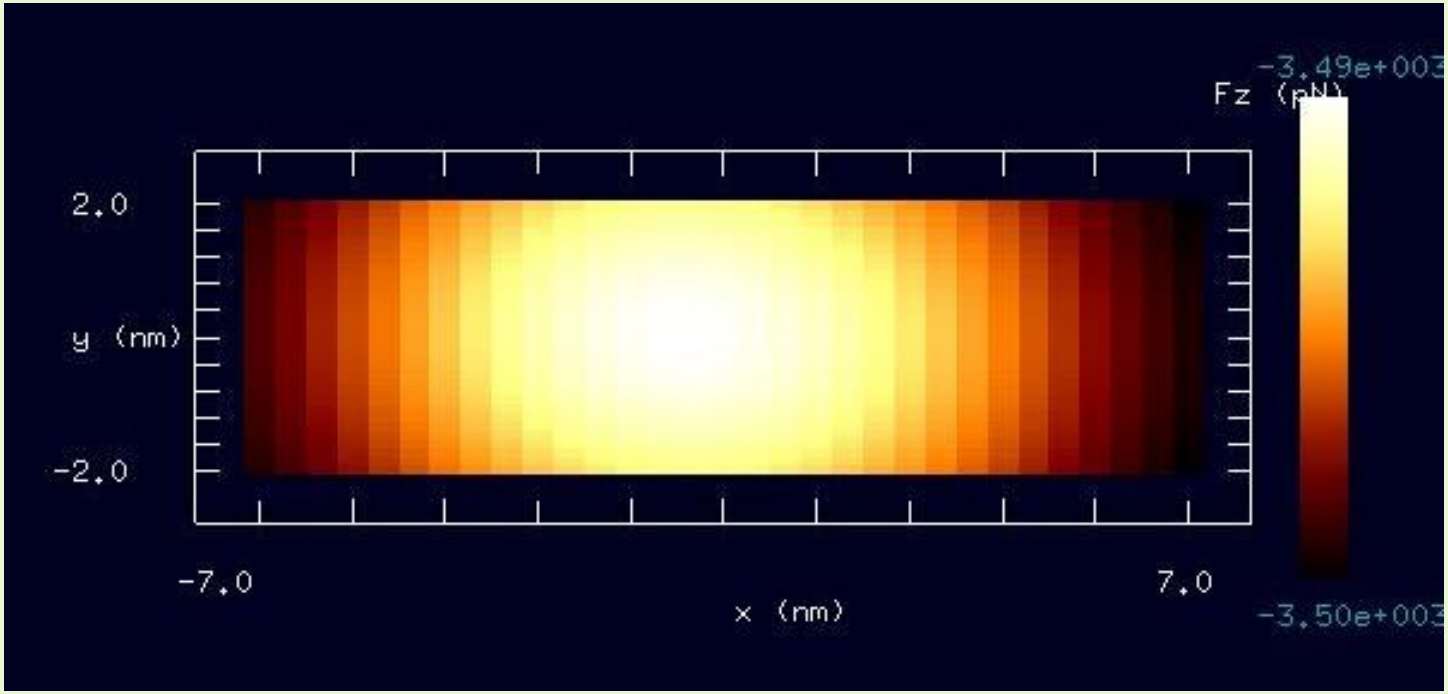
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

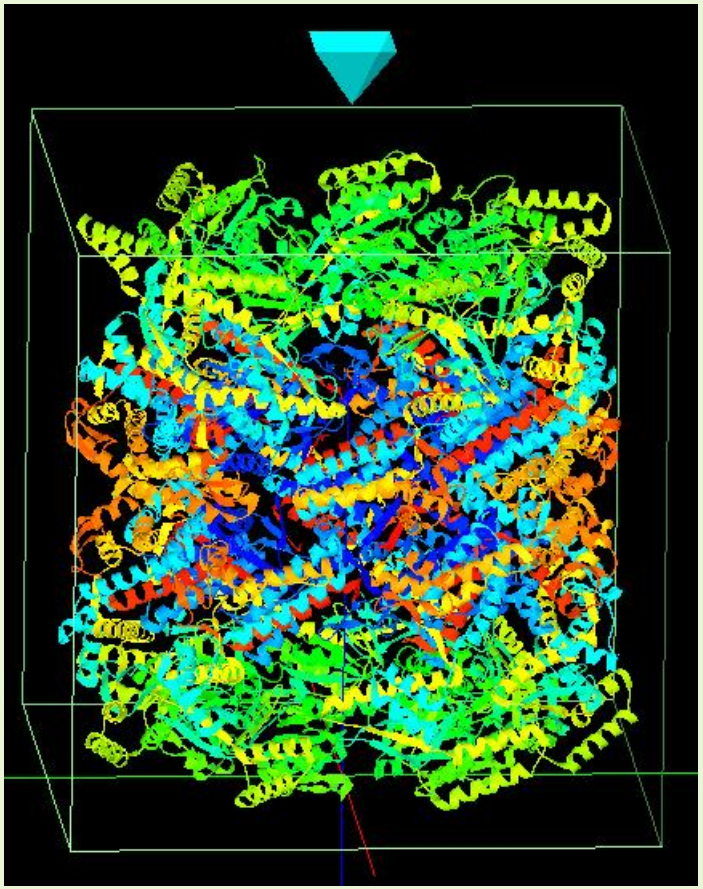
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



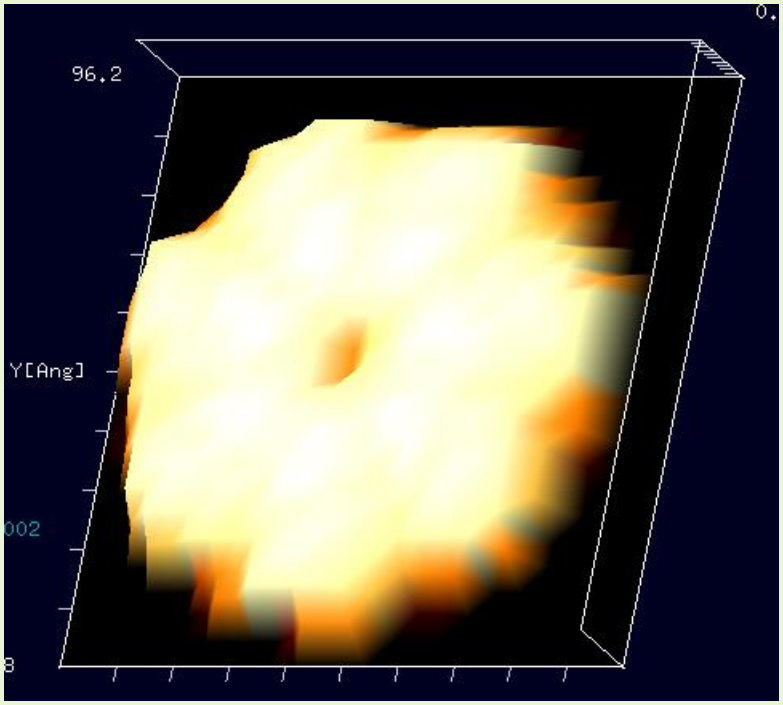
力の最大値:-3.49E+3[pN]
力の最小値:-3.50E+3[pN]

macroKPFM_DLVO

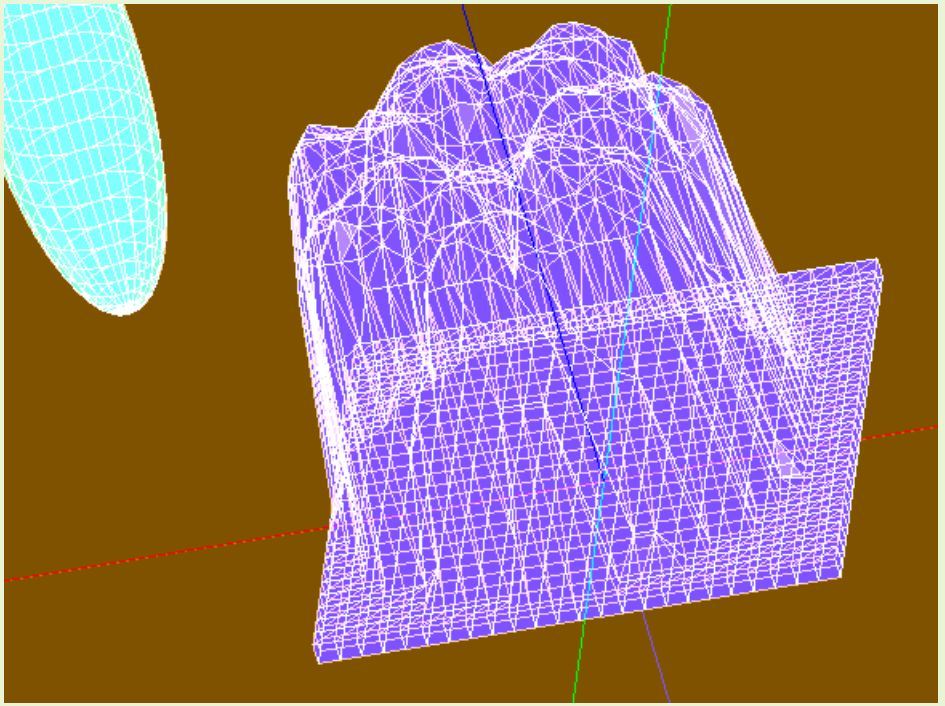
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、
0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

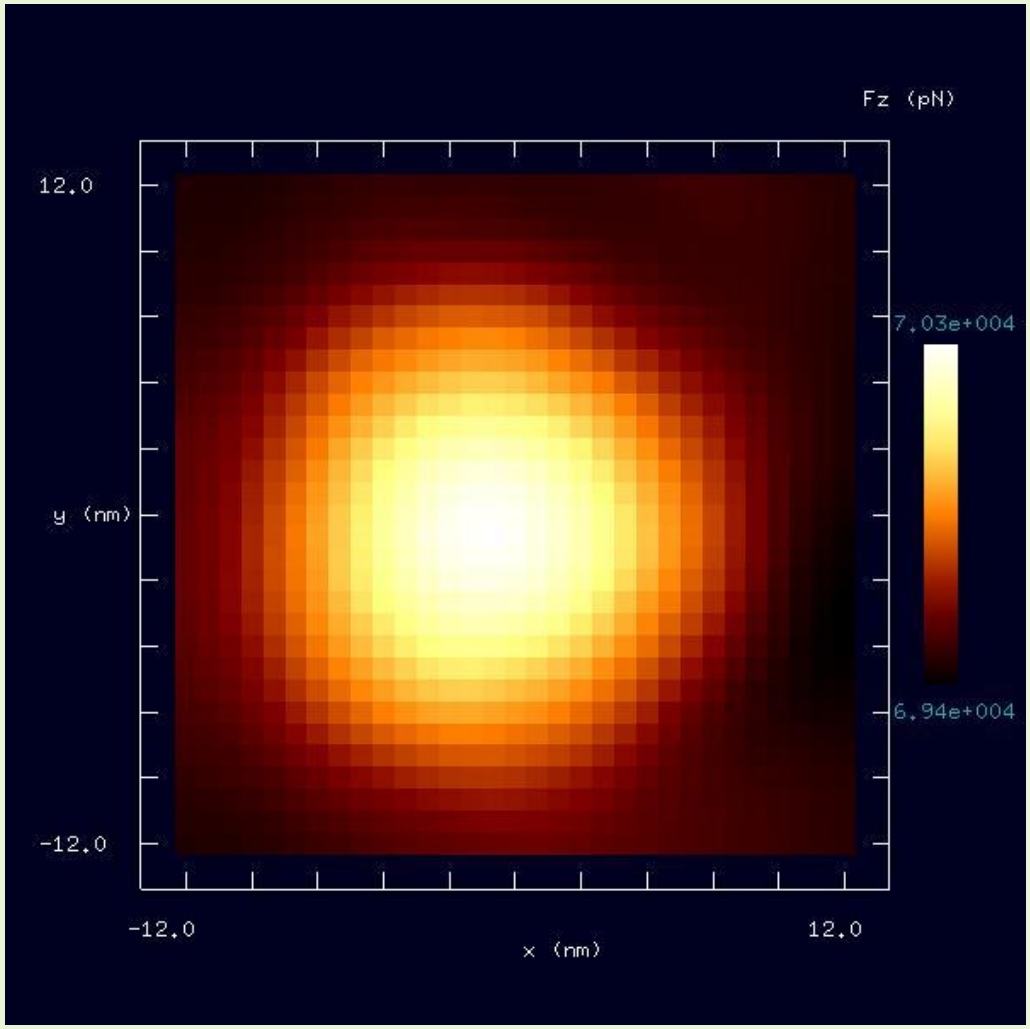
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

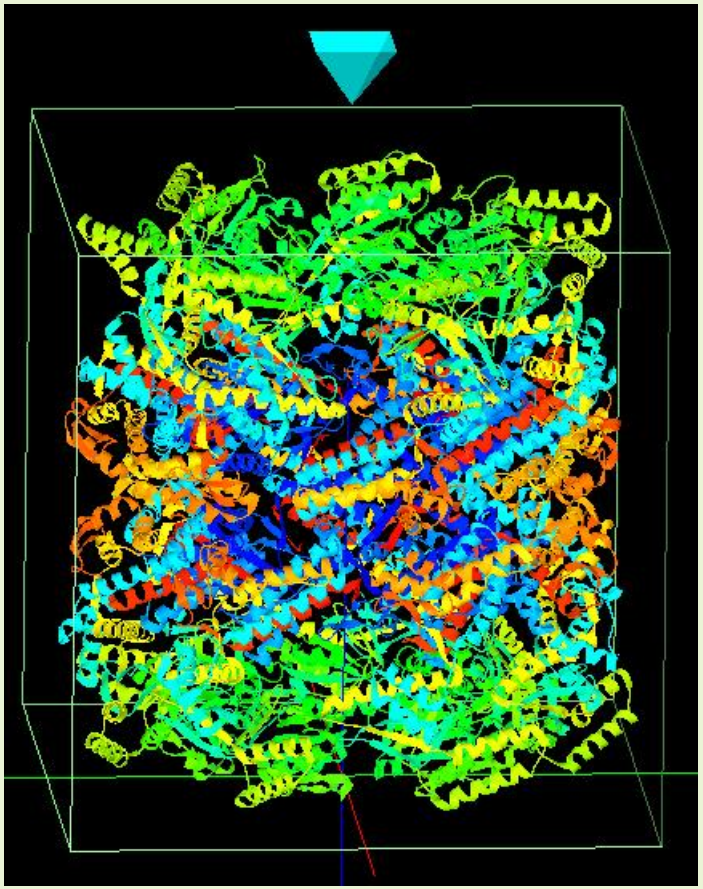
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



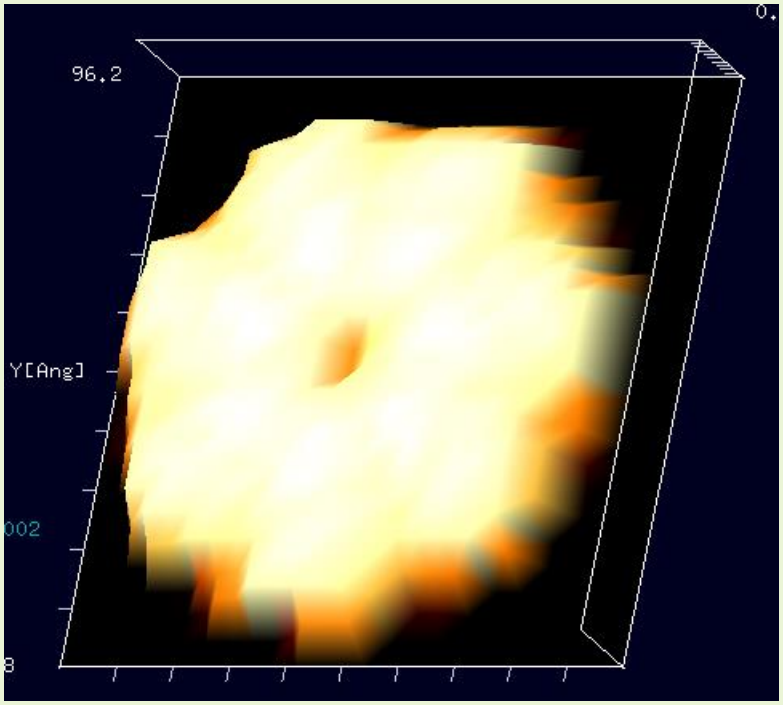
力の最大値：7.03E+4[pN]
力の最小値：6.94E+4[pN]

macroKPFM_DLVO

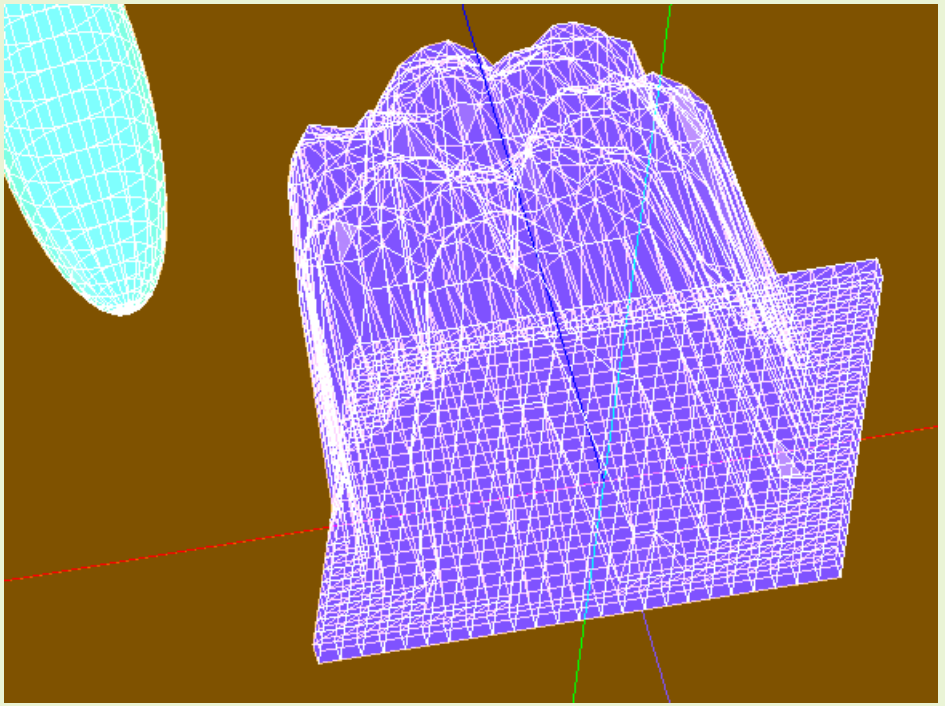
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、
0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

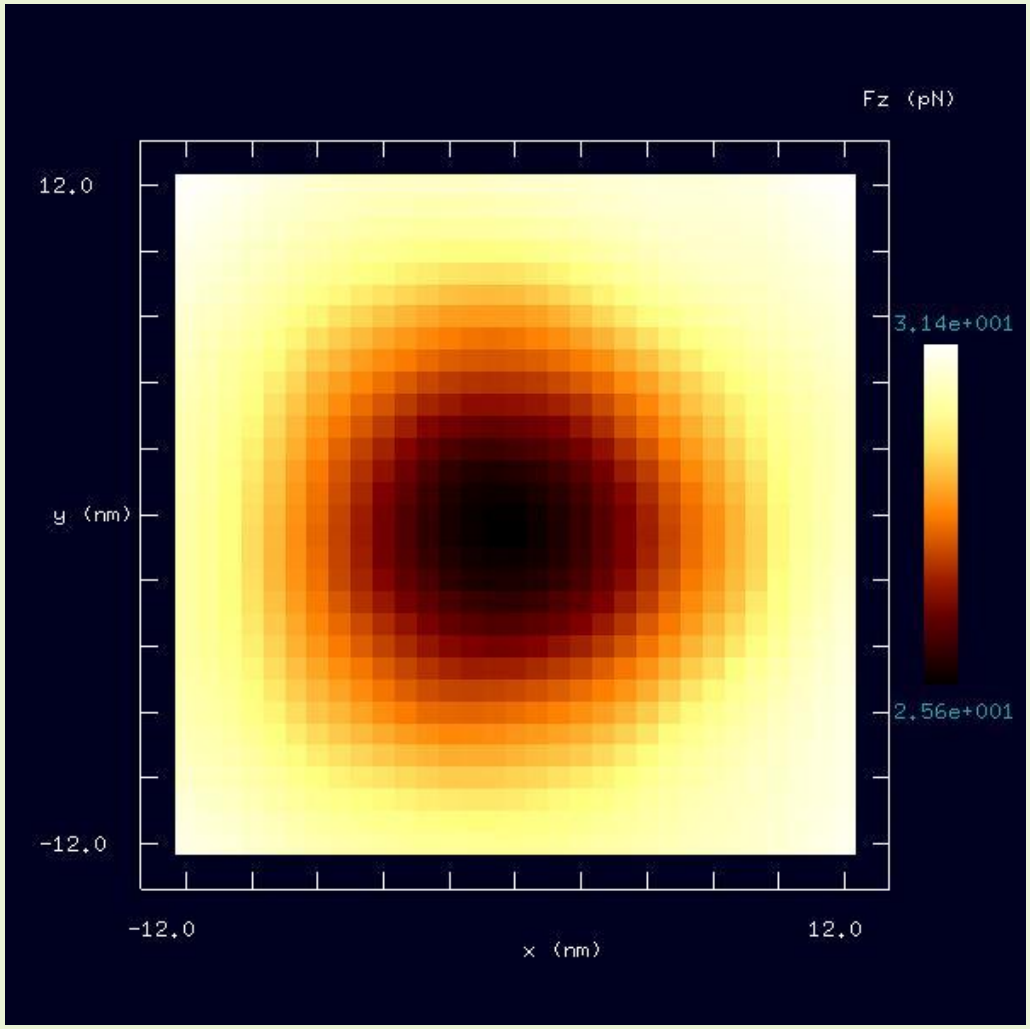
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

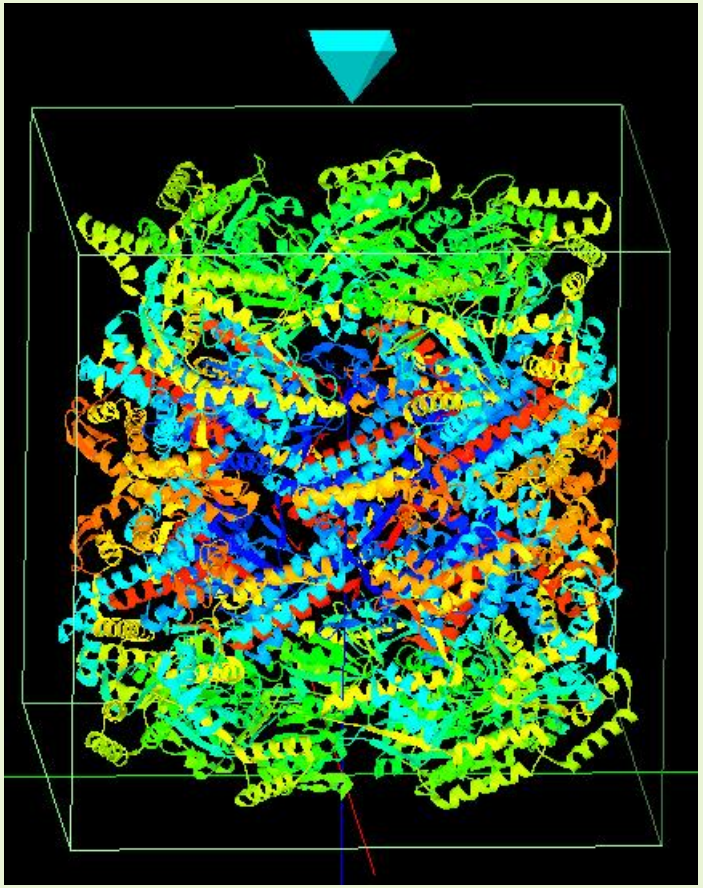
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



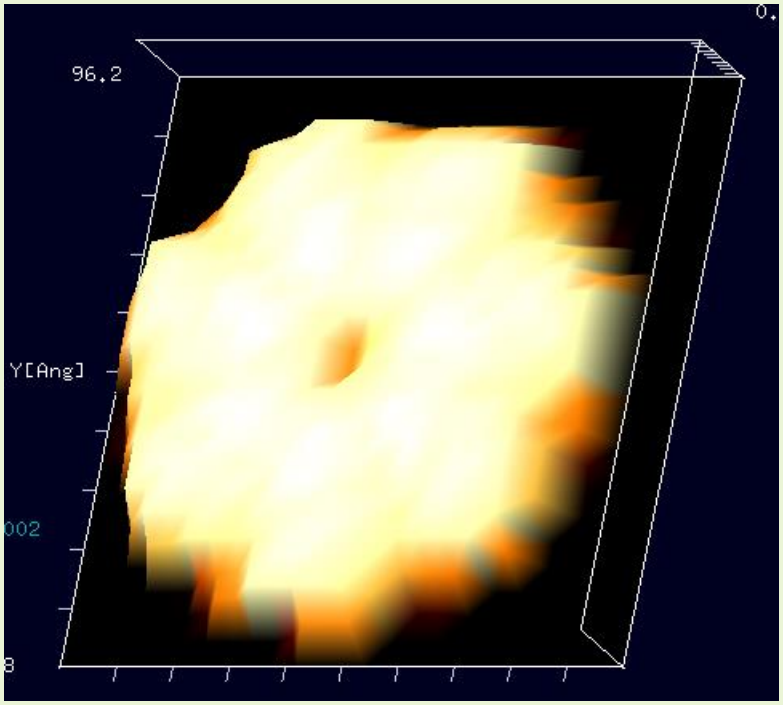
力の最大値：3.14E+1[pN]
力の最小値：2.56E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

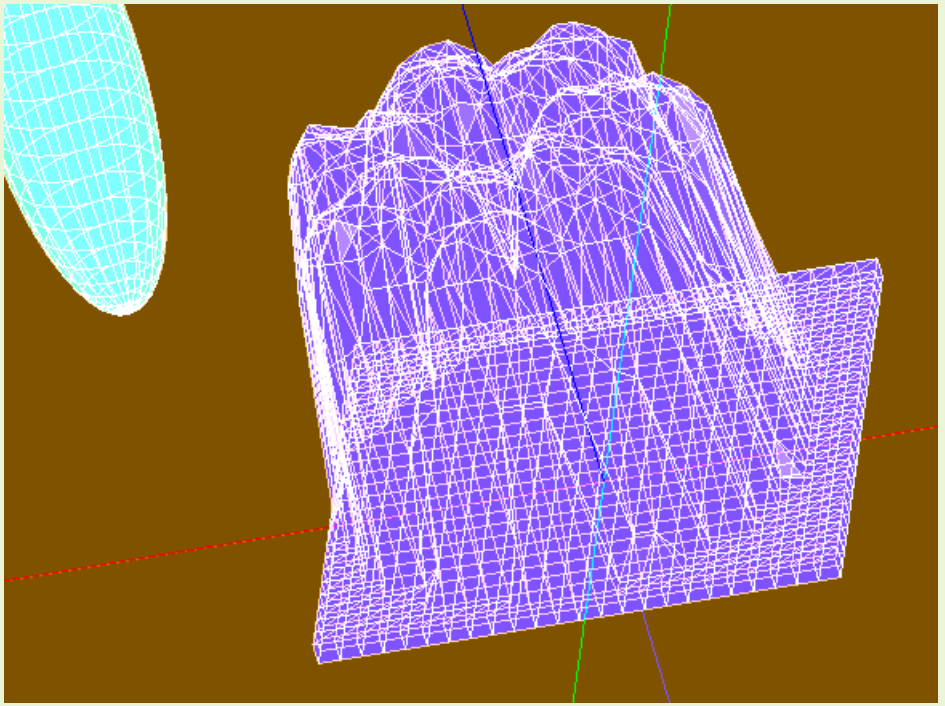
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、
0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

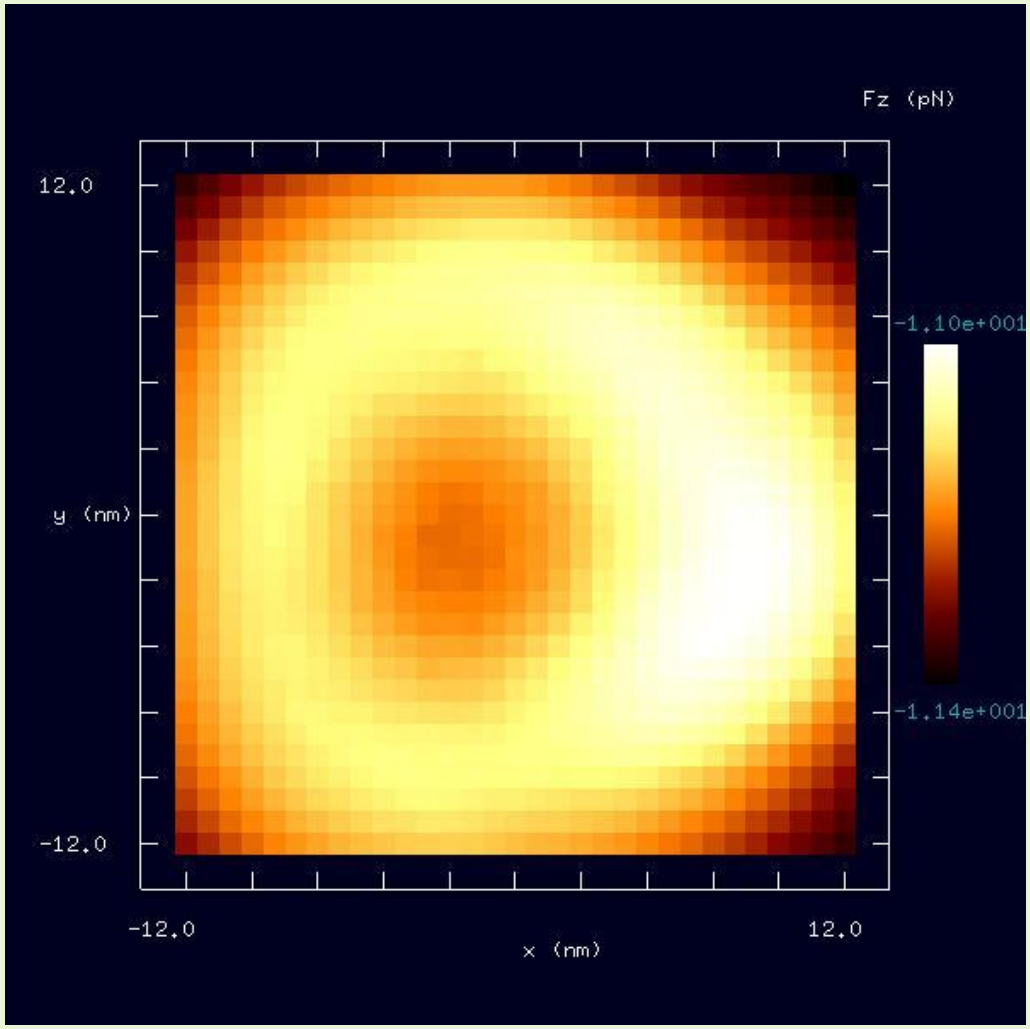
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

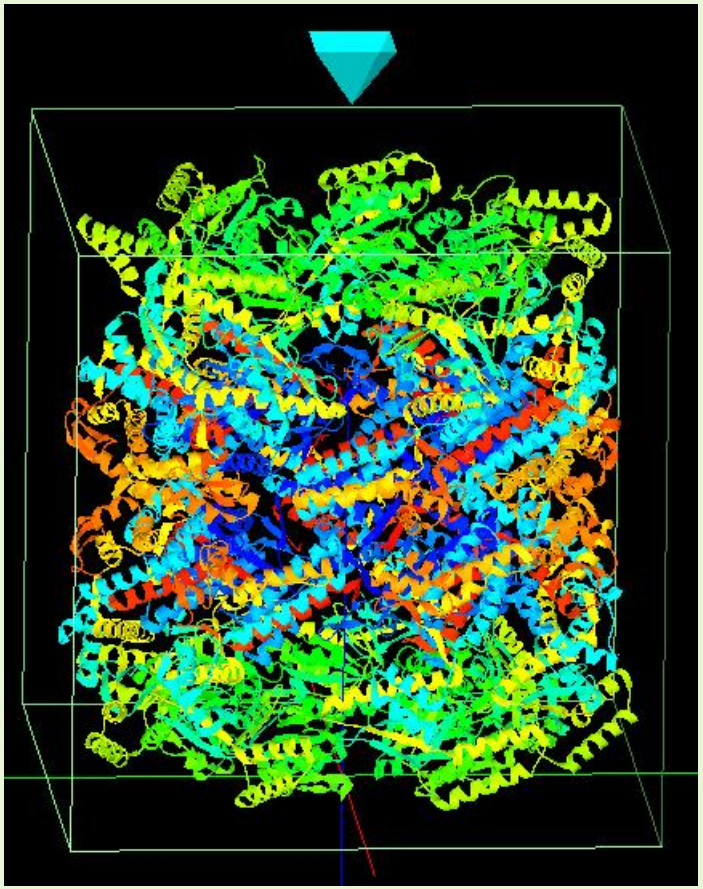
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



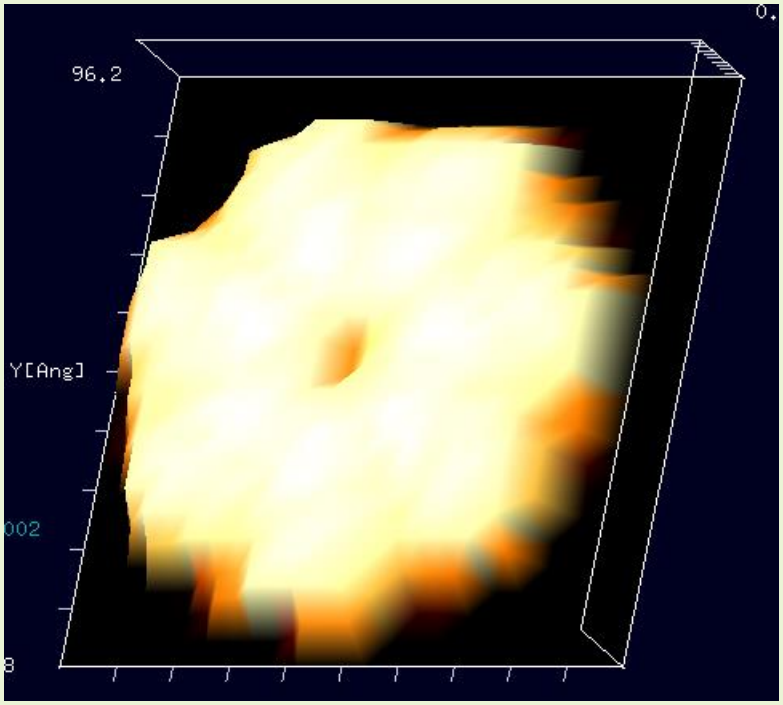
力の最大値:-1.10E+1[pN]
力の最小値:-1.14E+1[pN]

macroKPFM_DLVO

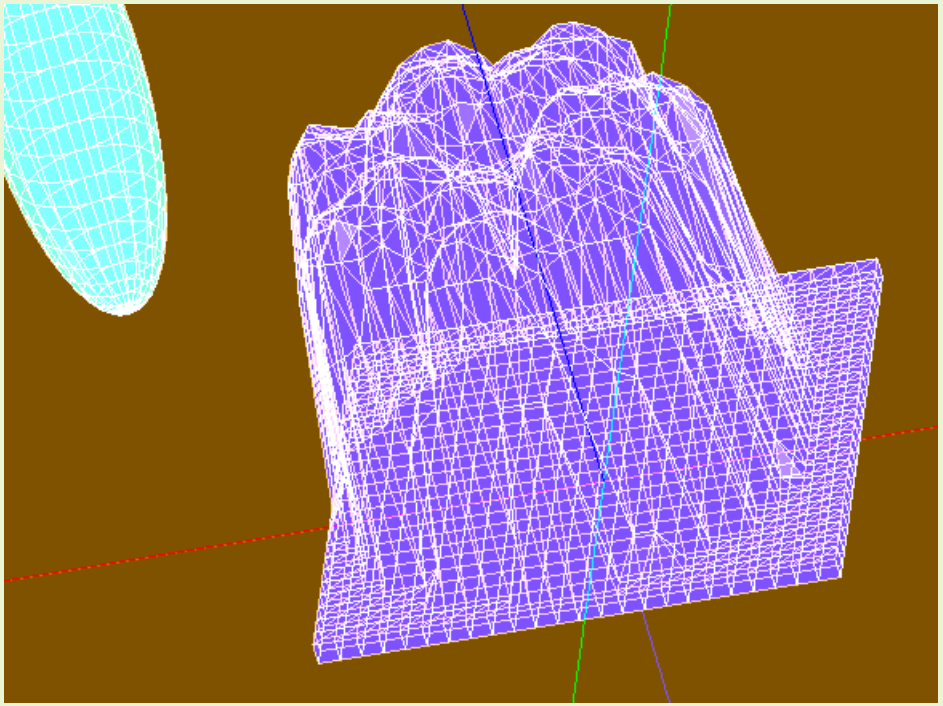
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

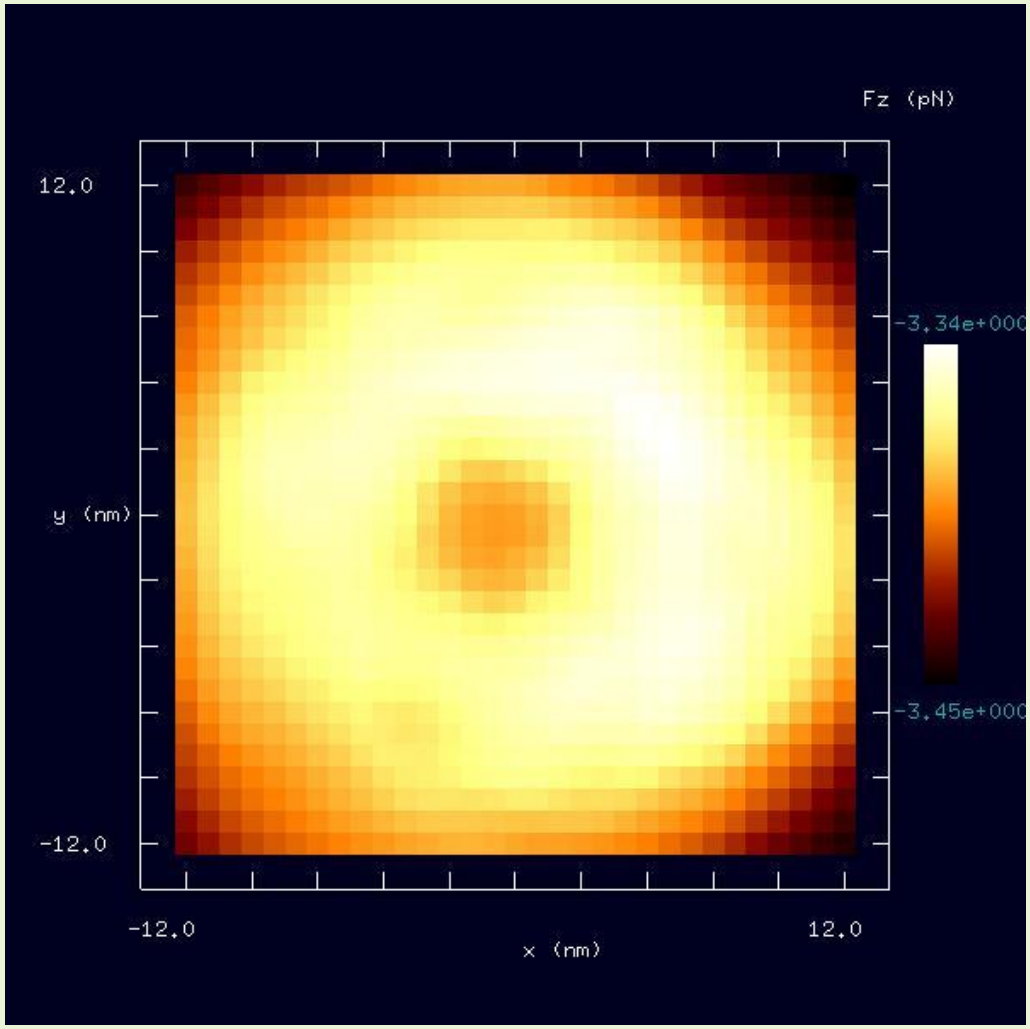
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

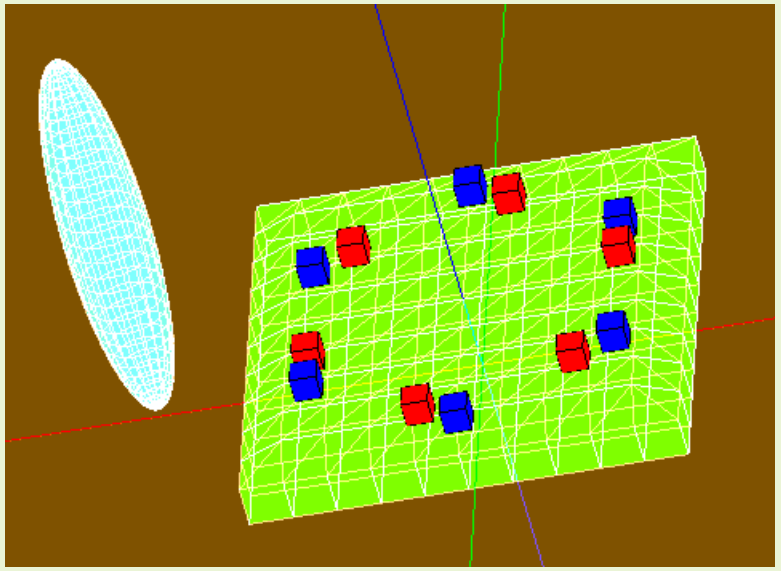
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値：-3.34E+0[pN]
力の最小値：-3.45E+0[pN]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

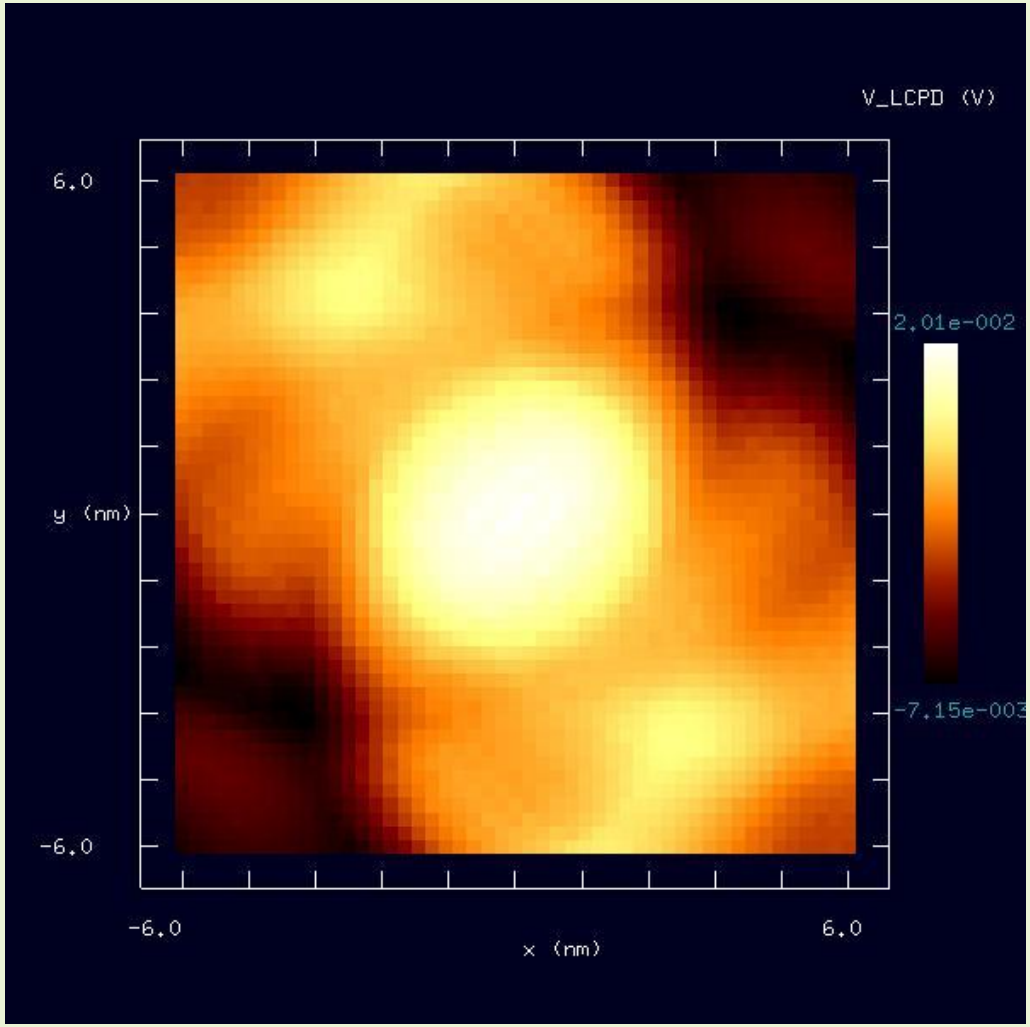
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

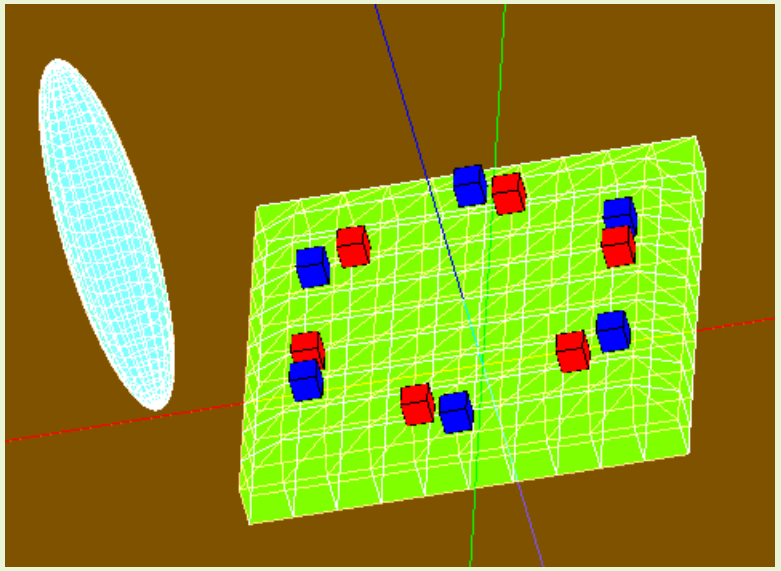
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:2.01E-2[V]
最小値:-7.15E-3[V]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

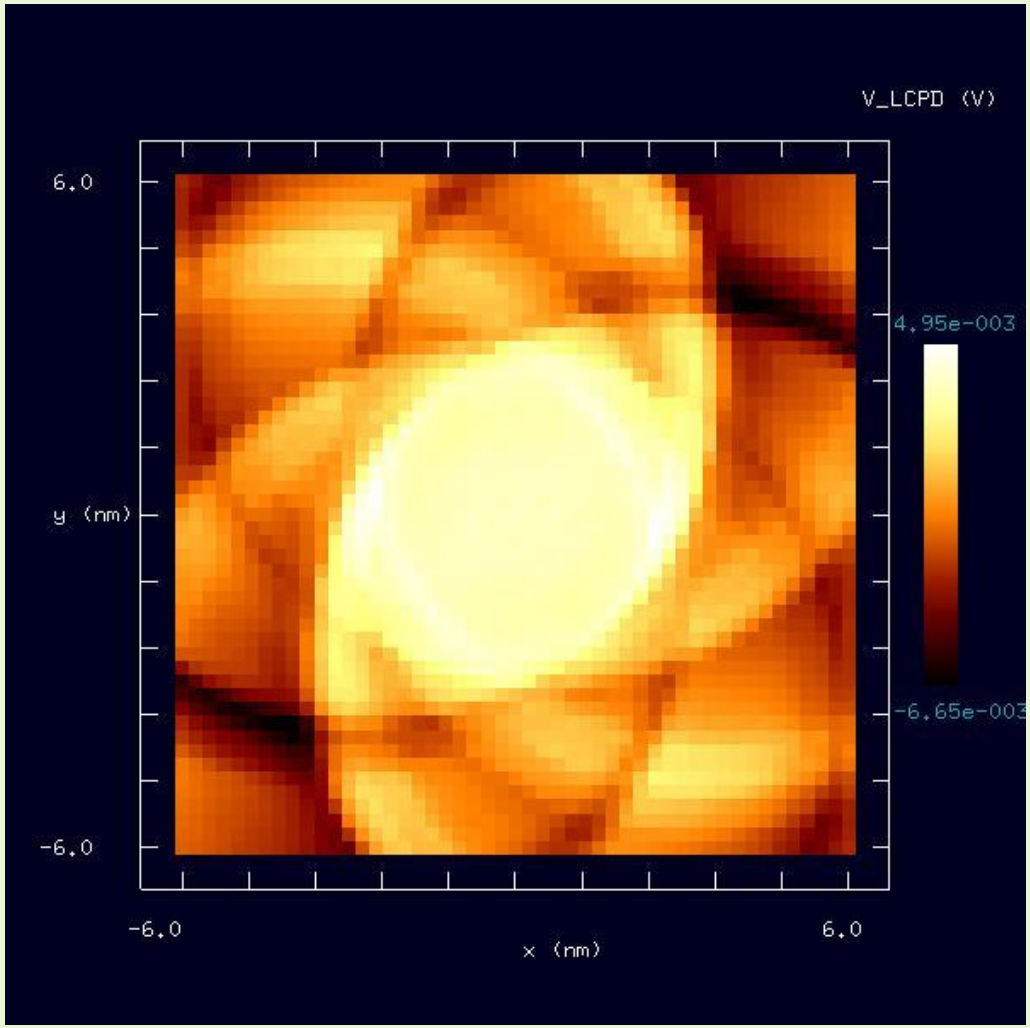
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

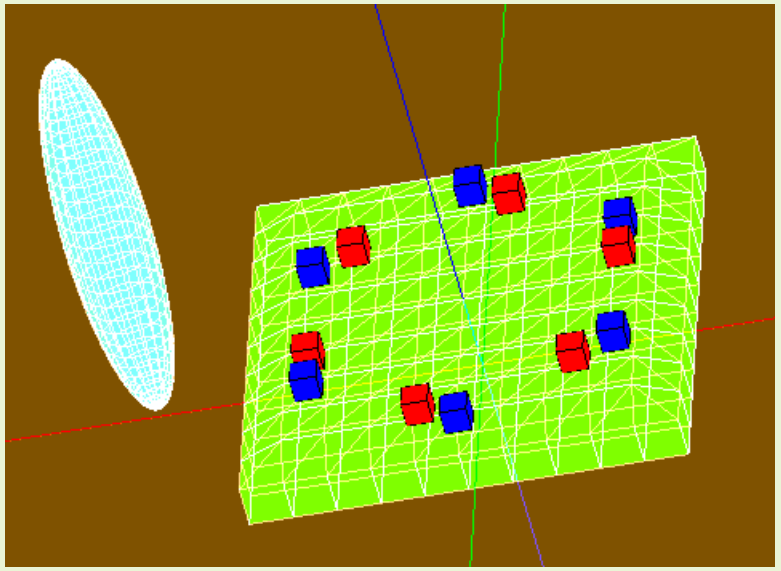
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:4.95E-3[V]
最小値:-6.65E-3[V]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

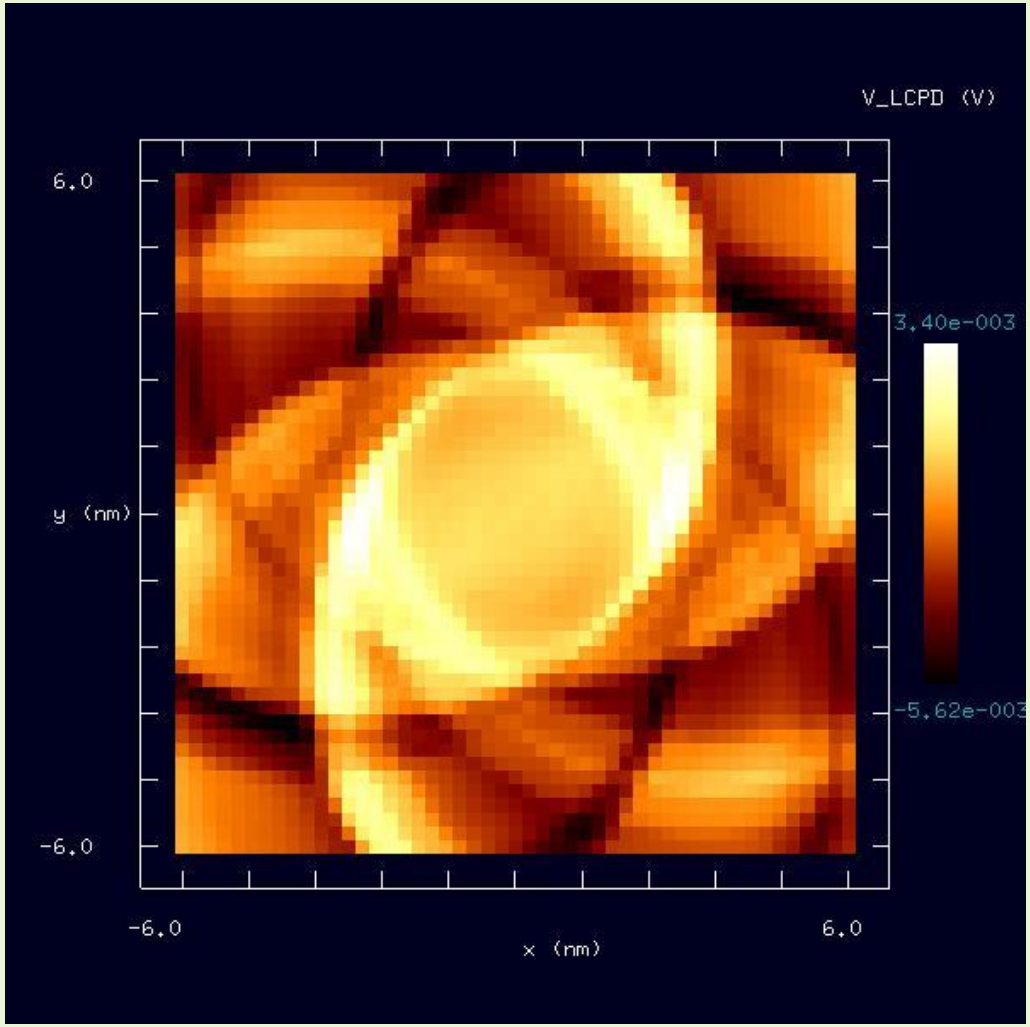
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

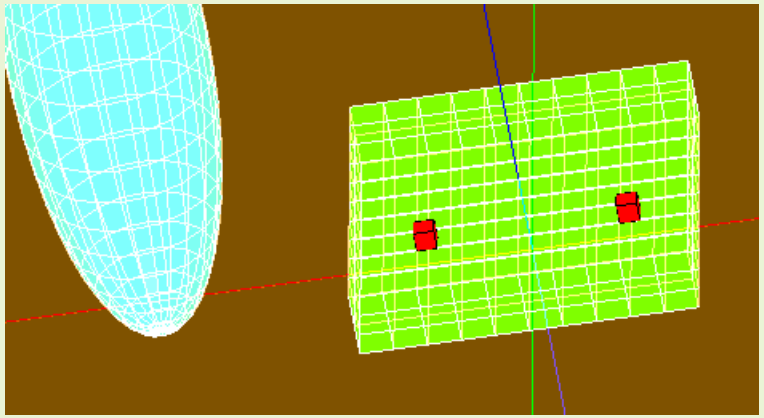
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:3.40E-3[V]
最小値:-5.62E-3[V]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板内部に2個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ2[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

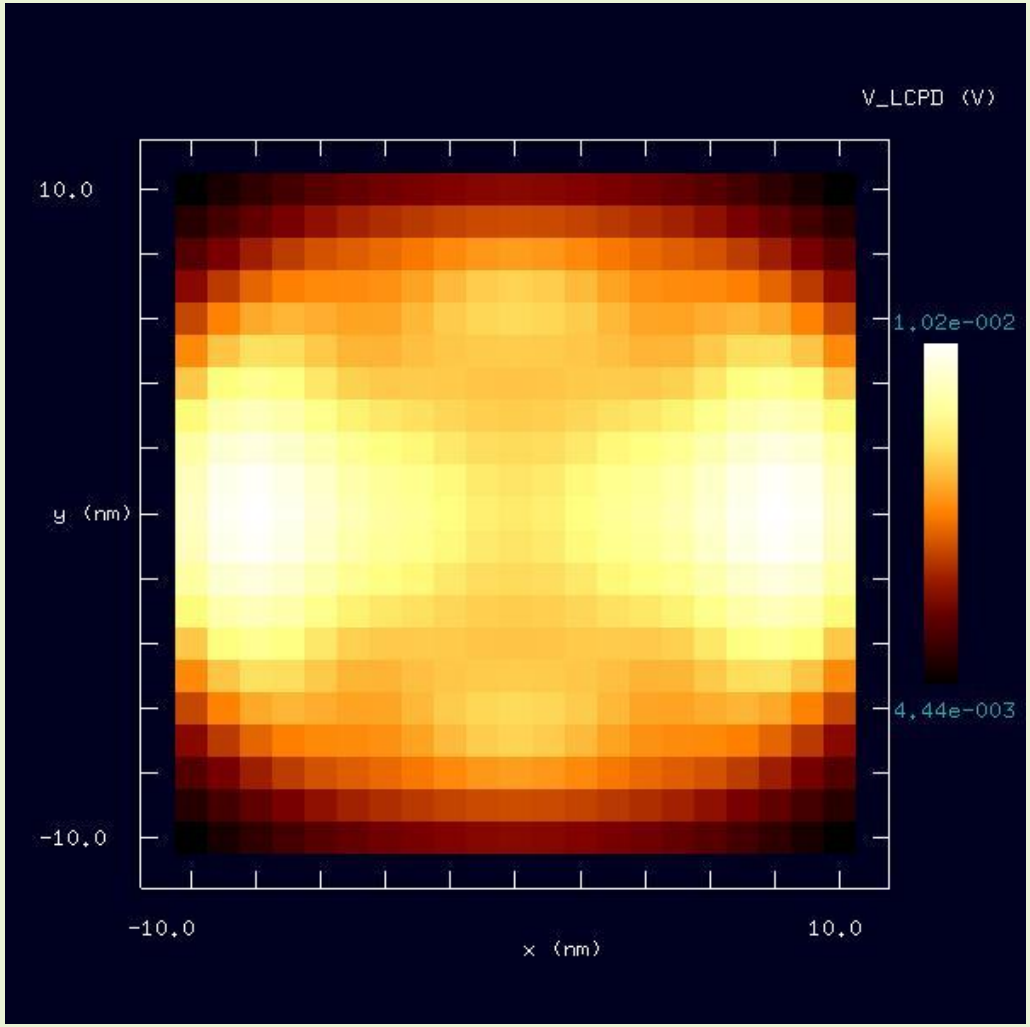
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.001[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：9.77[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|の電荷を2個、配置した

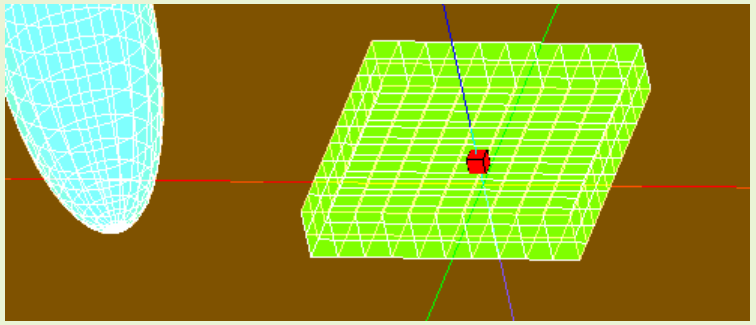
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:1.02E-2[V]
最小値:4.44E-3[V]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板内部に1個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ2[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

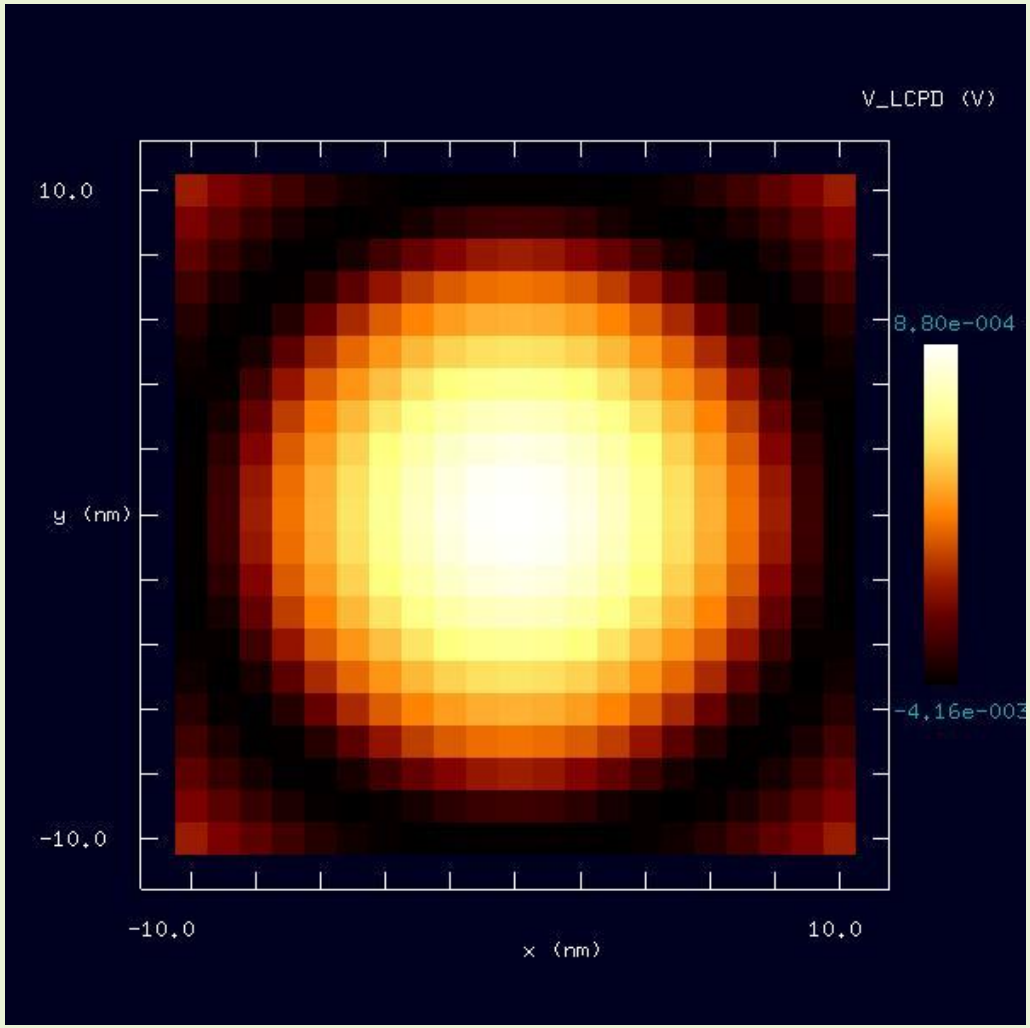
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|の電荷を1個、配置した

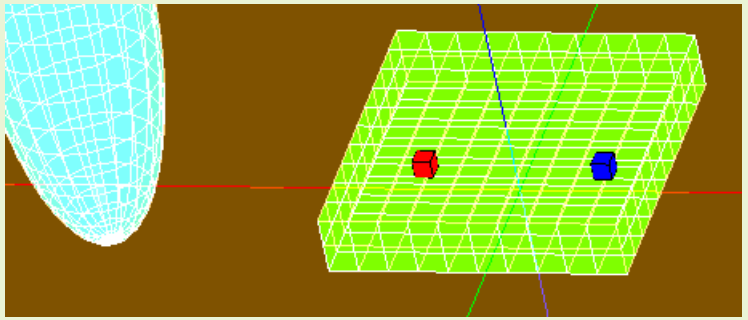
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:8.80E-4[V]
最小値:-4.16E-3[V]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板内部に正負の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ2[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

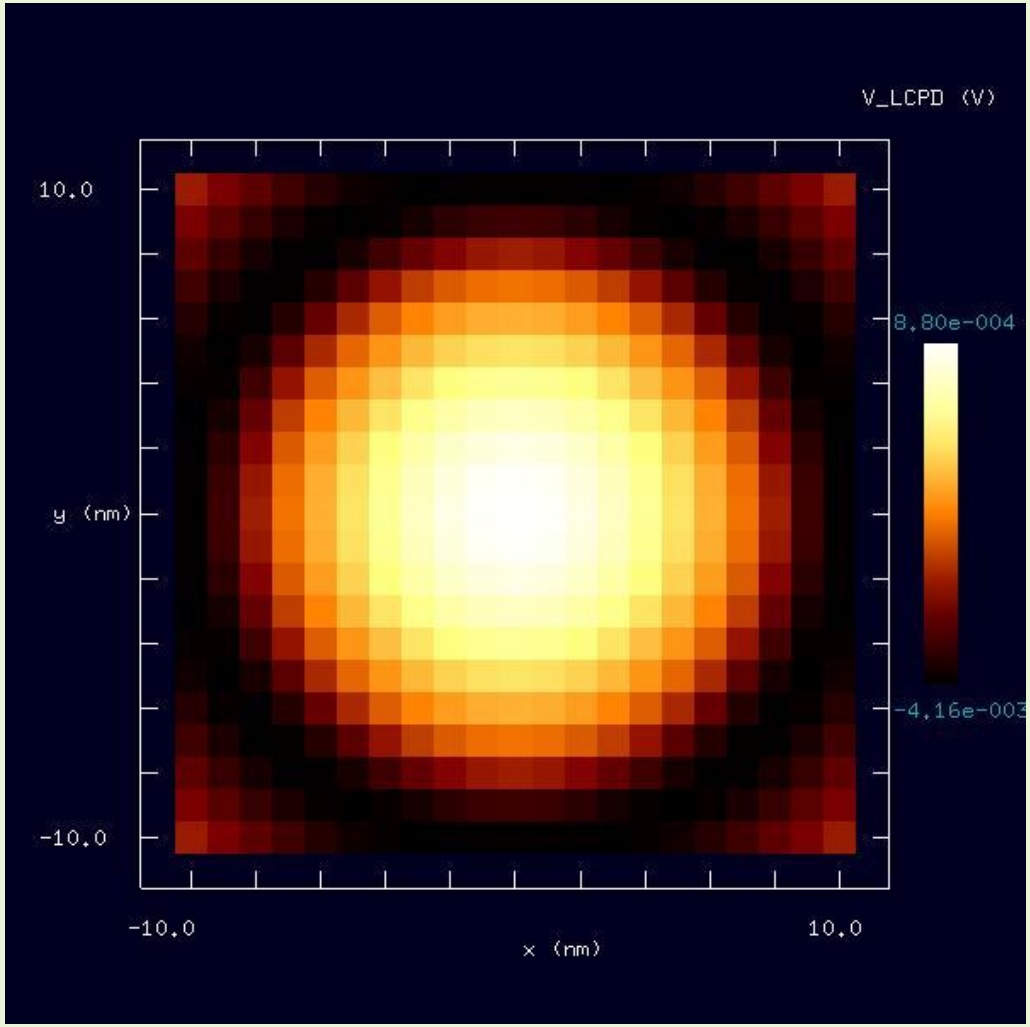
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.001[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：9.77[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|と-1.0|e|の正負の電荷を1個ずつ、配置した

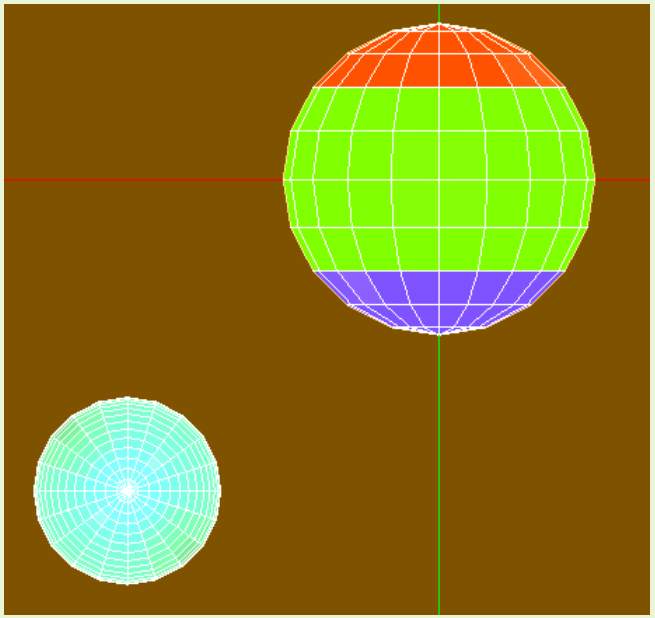
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:8.80E-4[V]
最小値:-4.16E-3[V]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素球体上に正負の電荷を分布させた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：直径10[nm]の酸化ケイ素の球体

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

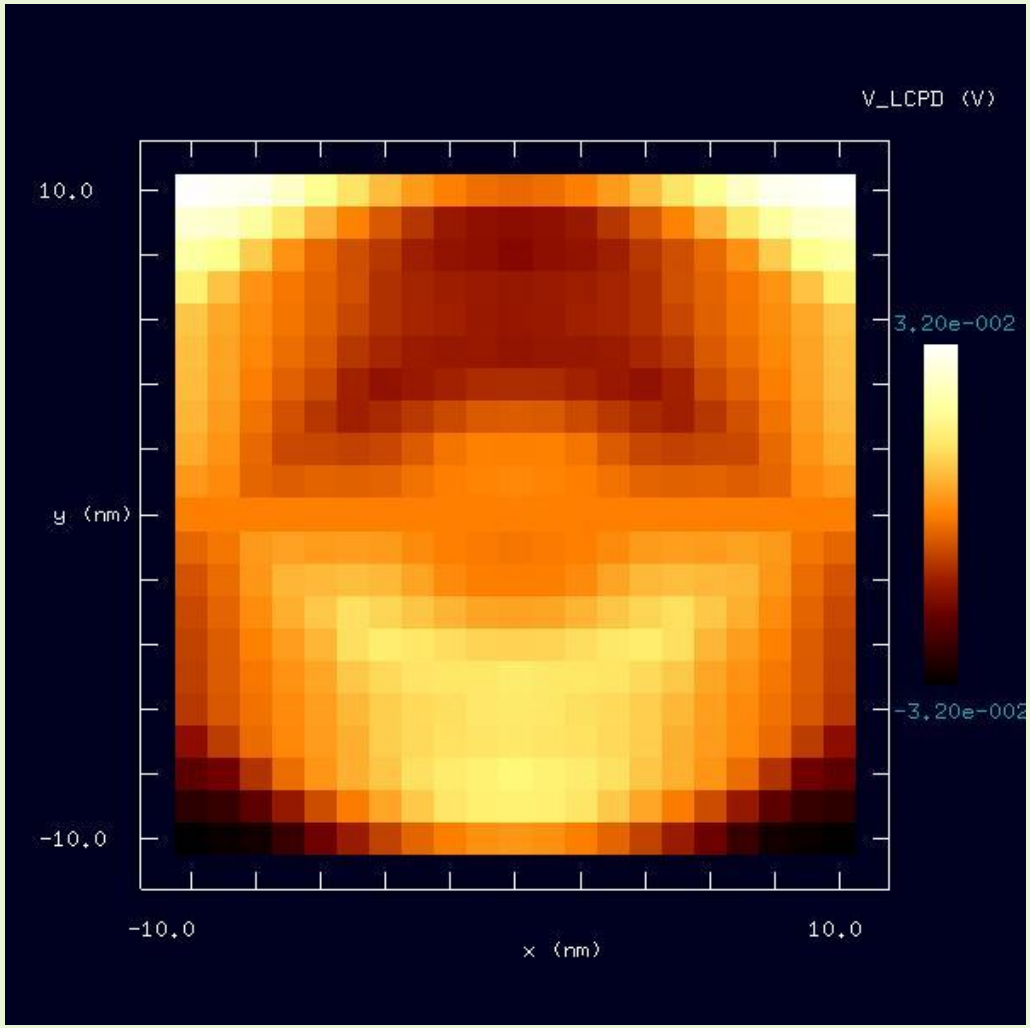
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料球体表面の、y軸方向の正の側に
3.0E-1[C/m^2]、負の側に-3.0E-1[C/m^2]
の 電荷を分布させた

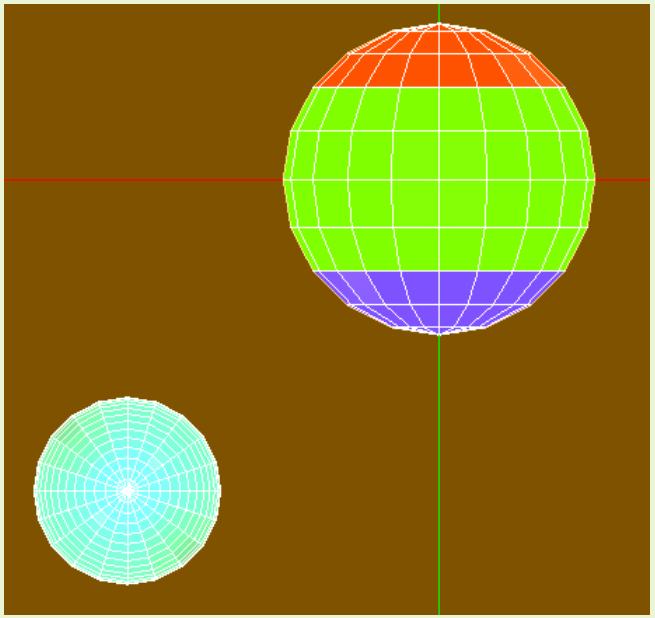
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:3.20E-2[V]
最小値:-3.20E-2[V]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素球体上に正負の電荷を分布させた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：直径10[nm]の酸化ケイ素の球体

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

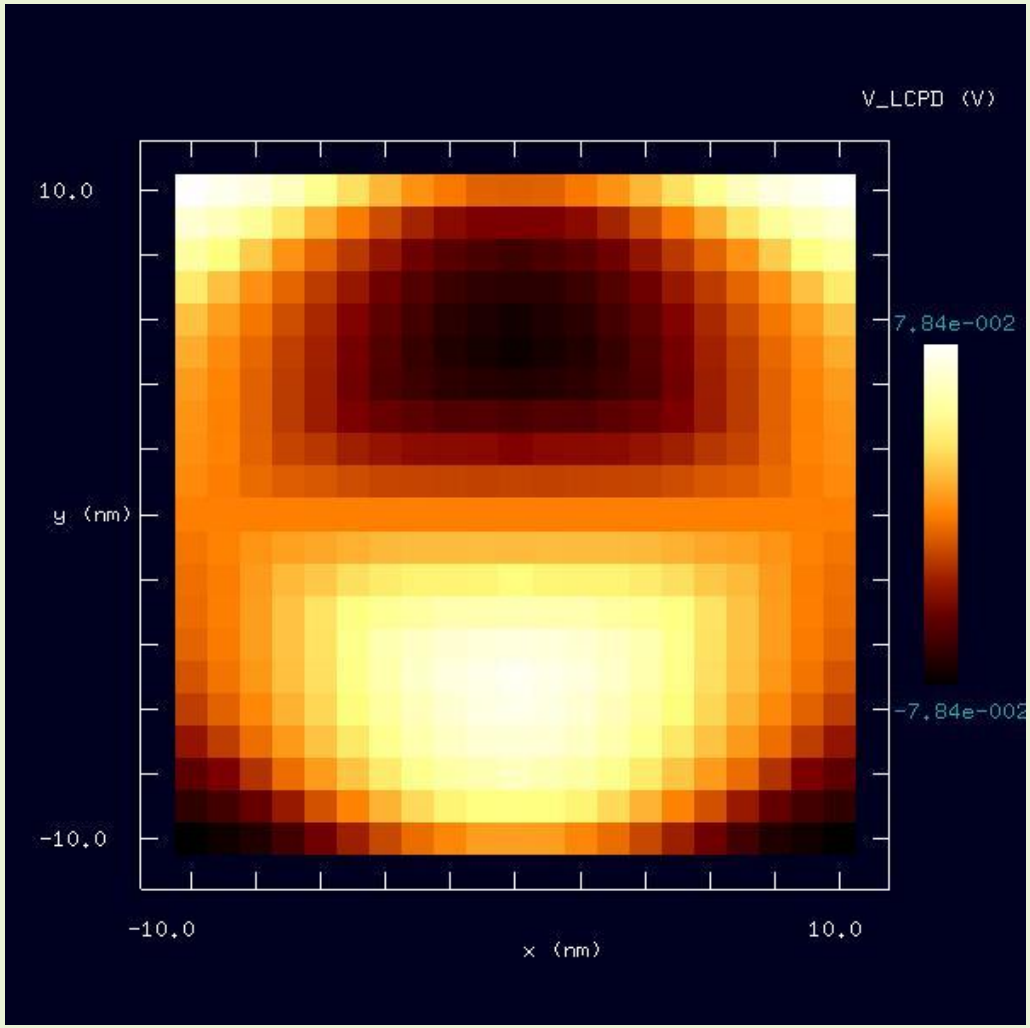
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料球体表面の、y軸方向の正の側に
3.0E-1[C/m^2]、負の側に-3.0E-1[C/m^2]
の 電荷を分布させた

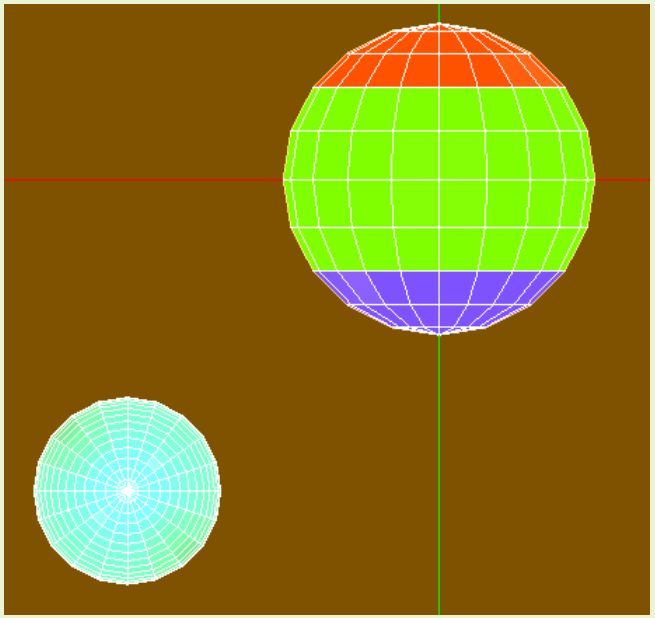
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:7.84E-2[V]
最小値:-7.84E-2[V]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素球体上に正負の電荷を分布させた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：直径10[nm]の酸化ケイ素の球体

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

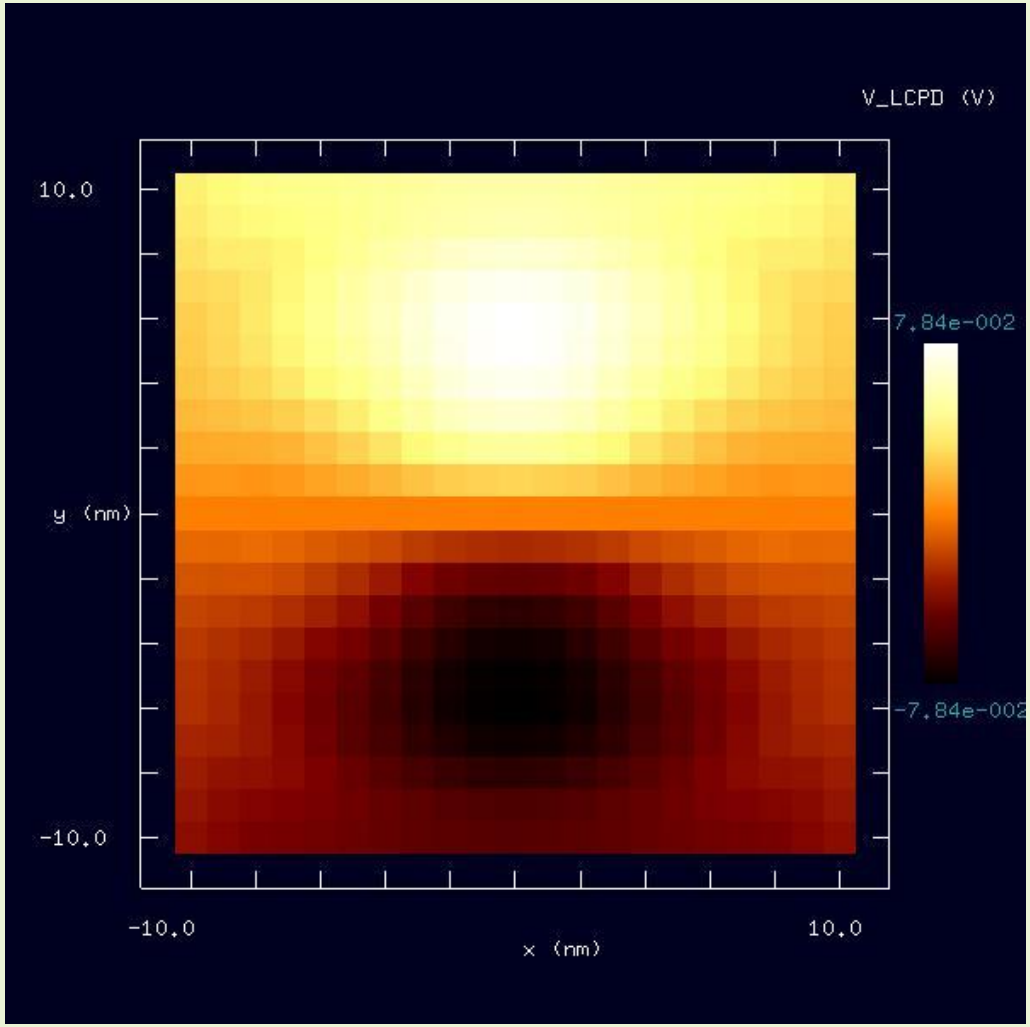
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.001[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：9.77[nm]

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料球体表面の、y軸方向の正の側に
3.0E-1[C/m^2]、負の側に-3.0E-1[C/m^2]
の 電荷を分布させた

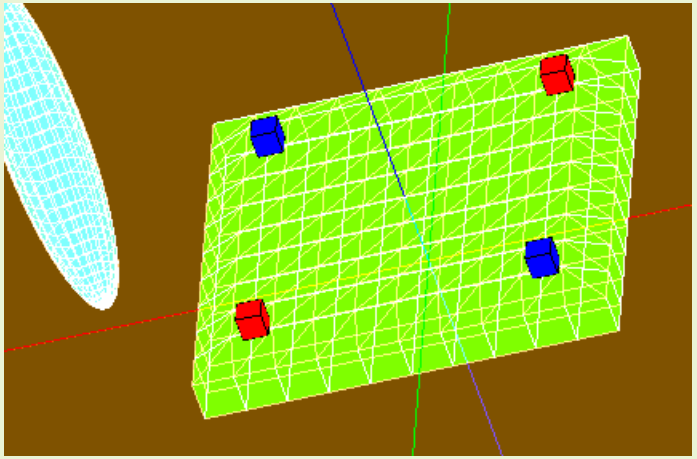
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:7.84E-2[V]
最小値:-7.84E-2[V]

macroKPFM_DLVO

酸化ケイ素基板上に正負の電荷4個を置いた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

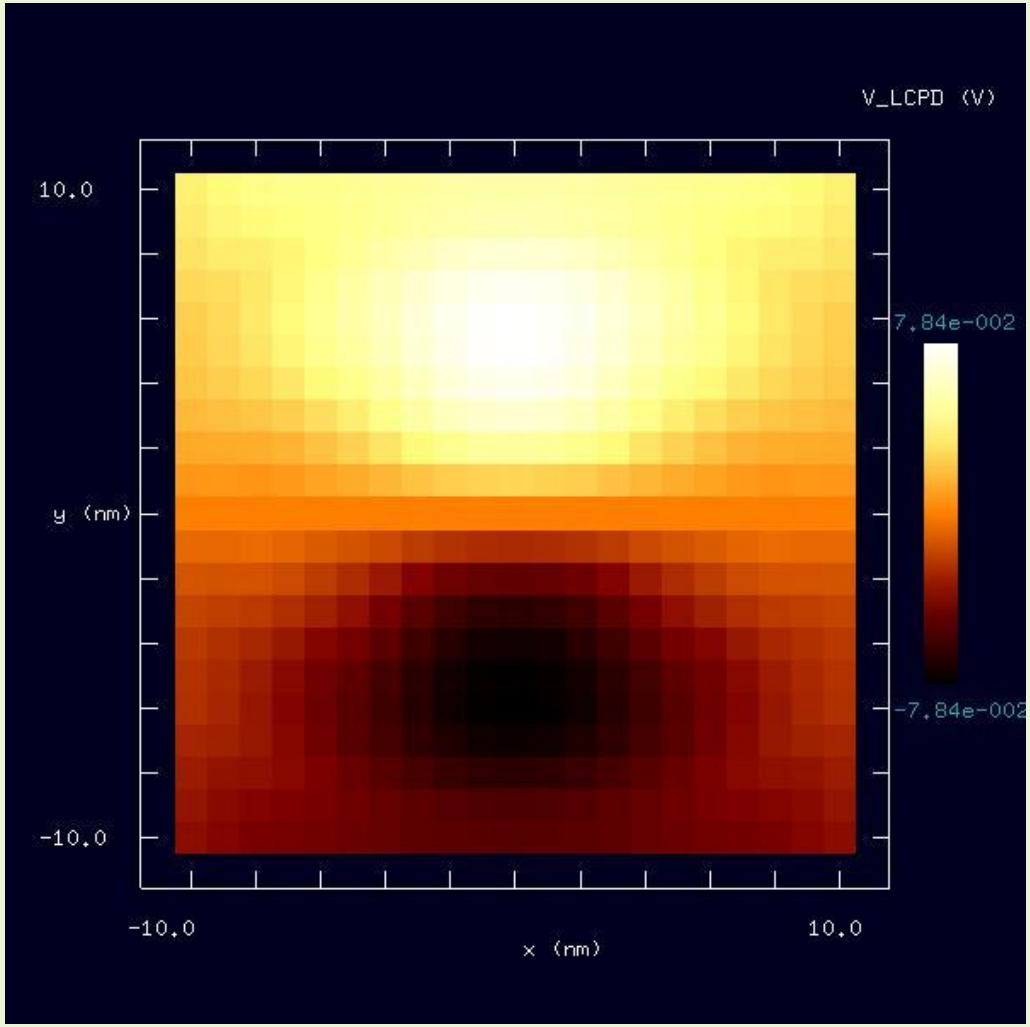
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を2個ずつ、配置した

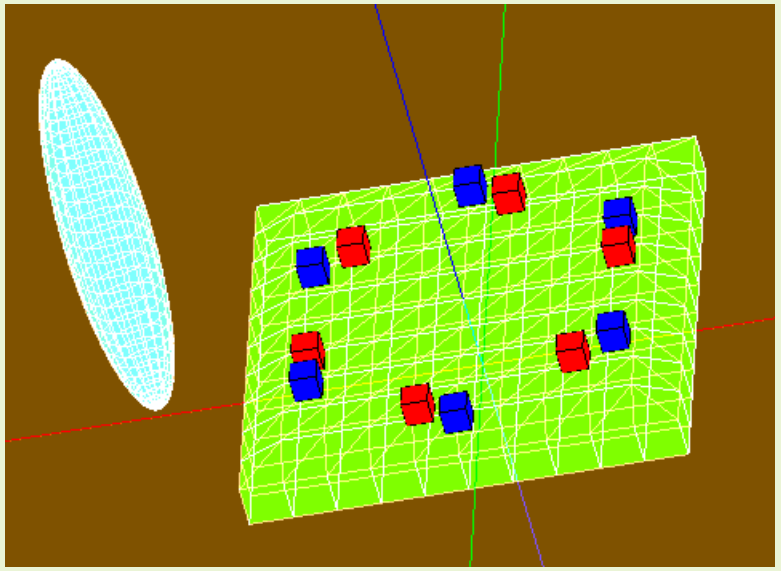
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:7.84E-2[V]
最小値:-7.84E-2[V]

macroKPFM_DLVO

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

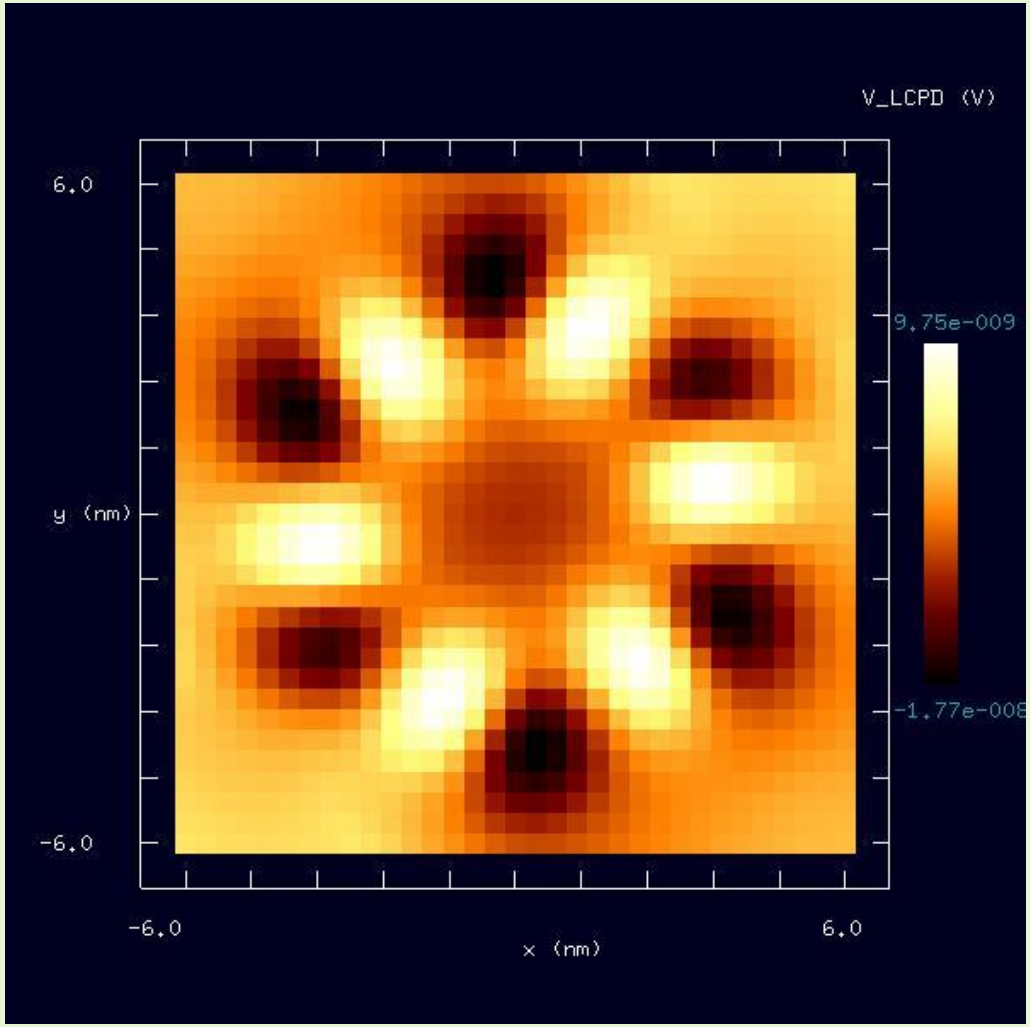
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

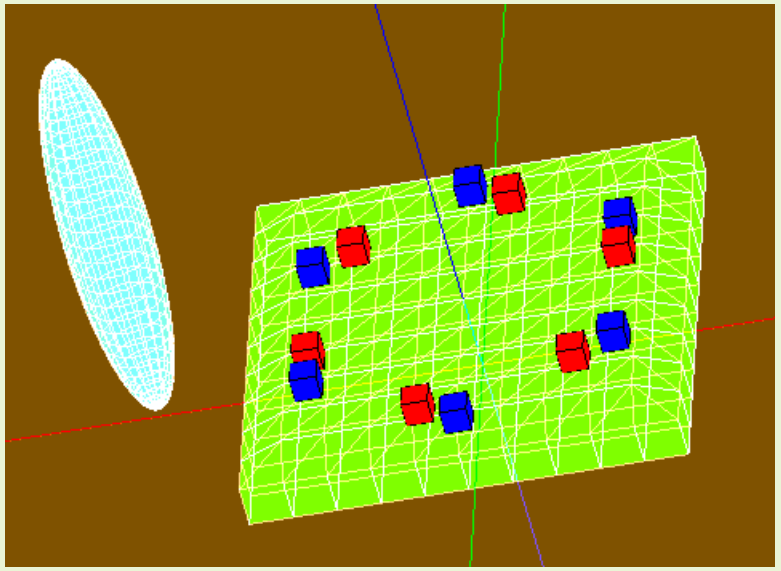
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:9.75E-9[V]
最小値:-1.77E-8[V]

macroKPFM_DLVO

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

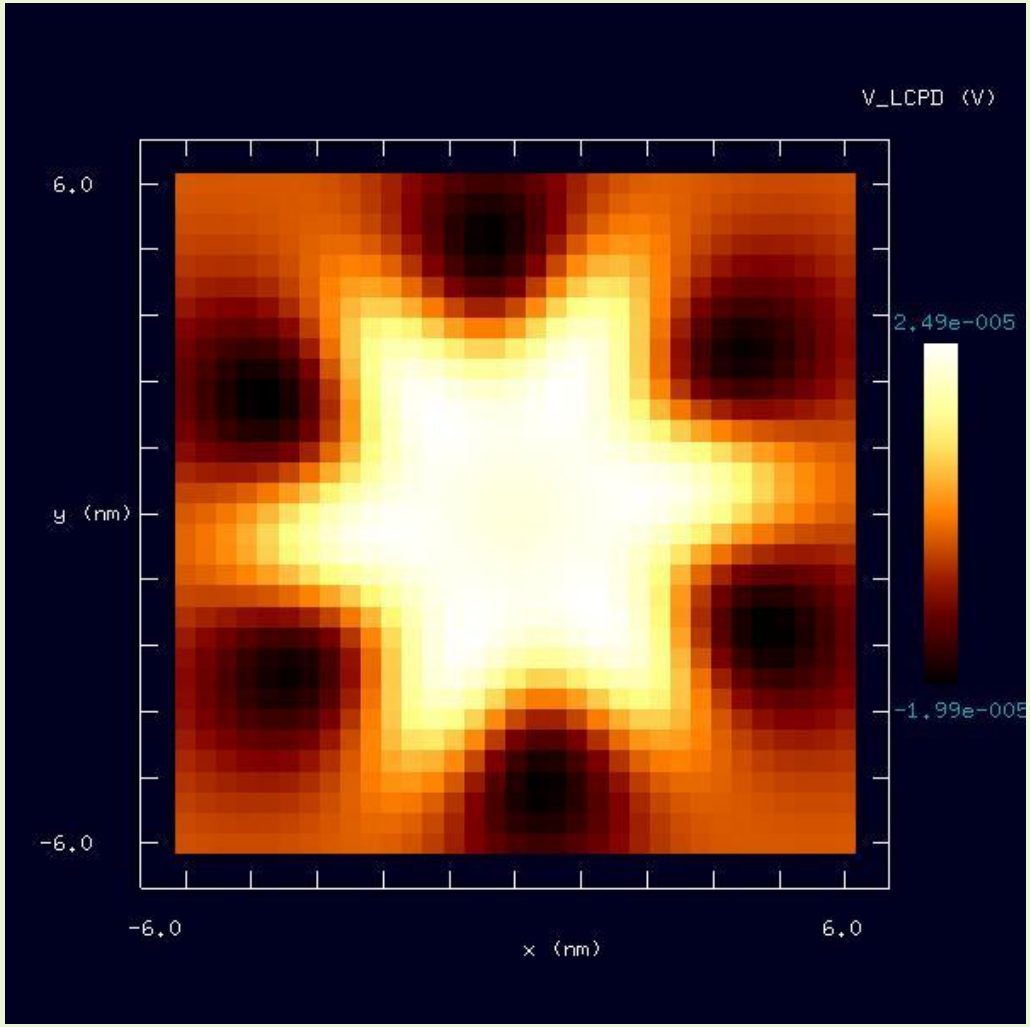
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

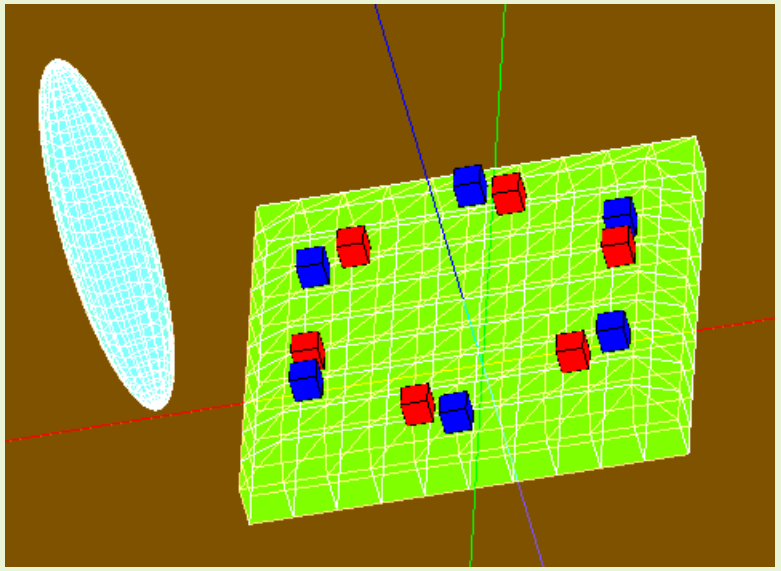
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:2.49E-5[V]
最小値:-1.99E-5[V]

macroKPFM_DLVO

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

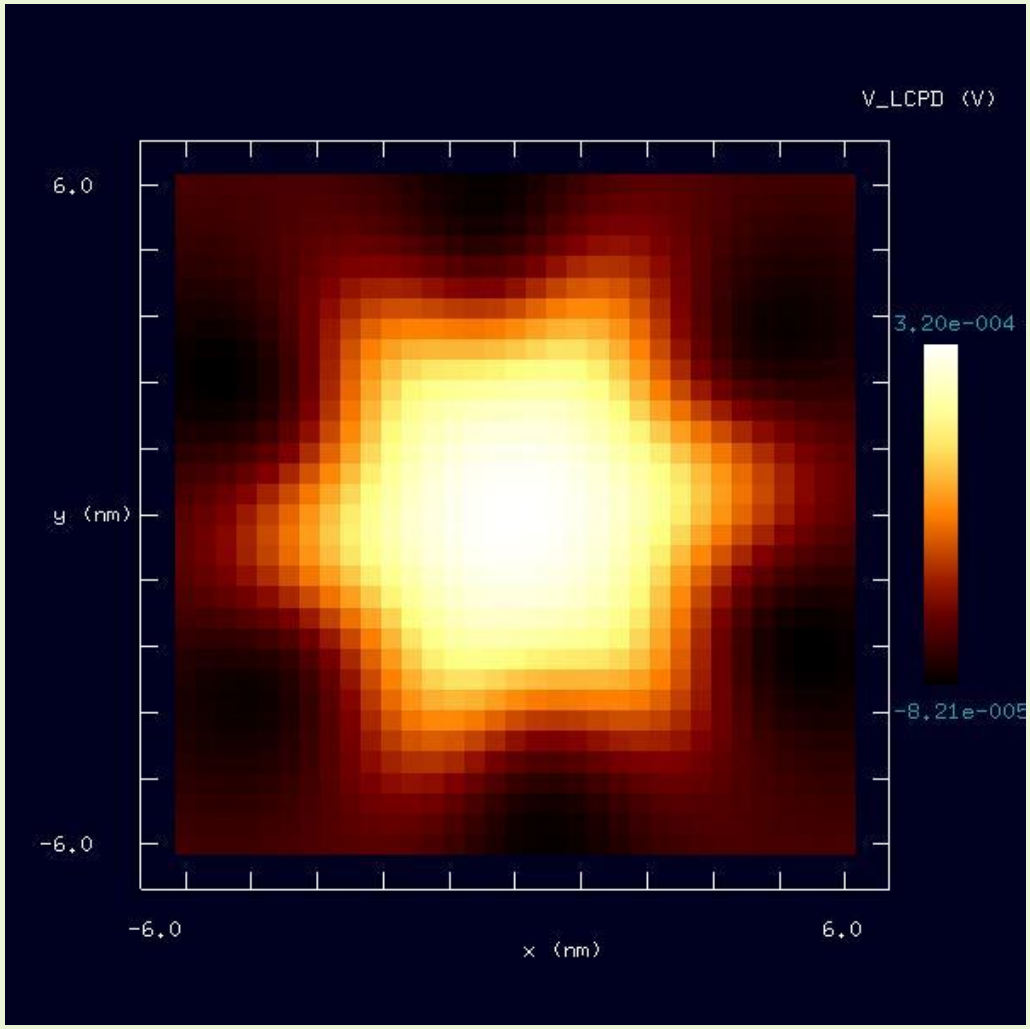
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

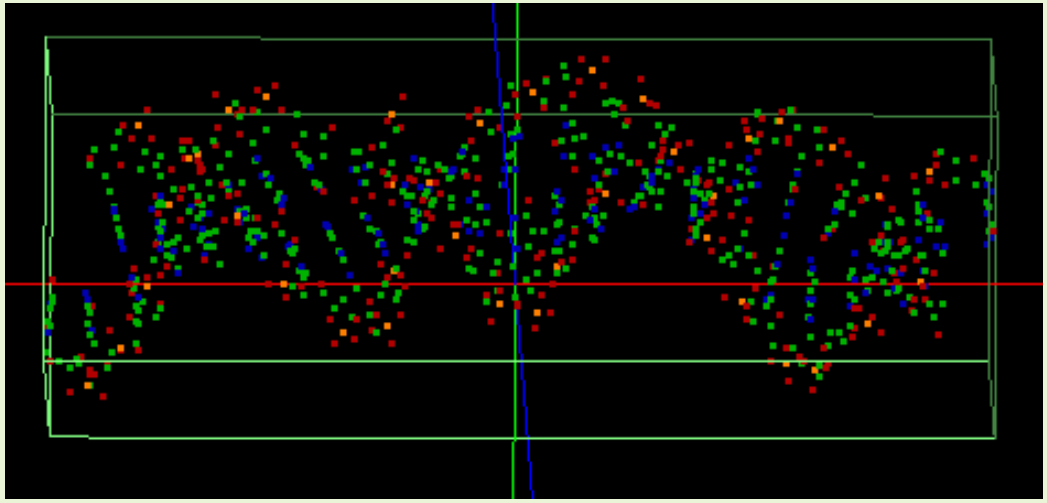
LCPD(局所接触電位差)像



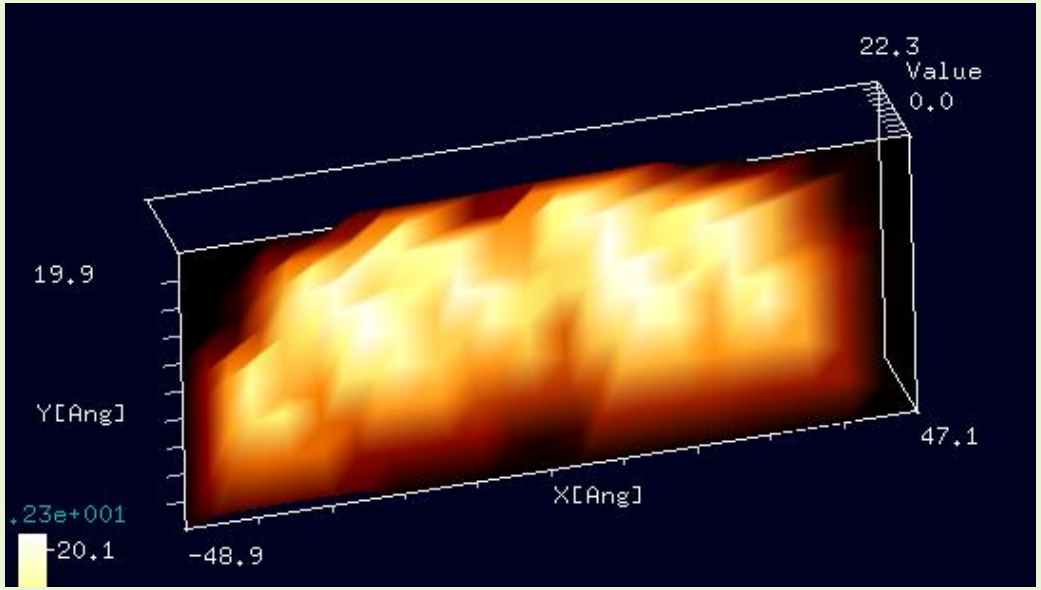
最大値:3.20E-4[V]
最小値:-8.21E-5[V]

macroKPFM_DLVO

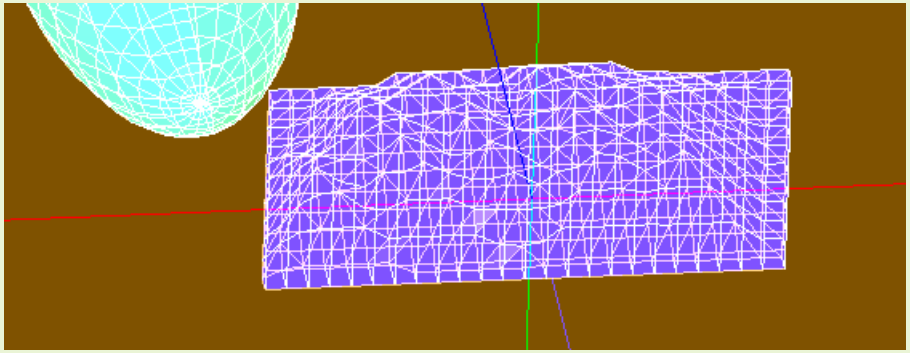
DNA分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



DNAの分子構造図



DNA分子に対して、0.4[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅9.6[nm]、深さ4[nm]、高さ2.63[nm]のDNA分子

試料のメッシュ幅は0.4[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：4.87[nm]

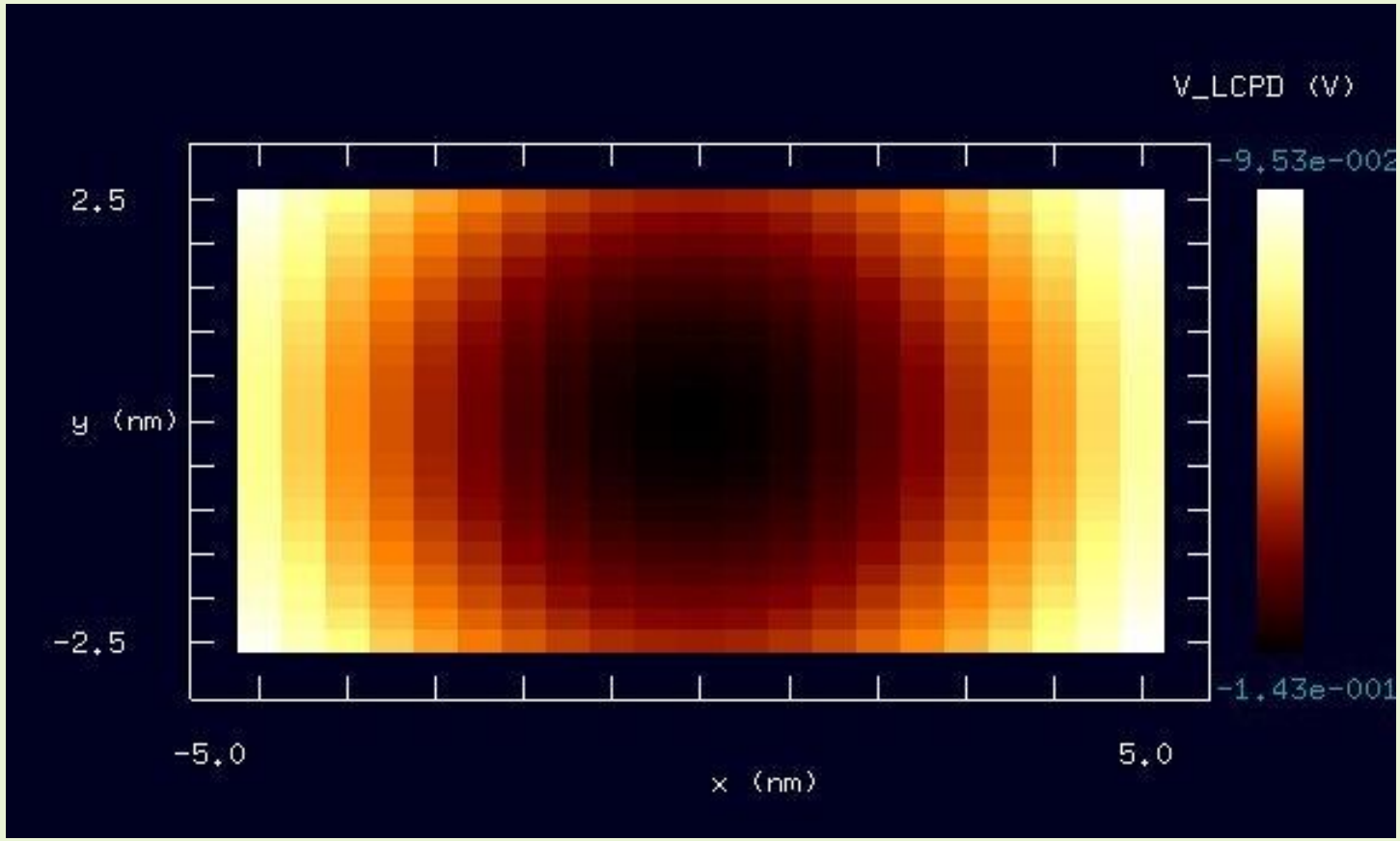
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-3.0E-1[C/m^2]の電荷を分布させる

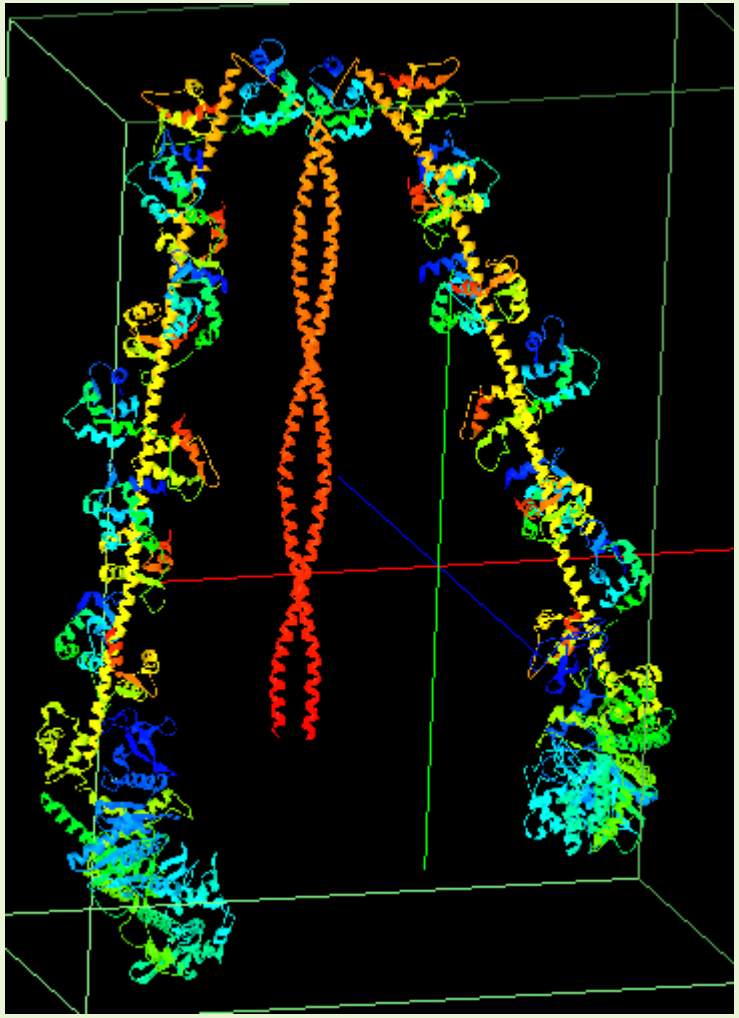
LCPD(局所接触電位差)像



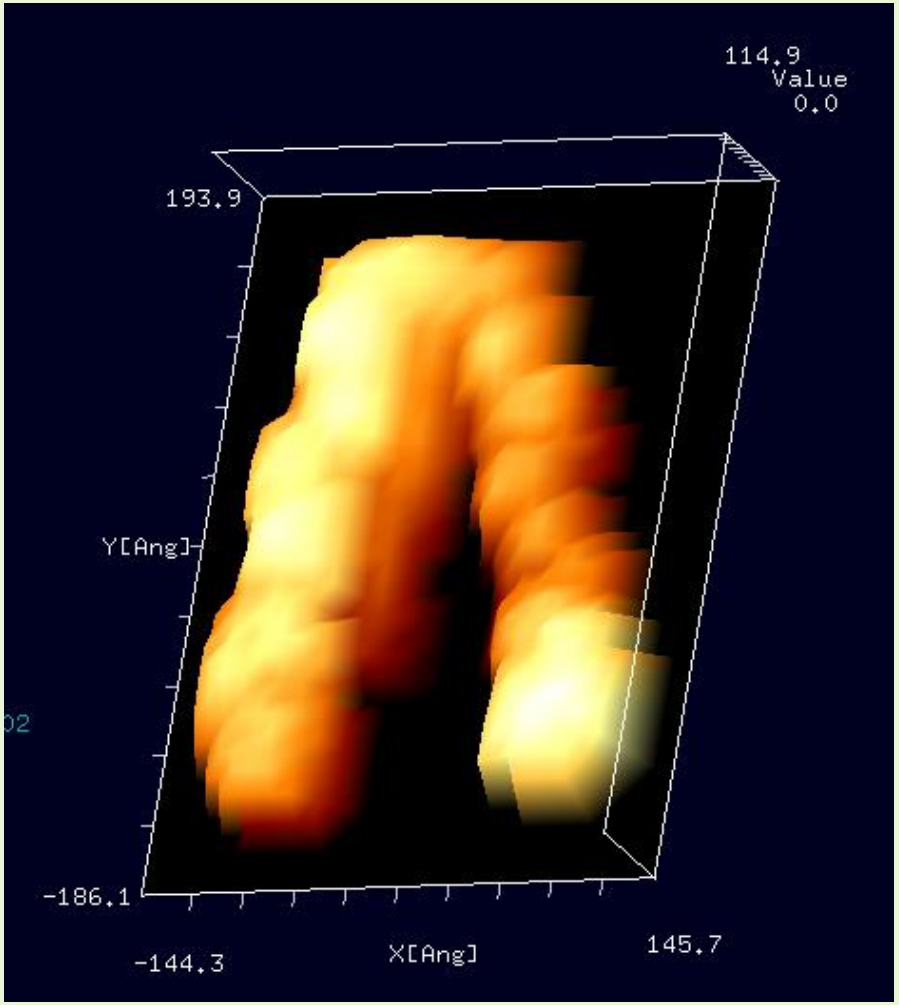
最大値:-9.53E-2[V]
最小値:-1.43E-1[V]

macroKPFM_DLVO

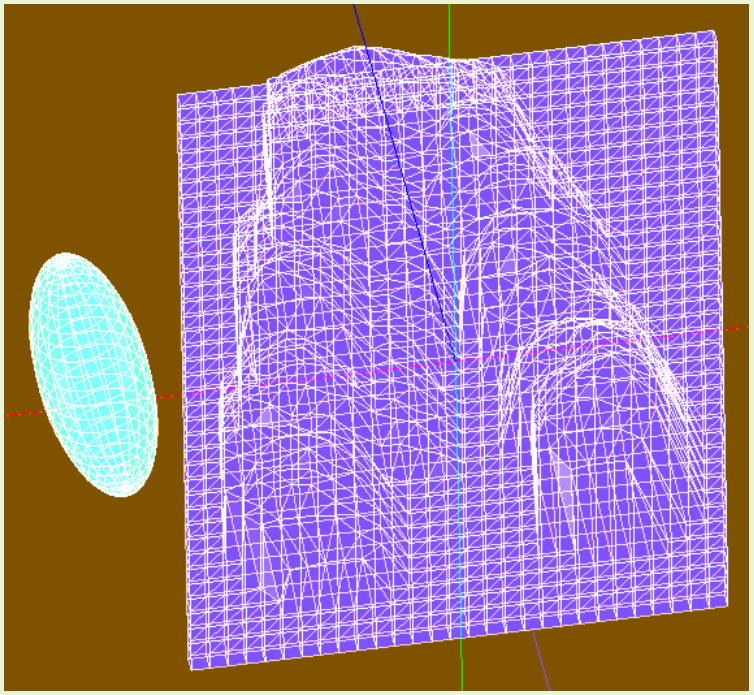
ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



DNAの分子構造図



DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]のミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

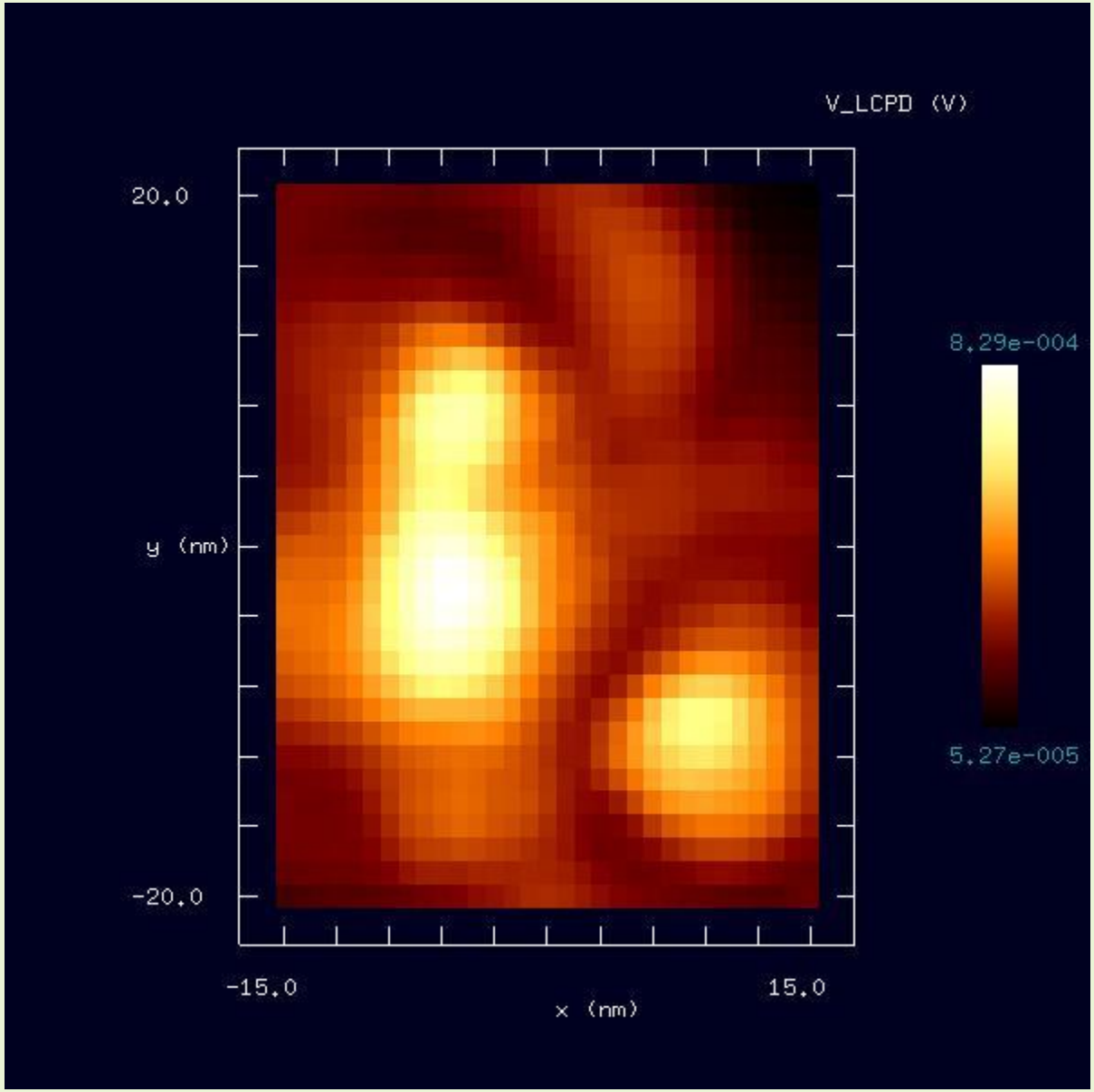
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

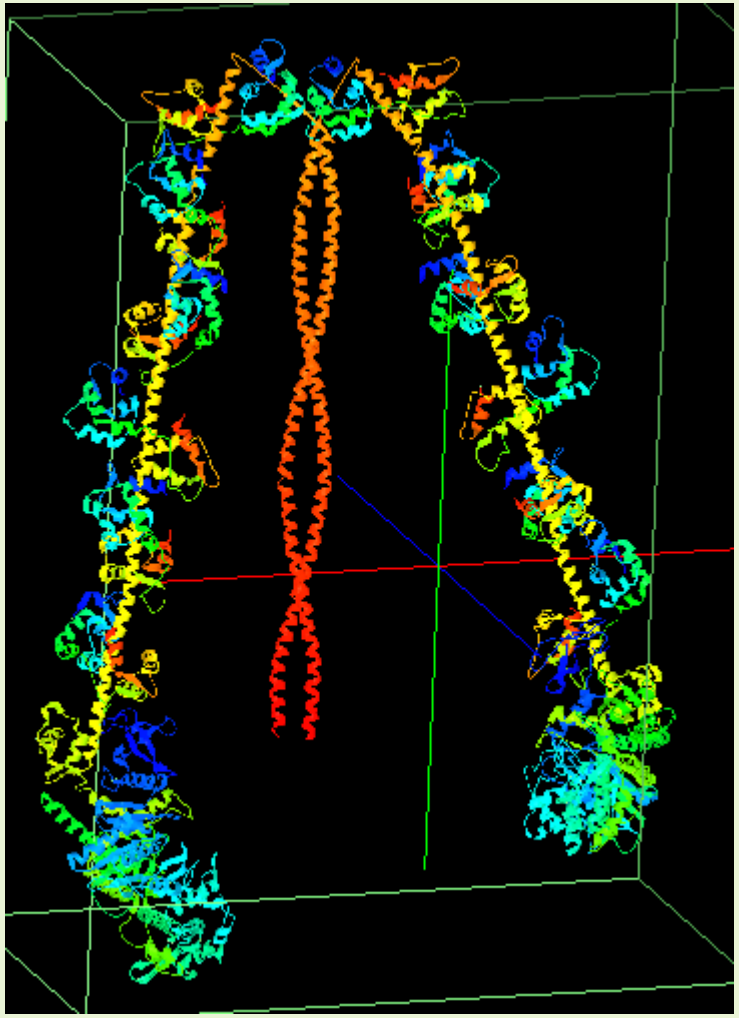
LCPD(局所接触電位差)像



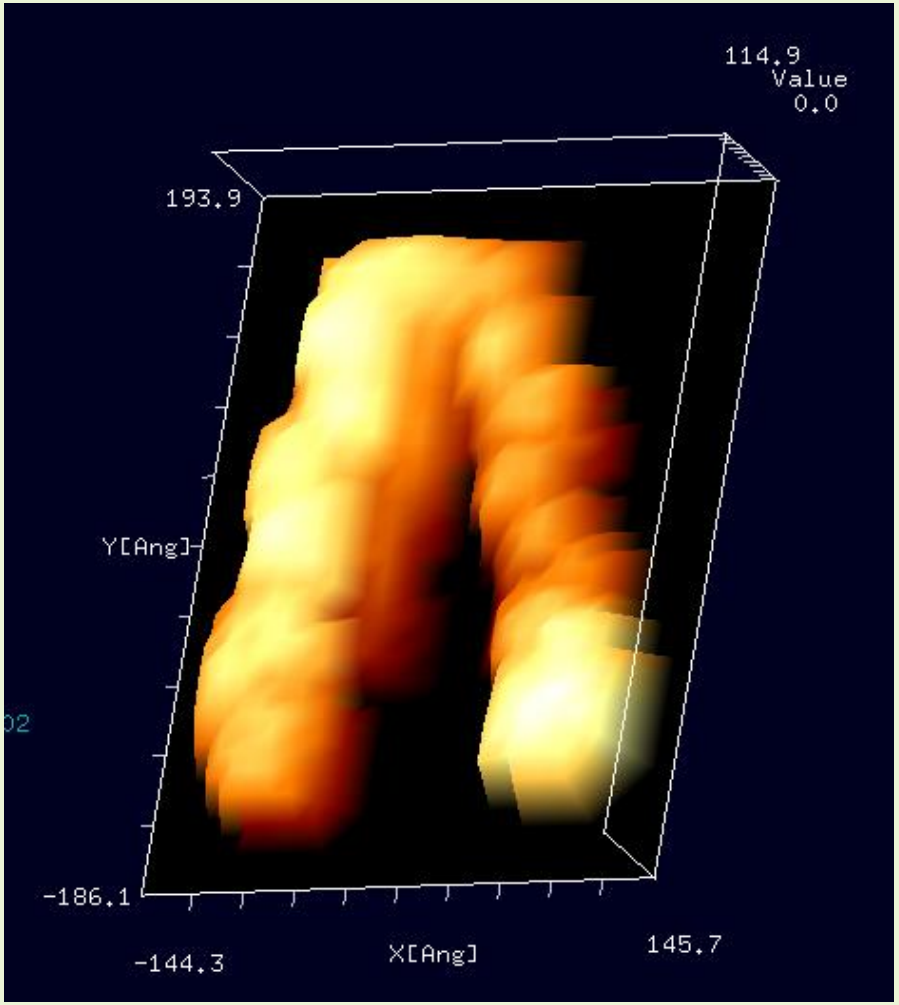
最大値:8.29E-4[V]
最小値:5.27E-5[V]

macroKPFM_DLVO

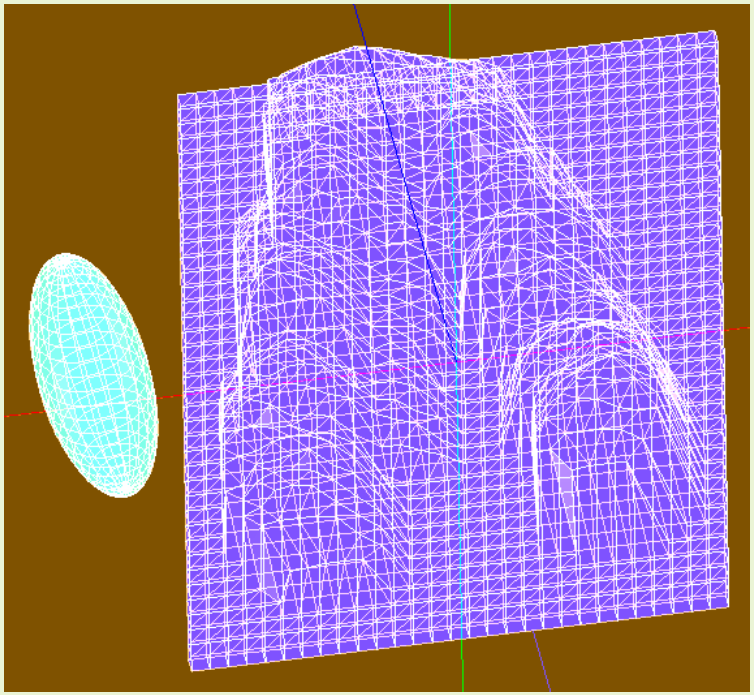
ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



DNAの分子構造図



DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]のミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

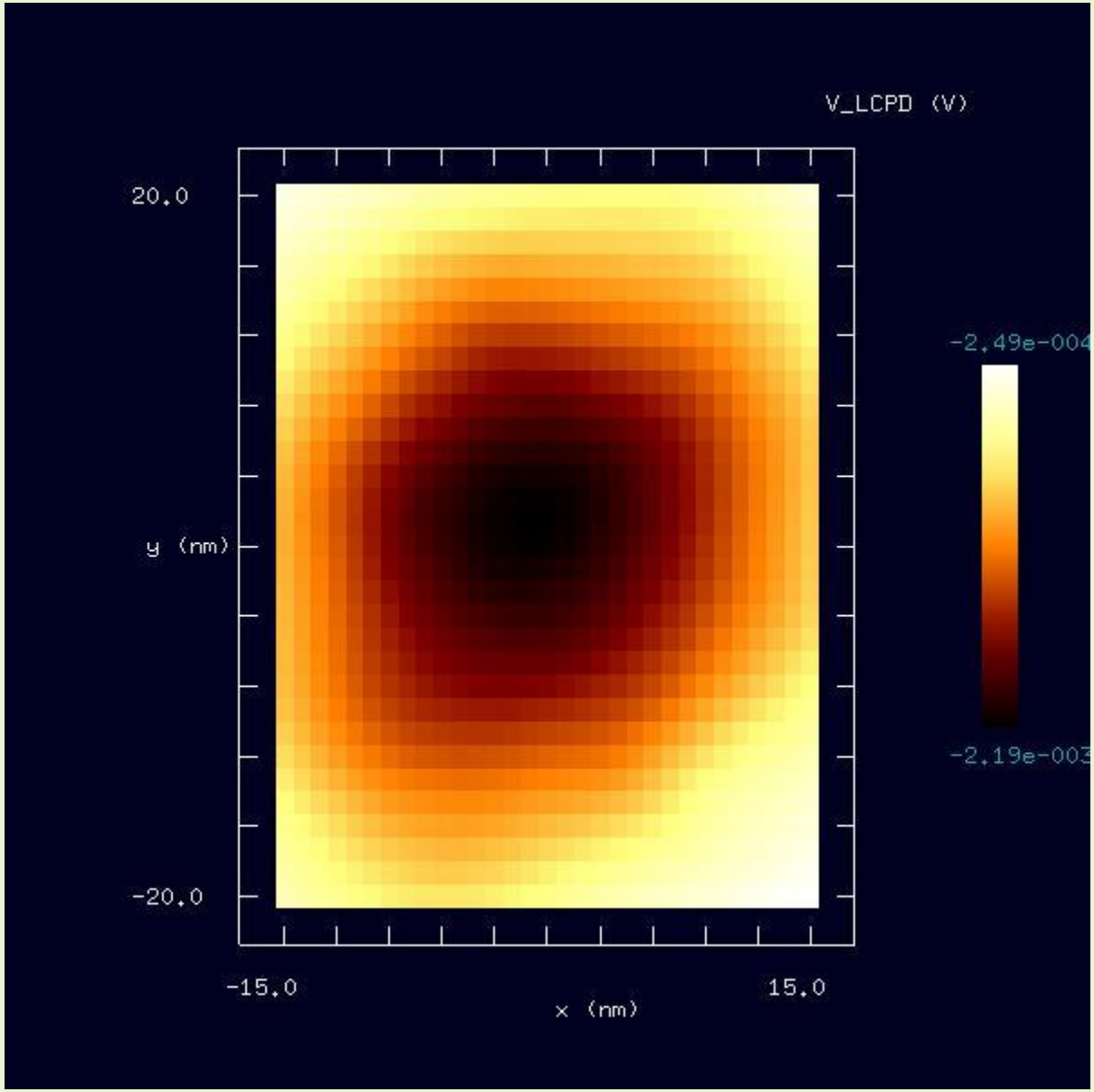
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

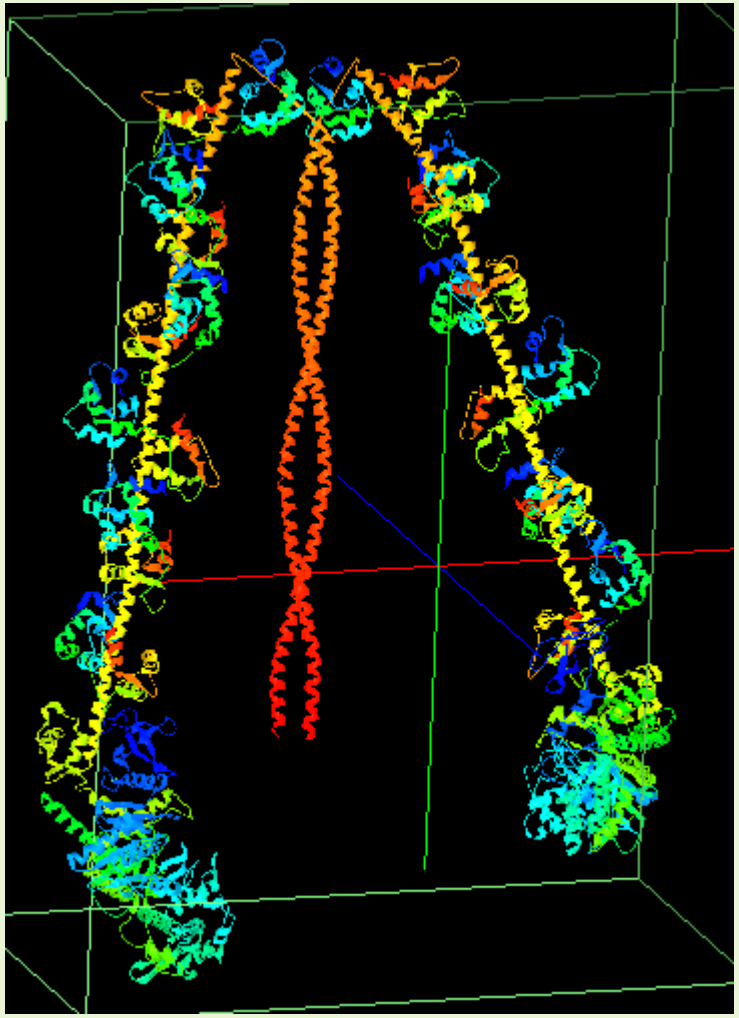
LCPD(局所接触電位差)像

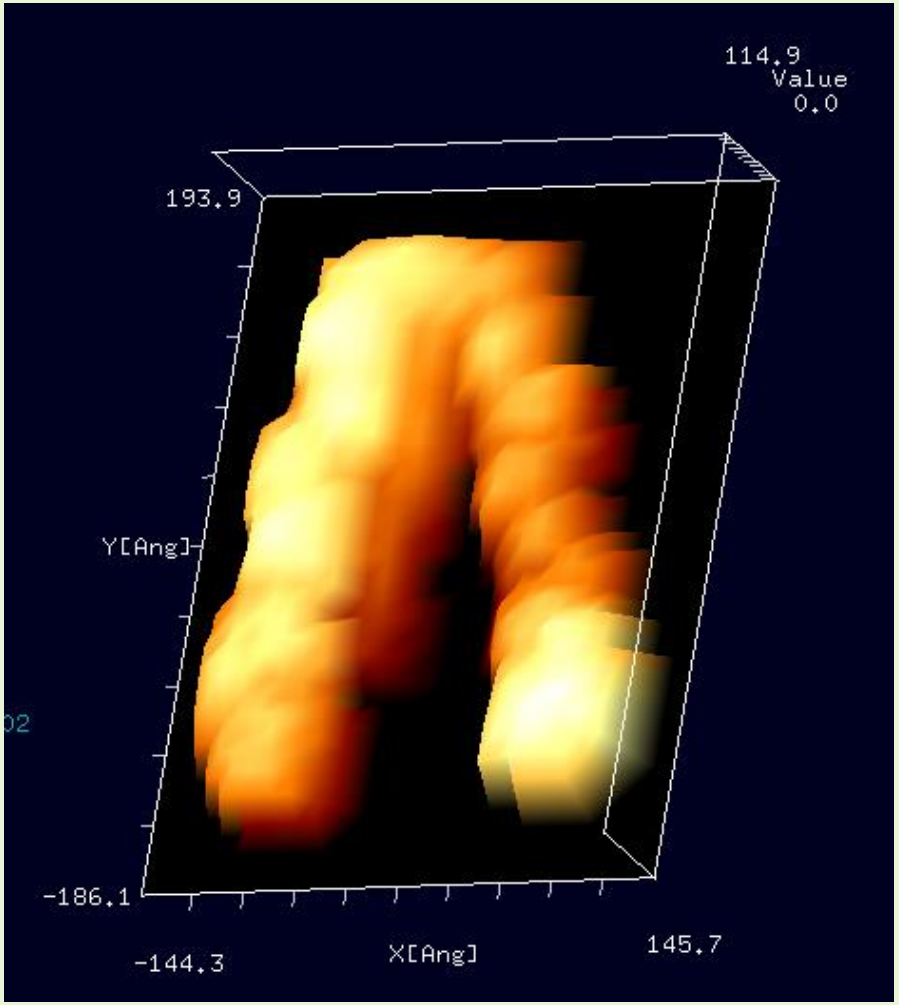


最大値:-2.49E-4[V]
最小値:-2.19E-3[V]

macroKPFM_DLVO

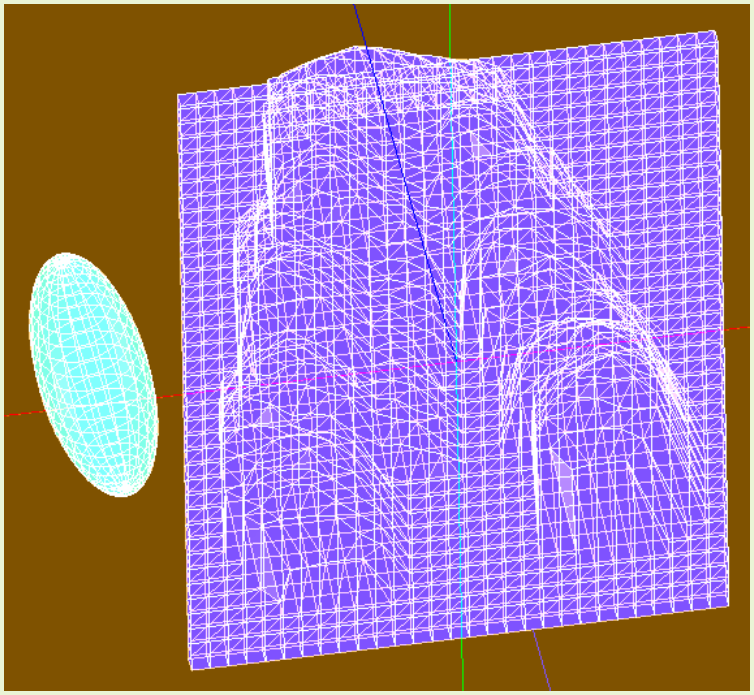
ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像





DNAの分子構造図

DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]のミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

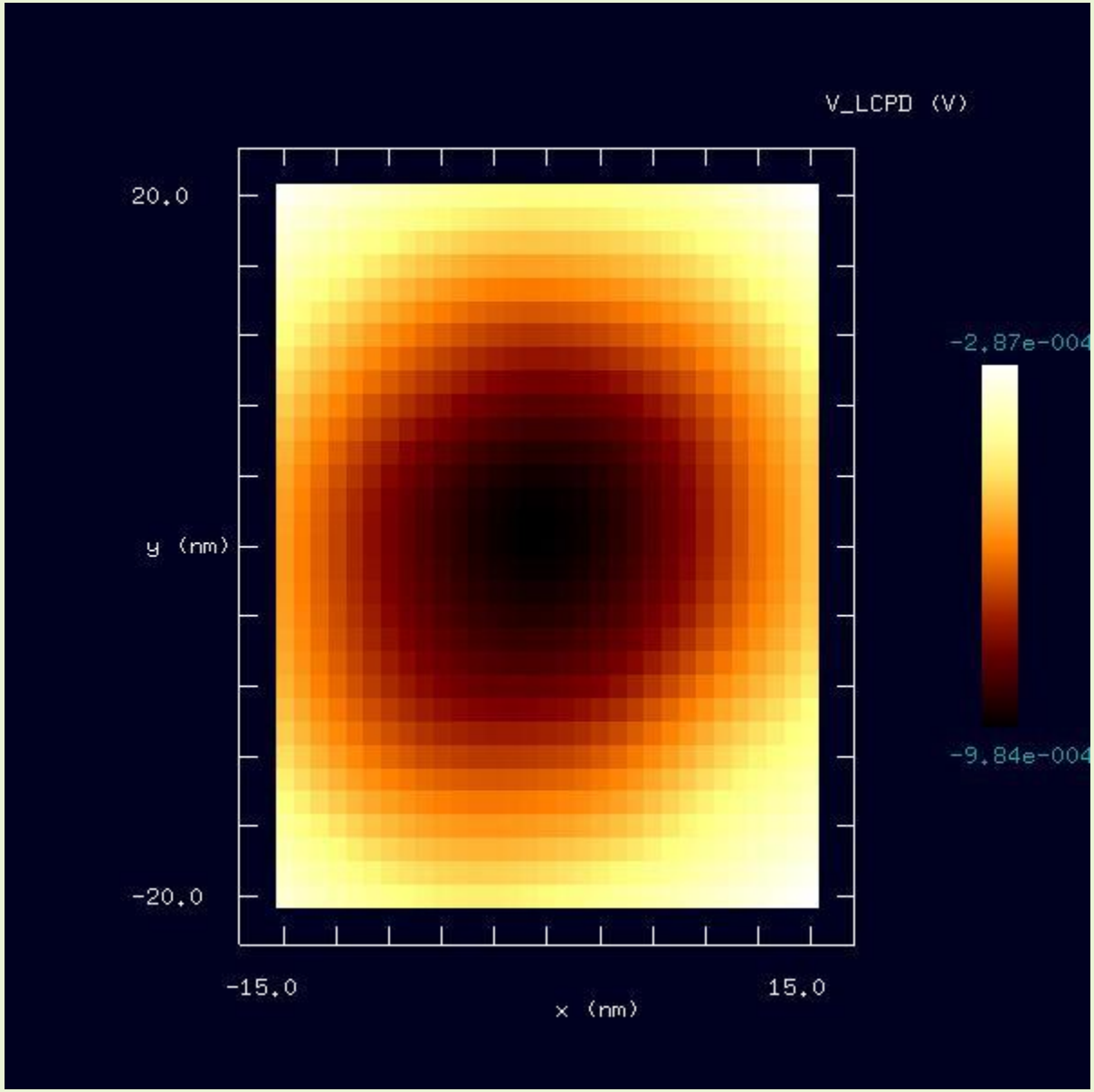
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

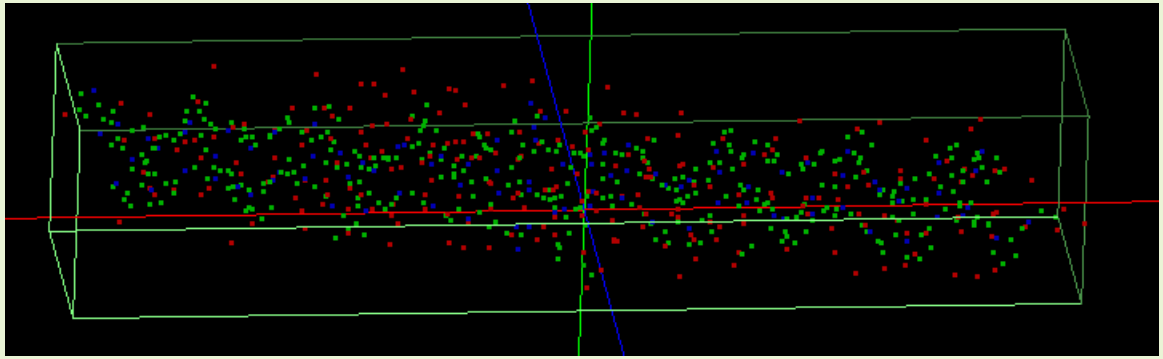
LCPD(局所接触電位差)像



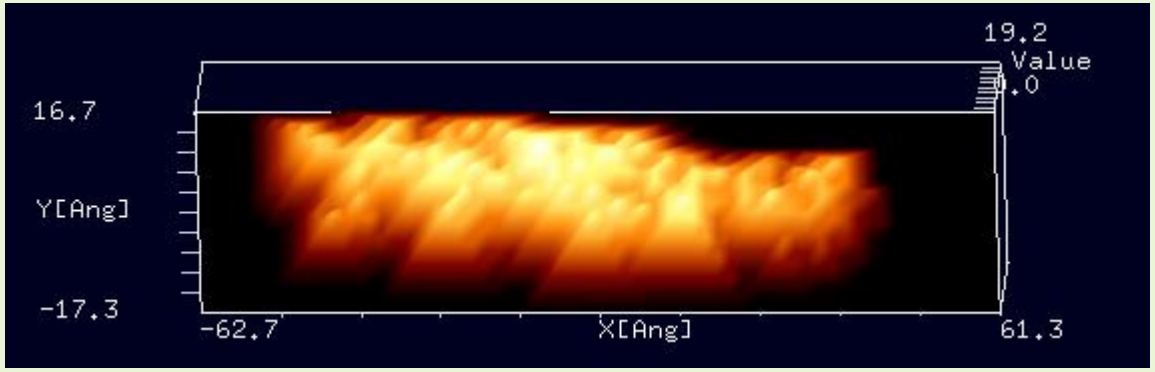
最大値:-2.87E-4[V]
最小値:-9.84E-4[V]

macroKPFM_DLVO

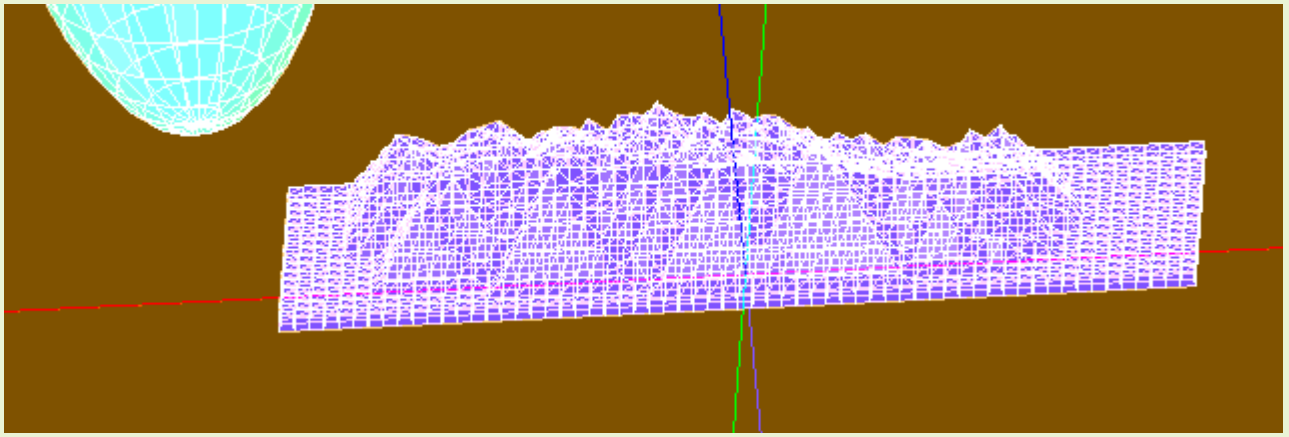
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]のコラーゲン分子

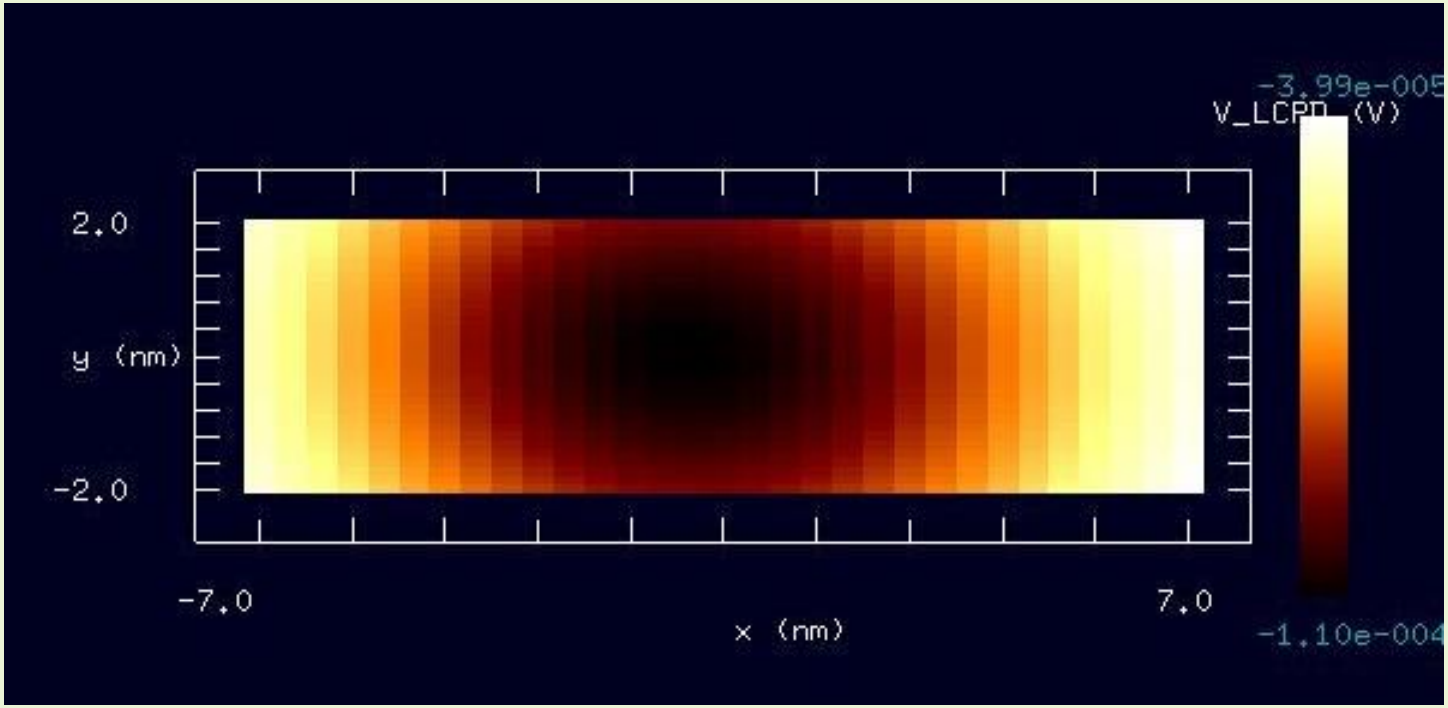
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

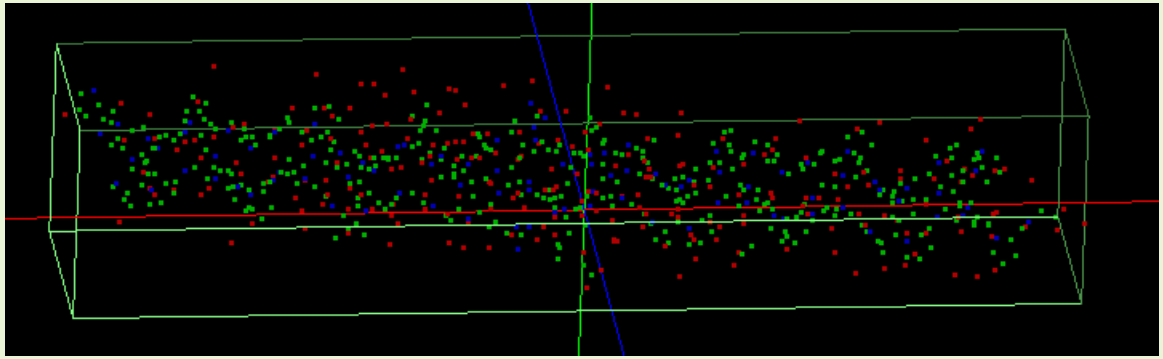
LCPD(局所接触電位差)像



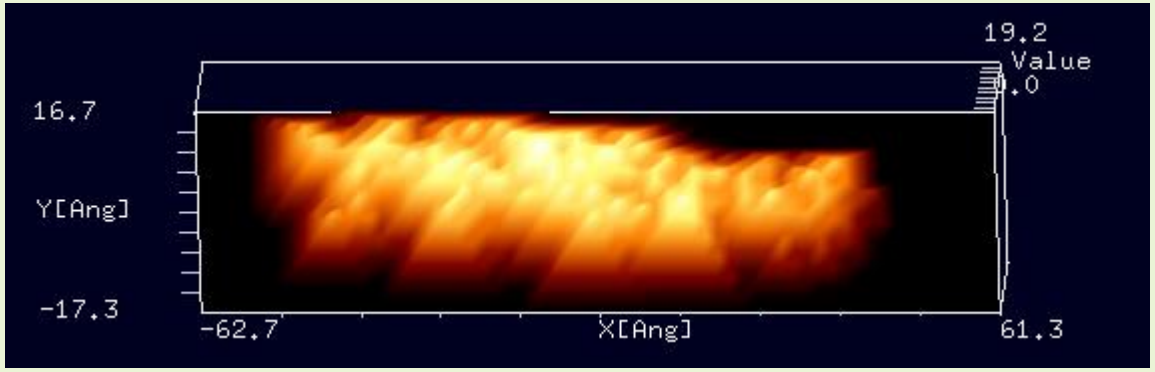
最大値:-3.99E-5[V]
最小値:-1.10E-4[V]

macroKPFM_DLVO

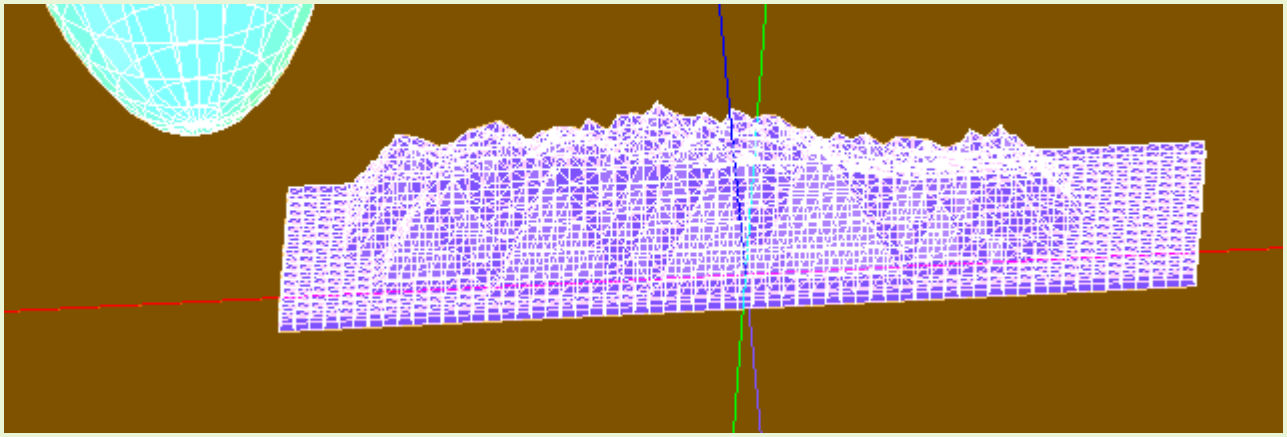
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]のコラーゲン分子

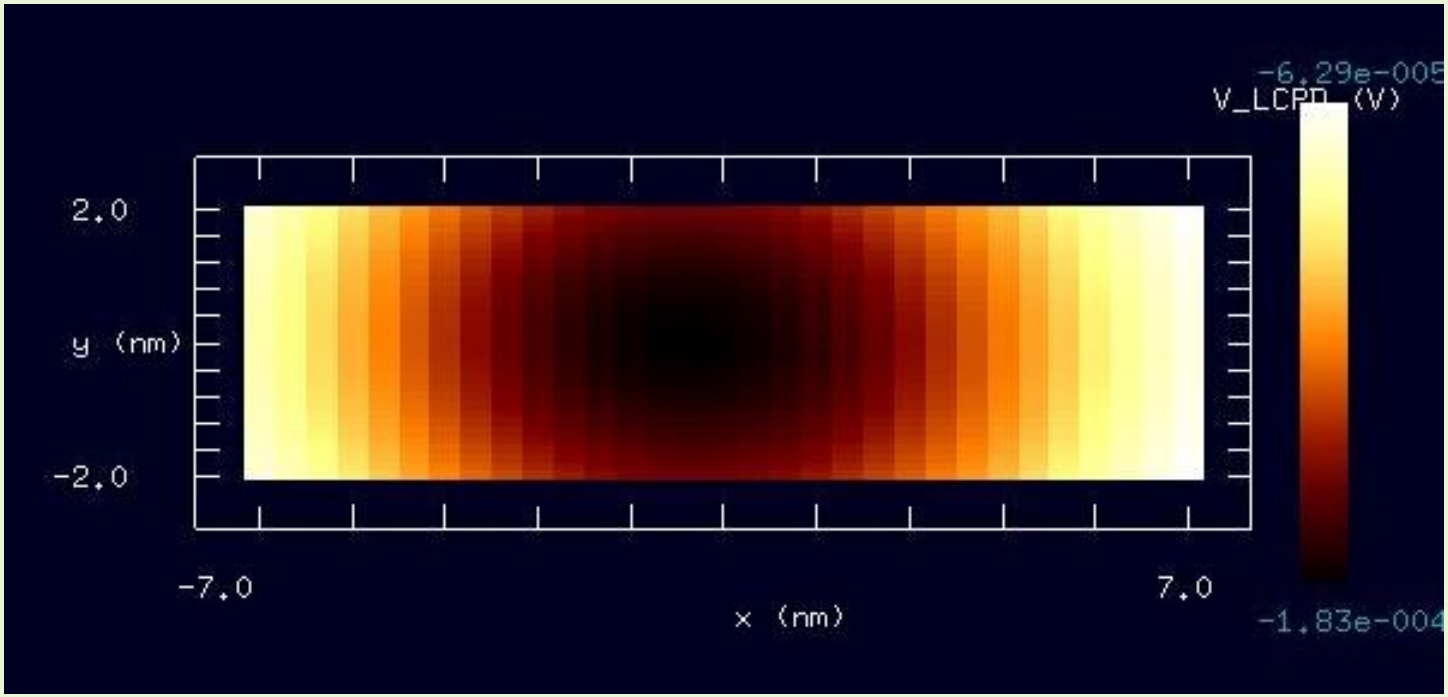
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

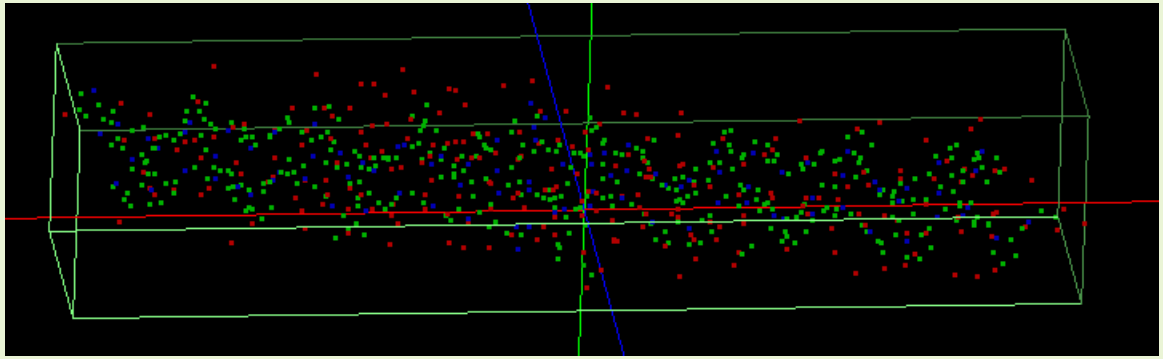
LCPD(局所接触電位差)像



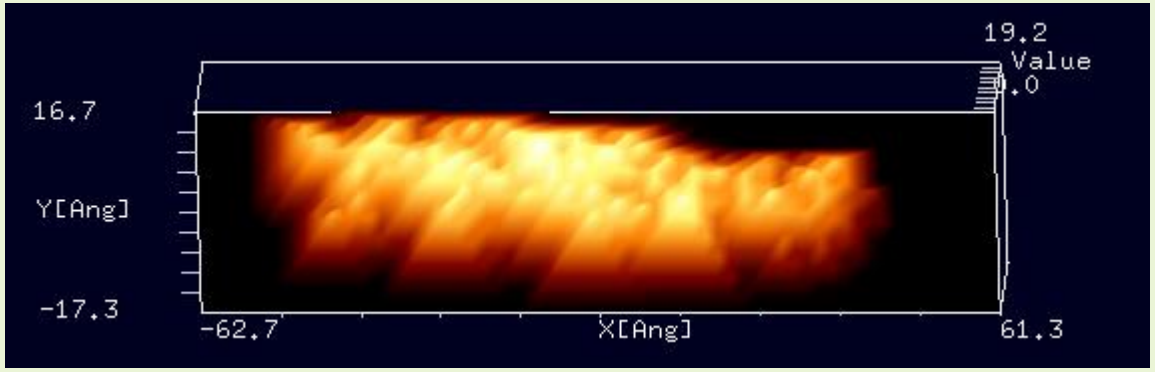
最大値:-6.29E-5[V]
最小値:-1.83E-4[V]

macroKPFM_DLVO

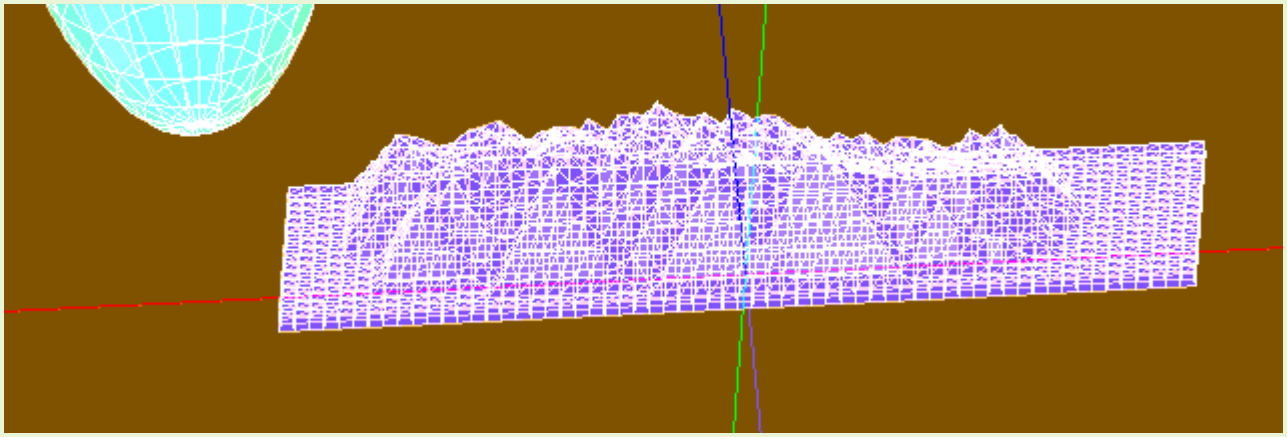
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]のコラーゲン分子

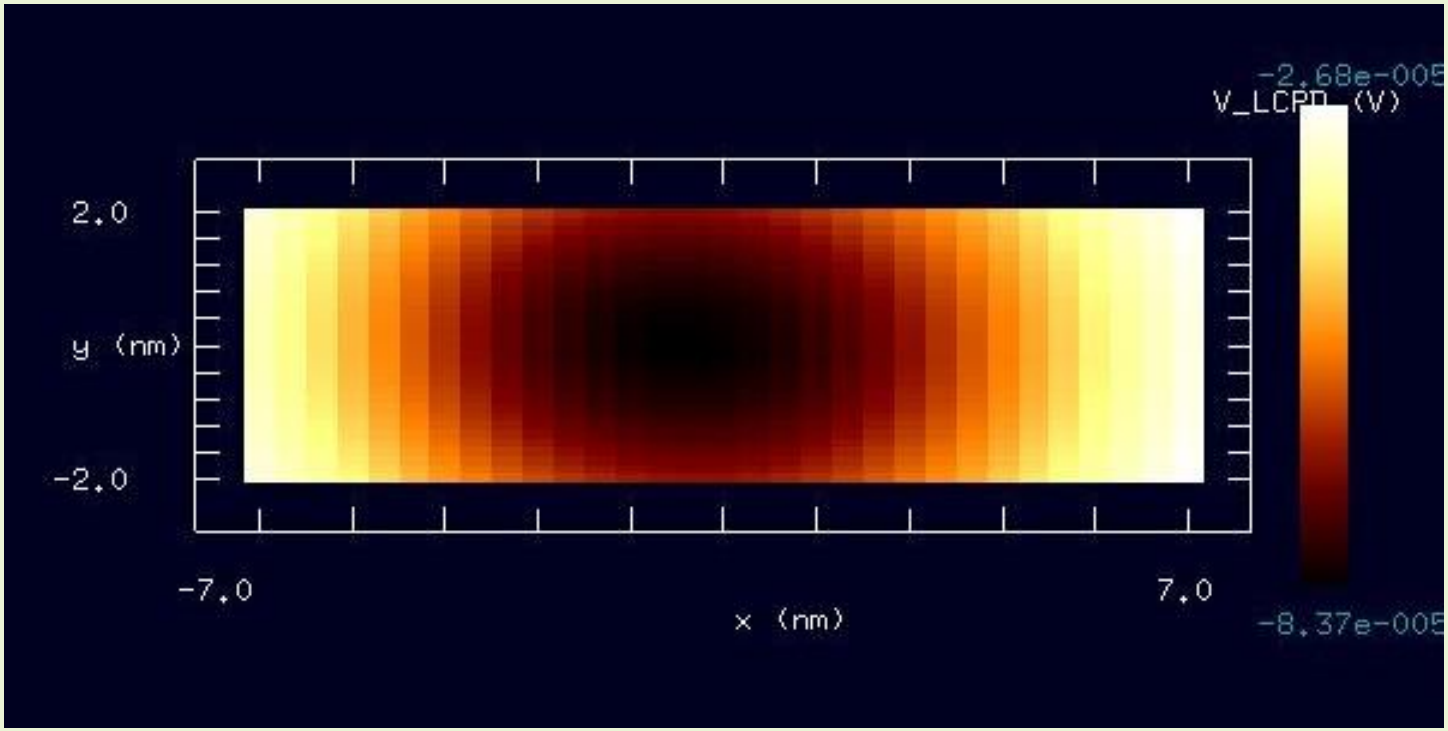
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

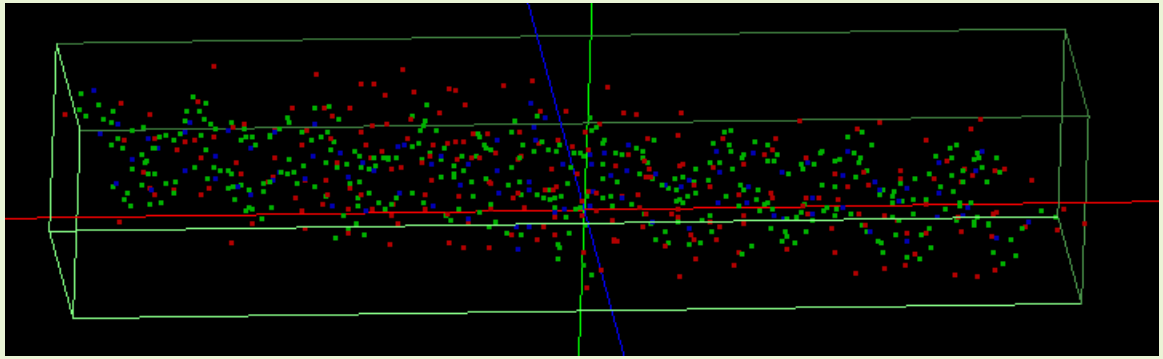
LCPD(局所接触電位差)像



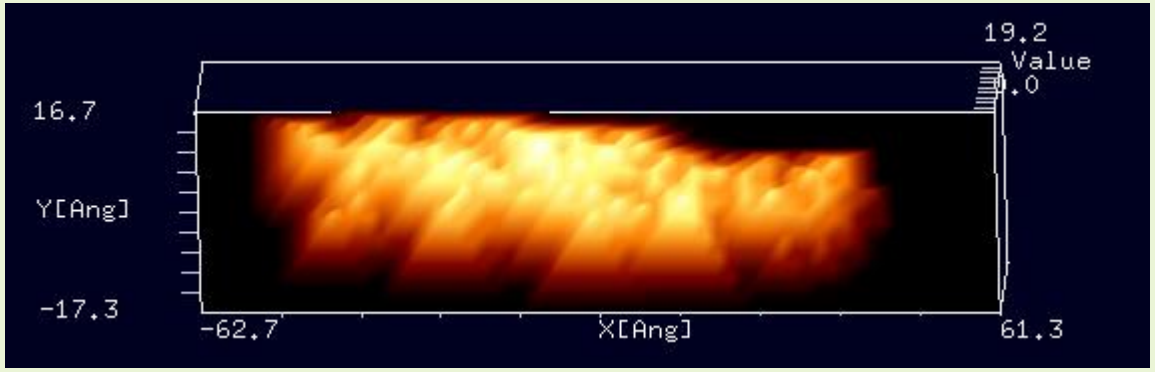
最大値:-2.68E-5[V]
最小値:-8.37E-5[V]

macroKPFM_DLVO

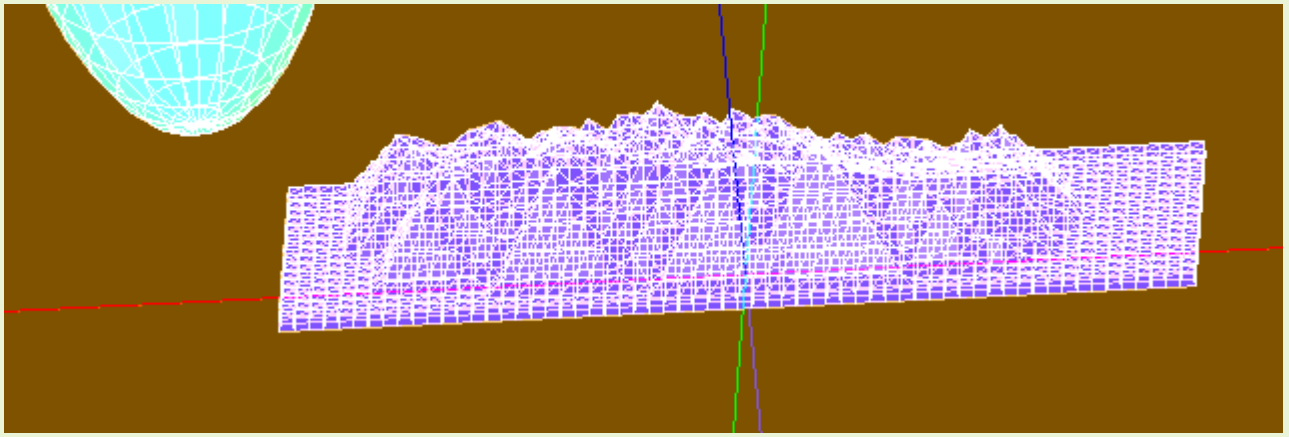
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]のコラーゲン分子

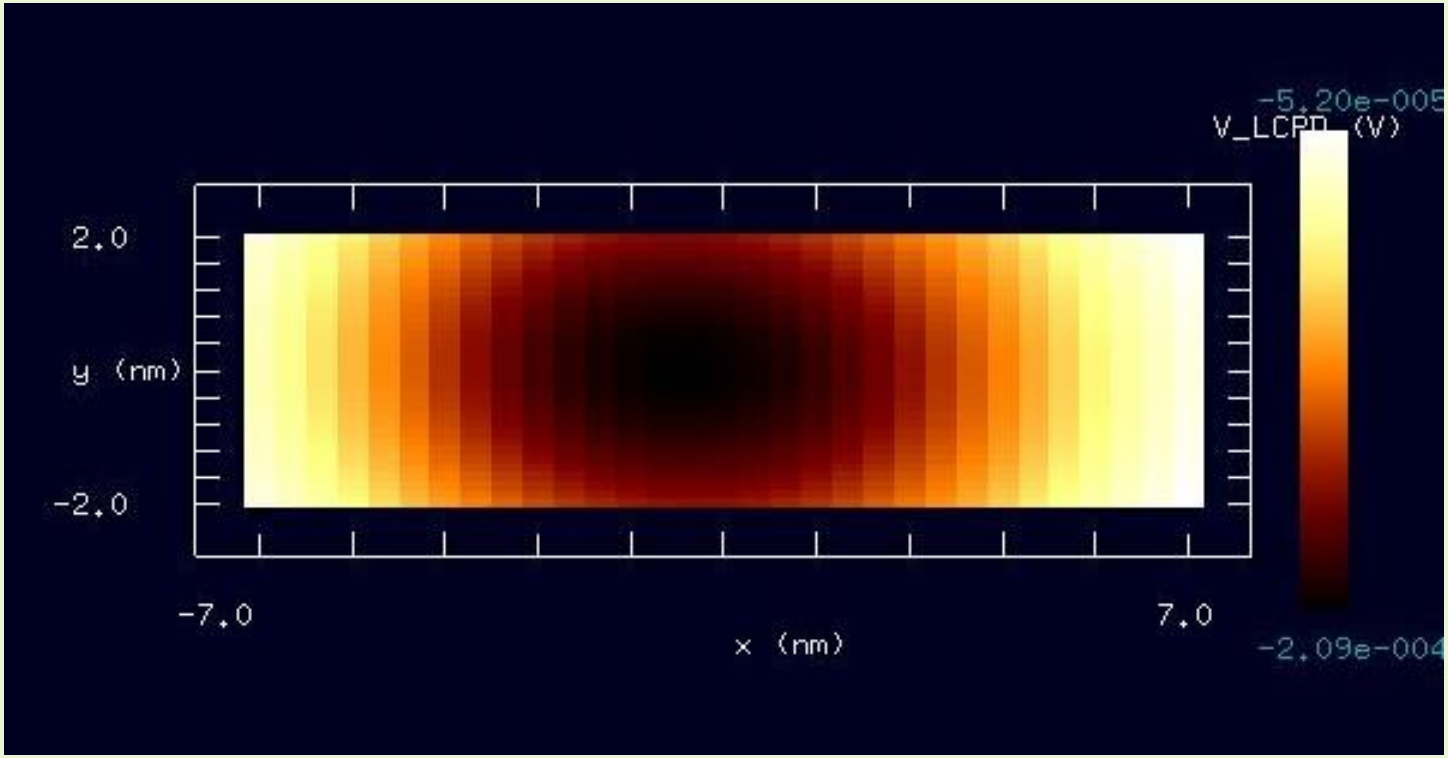
探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

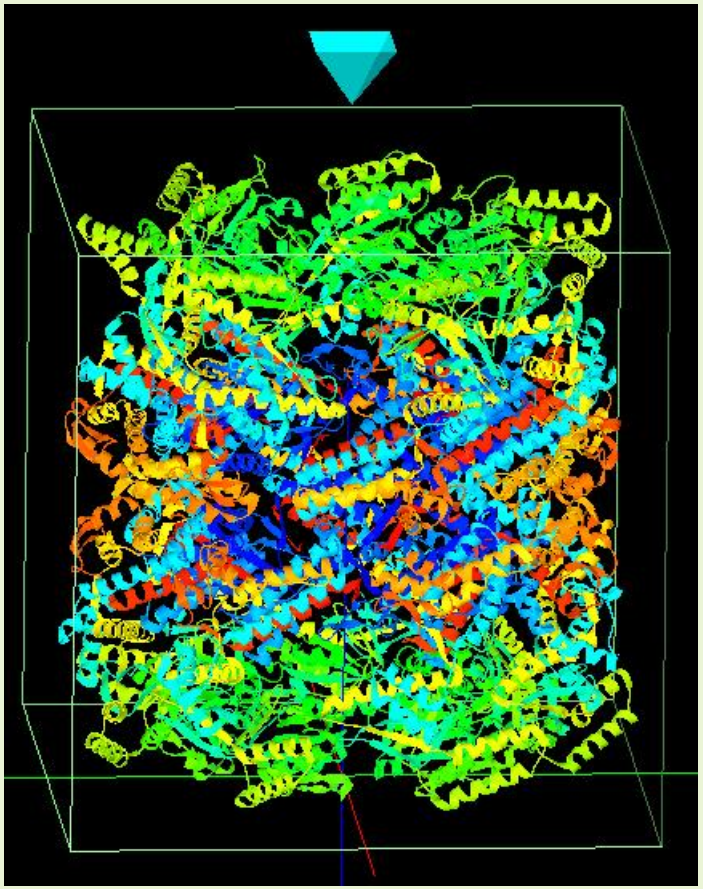
LCPD(局所接触電位差)像



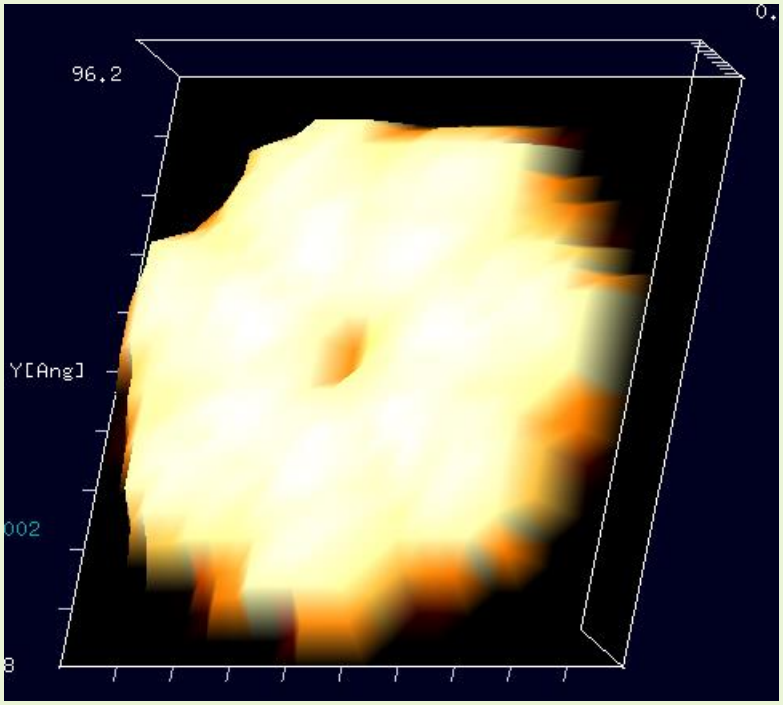
最大値:-5.20E-5[V]
最小値:-2.09E-4[V]

macroKPFM_DLVO

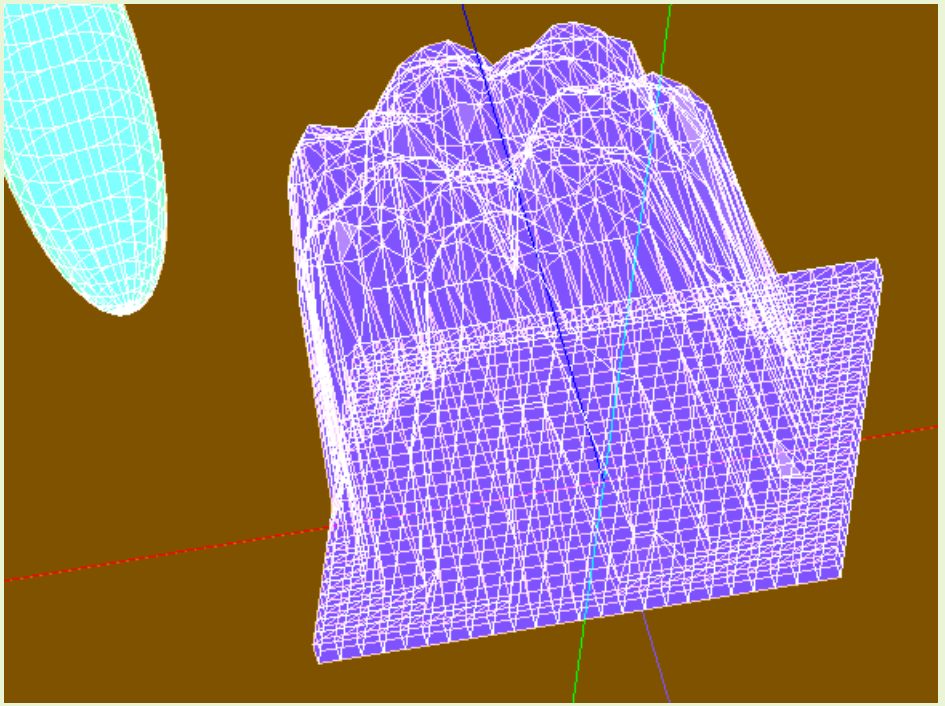
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする

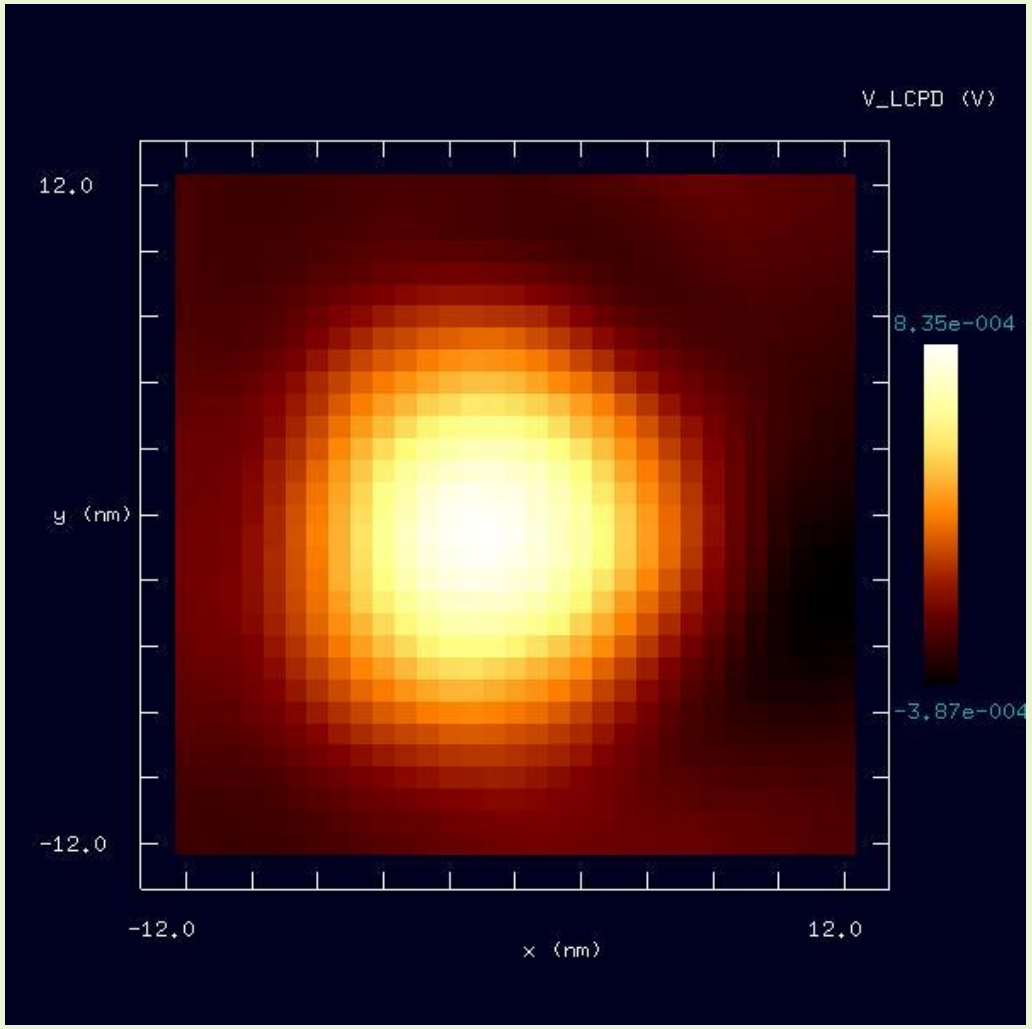
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

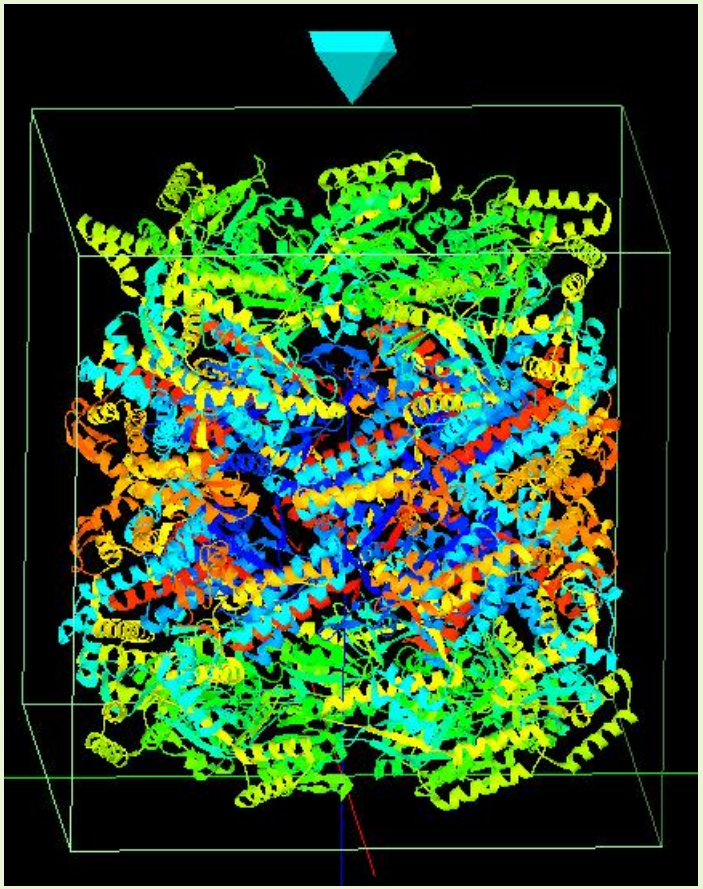
LCPD(局所接触電位差)像



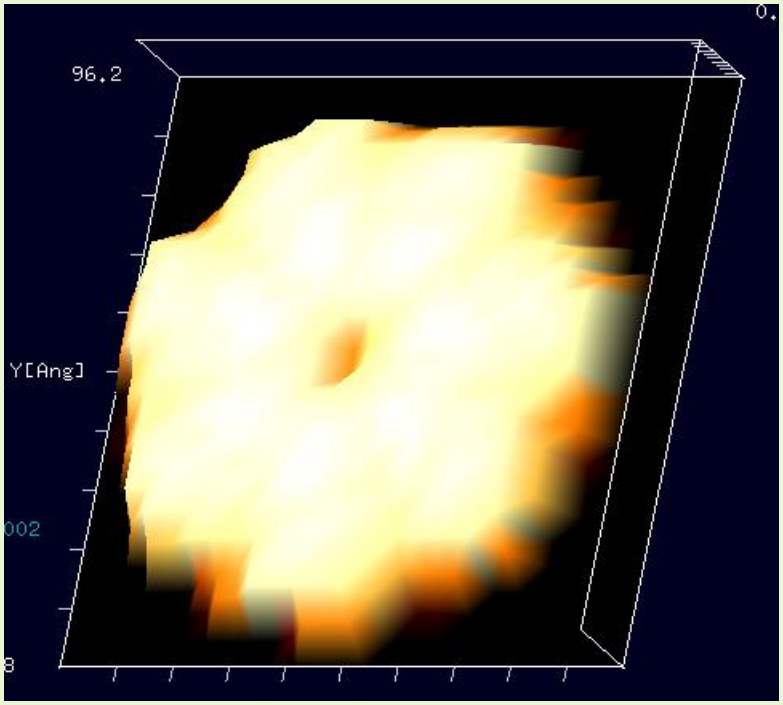
最大値:8.35E-4[V]
最小値:-3.87E-4[V]

macroKPFM_DLVO

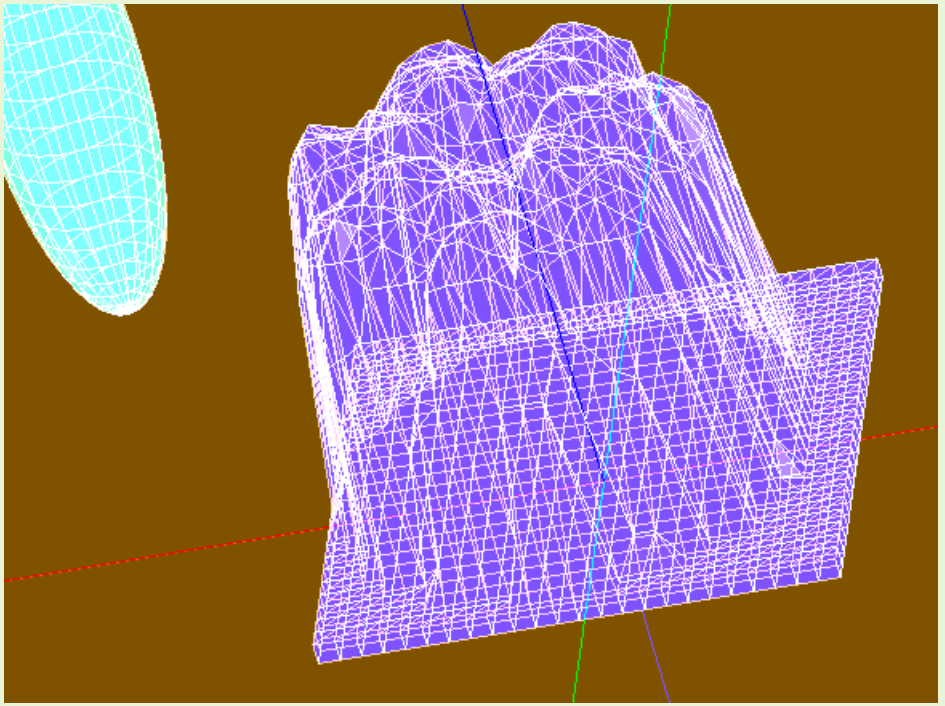
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする

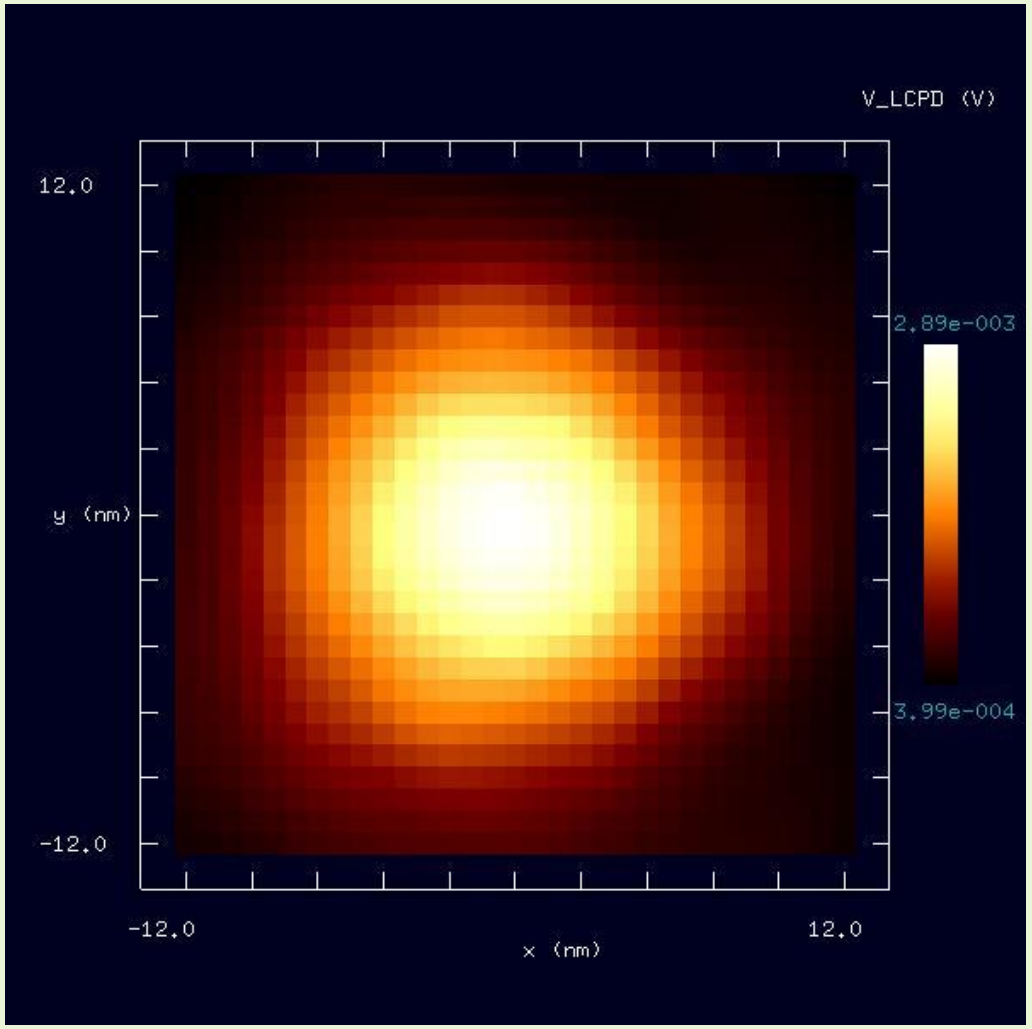
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

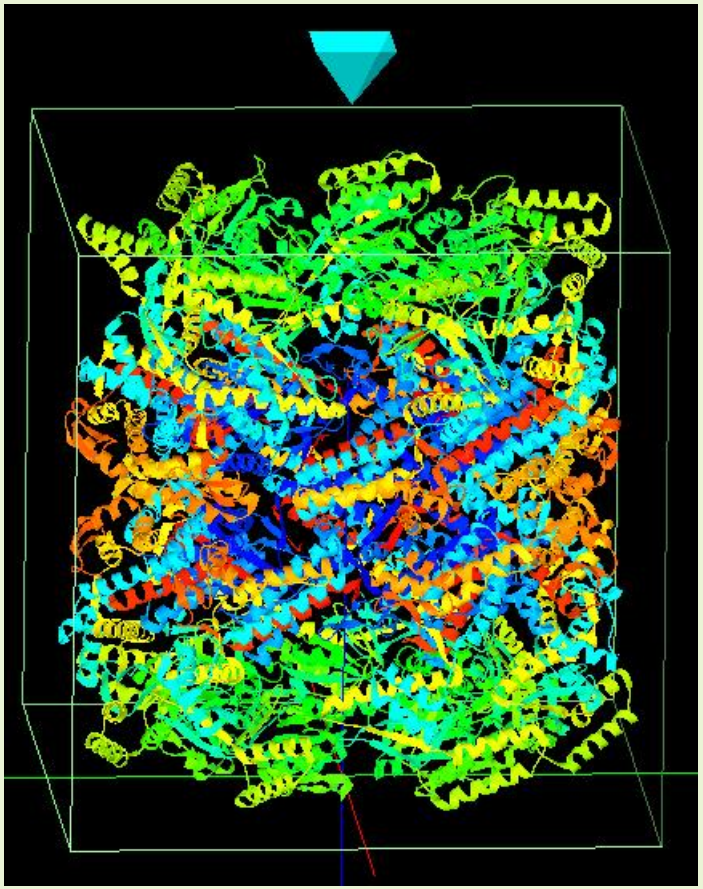
LCPD(局所接触電位差)像



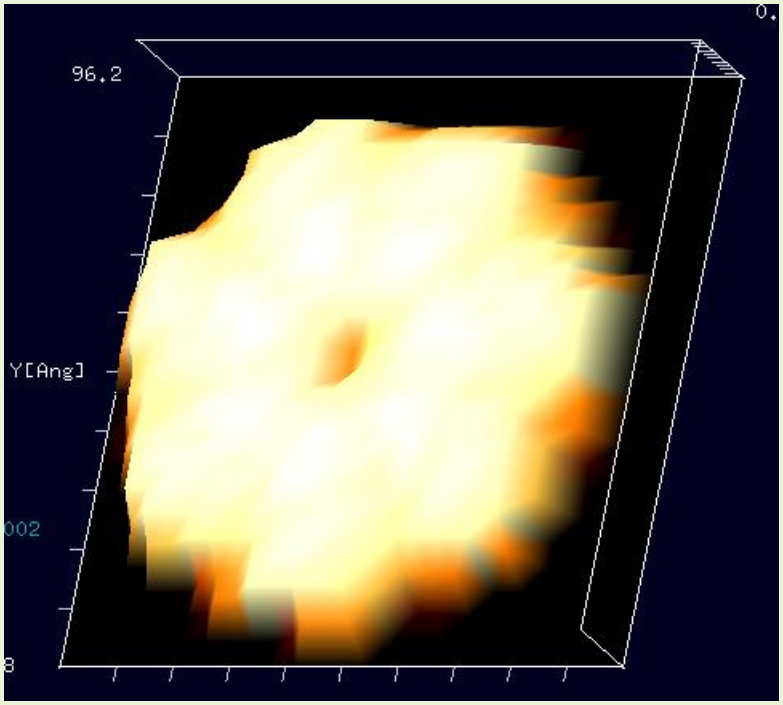
最大値:2.89E-3[V]
最小値:3.99E-4[V]

macroKPFM_DLVO

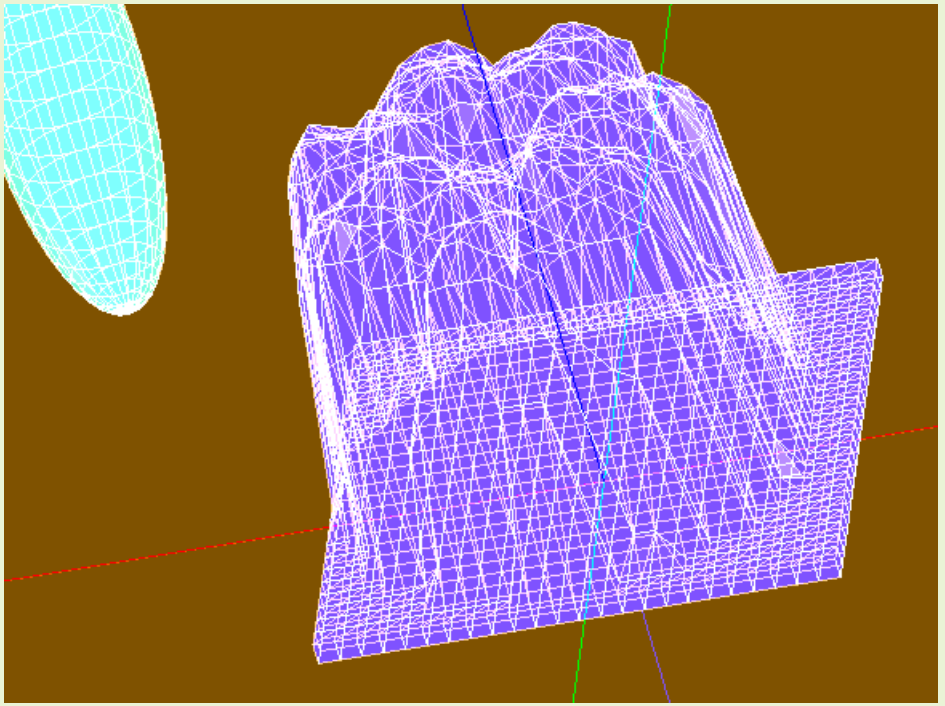
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする

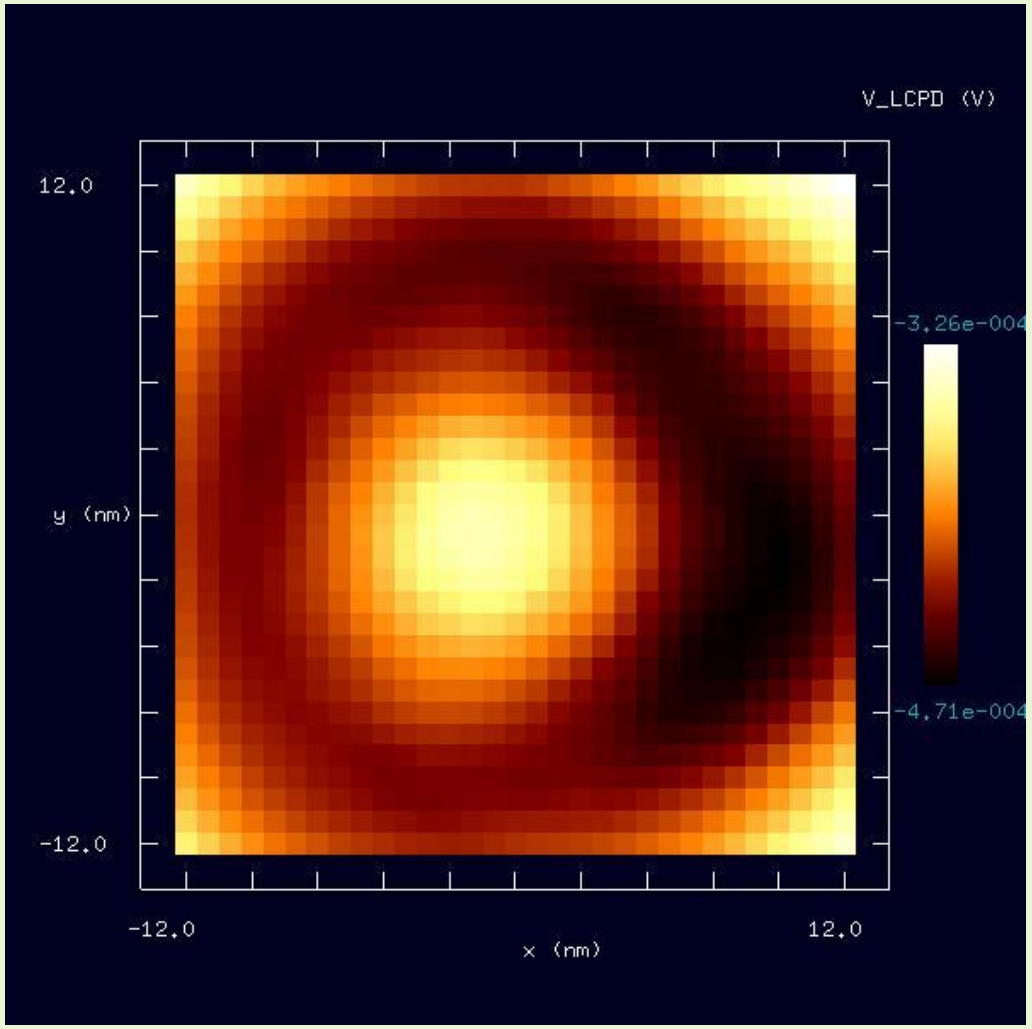
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

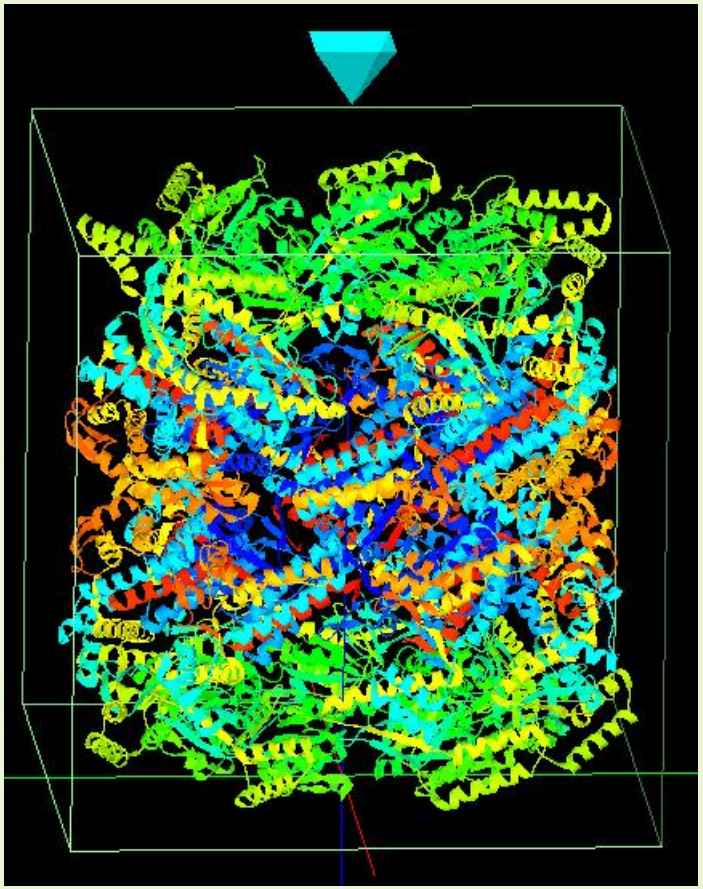
LCPD(局所接触電位差)像



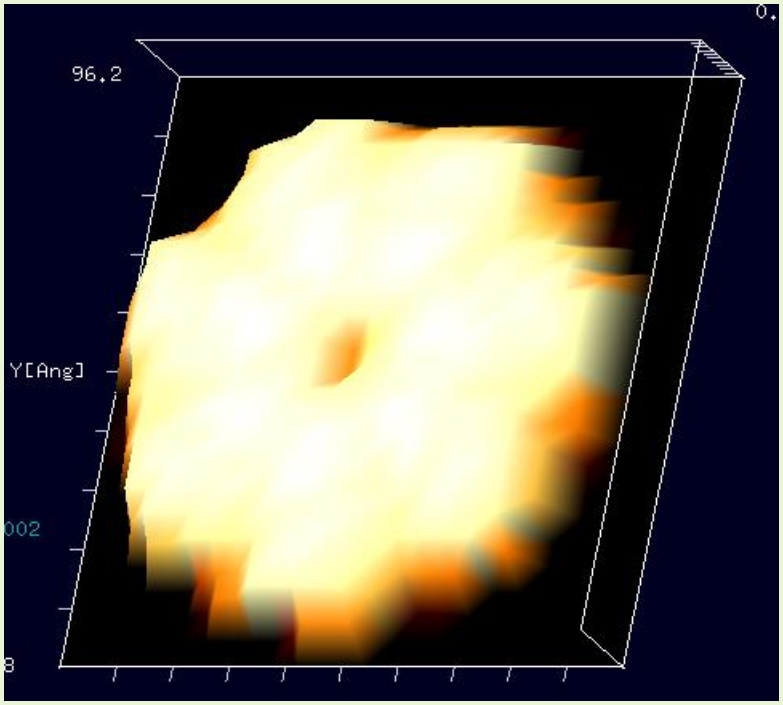
最大値:-3.26E-4[V]
最小値:-4.71E-4[V]

macroKPFM_DLVO

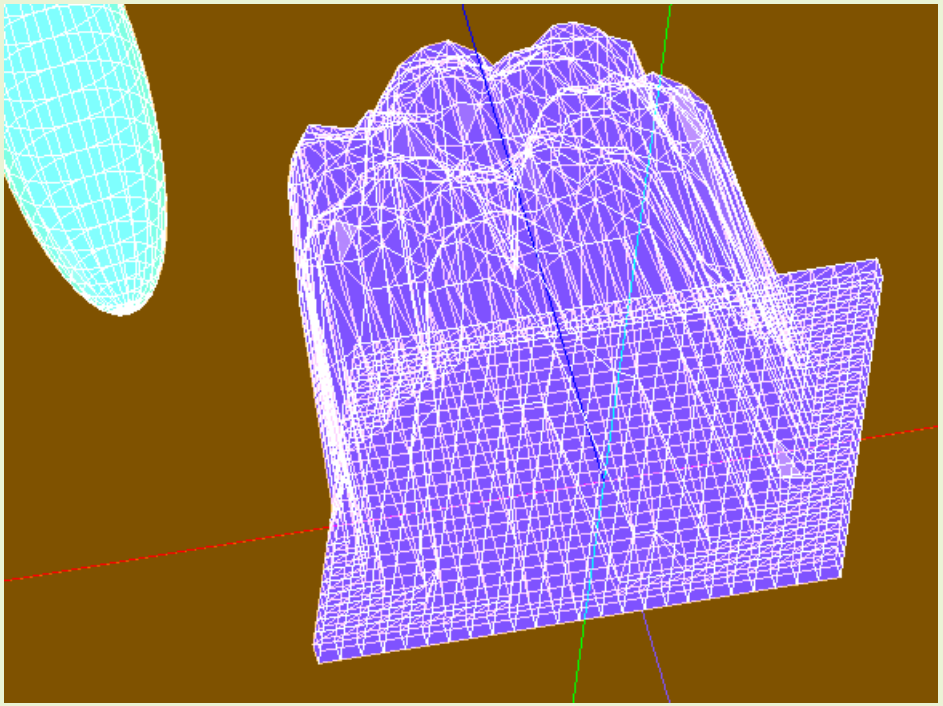
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする

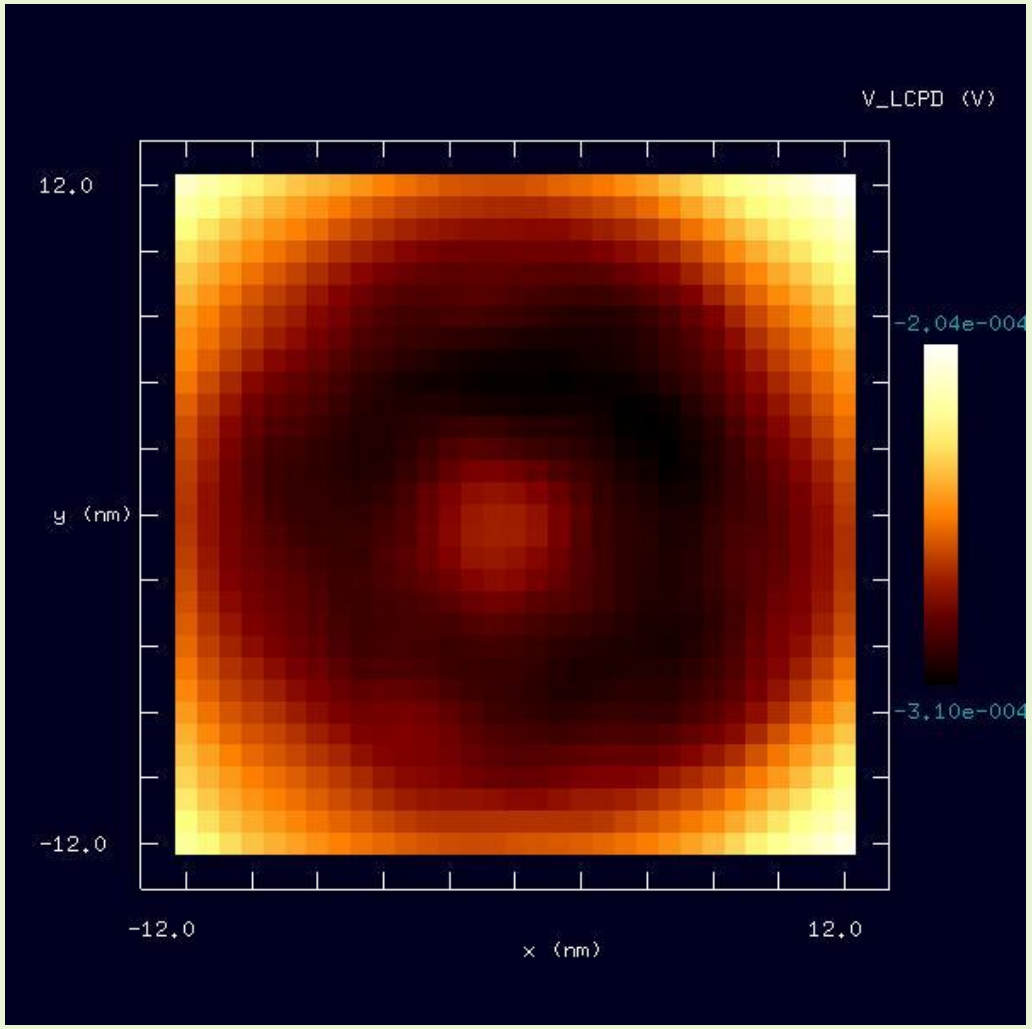
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

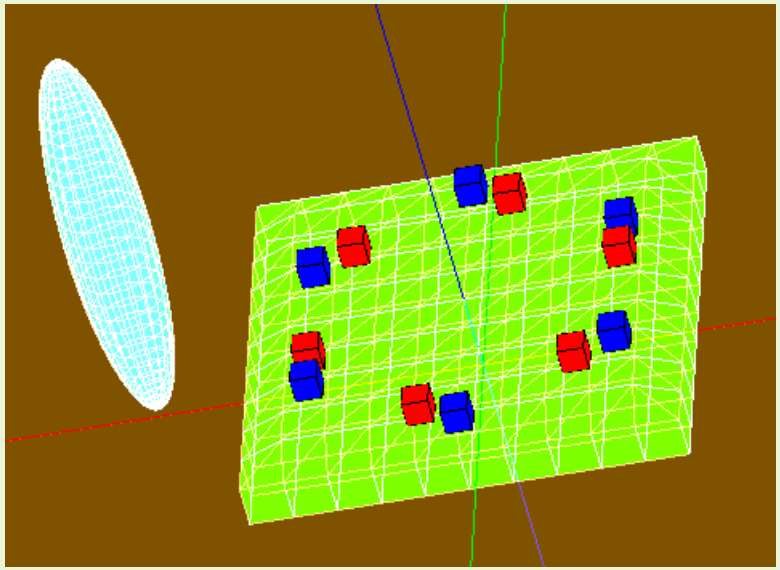
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:-2.04E-4[V]
最小値:-3.10E-4[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

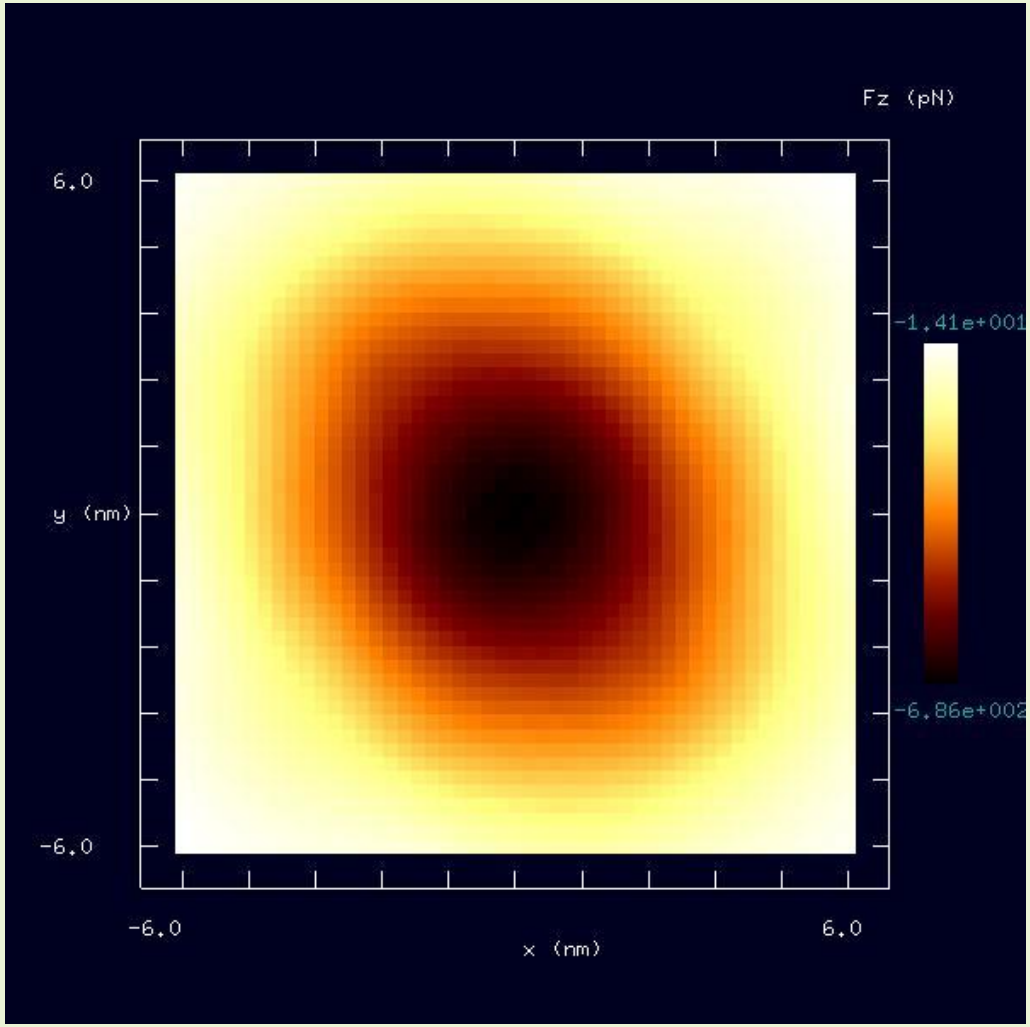
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

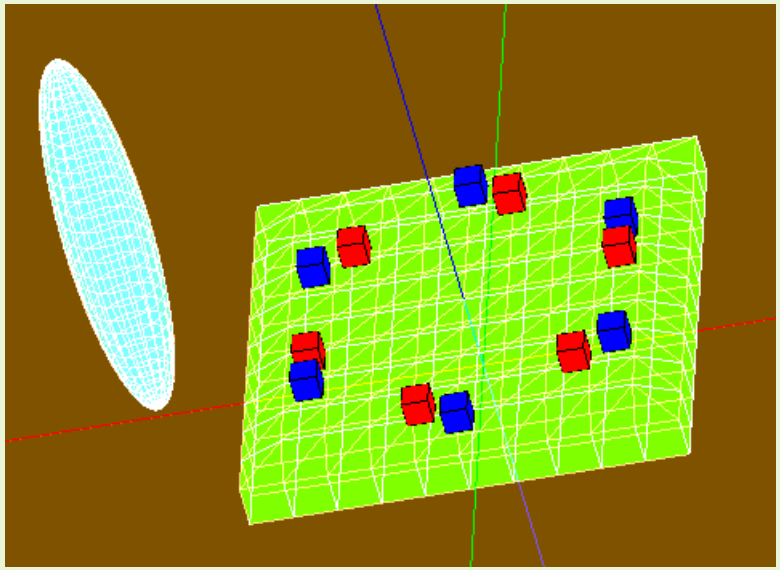
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-1.41E+1[pN]
力の最小値:-6.86E+2[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

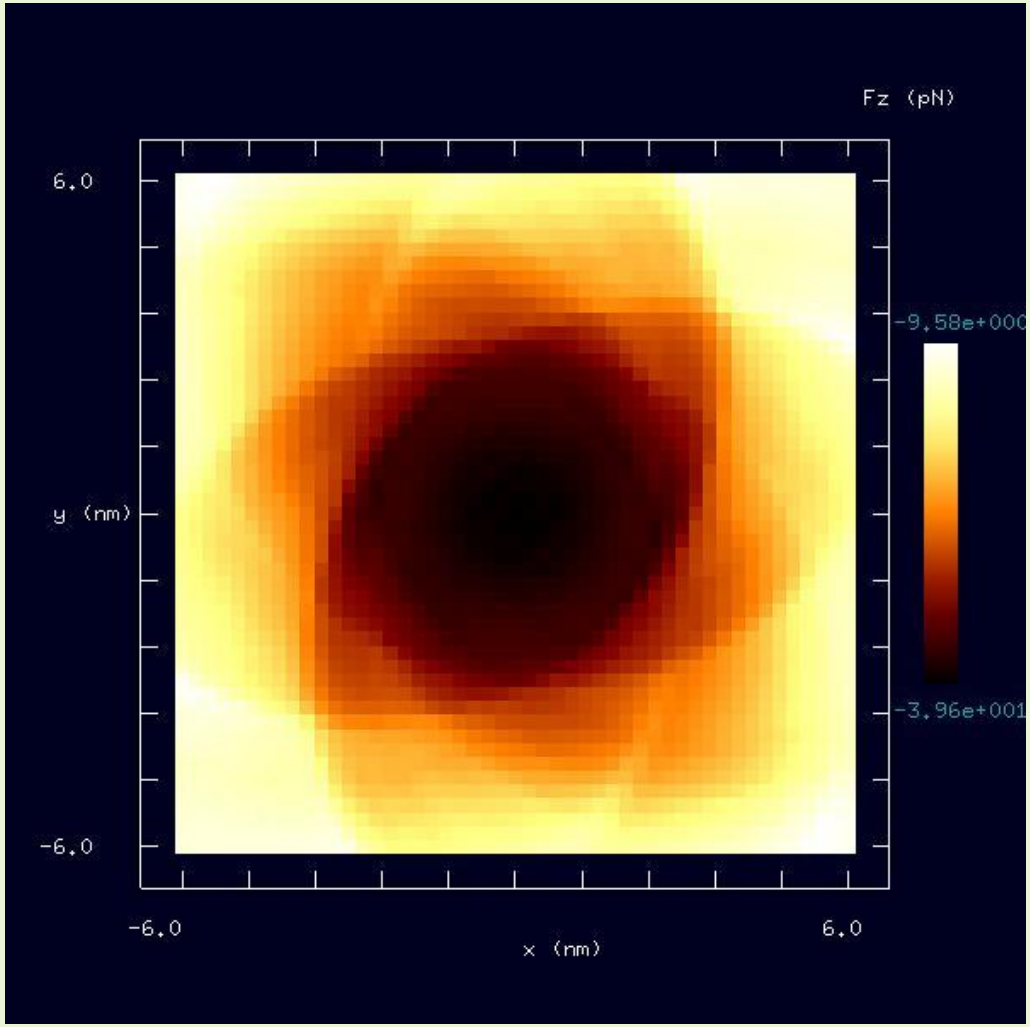
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

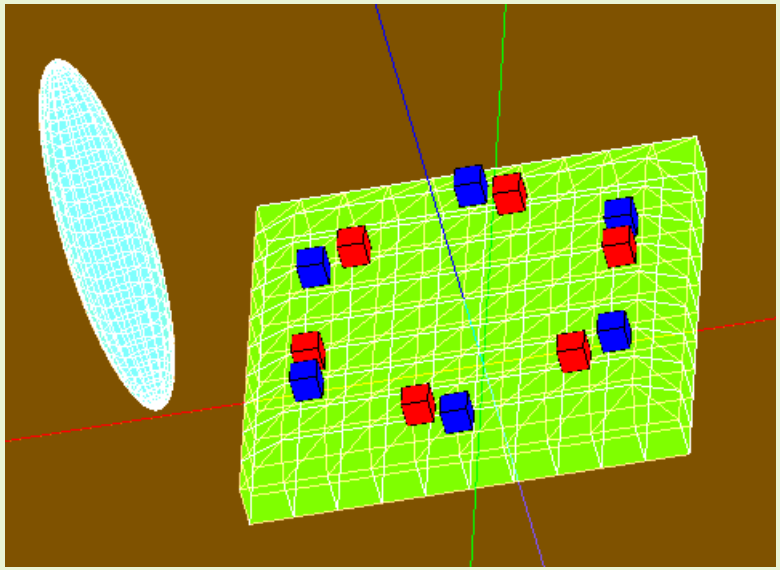
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-9.58E+0[pN]
力の最小値:-3.96E+1[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals



探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度:0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷:+1
温度:300[K]
比誘電率:80.4
デバイ長さ:3.09[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像

探針:幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料:幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

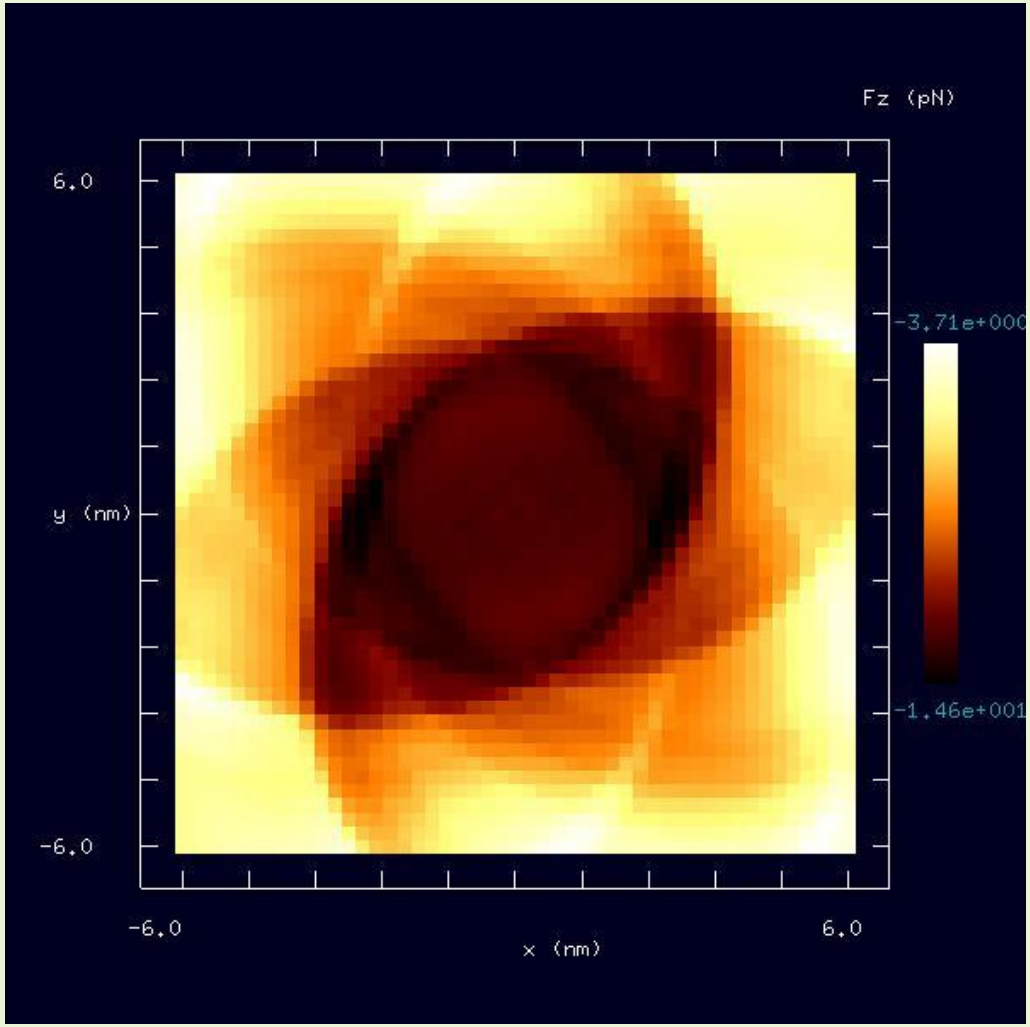
探針先端と試料の最短距離:3[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

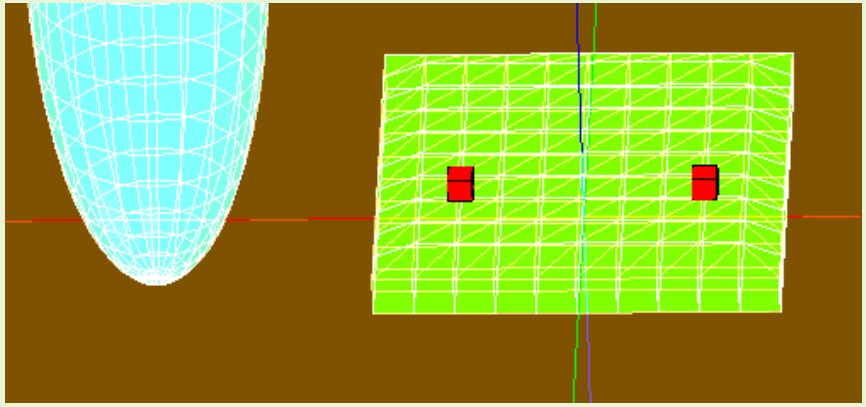
試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-3.71E+0[pN]
力の最小値:-1.46E+1[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals



酸化ケイ素基板内部に2個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像

探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.001[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：9.77[nm]

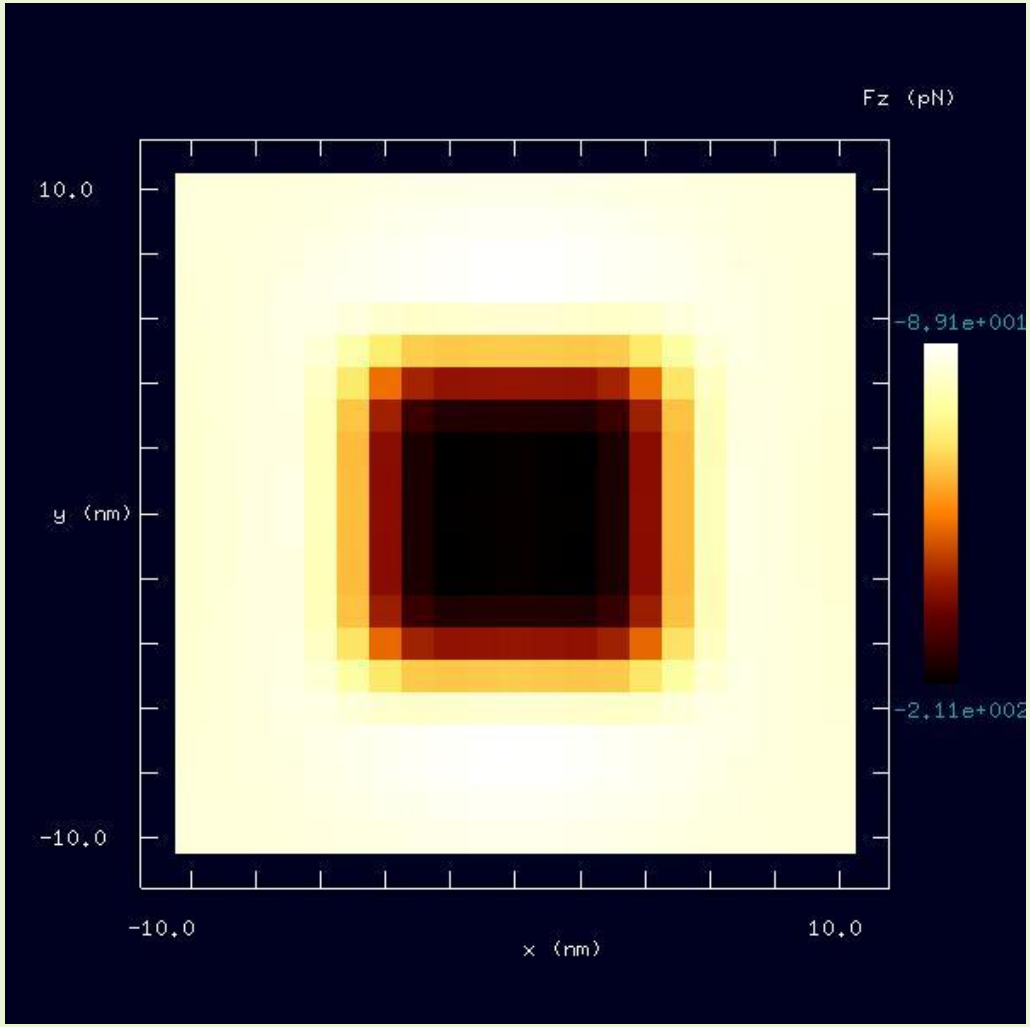
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針は導体とする
探針に電圧-0.5[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

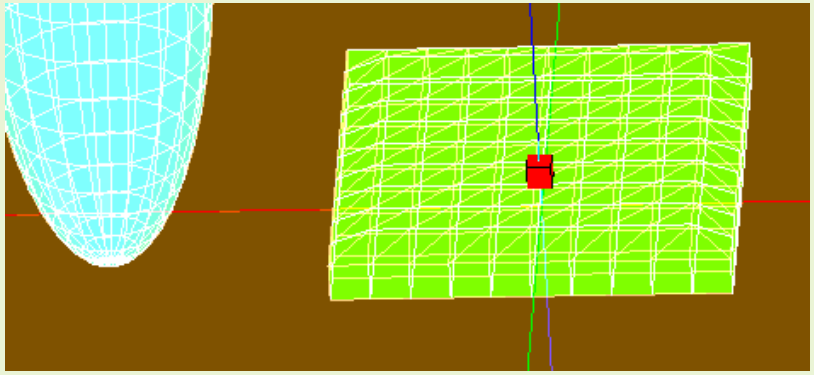
試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|の電荷を2個、配置した

探針に電圧-0.5[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-8.91E+1[pN]
力の最小値:-2.11E+2[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals



酸化ケイ素基板内部に1個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像

探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ2[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.5[V]を印加する

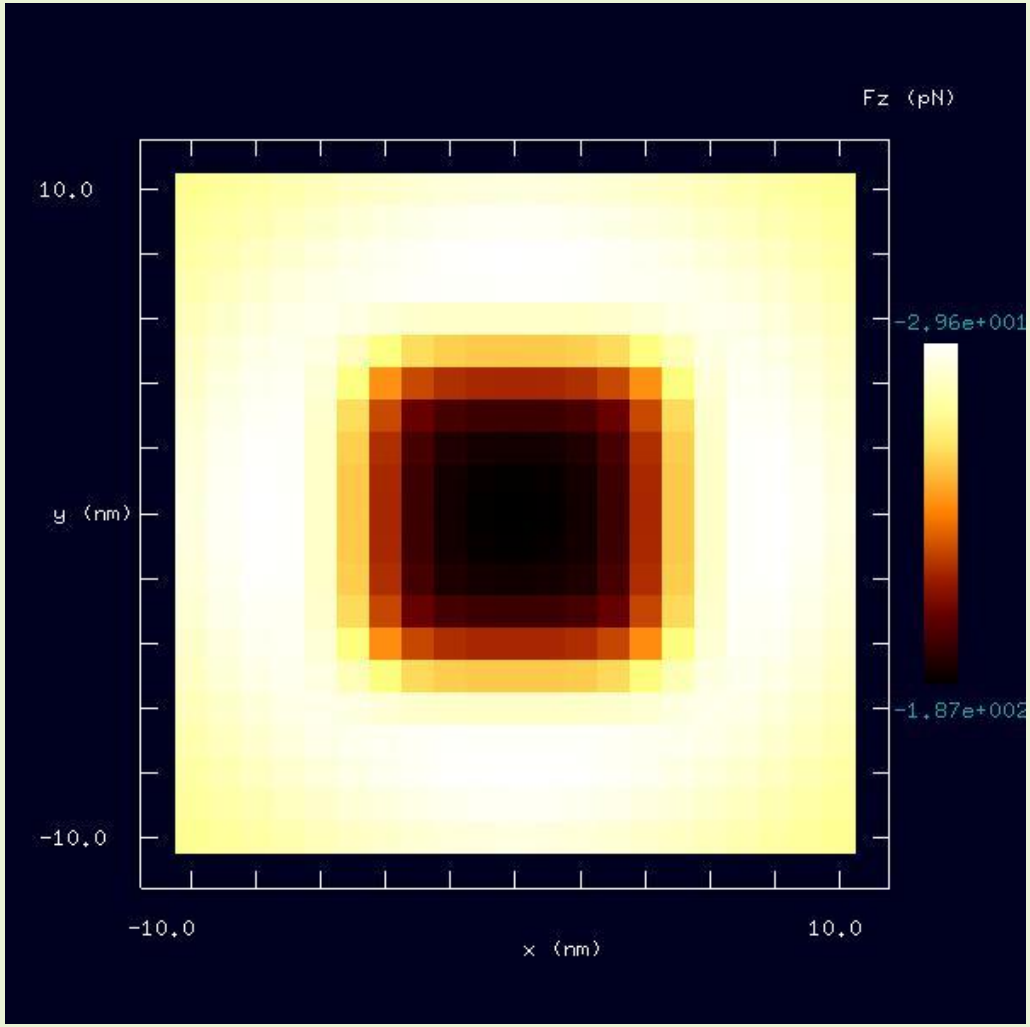
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|の電荷を1個、配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

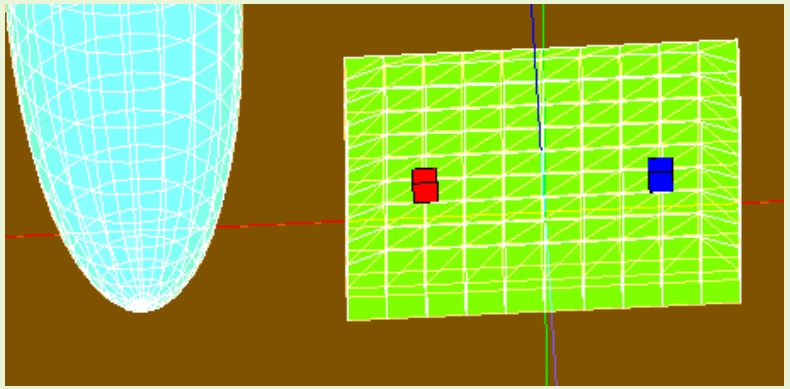
探針に電圧-0.5[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-2.96E+1[pN]
力の最小値:-1.87E+2[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

酸化ケイ素基板内部に正負の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.5[V]を印加する

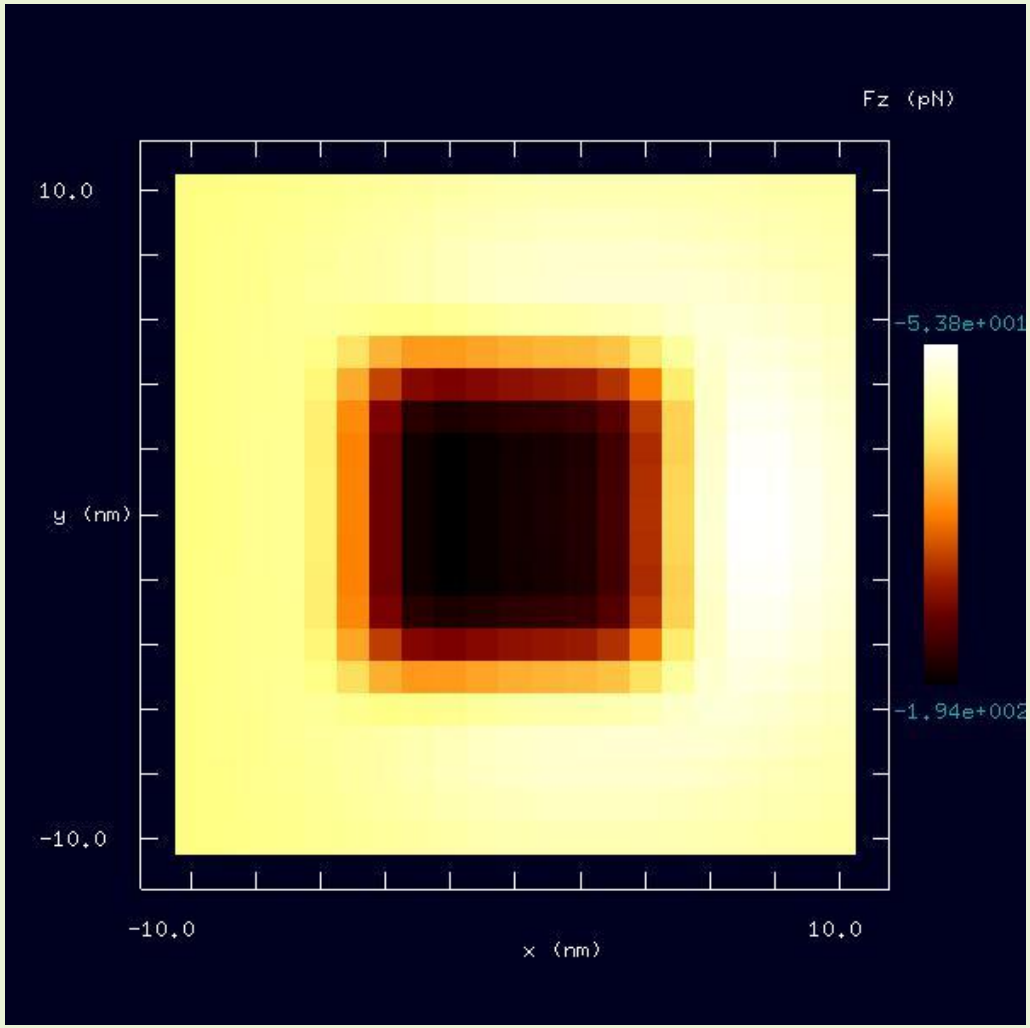
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|と-1.0|e|の正負の電荷を1個ずつ、配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.001[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：9.77[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

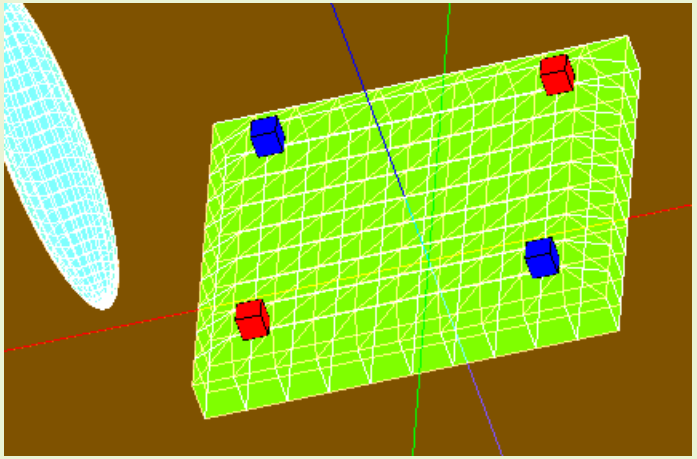
探針に電圧-0.5[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-5.38E+1[pN]
力の最小値:-1.94E+2[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

酸化ケイ素基板上に正負の電荷4個を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

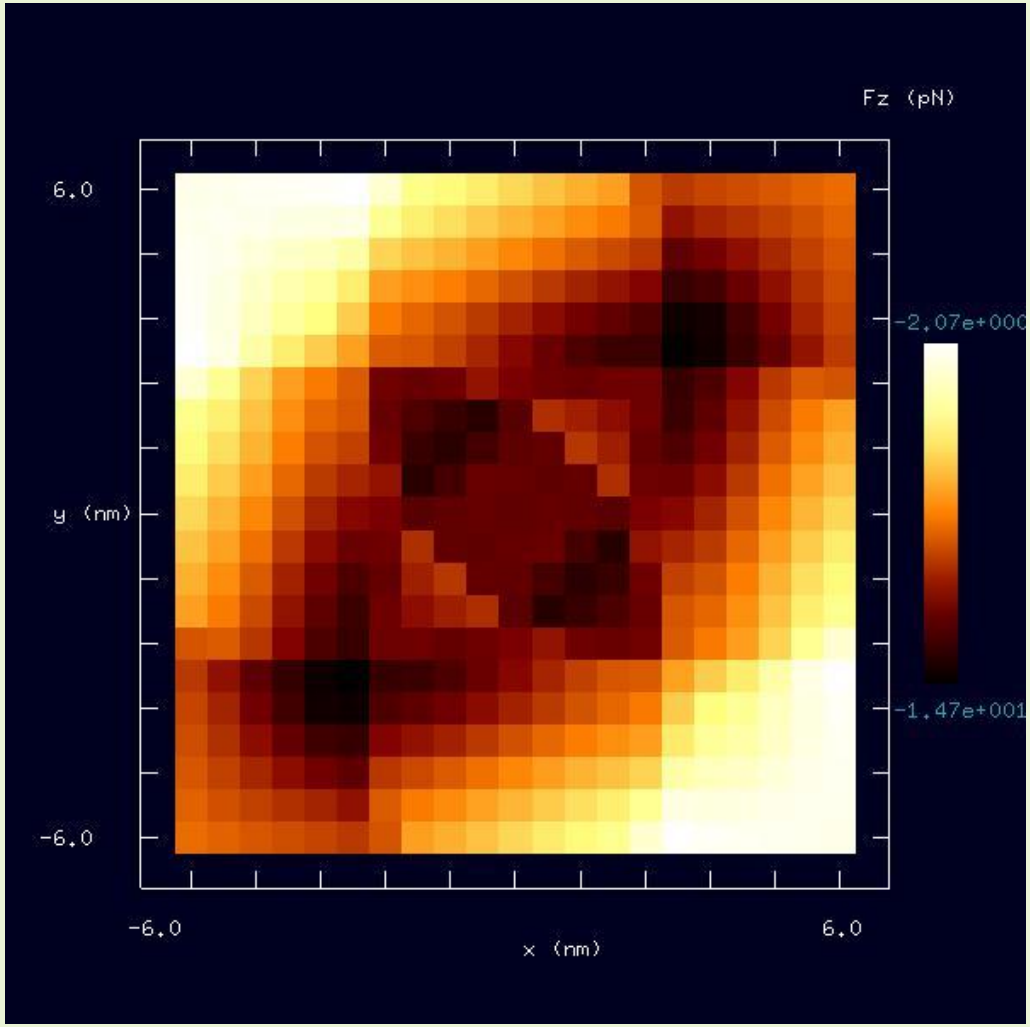
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を2個ずつ、配置した

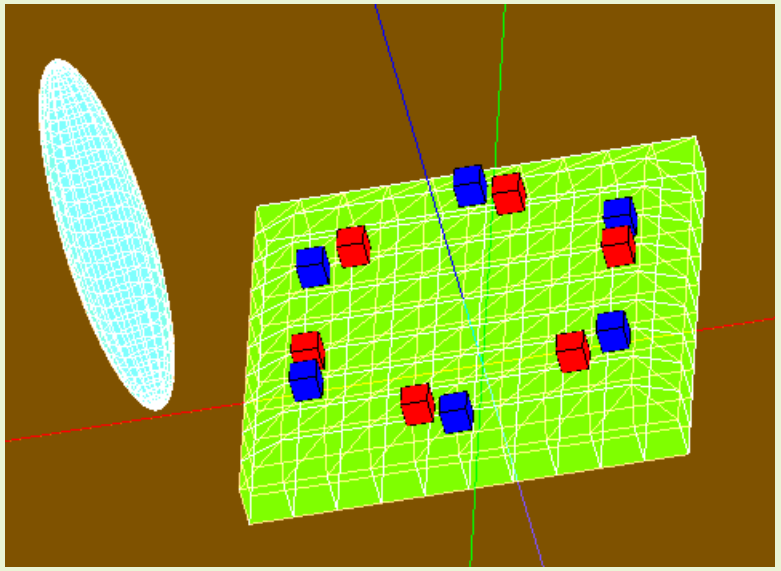
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-2.07E+0[pN]
力の最小値:-1.47E+1[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals



探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像

探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

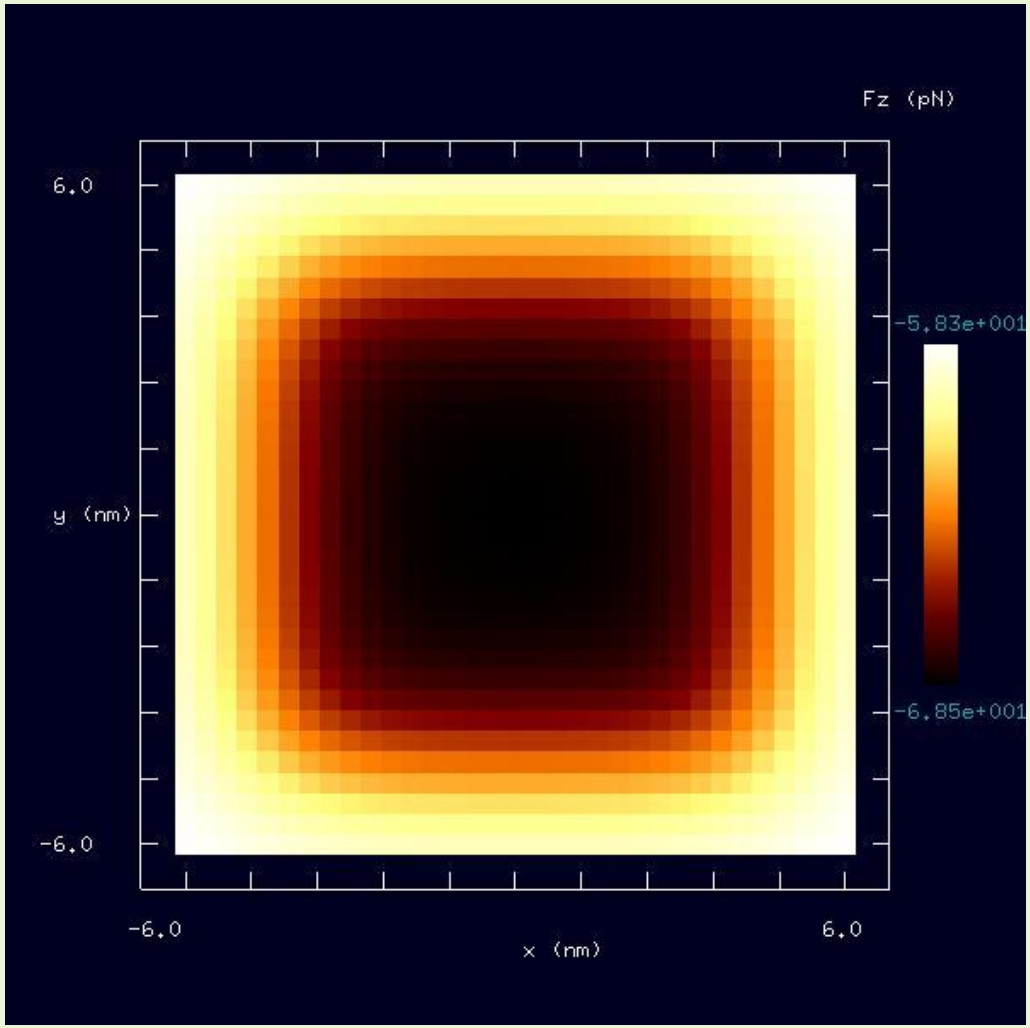
探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

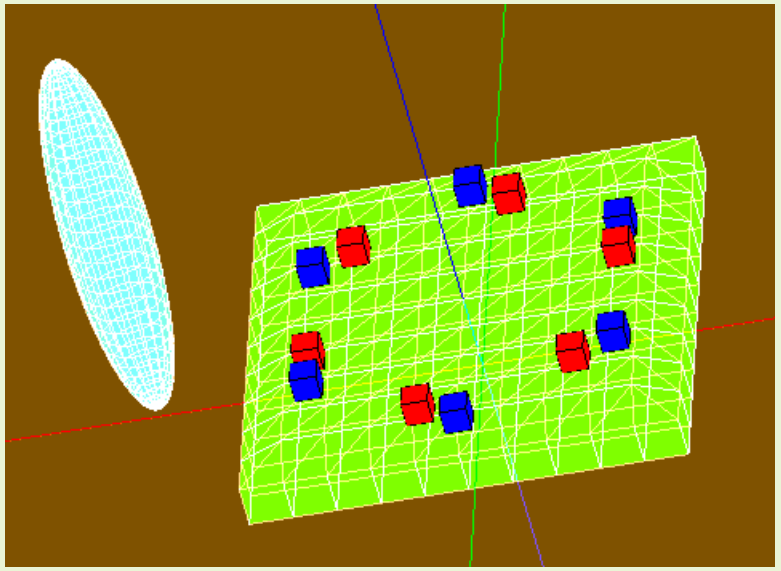
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-5.83E+1[pN]
力の最小値:-6.85E+1[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

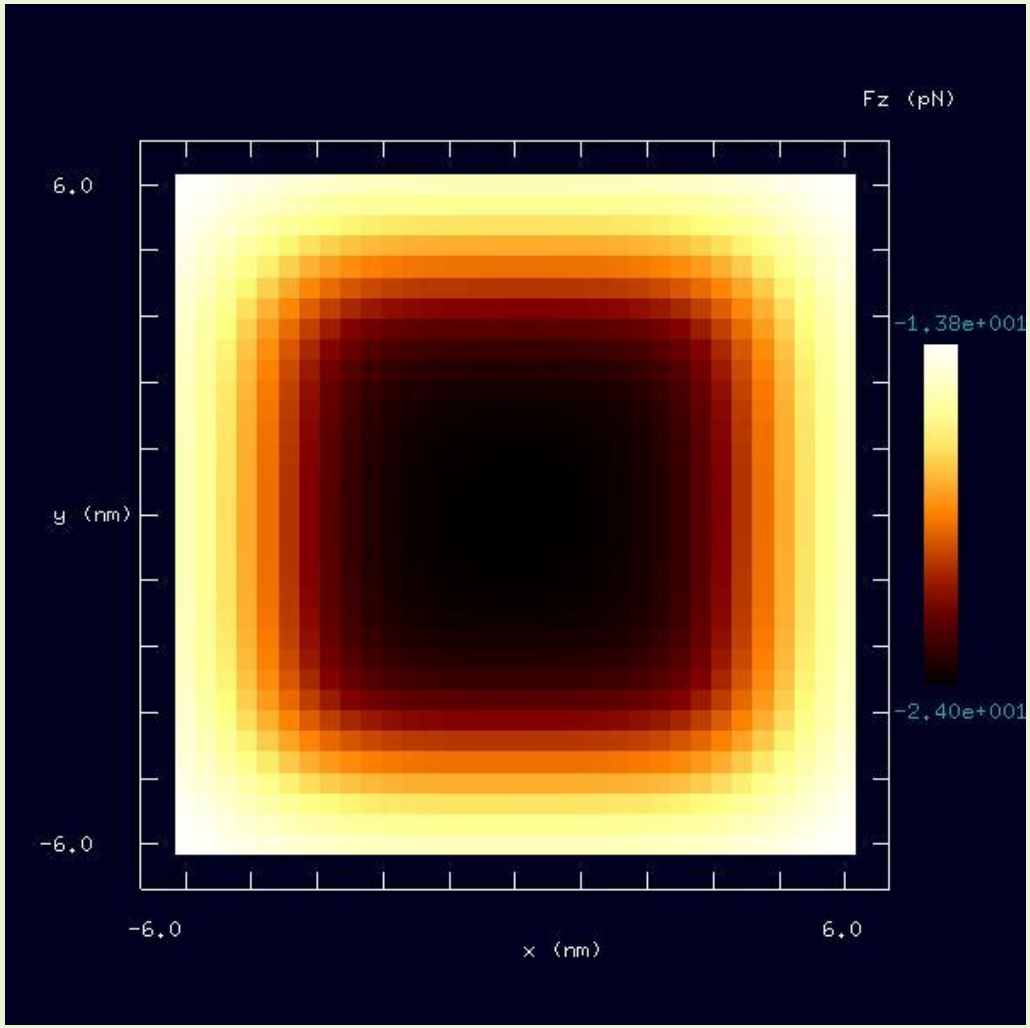
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

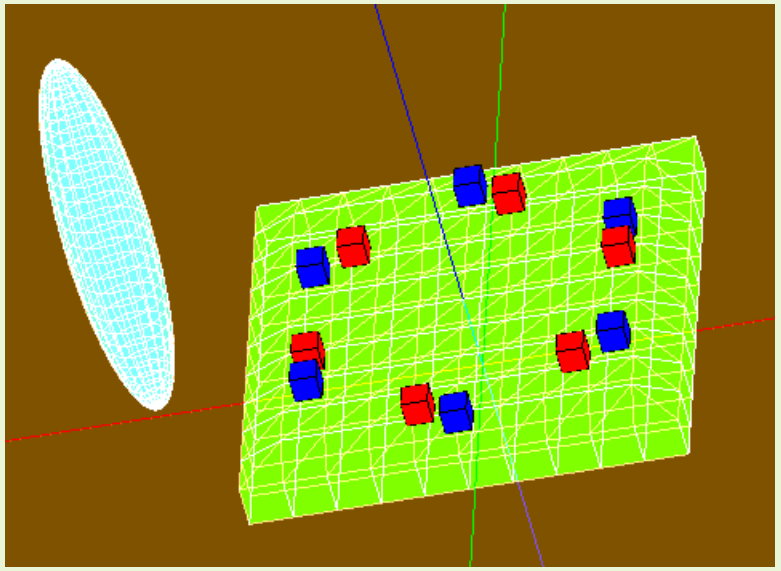
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-1.38E+1[pN]
力の最小値:-2.40E+1[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals



探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合の探針の感じる力の像

探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

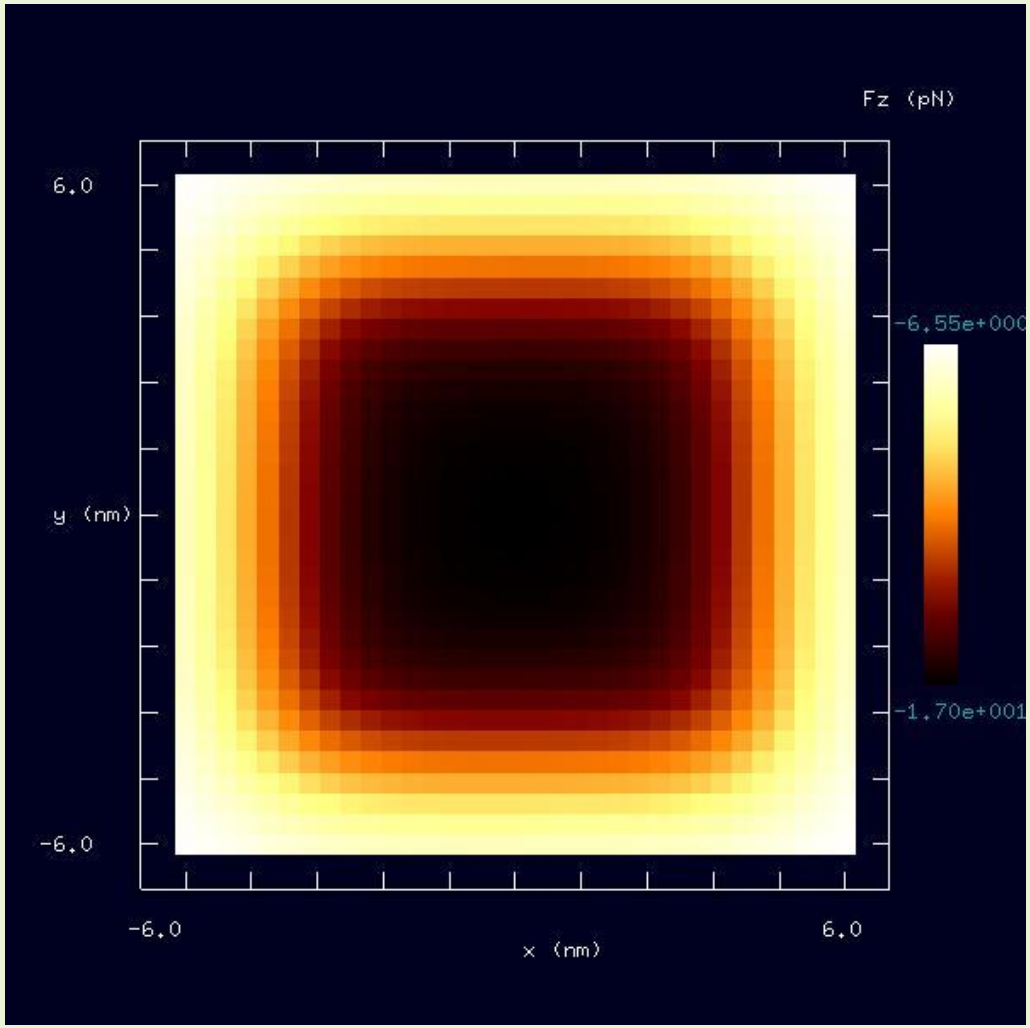
探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

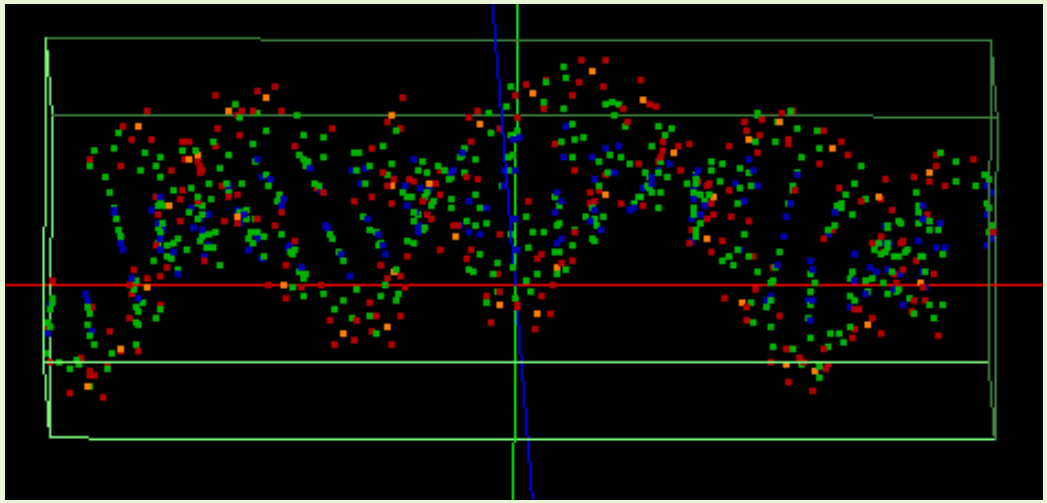
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



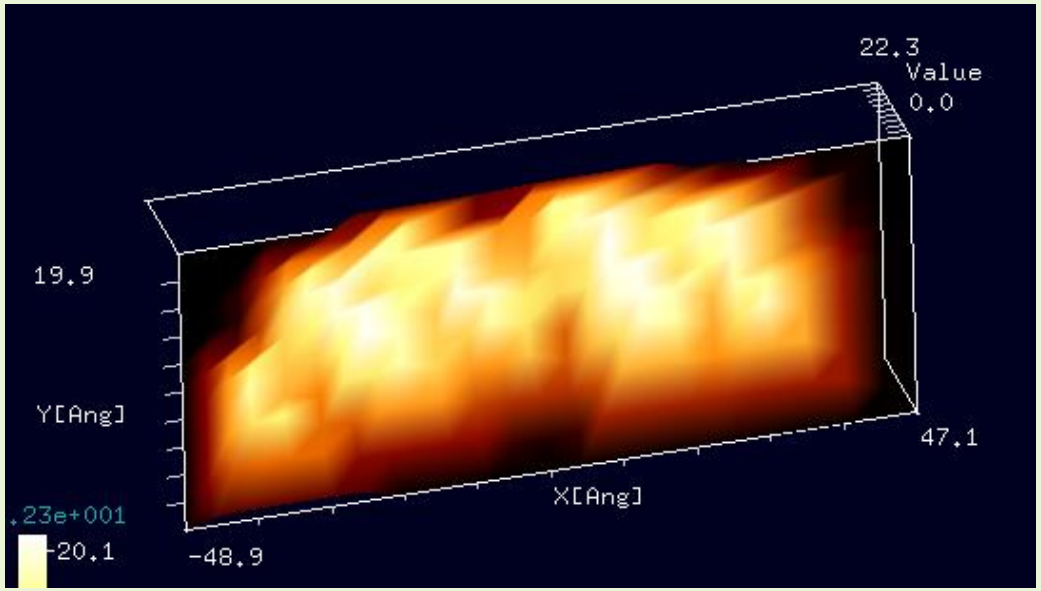
力の最大値:-6.55E+0[pN]
力の最小値:-1.70E+1[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

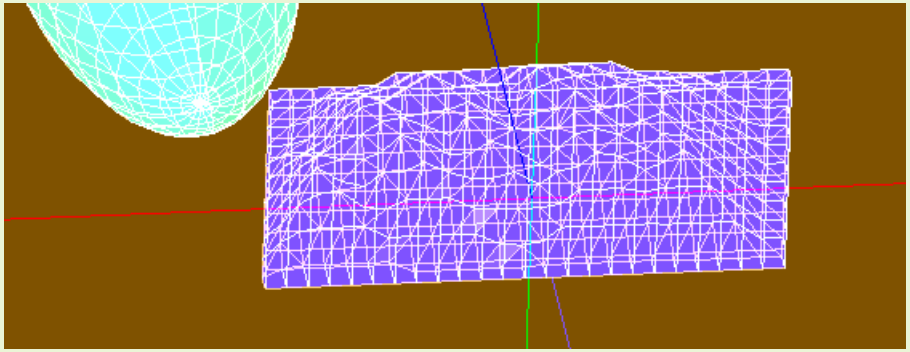
DNA分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



DNAの分子構造図



DNA分子に対して、0.4[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅9.6[nm]、深さ4[nm]、高さ2.63[nm]のDNA分子

試料のメッシュ幅は0.4[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：4.87[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

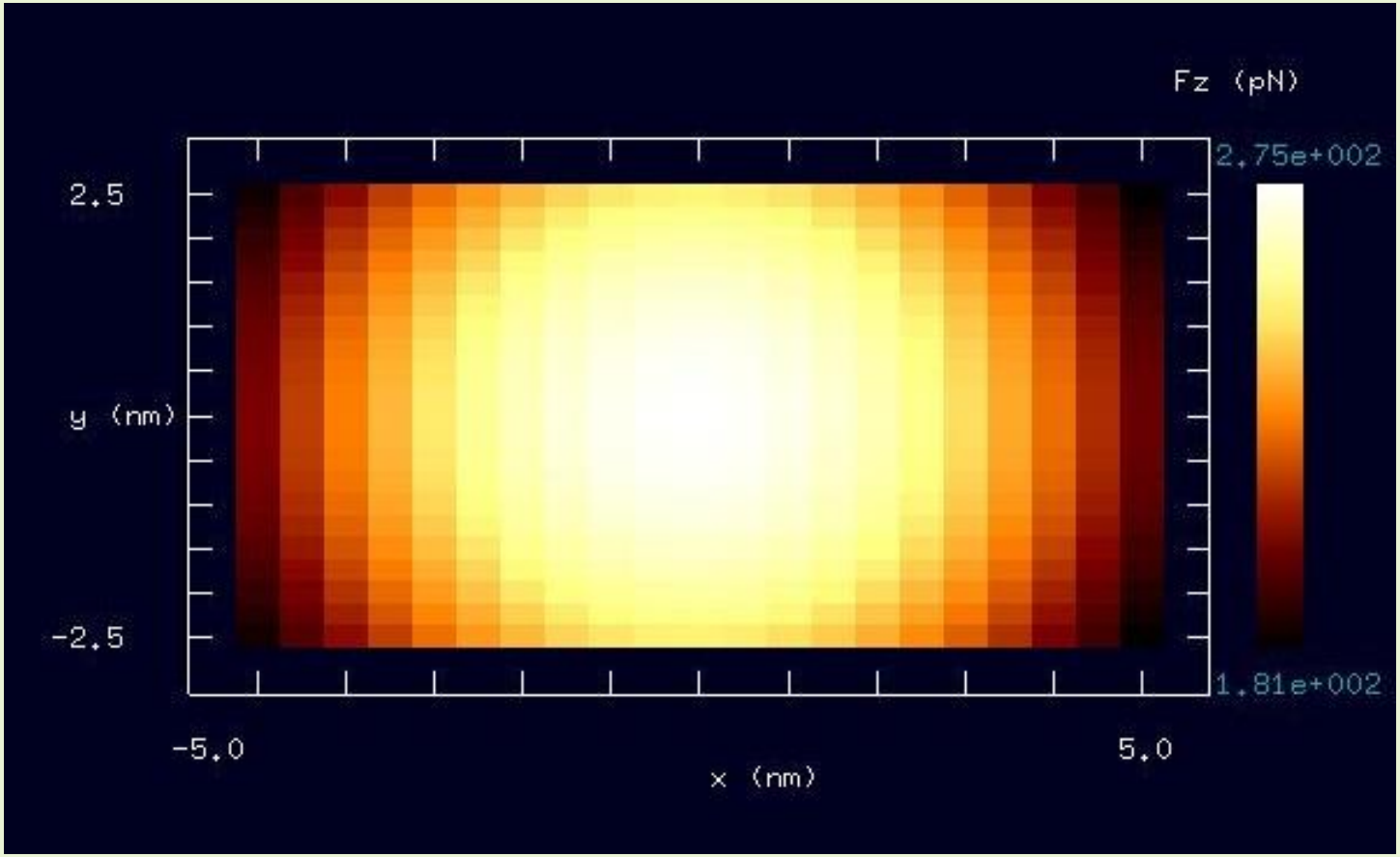
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針は導体とする
探針に電圧-0.5[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-3.0E-1[C/m^2]の電荷を分布させる

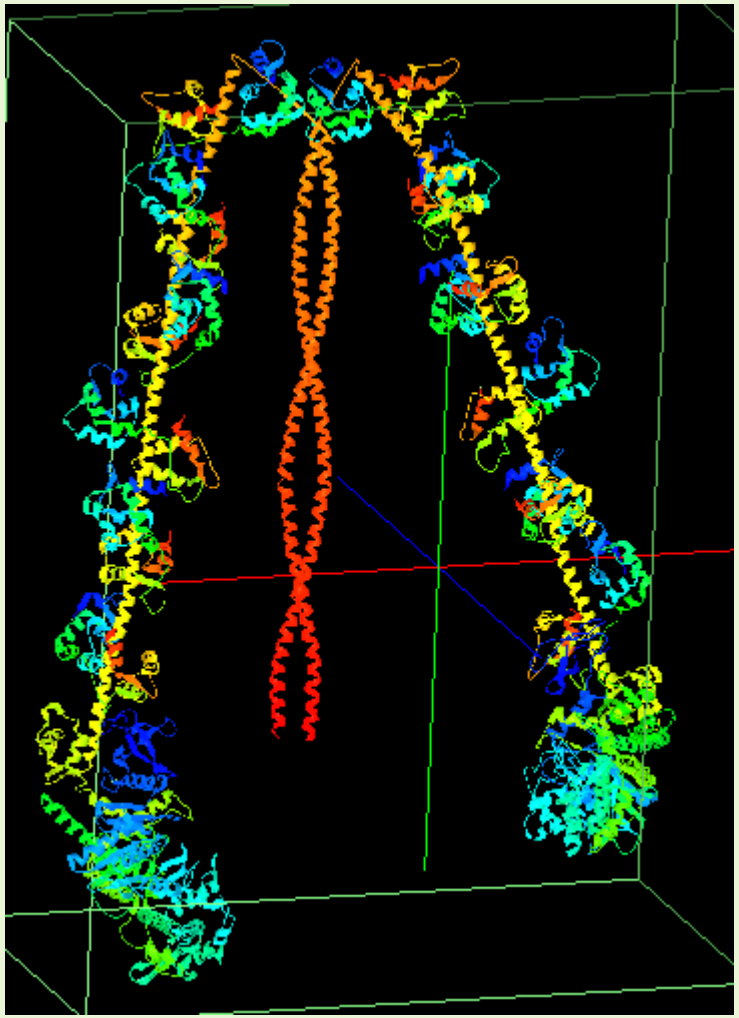
探針に電圧-0.5[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布

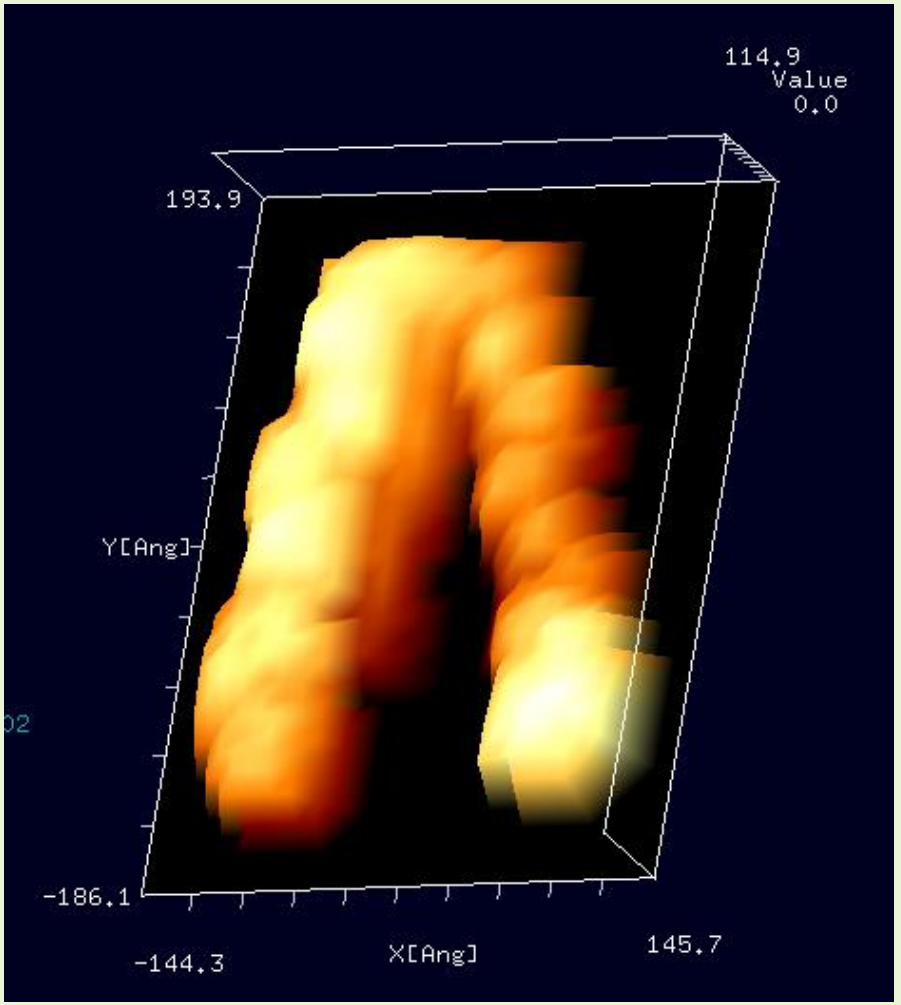


力の最大値:2.75E+2[pN]
力の最小値:1.81E+2[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

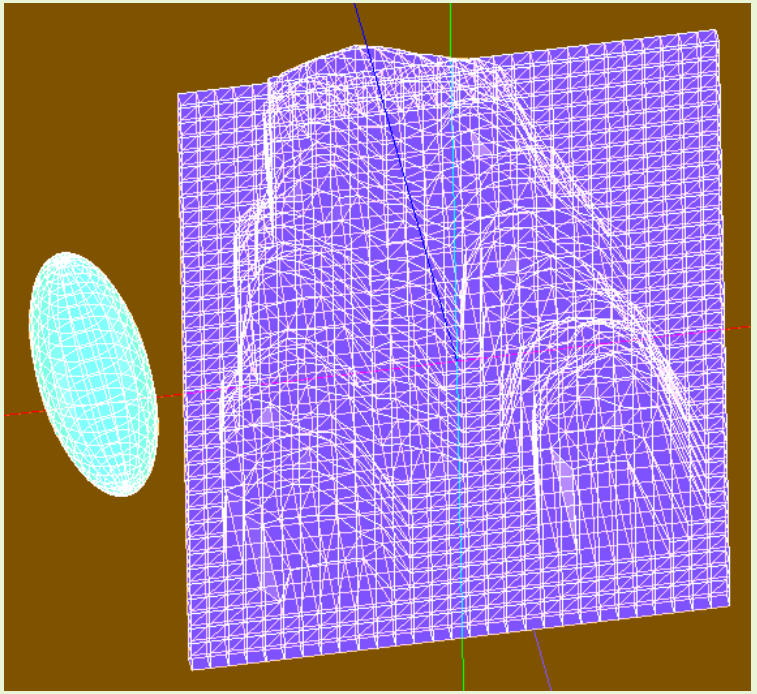
ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像





DNAの分子構造図

DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の
回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]の
ミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

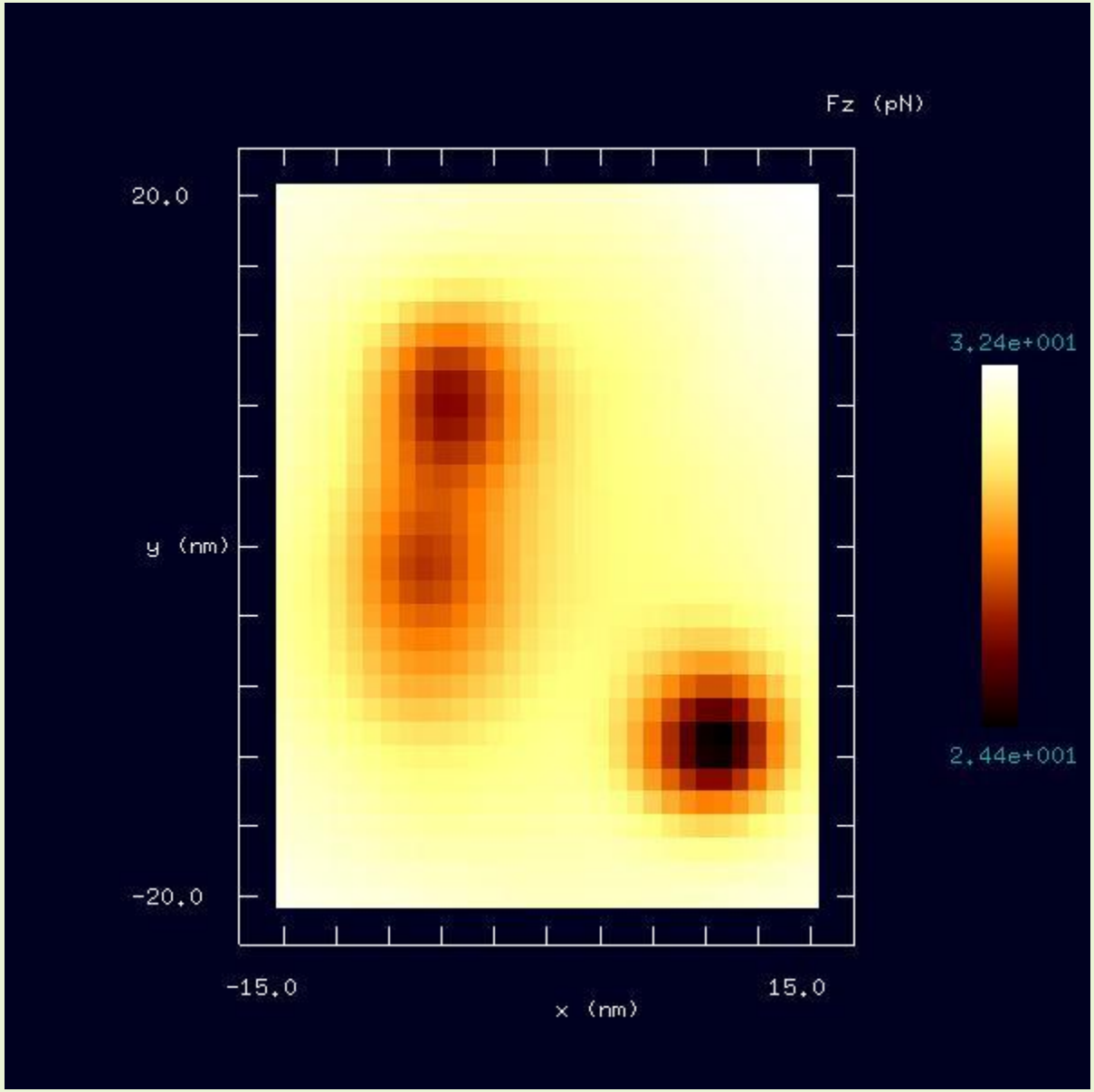
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

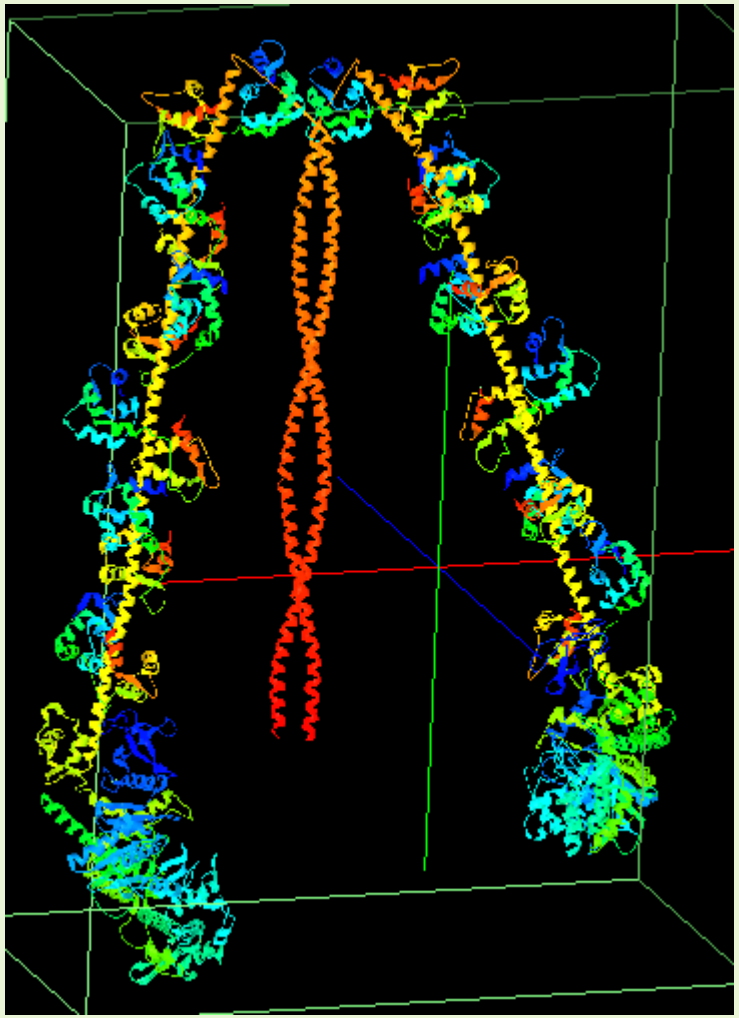
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布

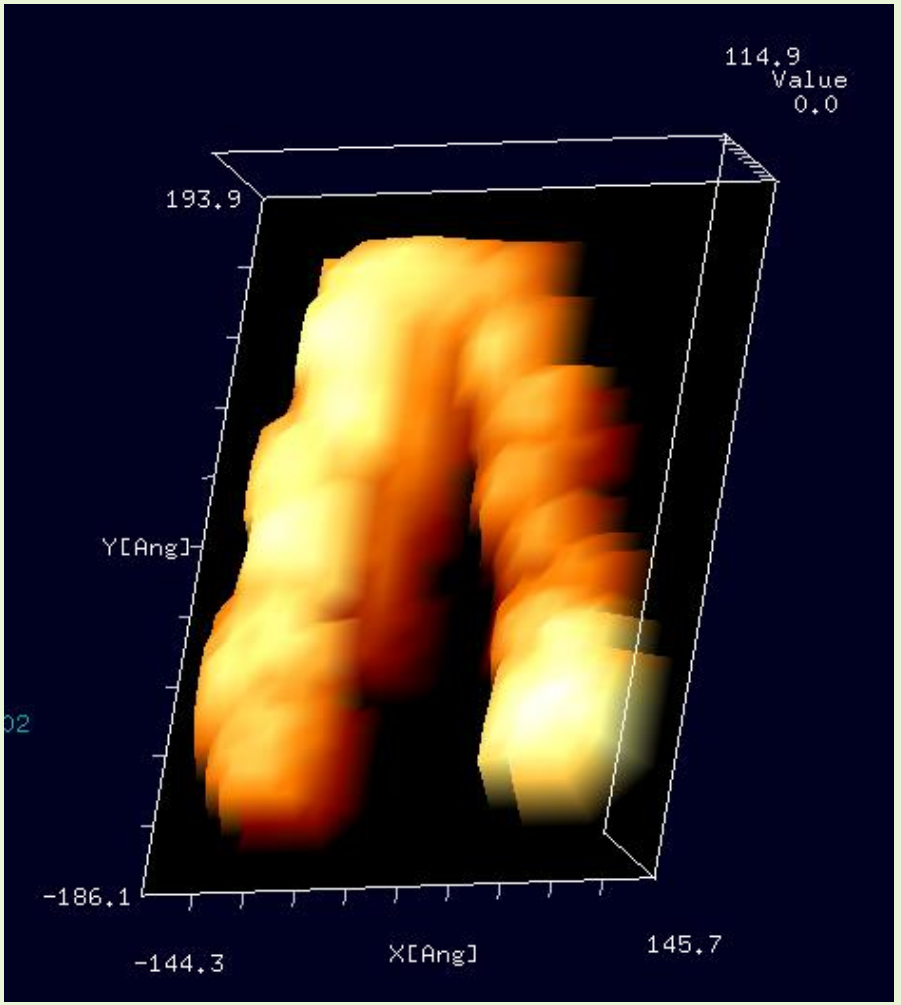


力の最大値:3.24E+1[pN]
力の最小値:2.44E+1[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

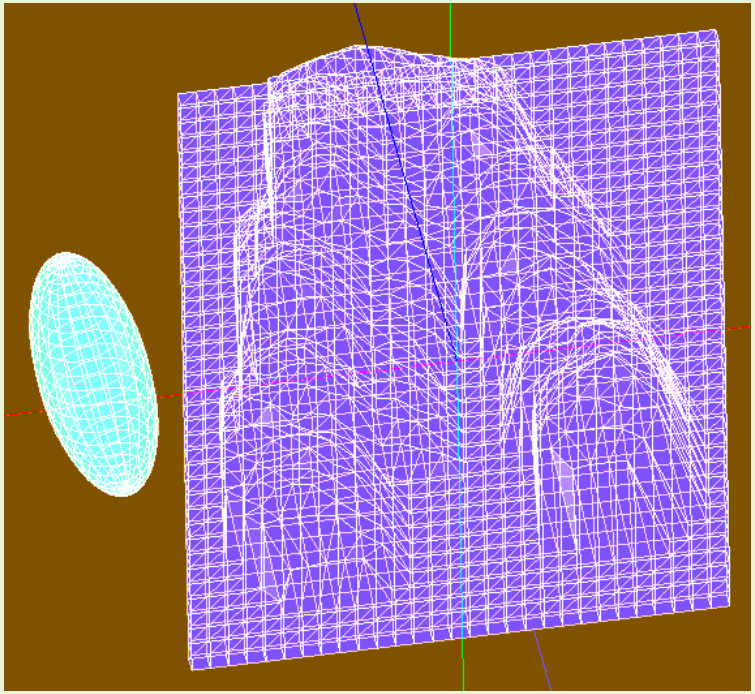
ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像





DNAの分子構造図

DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の
回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]の
ミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

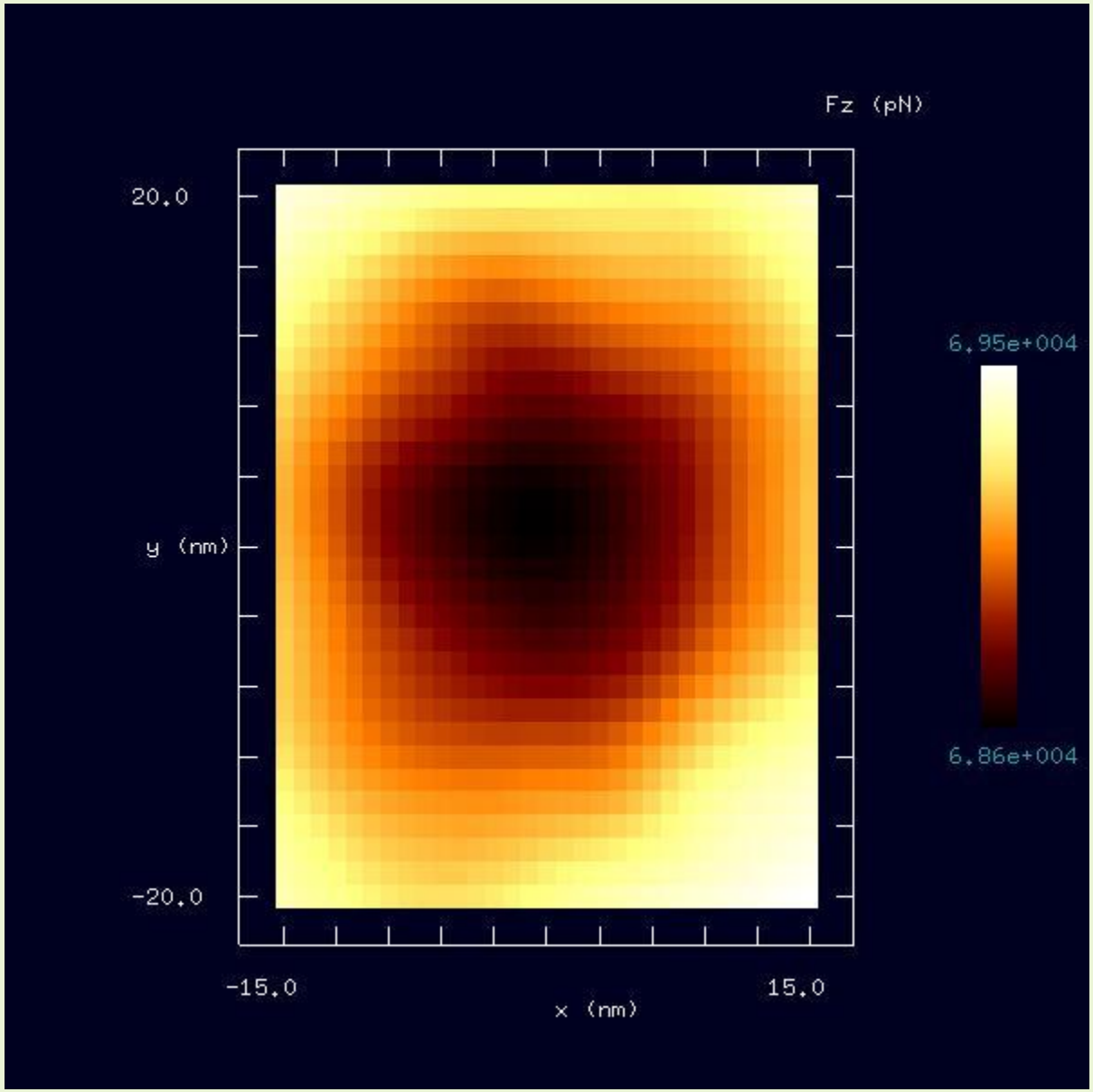
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

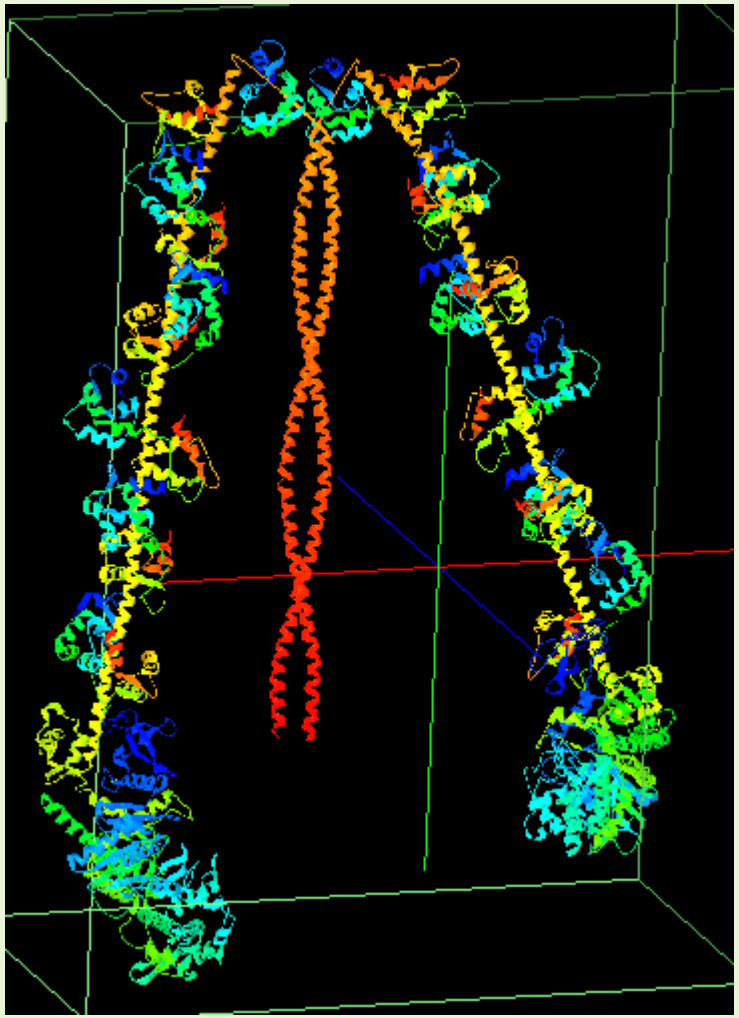
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布

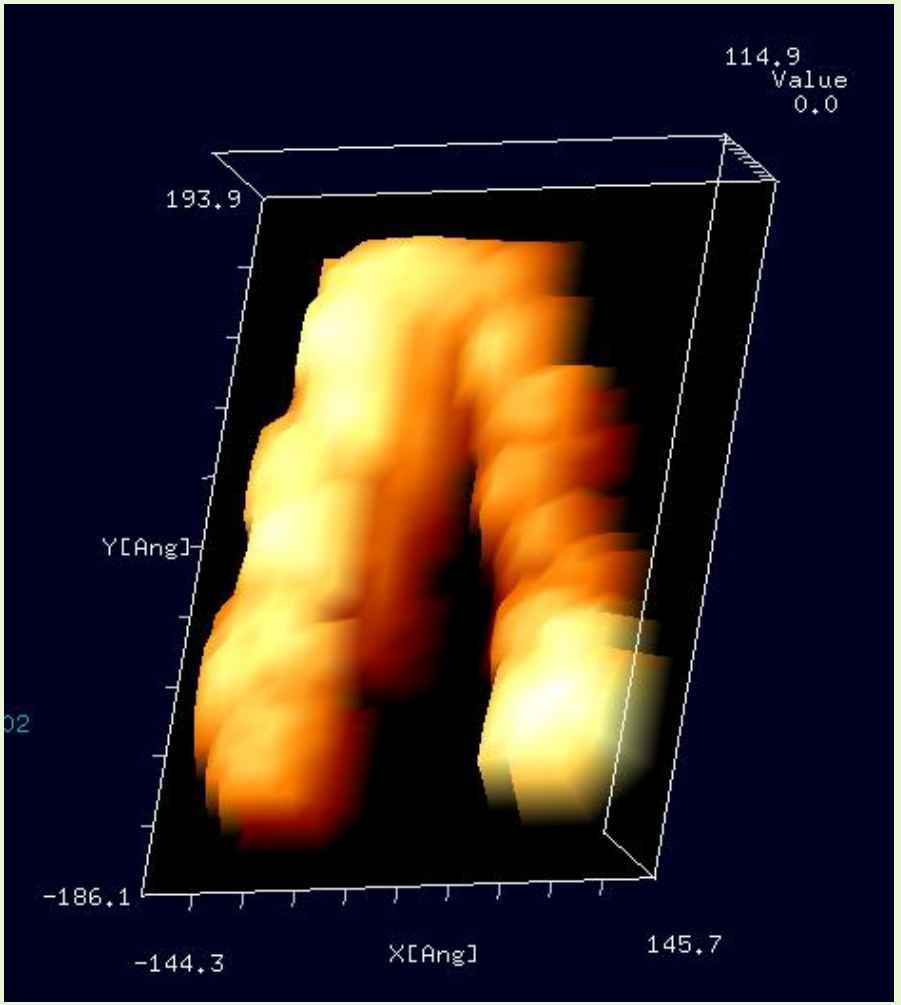


力の最大値:6.95E+4[pN]
力の最小値:6.86E+4[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

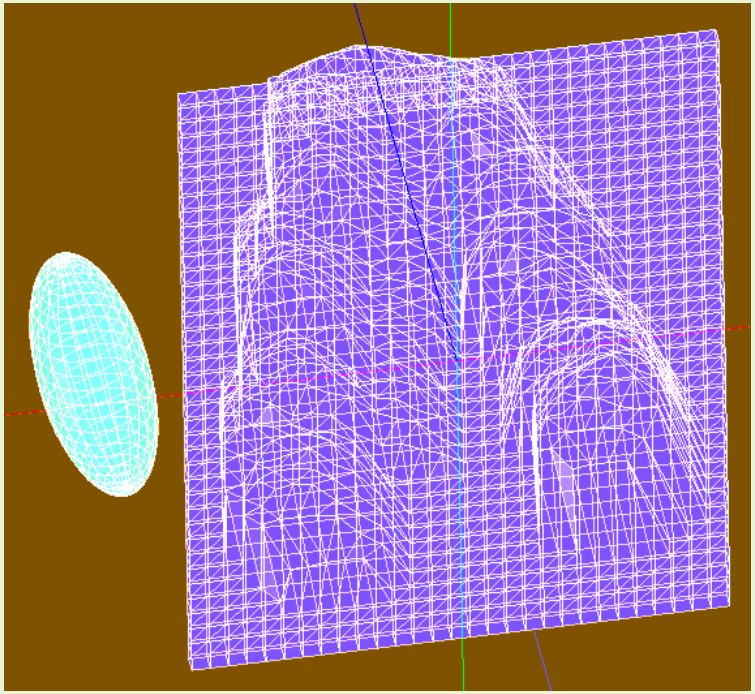
ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像





DNAの分子構造図

DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の
回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]の
ミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

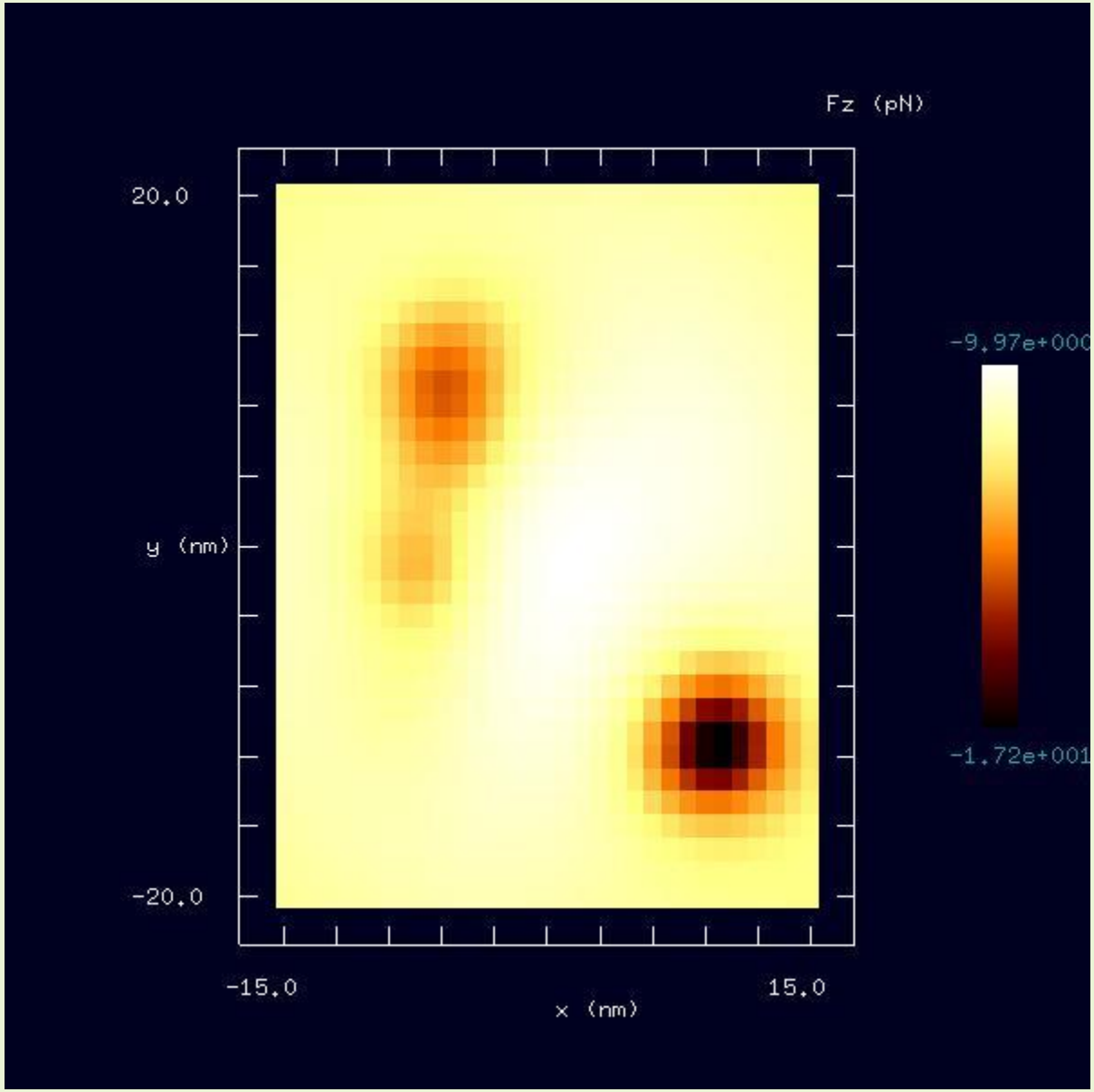
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

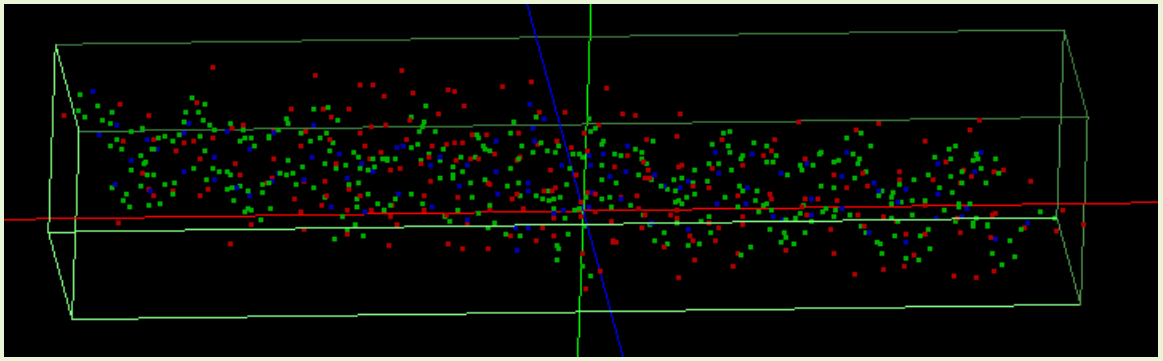
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



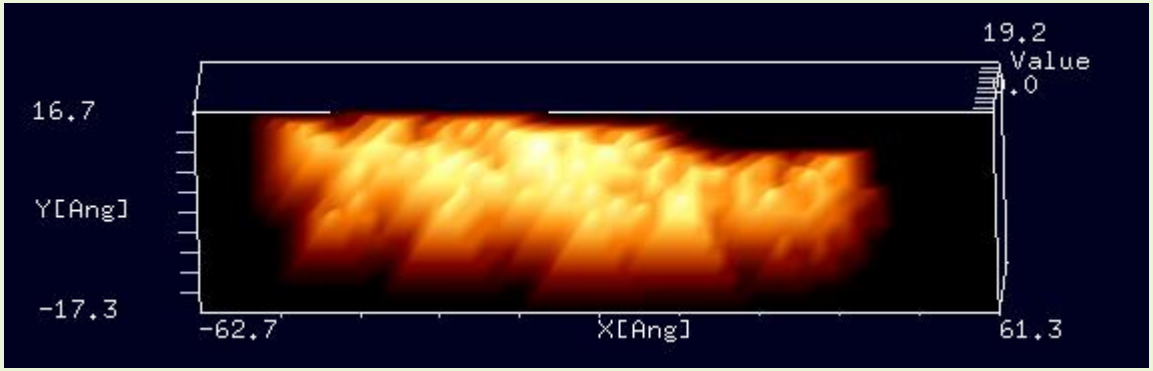
力の最大値:-9.97E+0[pN]
力の最小値:-1.72E+1[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

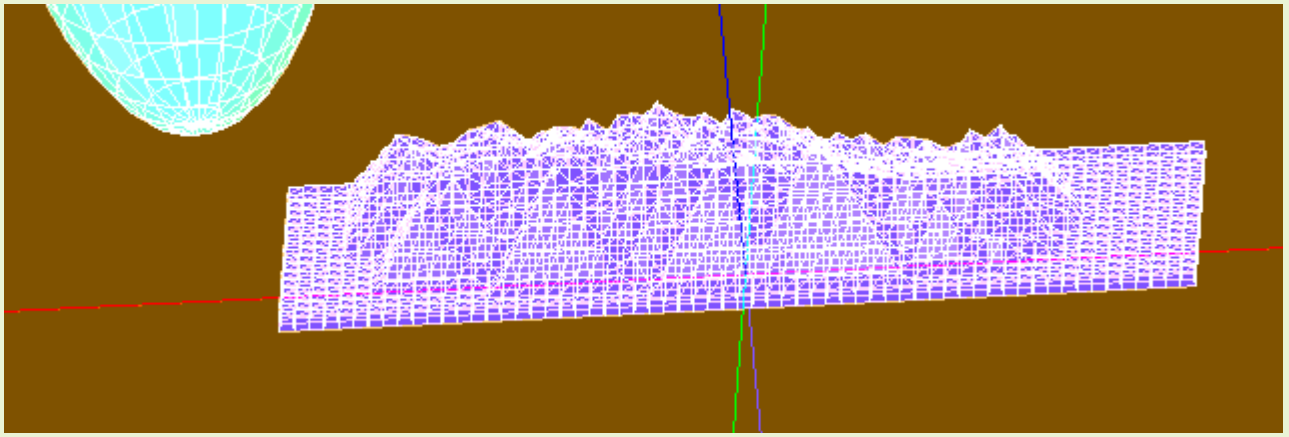
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、
高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]
とした

探針先端と試料の最短距離：
1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]の
コラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

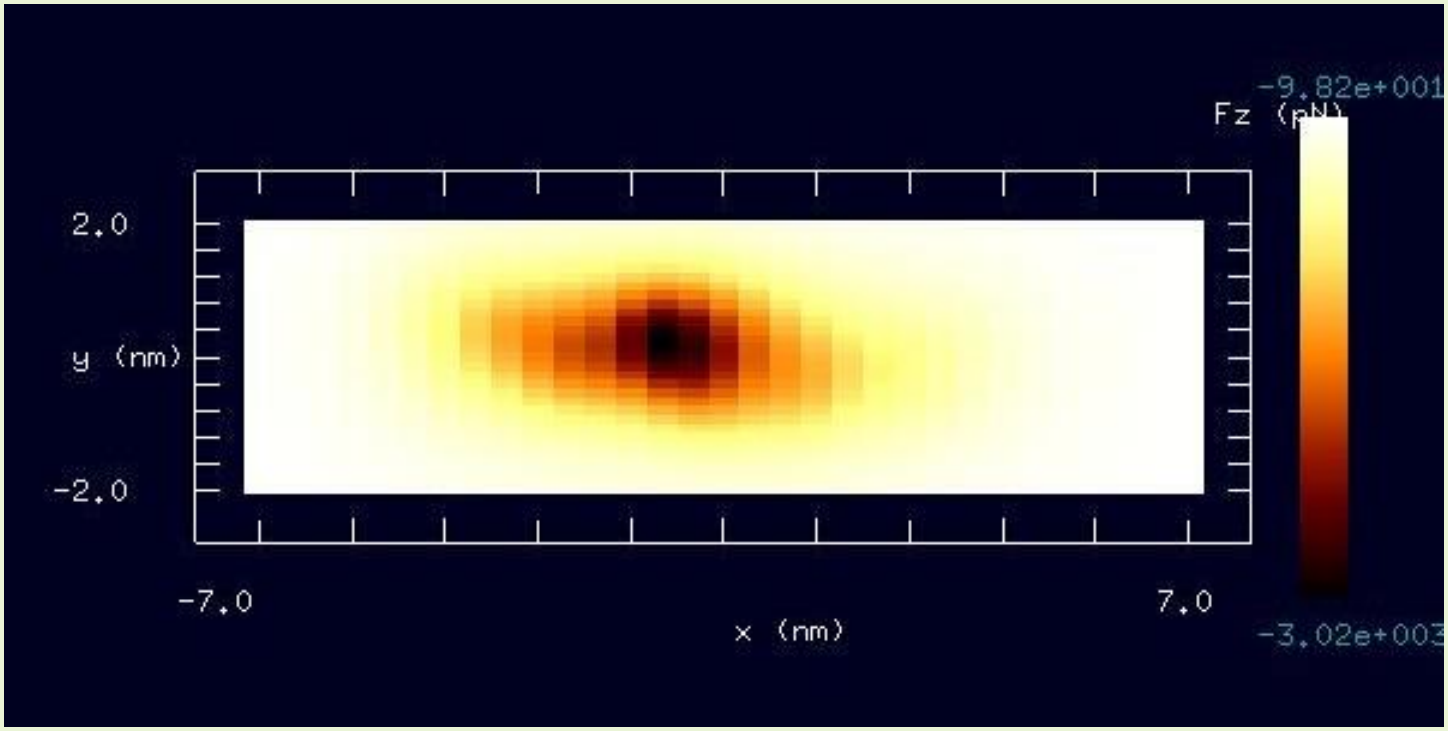
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

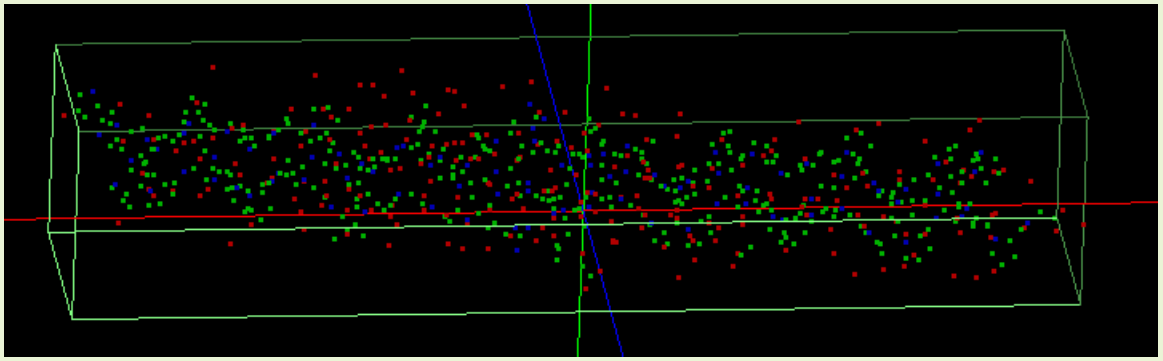
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



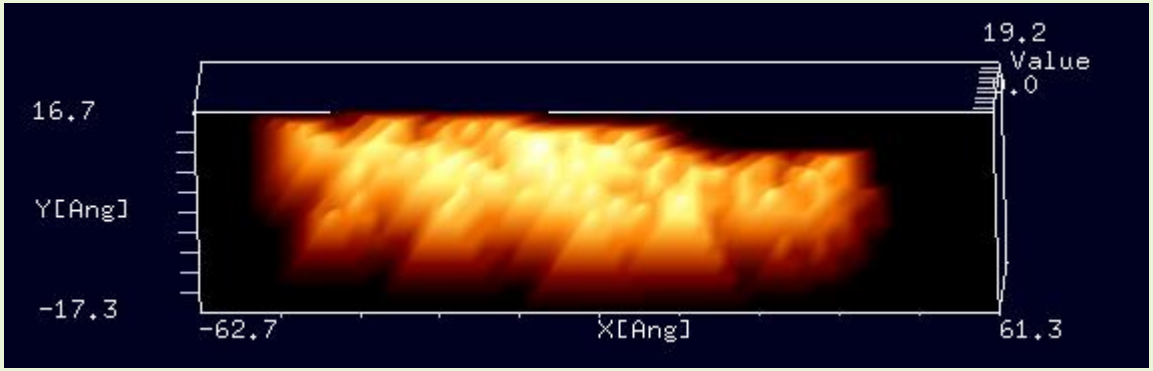
力の最大値:-9.82E+1[pN]
力の最小値:-3.02E+3[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

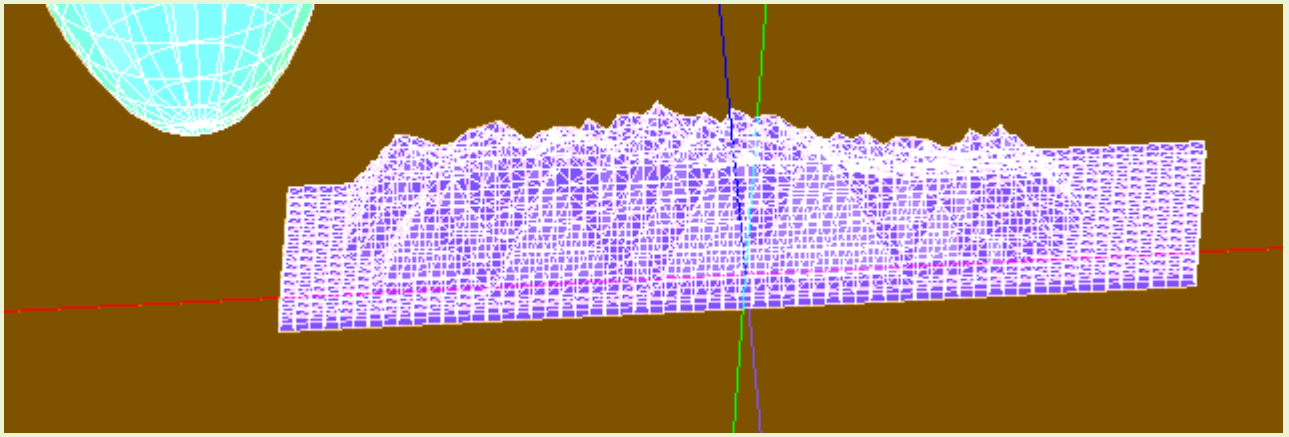
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、
高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]
とした

探針先端と試料の最短距離：
1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]の
コラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

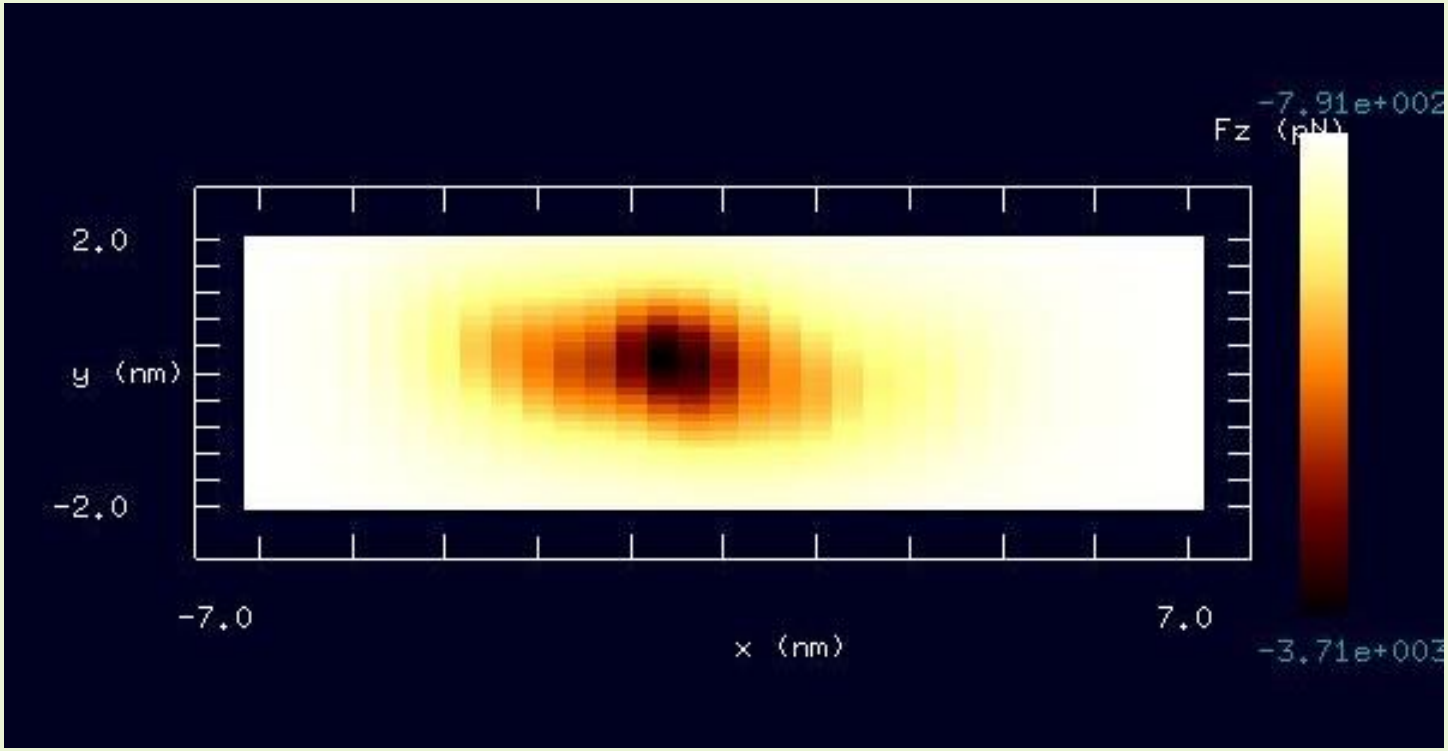
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

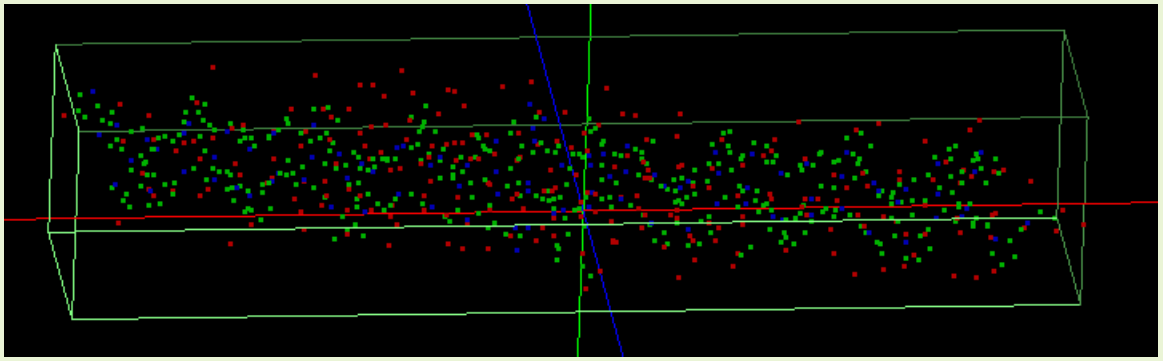
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



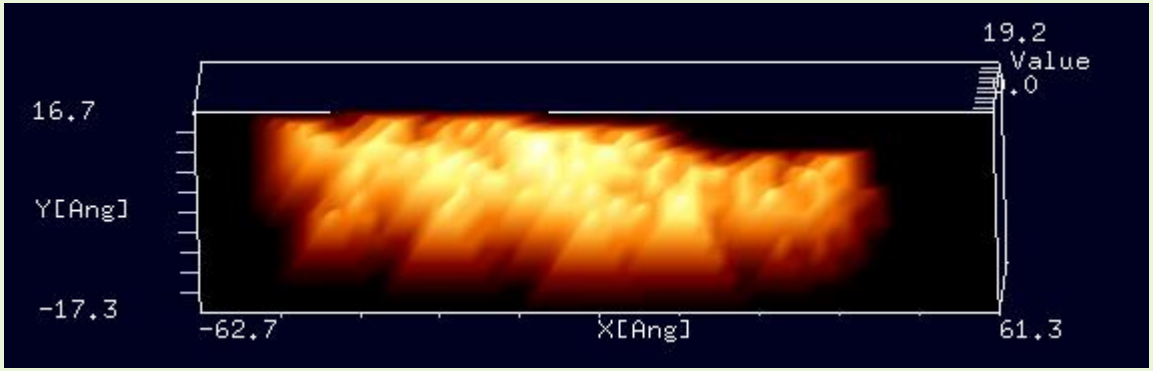
力の最大値:-7.91E+2[pN]
力の最小値:-3.71E+3[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

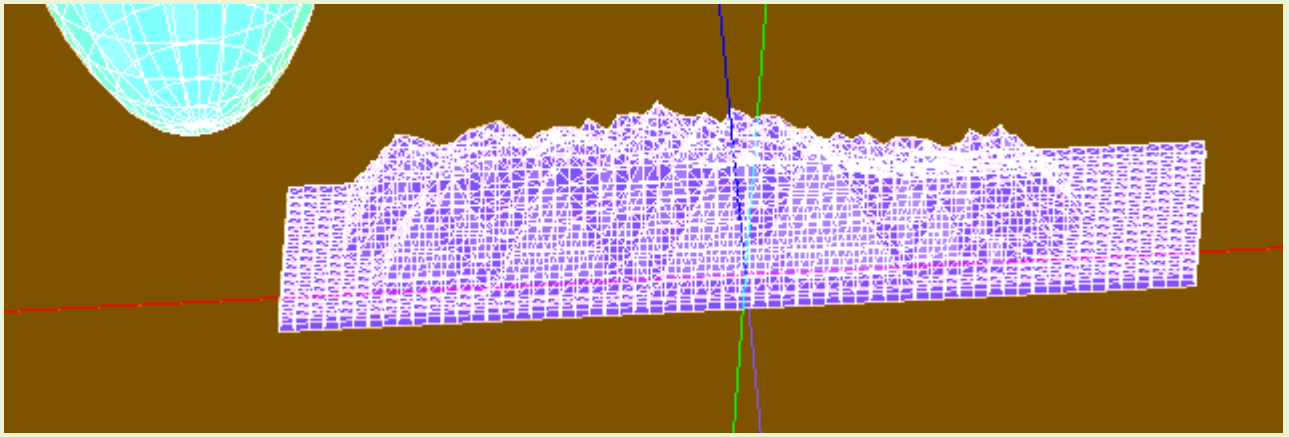
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、
高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]
とした

探針先端と試料の最短距離：
1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]の
コラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

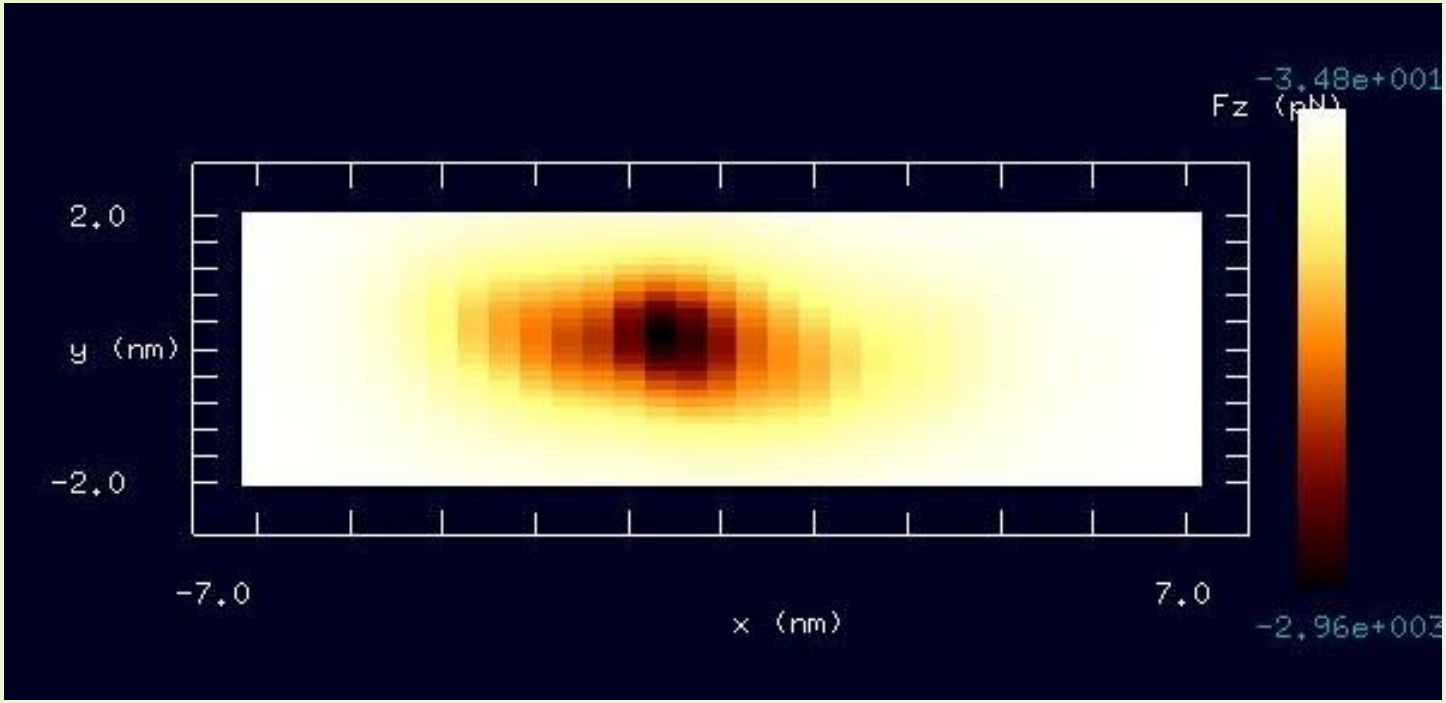
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

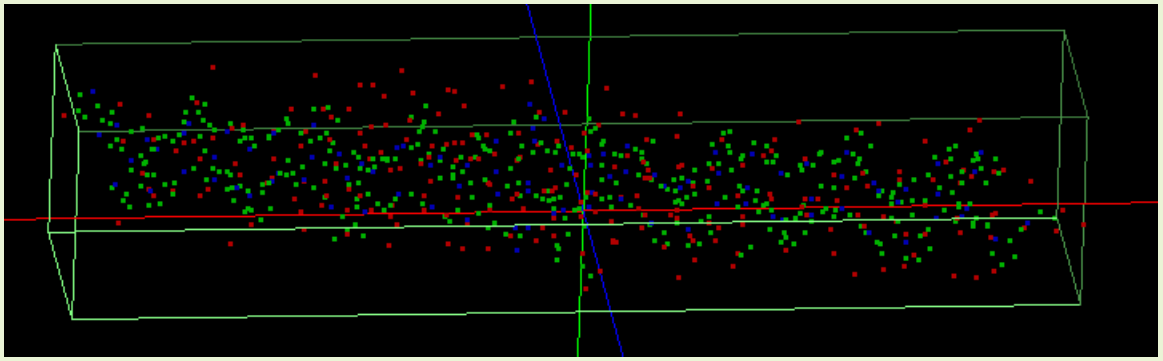
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



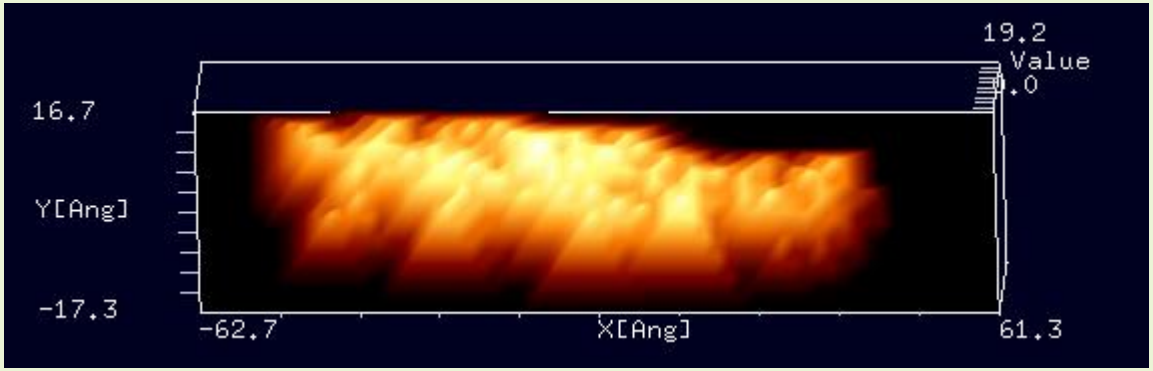
力の最大値:-3.48E+1[pN]
力の最小値:-2.96E+3[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

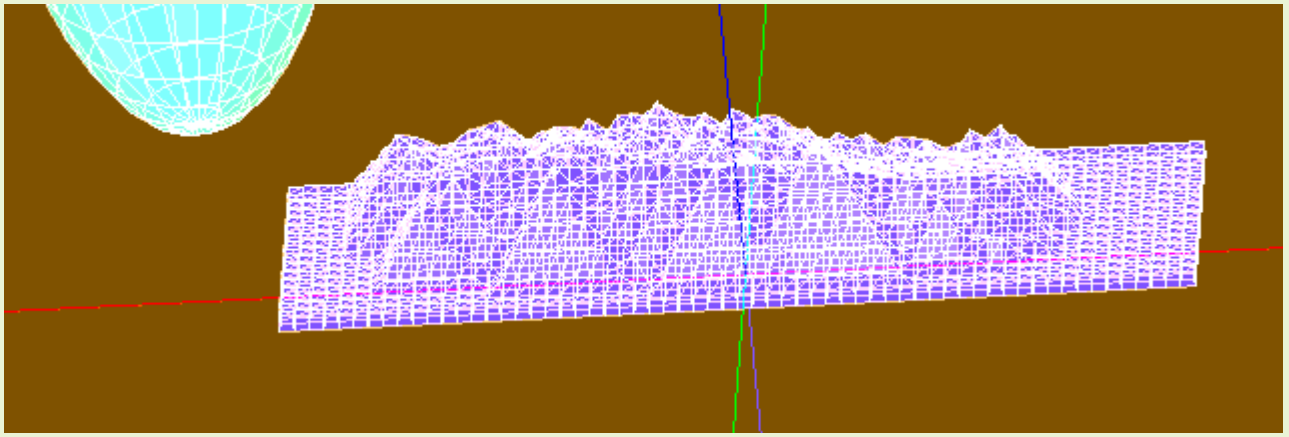
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、
高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]
とした

探針先端と試料の最短距離：
1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]の
コラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

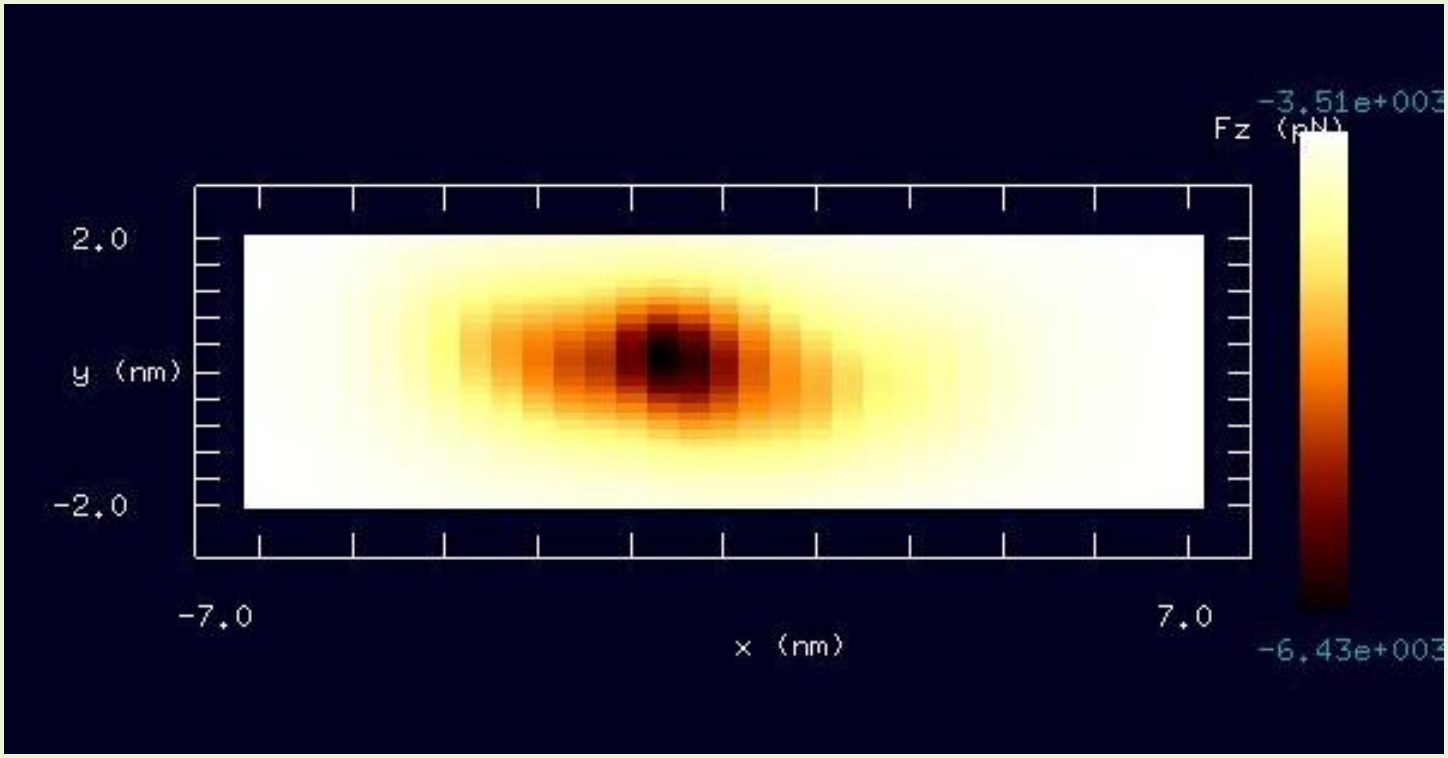
探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を
分布させる

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

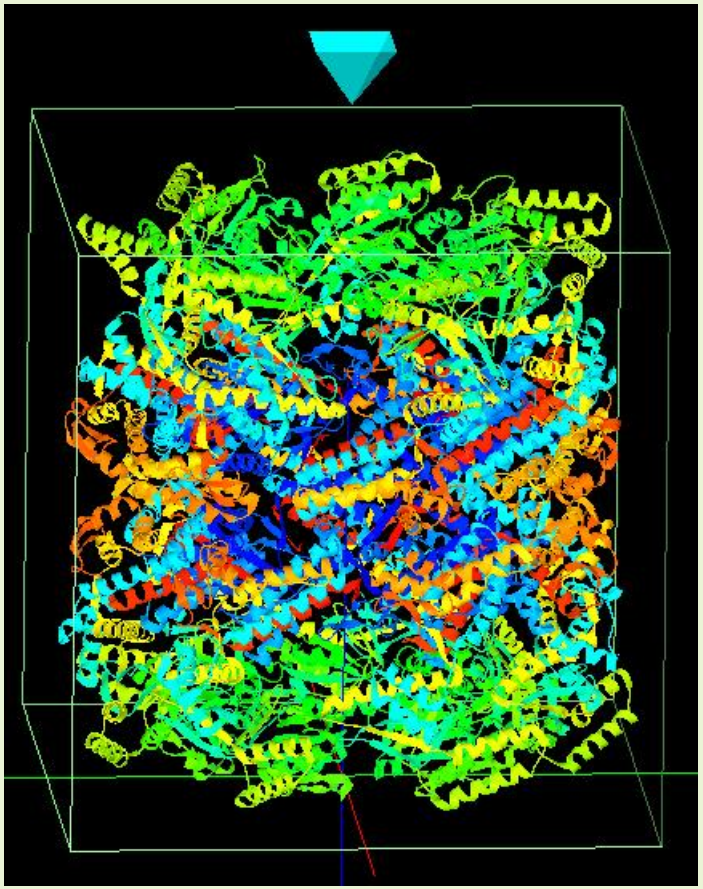
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



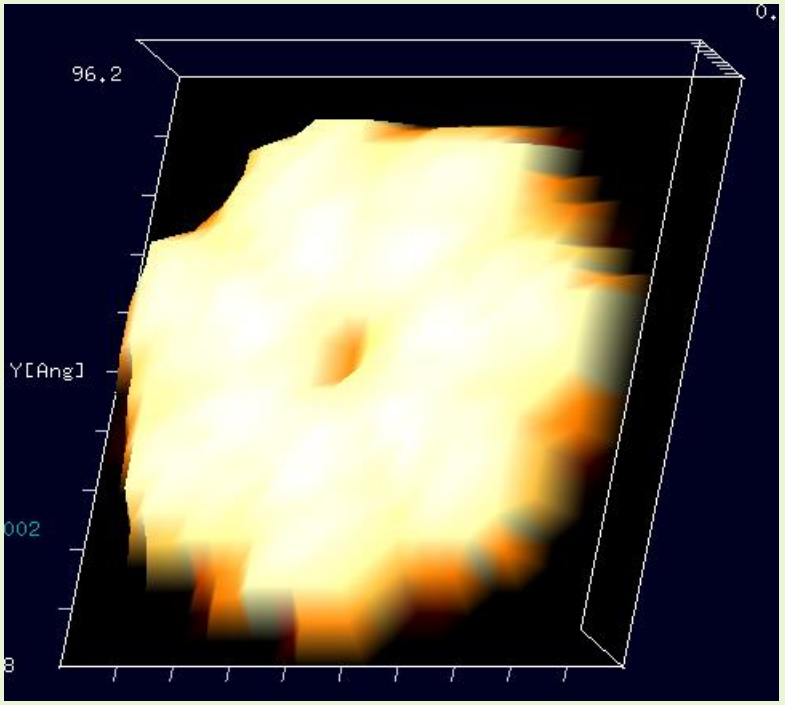
力の最大値:-3.51E+3[pN]
力の最小値:-6.43E+3[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

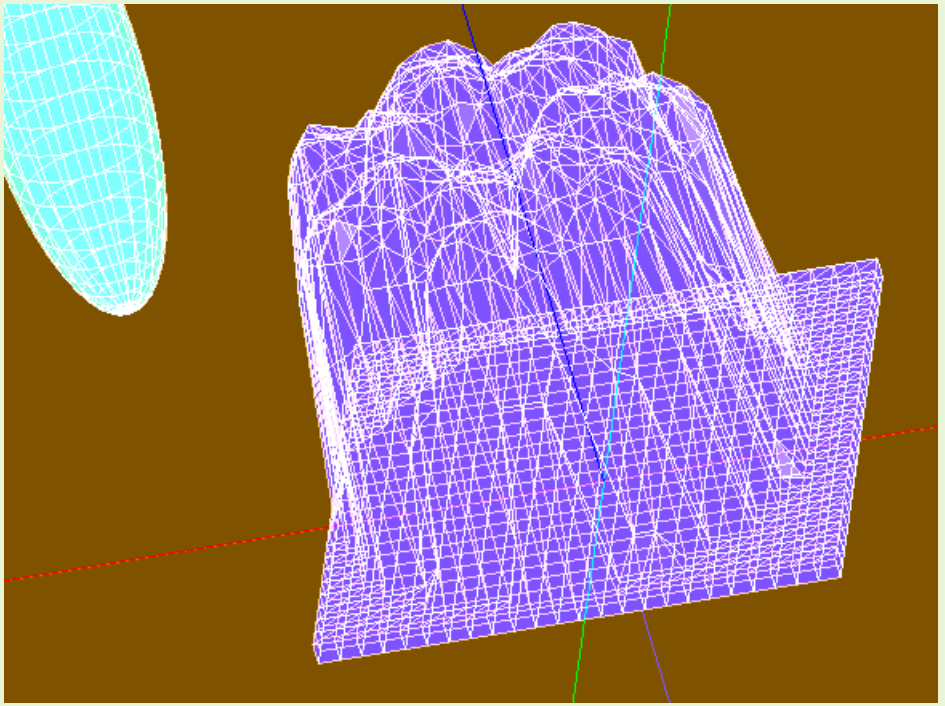
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

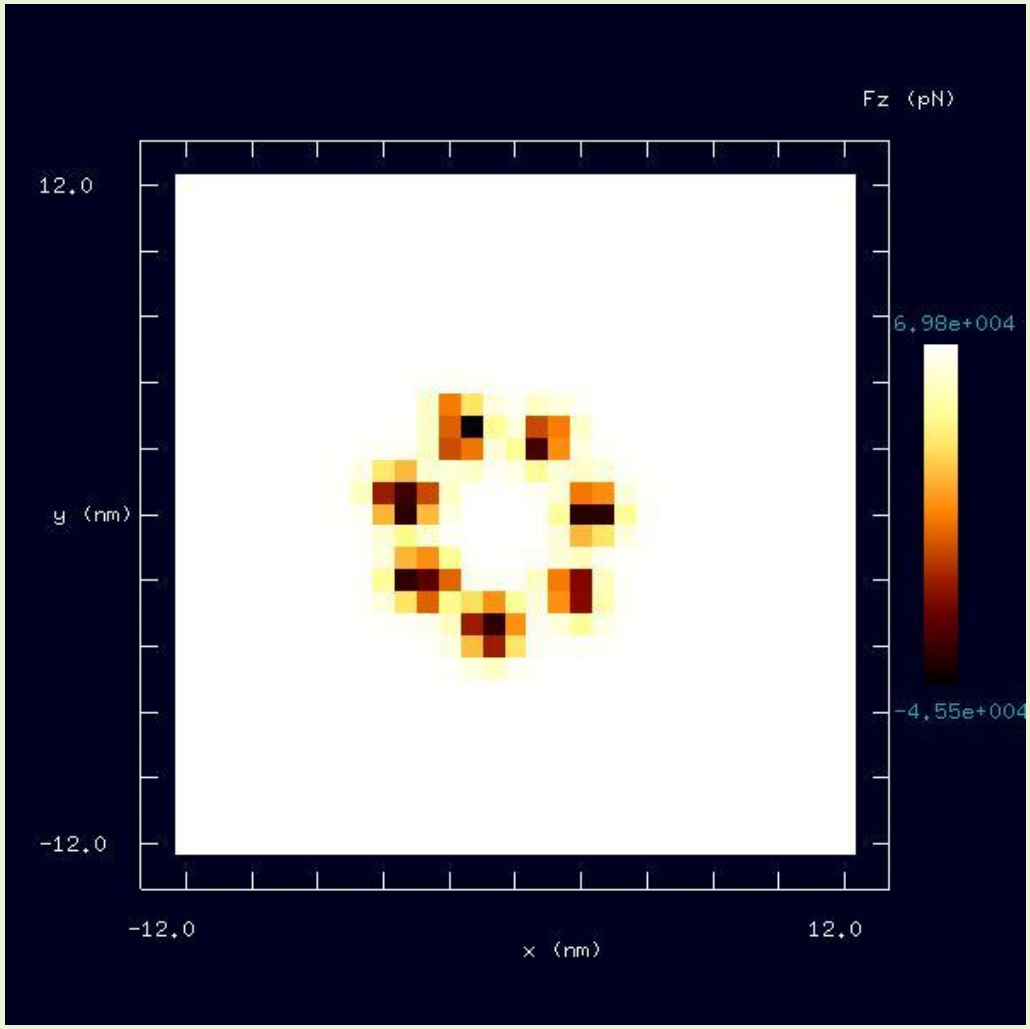
試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

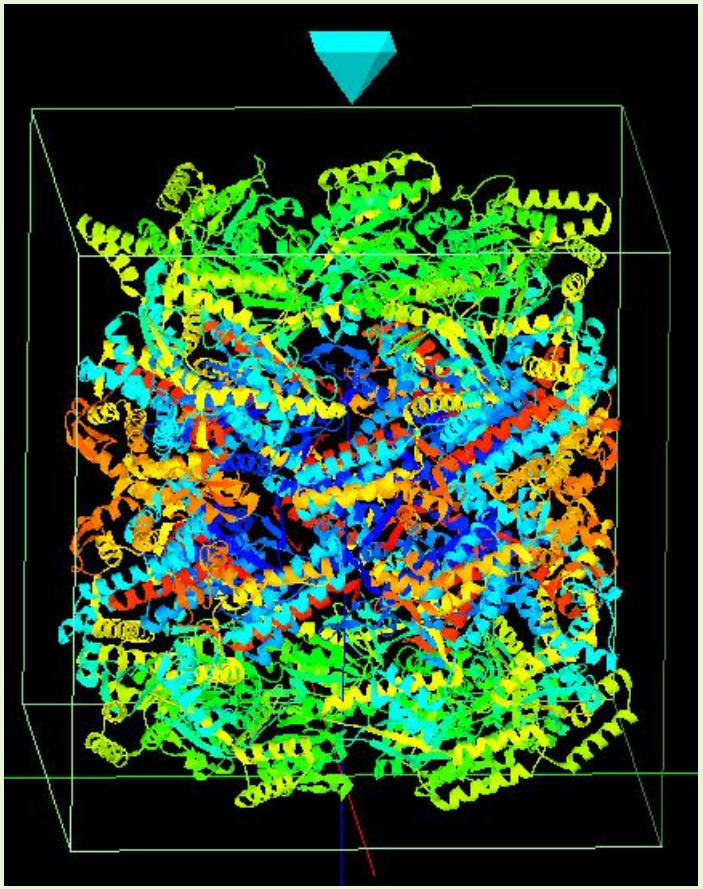
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



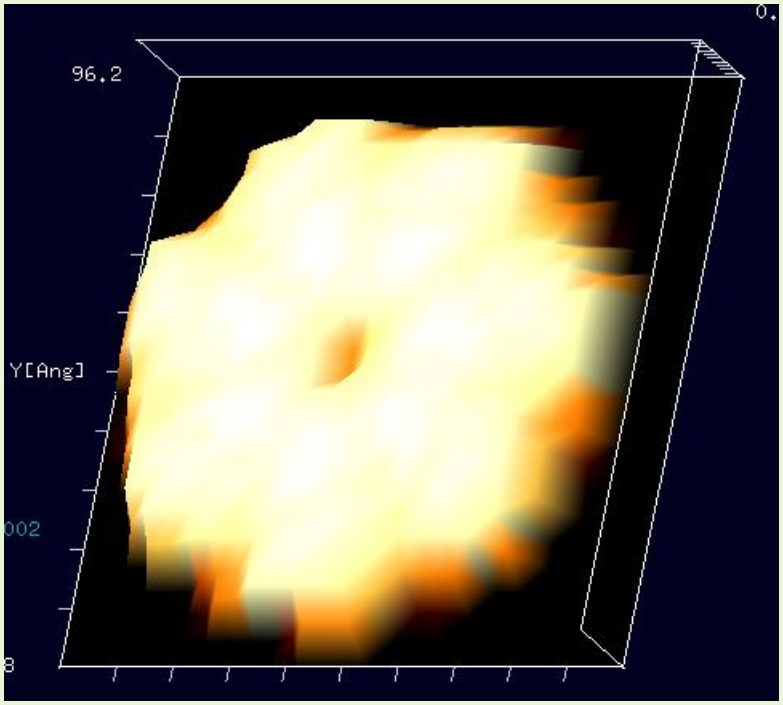
力の最大値：6.98E+4[pN]
力の最小値：-4.55E+4[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

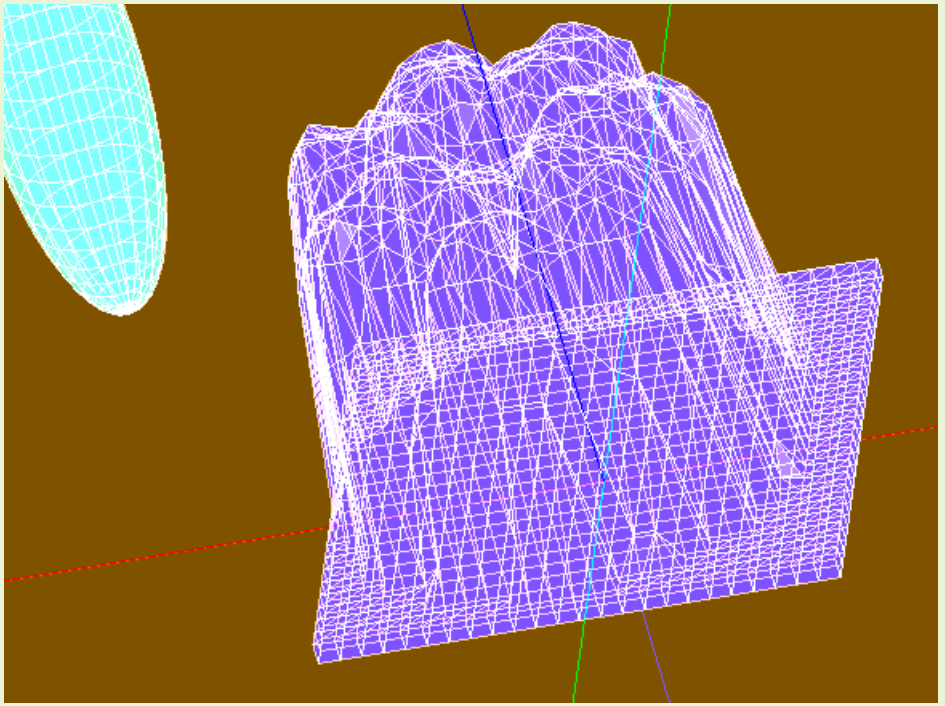
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、
0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

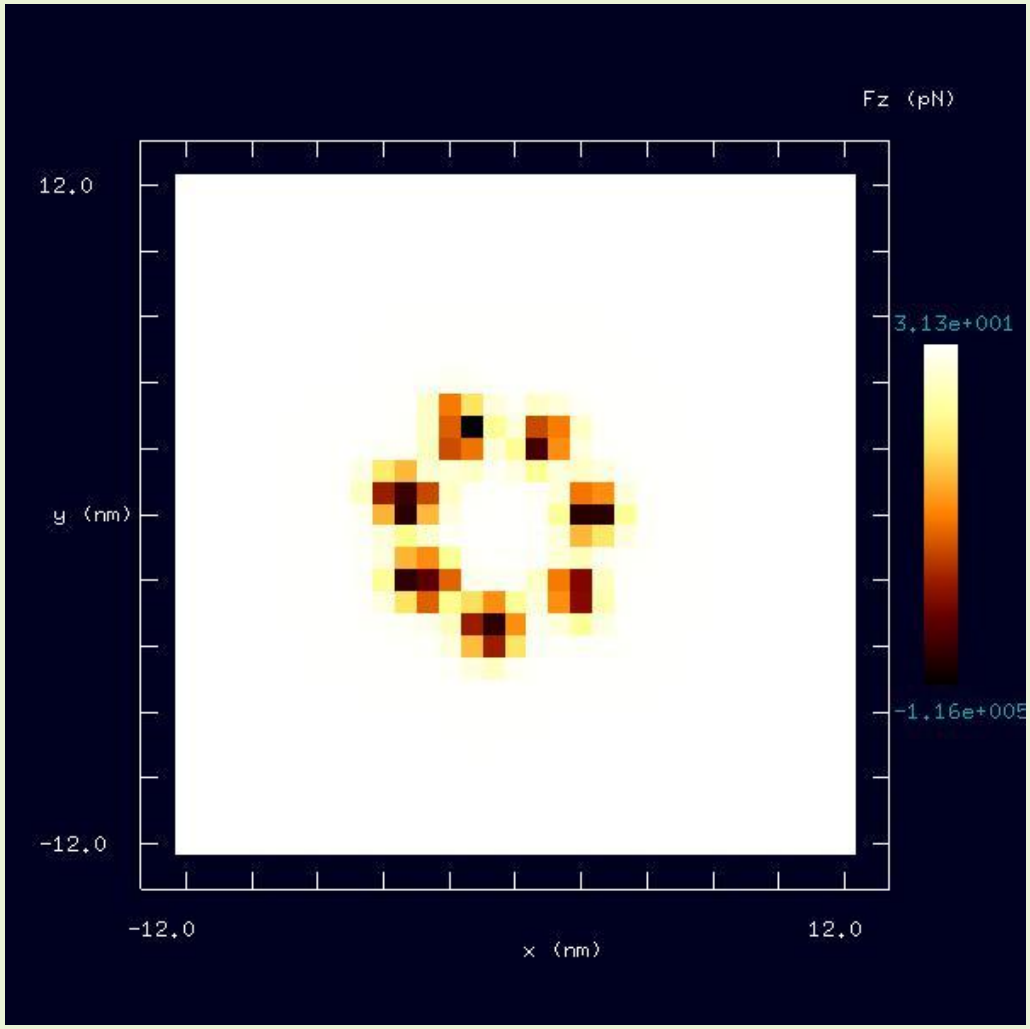
試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

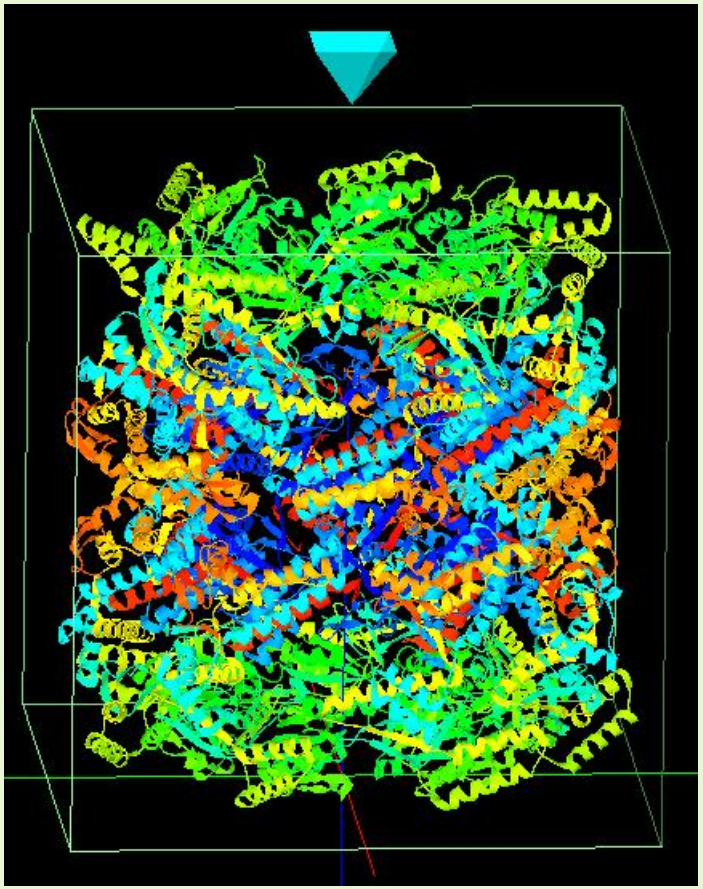
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



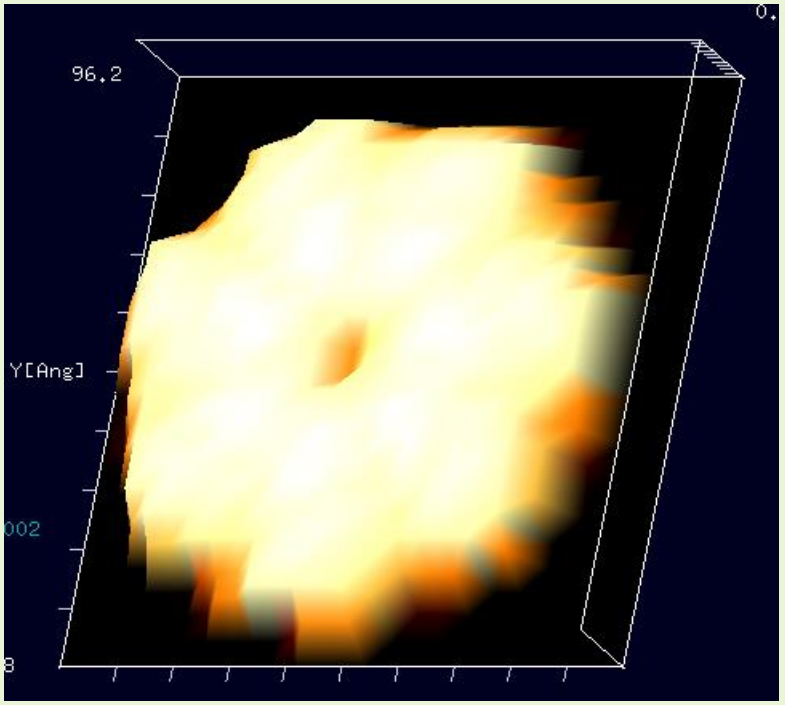
力の最大値:3.13E+1[pN]
力の最小値:-1.16E+5[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

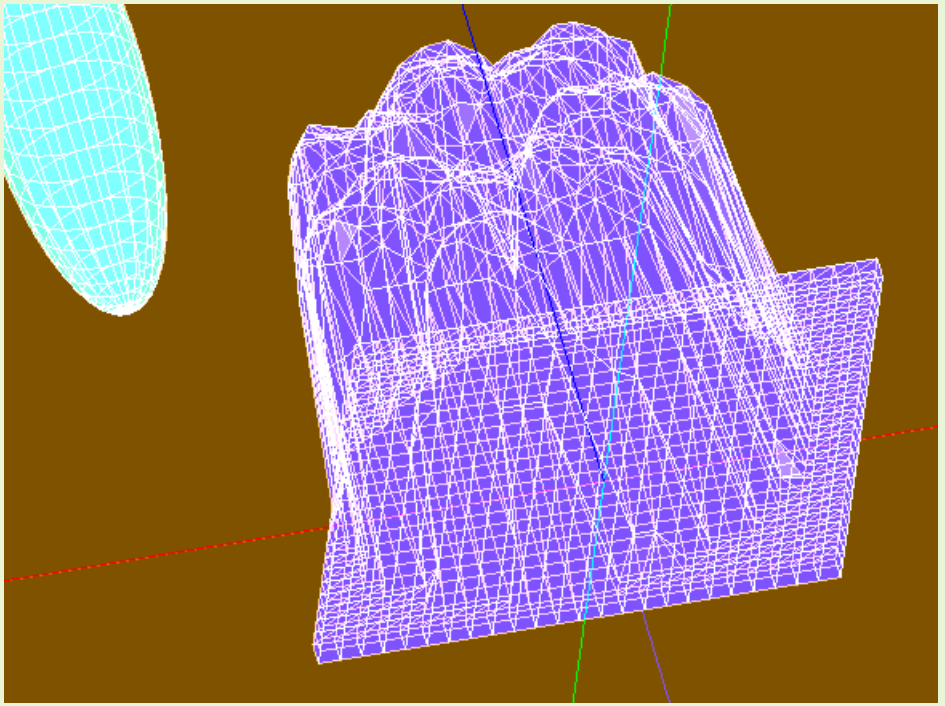
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

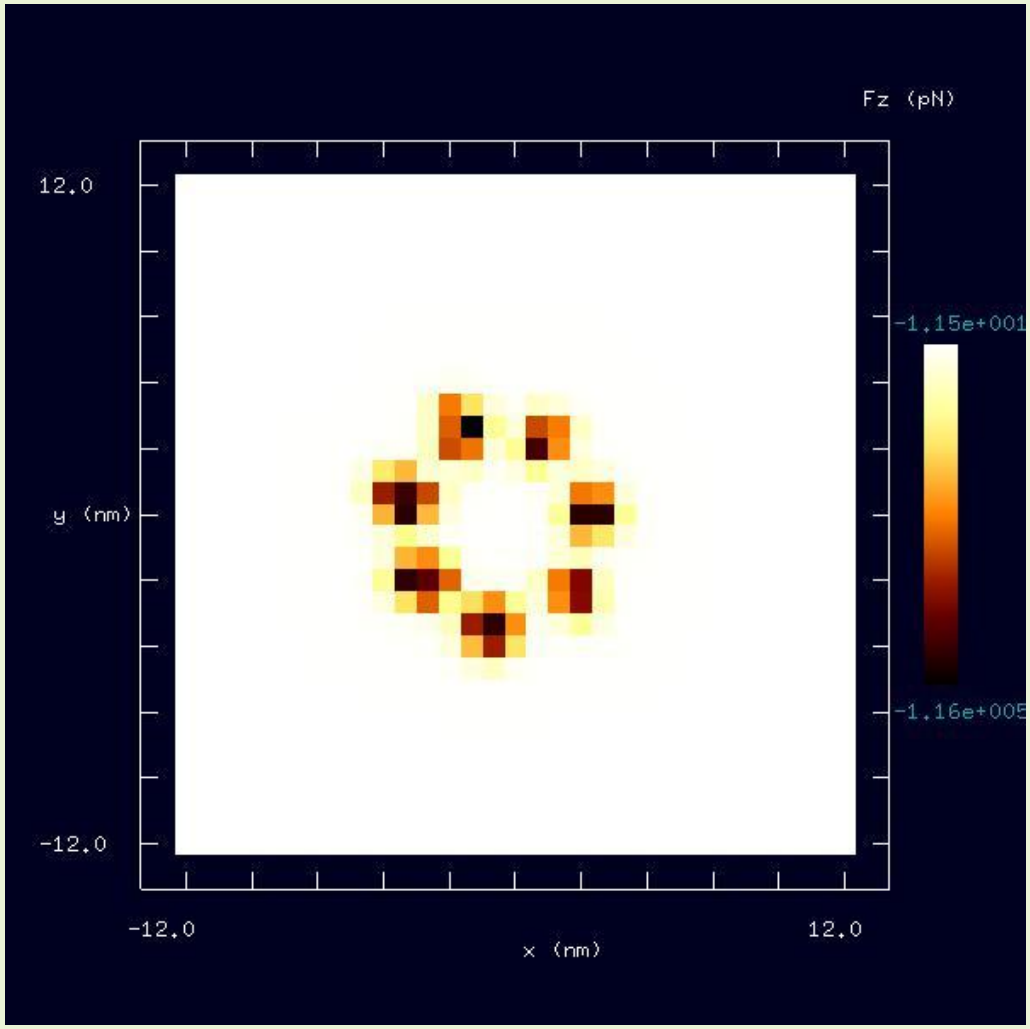
試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

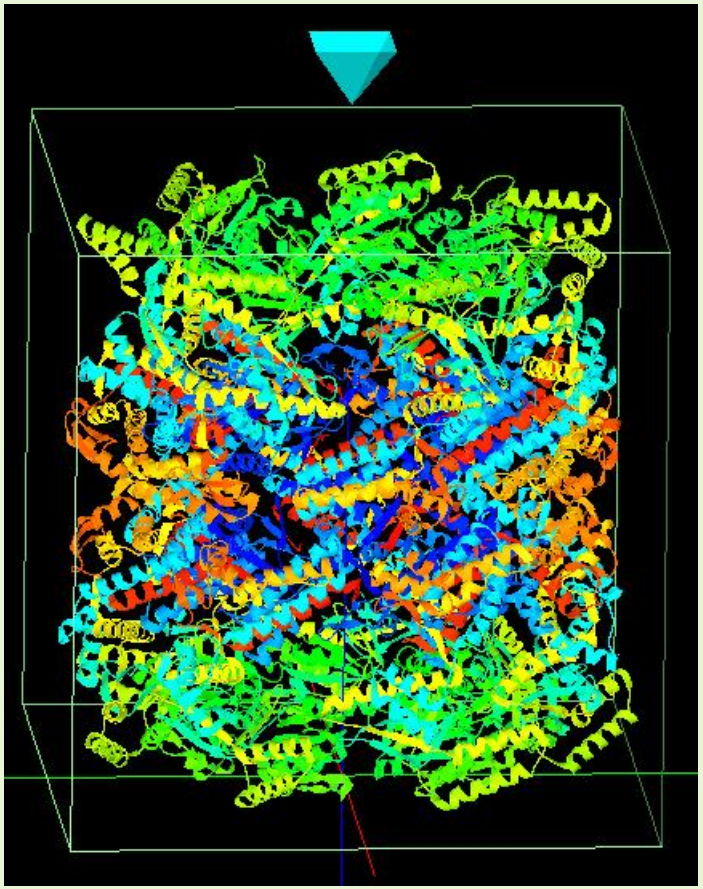
探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



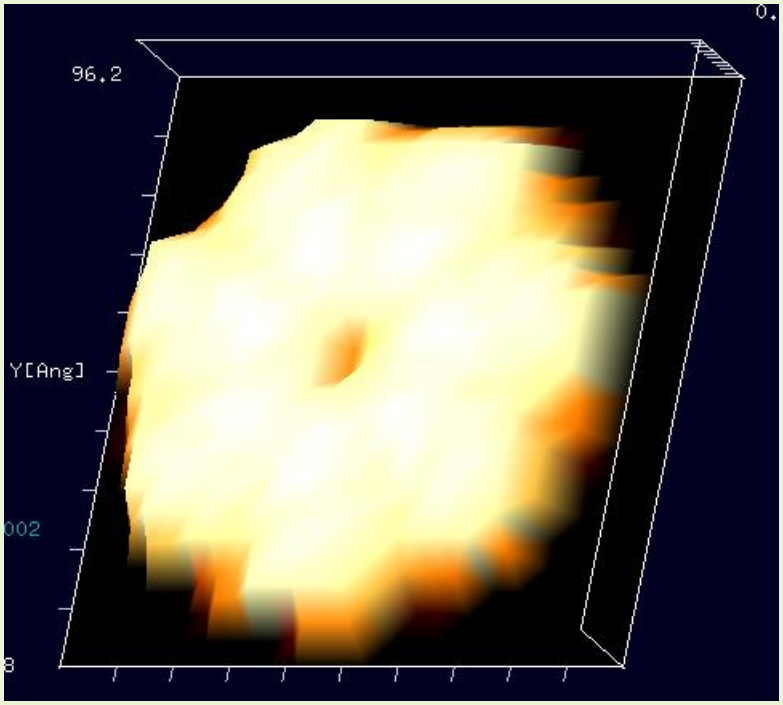
力の最大値:-1.15E+1[pN]
力の最小値:-1.16E+5[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

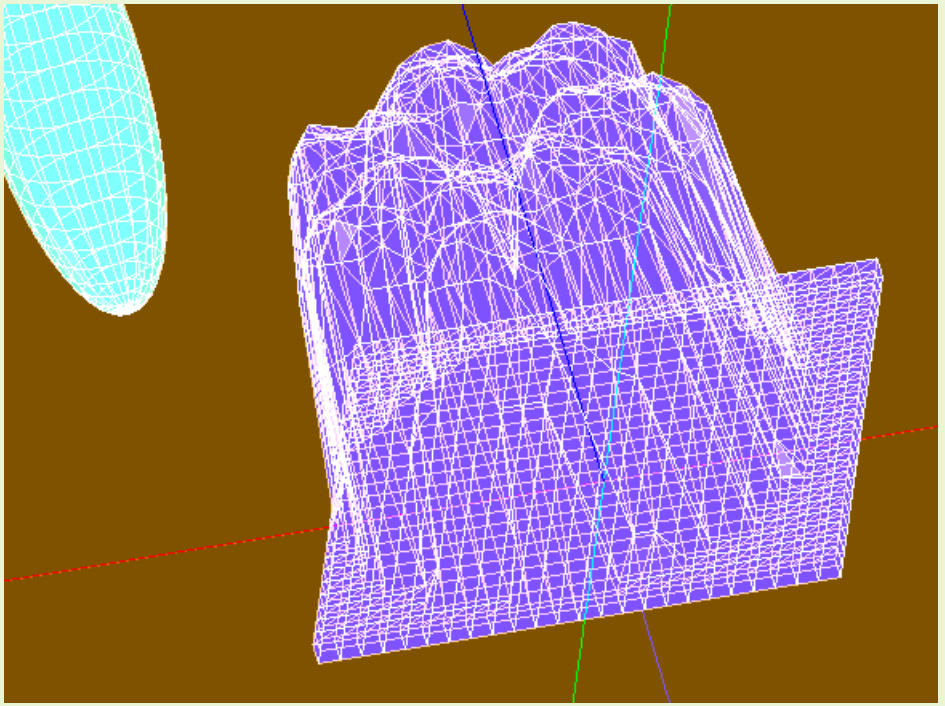
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合の探針の感じる力の像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする
探針に電圧-0.25[V]を印加する

基板は電圧0[V]とする

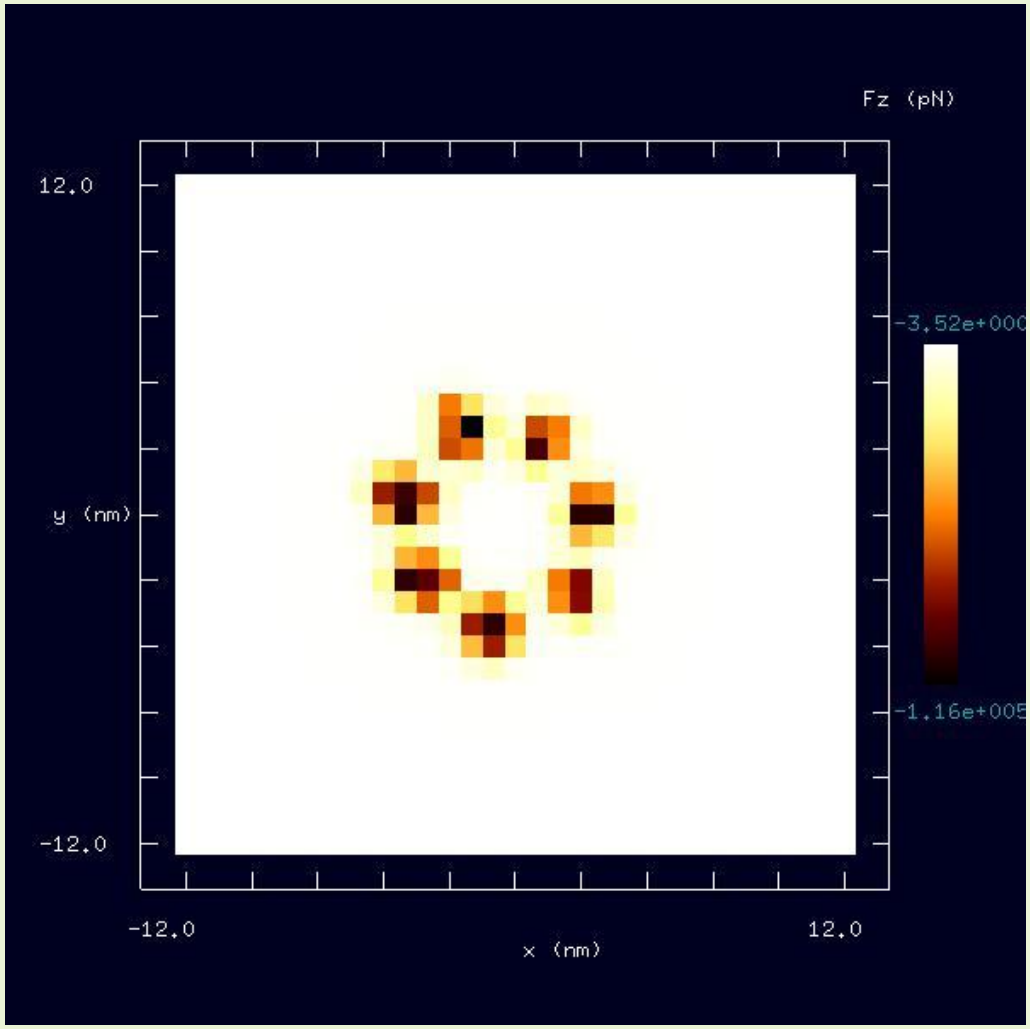
試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

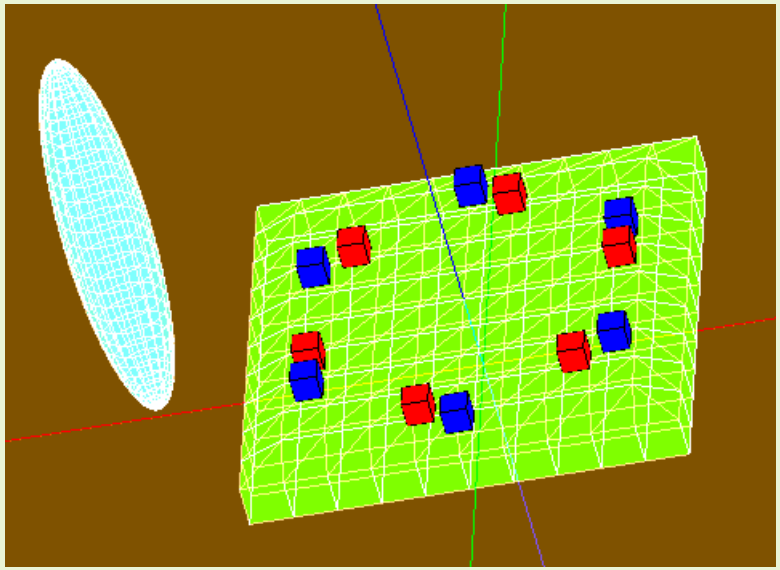
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針に電圧-0.25[V]を印加した場合の、探針が受ける力の分布



力の最大値:-3.52E+0[pN]
力の最小値:-1.16E+5[pN]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals



探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像

探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

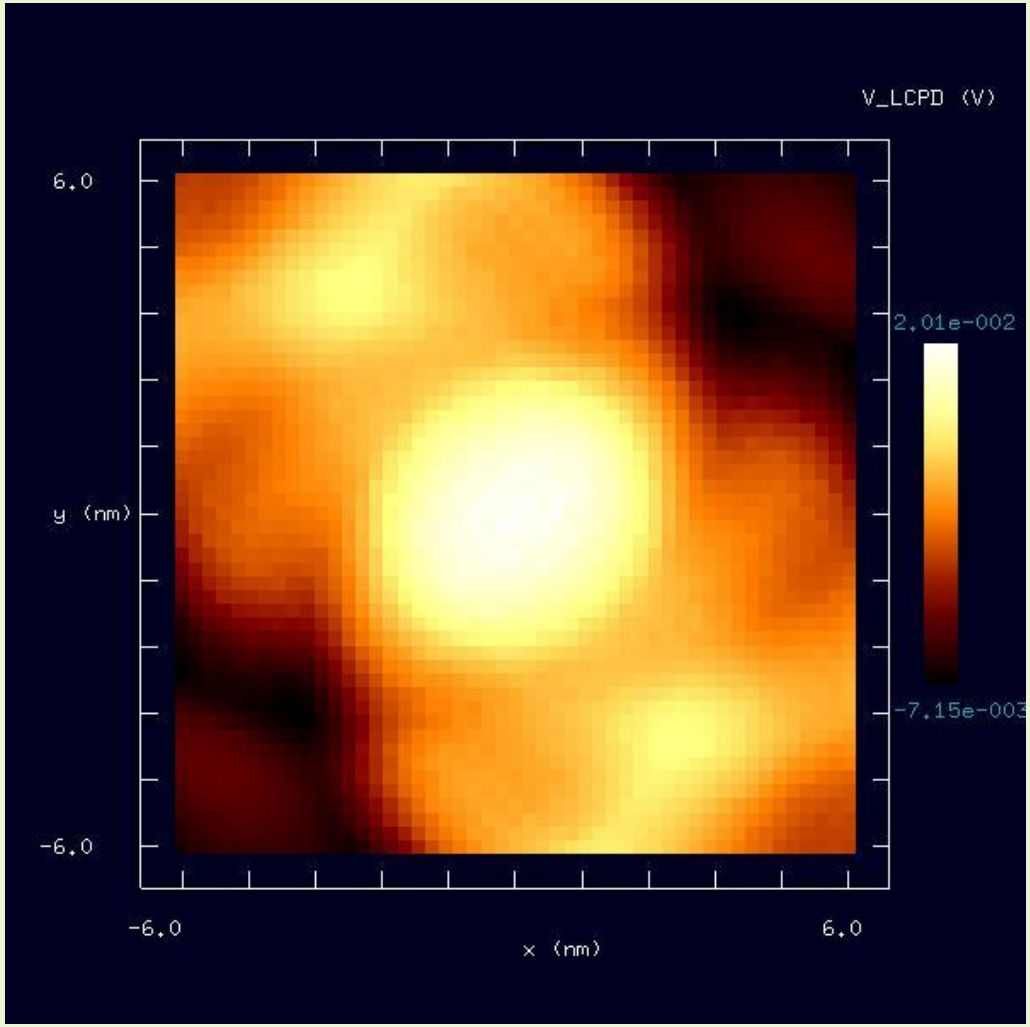
探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

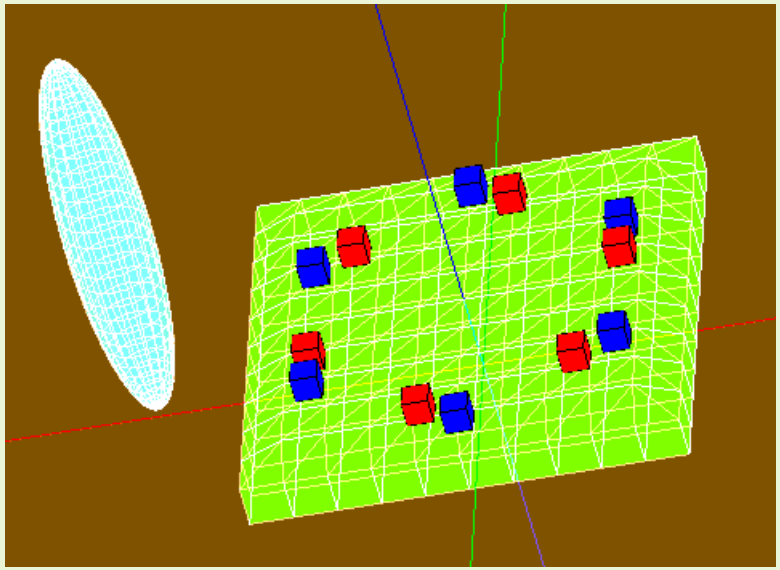
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:2.01E-2[V]
最小値:-7.15E-3[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

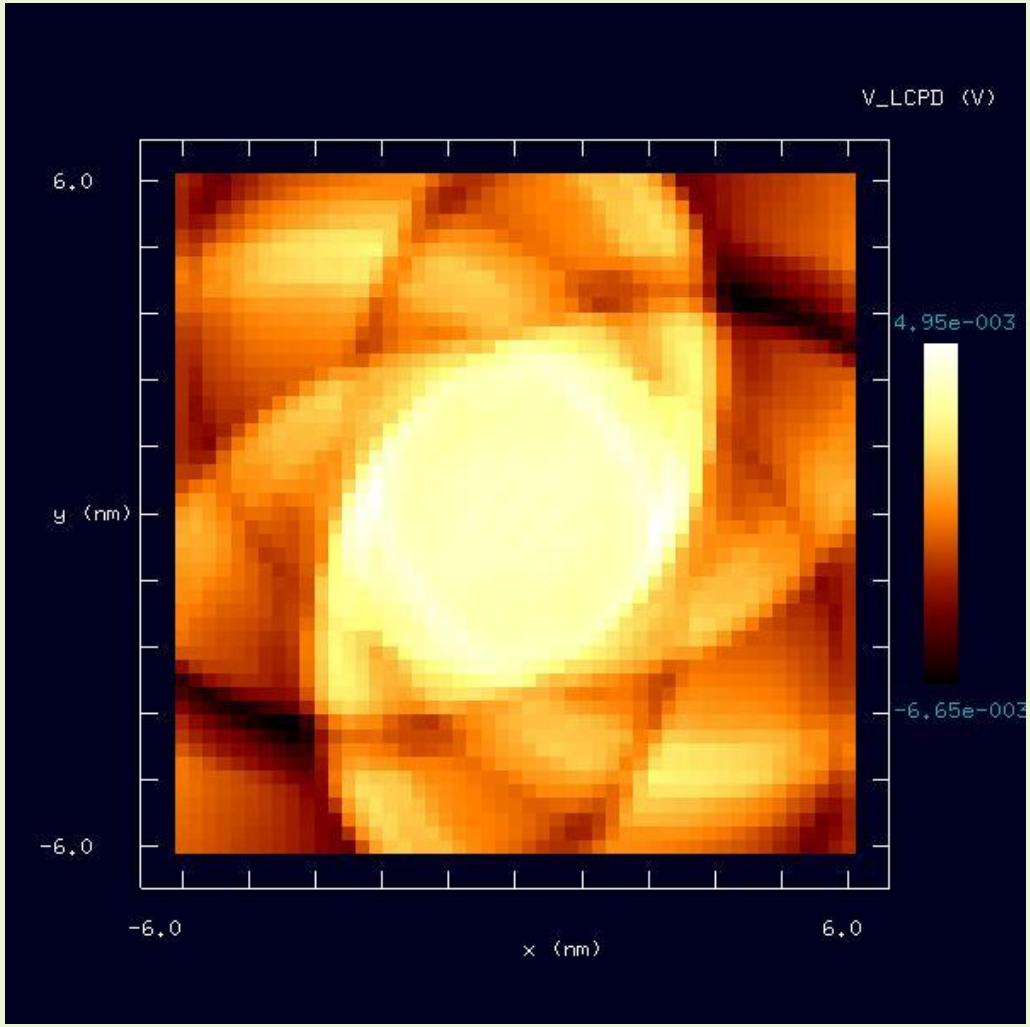
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

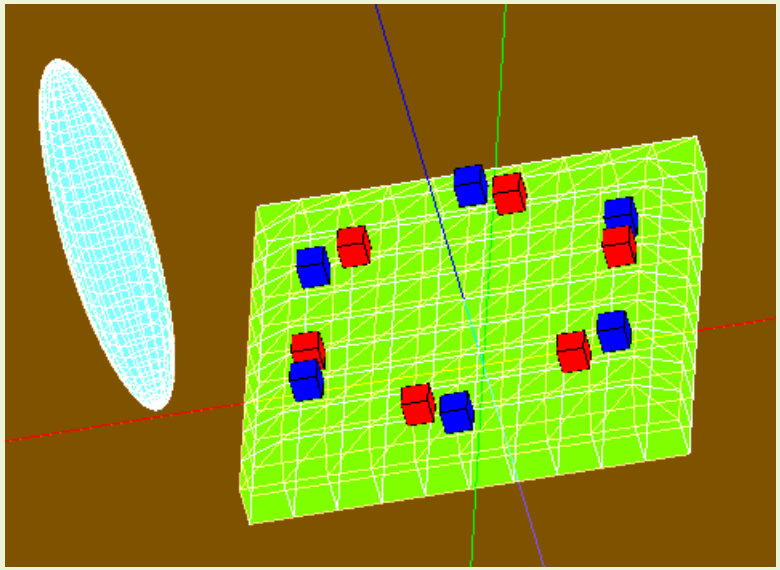
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:4.95E-3[V]
最小値:-6.65E-3[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

酸化ケイ素基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

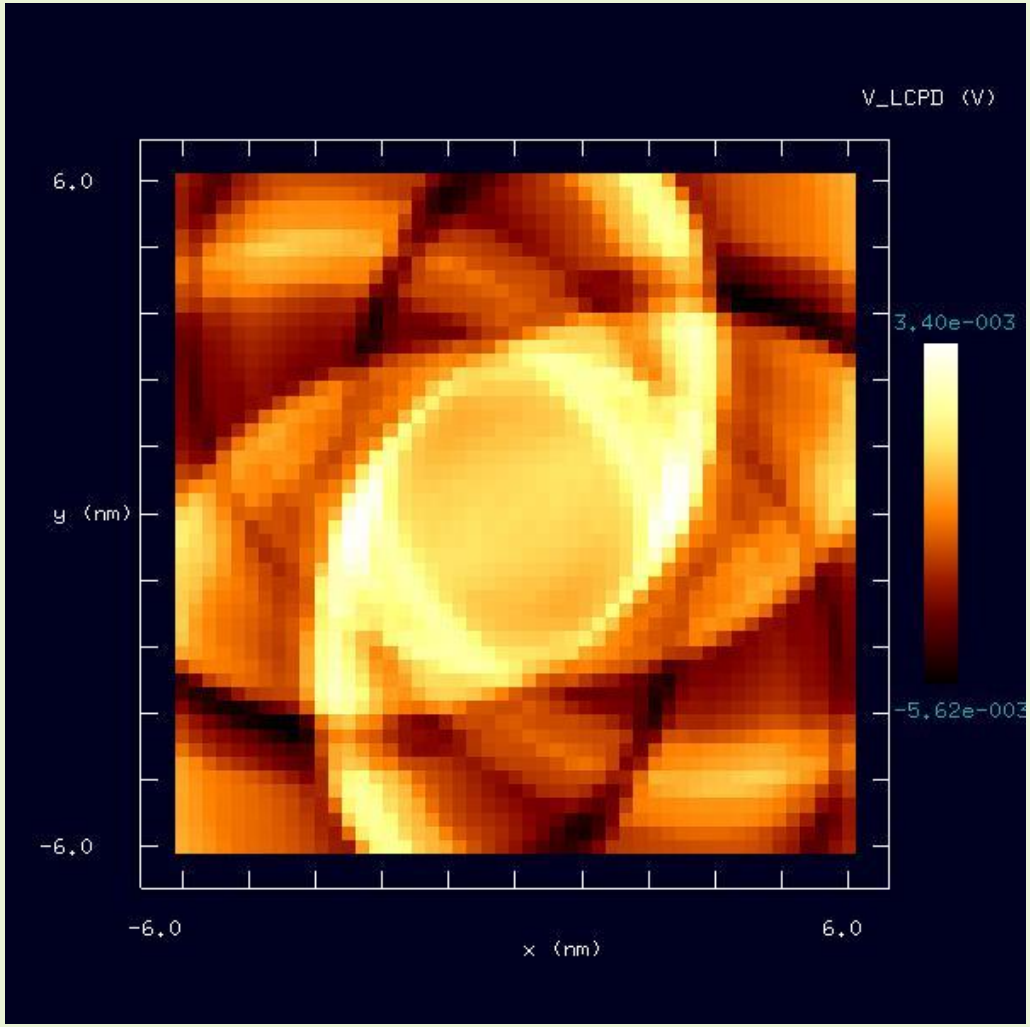
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

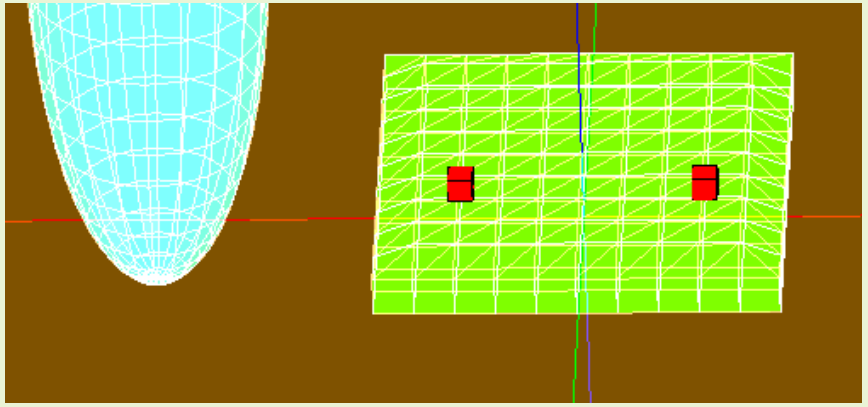
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:3.40E-3[V]
最小値:-5.62E-3[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

酸化ケイ素基板内部に2個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.001[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：9.77[nm]

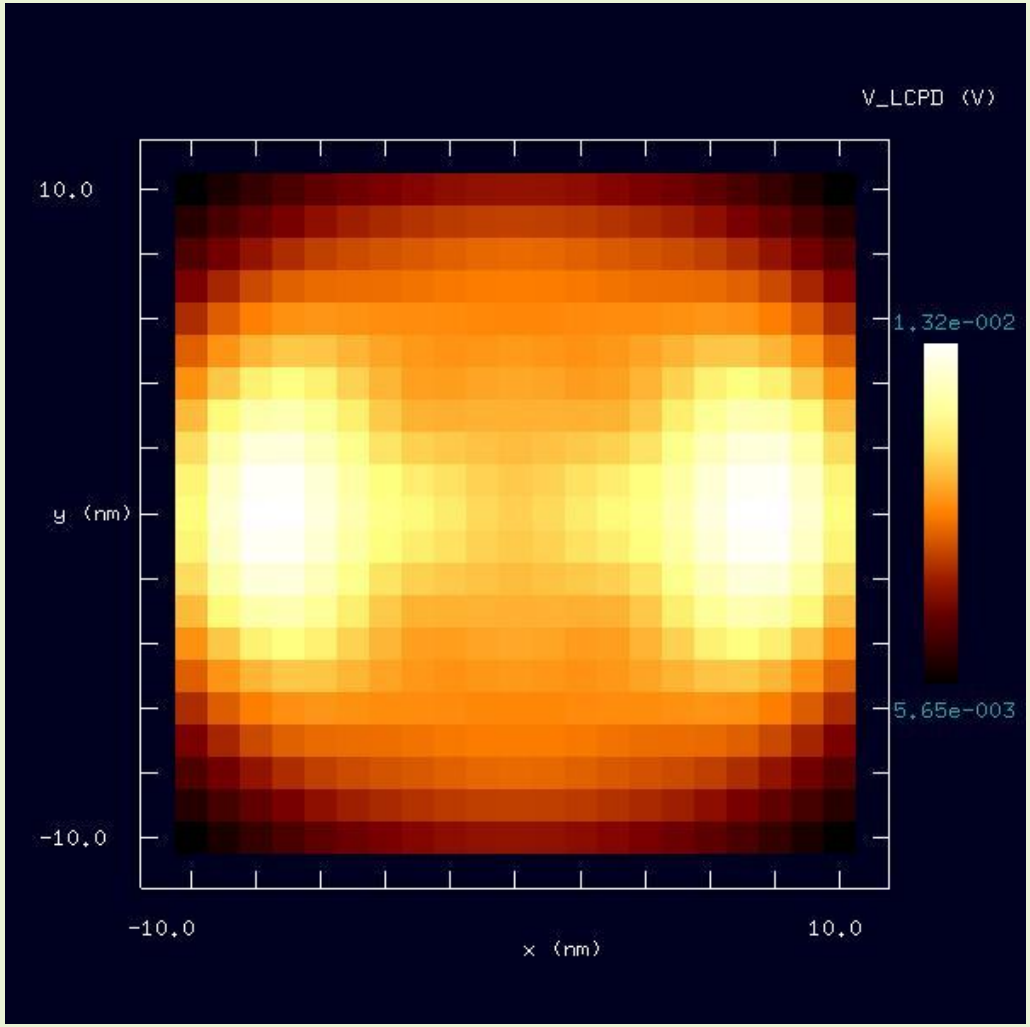
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|の電荷を2個、配置した

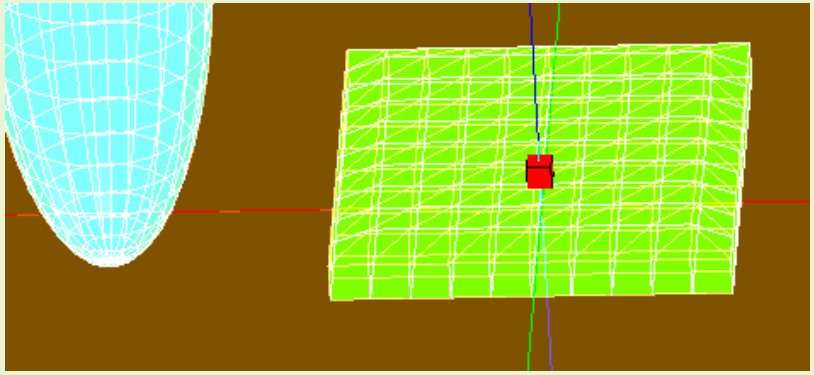
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:1.32E-2[V]
最小値:5.65E-3[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

酸化ケイ素基板内部に1個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ2[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

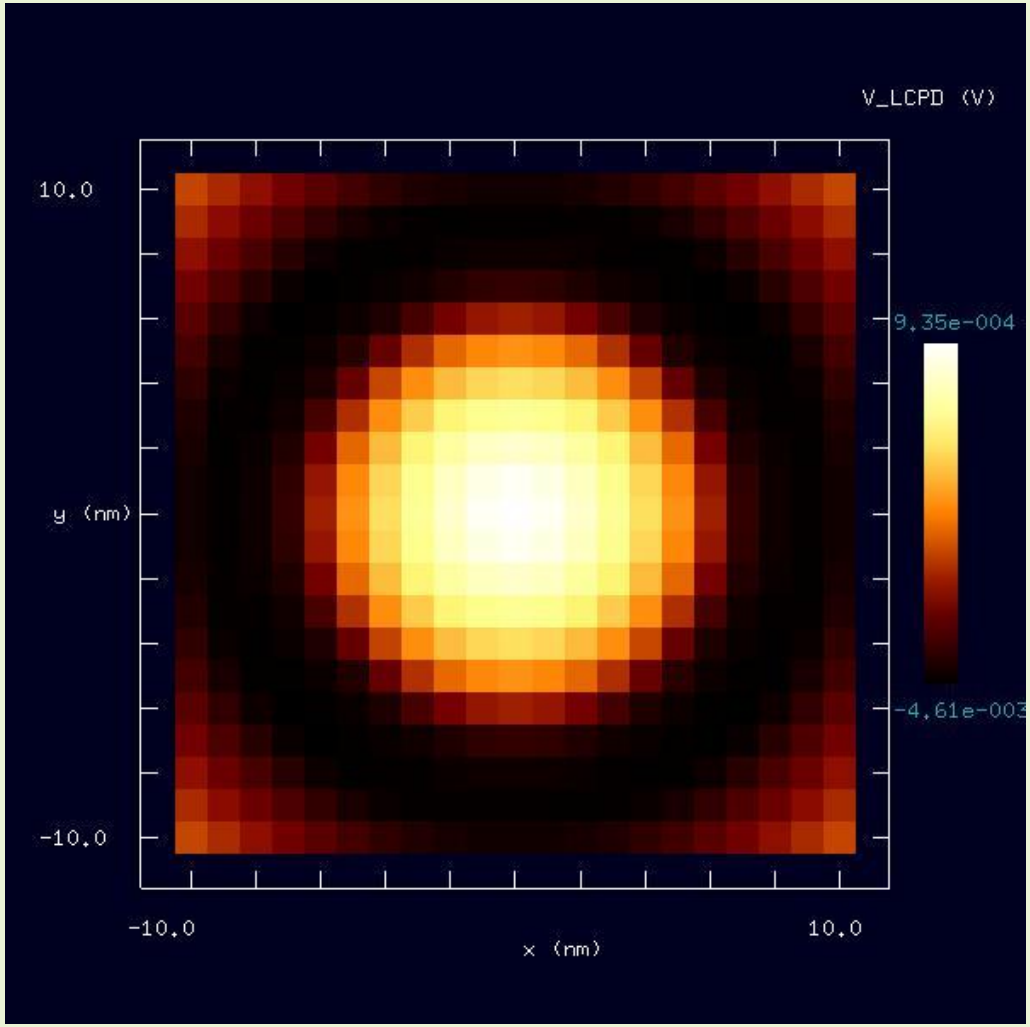
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|の電荷を1個、配置した

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

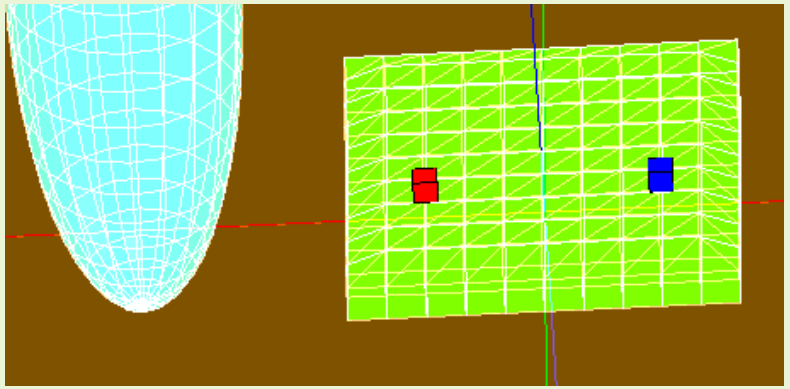
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:9.35E-4[V]
最小値:-4.61E-3[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

酸化ケイ素基板内部に正負の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.001[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：9.77[nm]

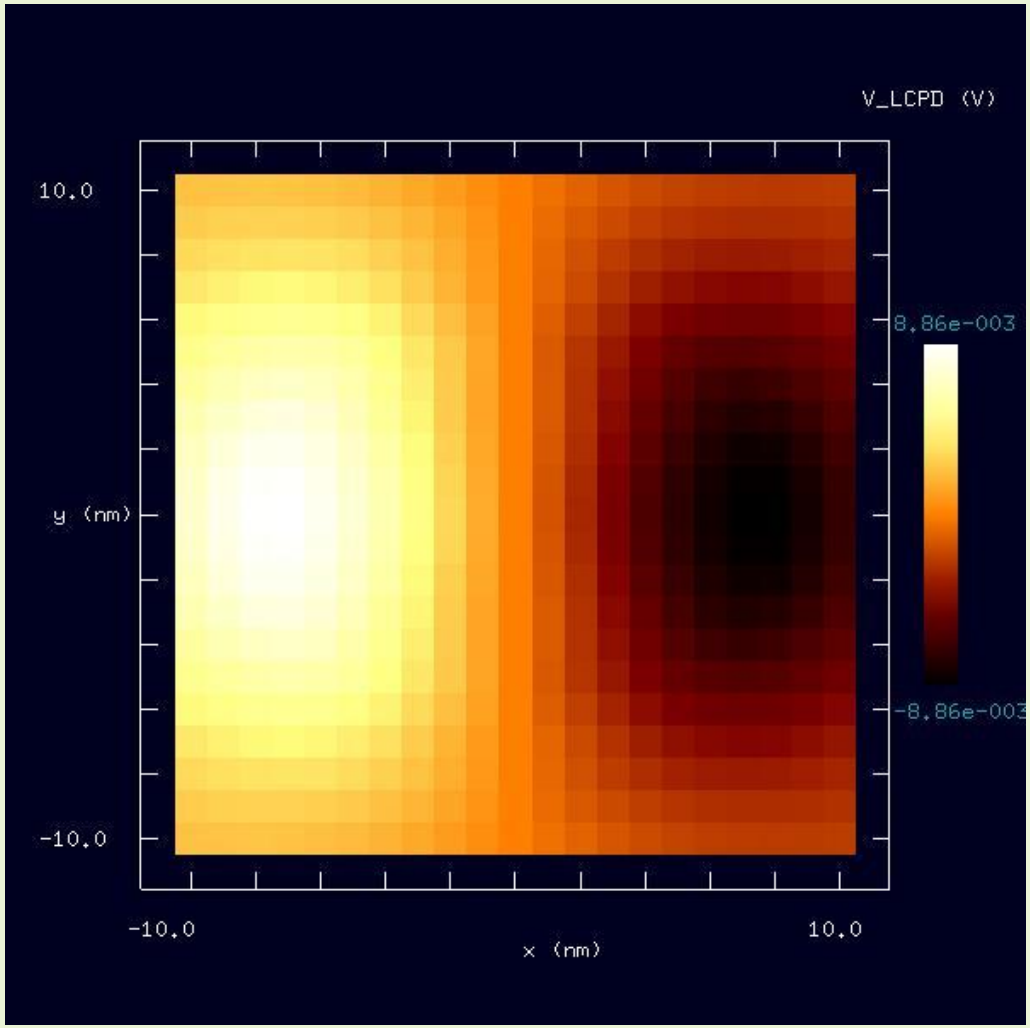
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、1.0|e|と-1.0|e|の正負の電荷を1個ずつ、配置した

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

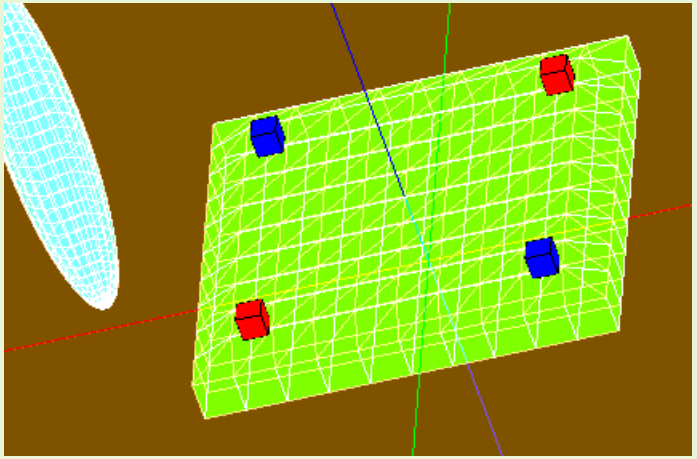
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:8.86E-3[V]
最小値:-8.86E-3[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

酸化ケイ素基板上に正負の電荷4個を置いた場合のLCPD像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の酸化ケイ素の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

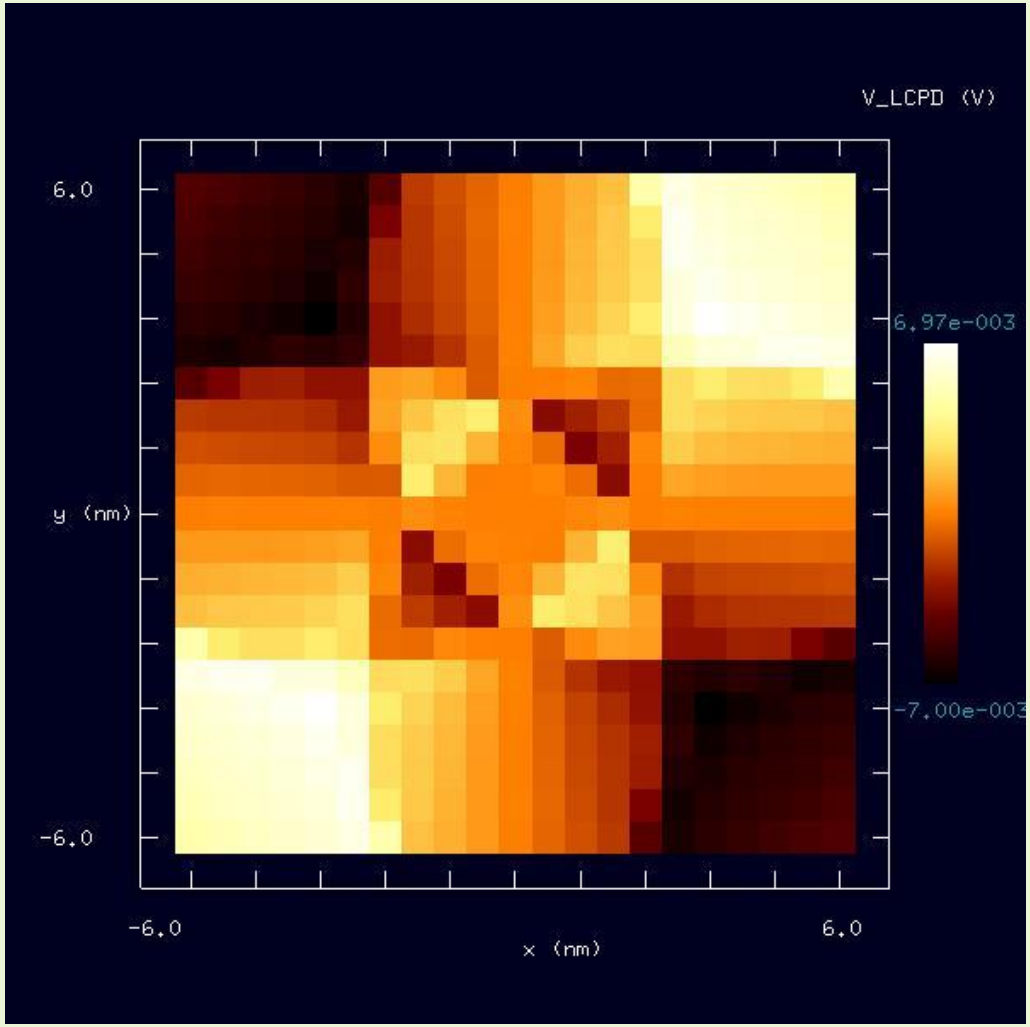
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率3.8の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を2個ずつ、配置した

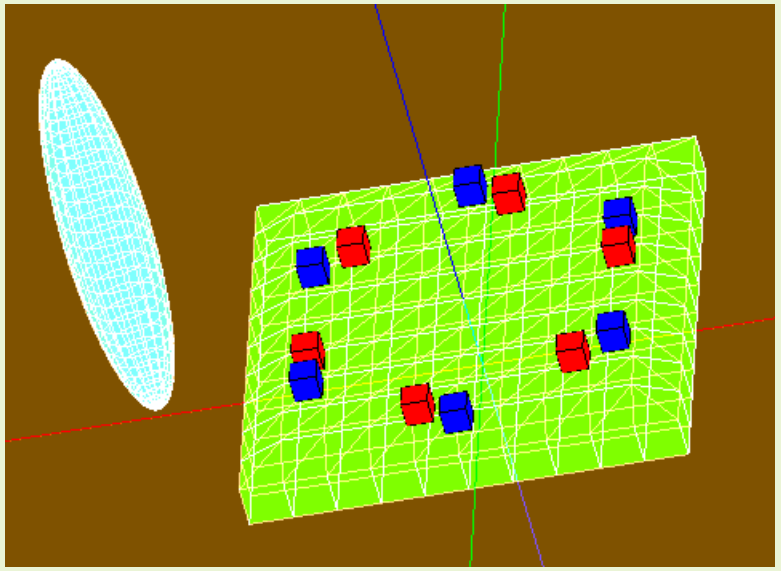
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:6.97E-3[V]
最小値:-7.00E-3[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

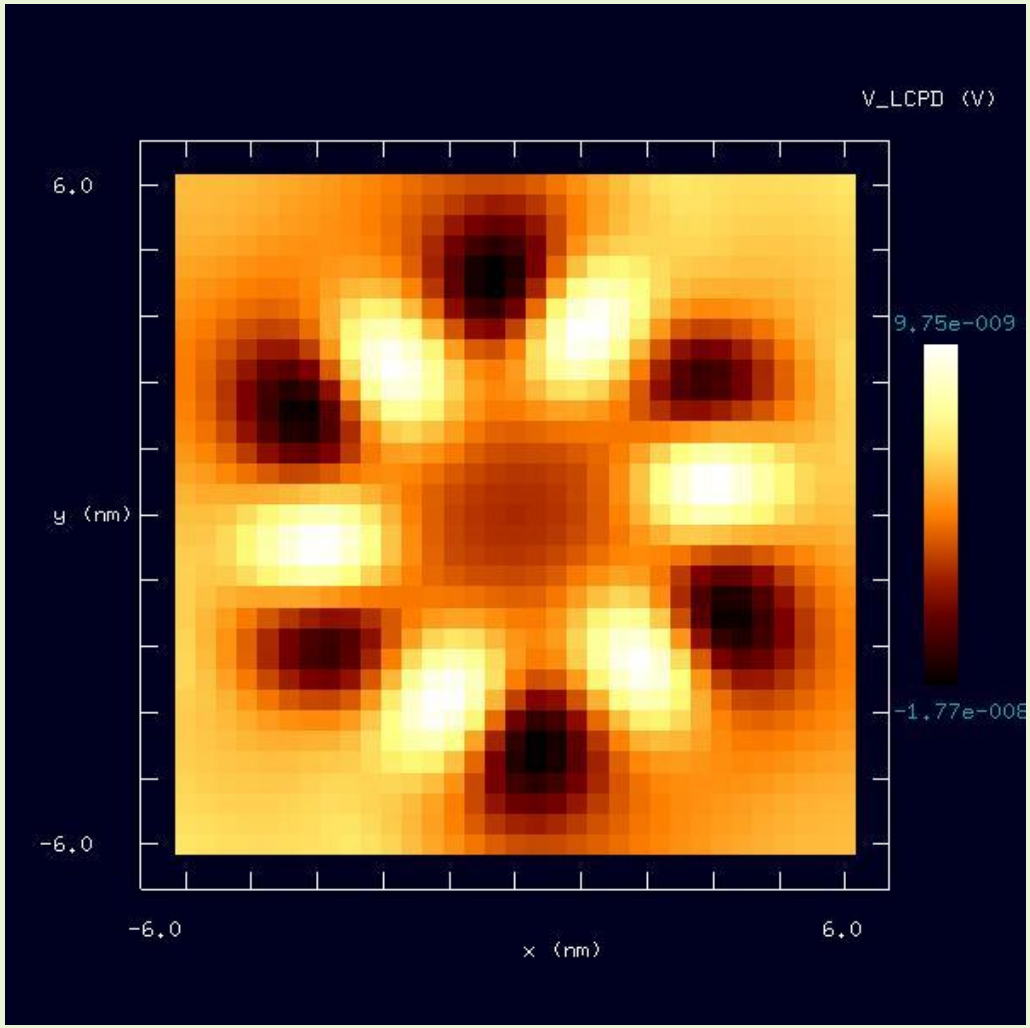
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

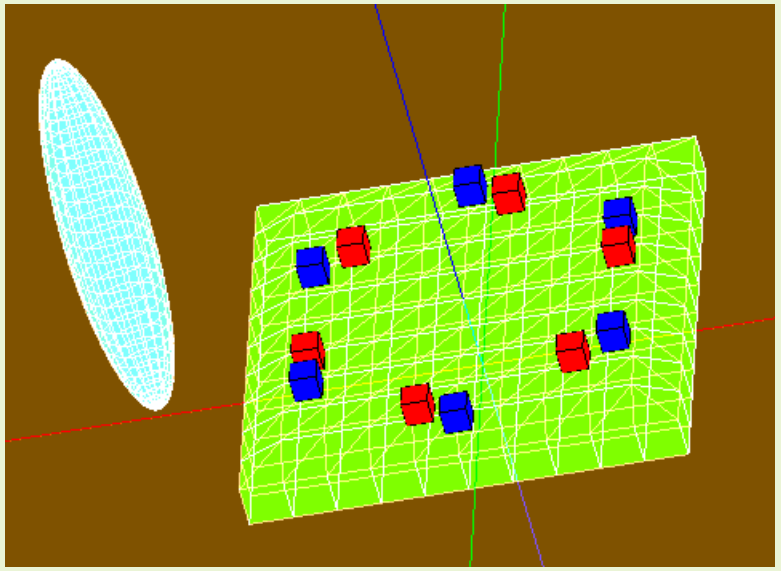
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:9.75E-9[V]
最小値:-1.77E-8[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

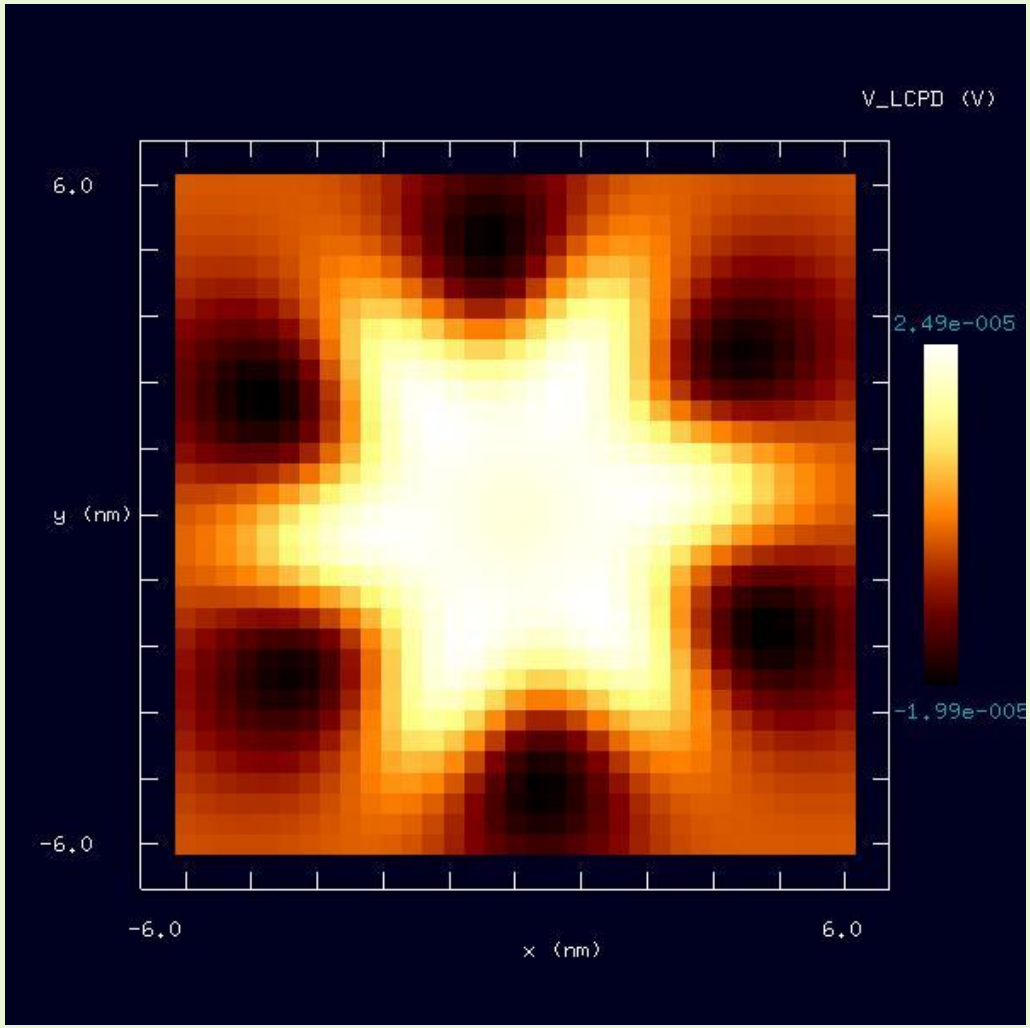
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

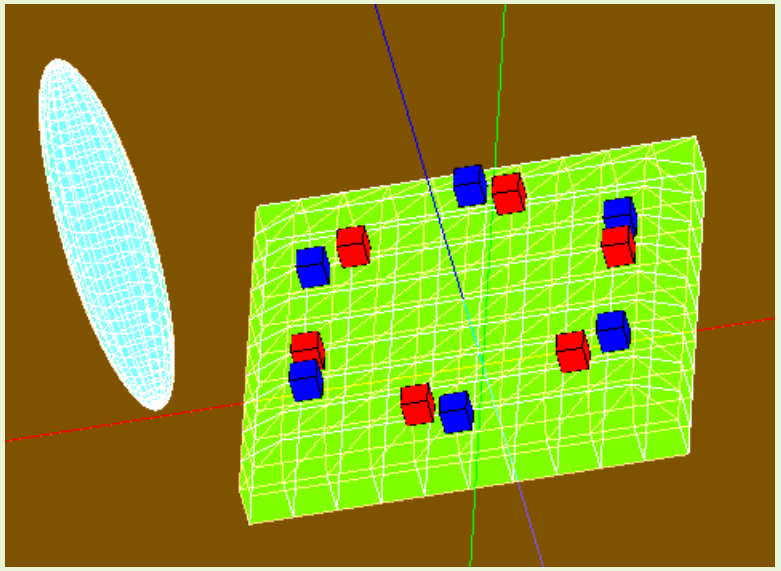
LCPD(局所接触電位差)像



最大値:2.49E-5[V]
最小値:-1.99E-5[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

有機材料基板上に12個の電荷を置いた場合のLCPD像



探針：幅2[nm]、深さ2[nm]、高さ10[nm]の回転楕円体

試料：幅10[nm]、深さ10[nm]、高さ1.4[nm]の有機材料の基板

試料基板のメッシュ幅は1[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：3[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

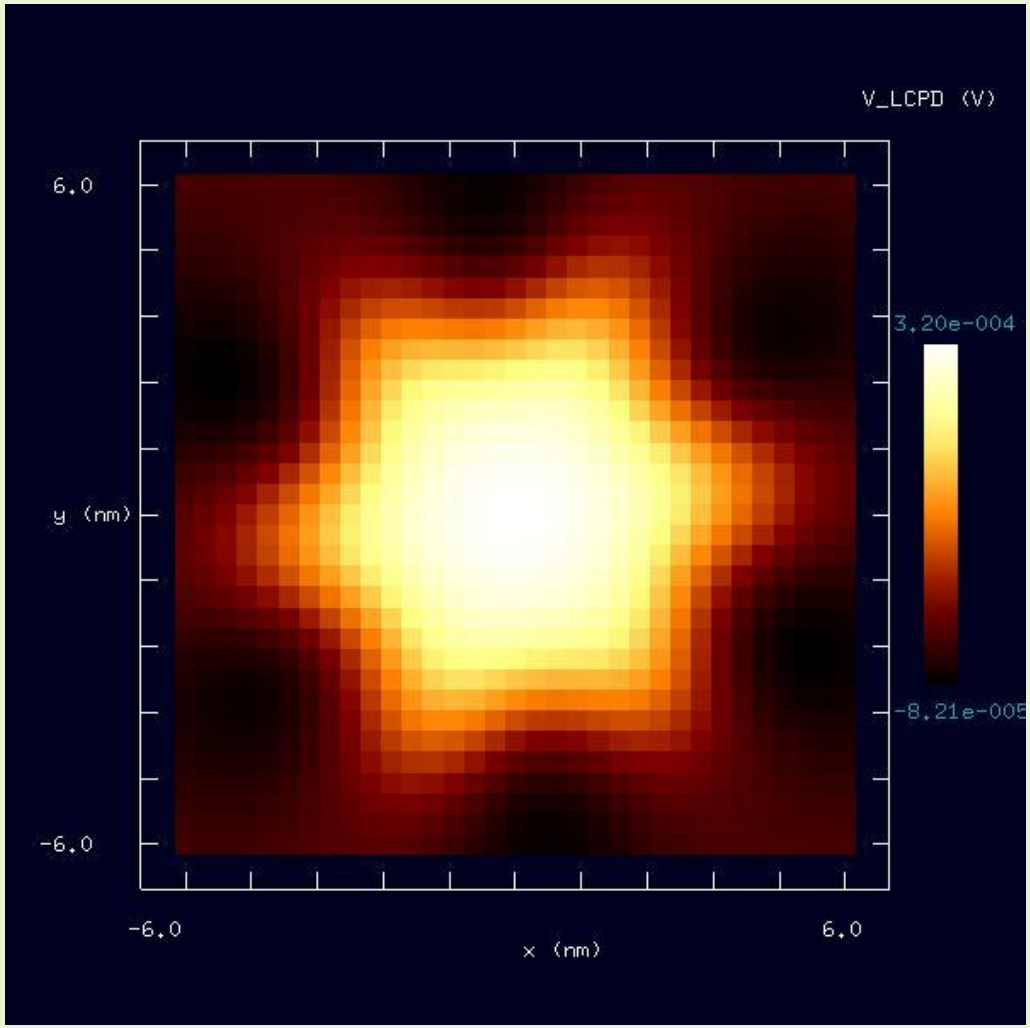
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、0.38|e|と-0.38|e|の正負の電荷を合計12個、六角形状に配置した

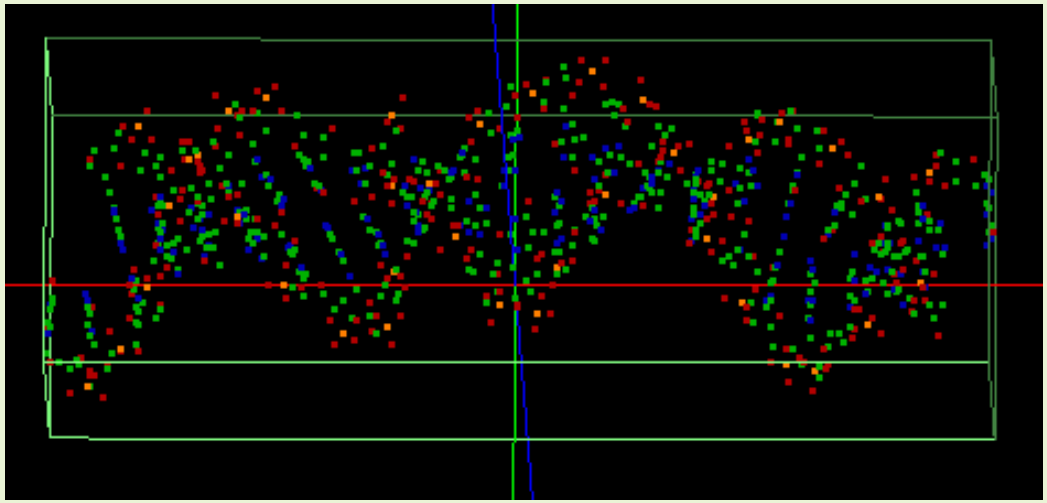
LCPD(局所接触電位差)像



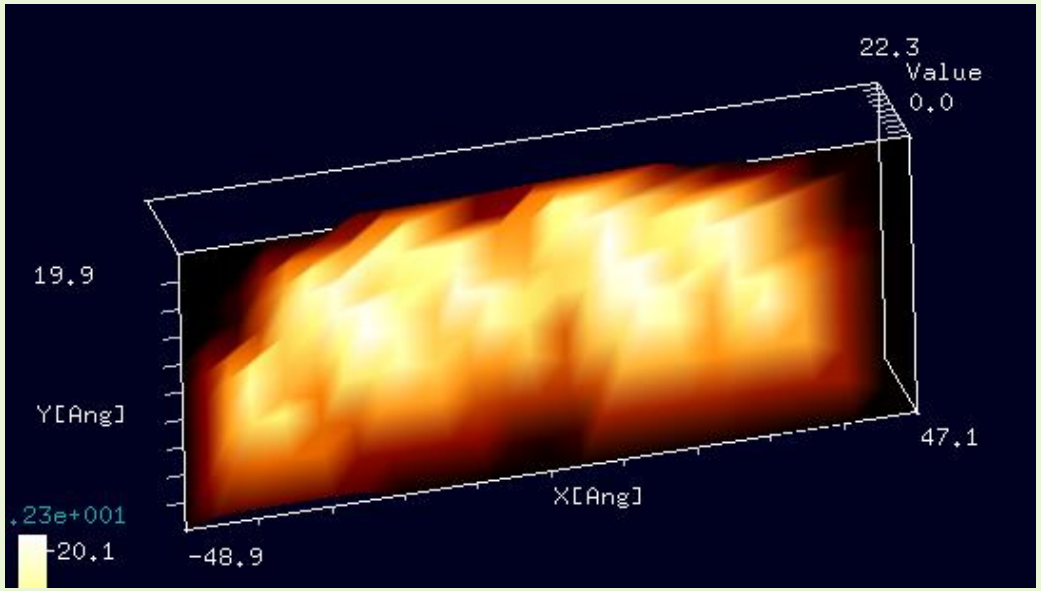
最大値:3.20E-4[V]
最小値:-8.21E-5[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

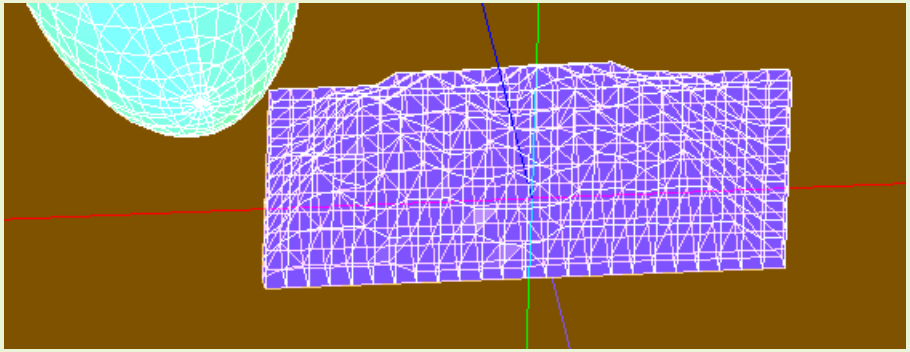
DNA分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



DNAの分子構造図



DNA分子に対して、0.4[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅9.6[nm]、深さ4[nm]、高さ2.63[nm]のDNA分子

試料のメッシュ幅は0.4[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：4.87[nm]

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

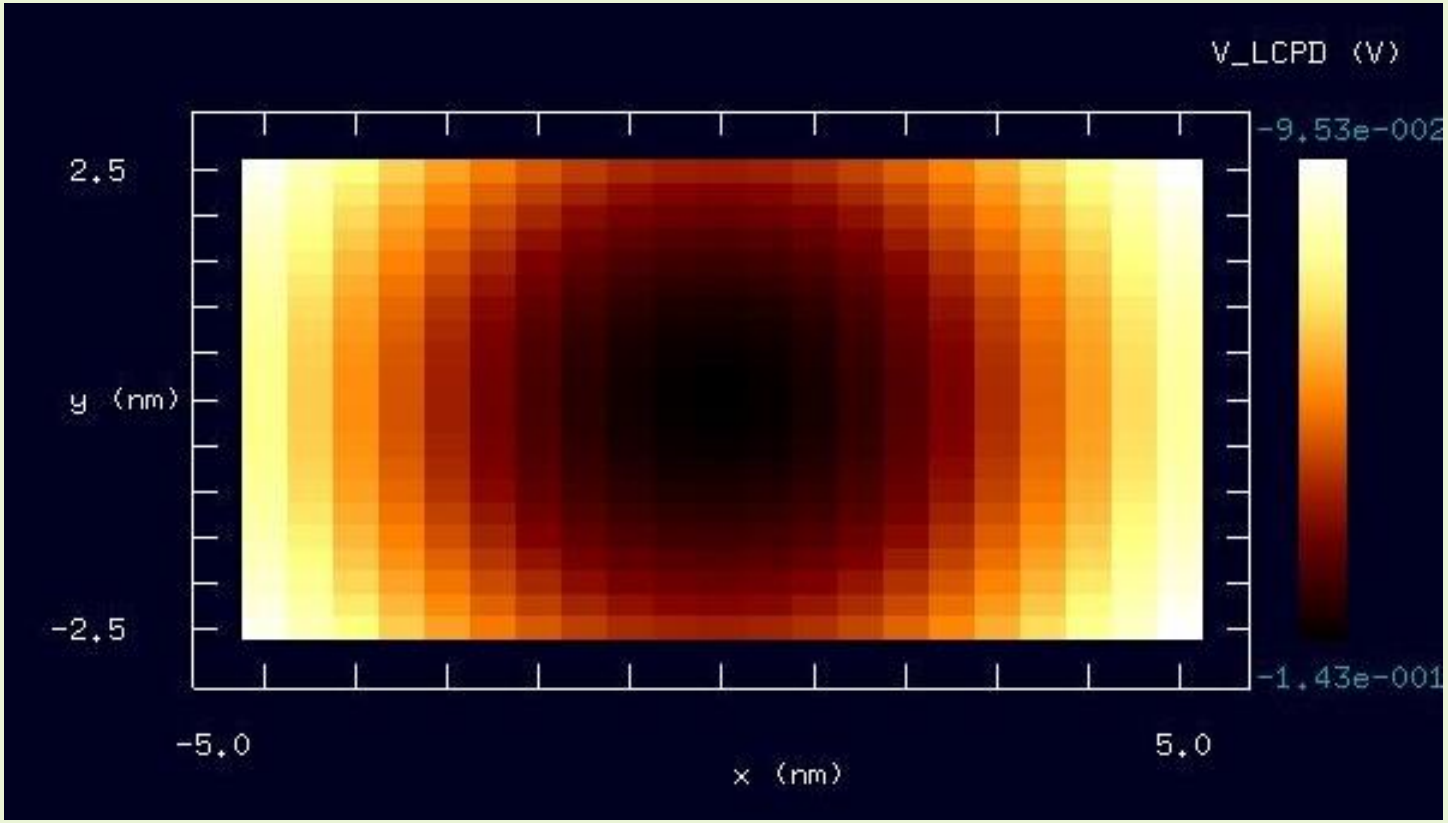
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-3.0E-1[C/m^2]の電荷を分布させる

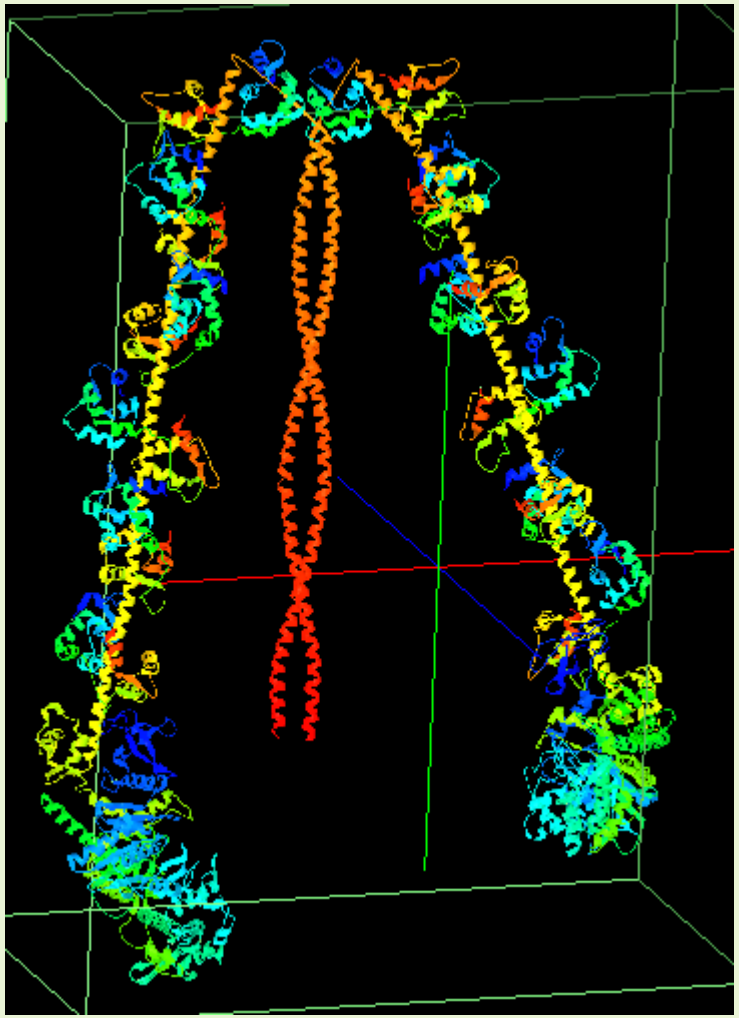
LCPD(局所接触電位差)像

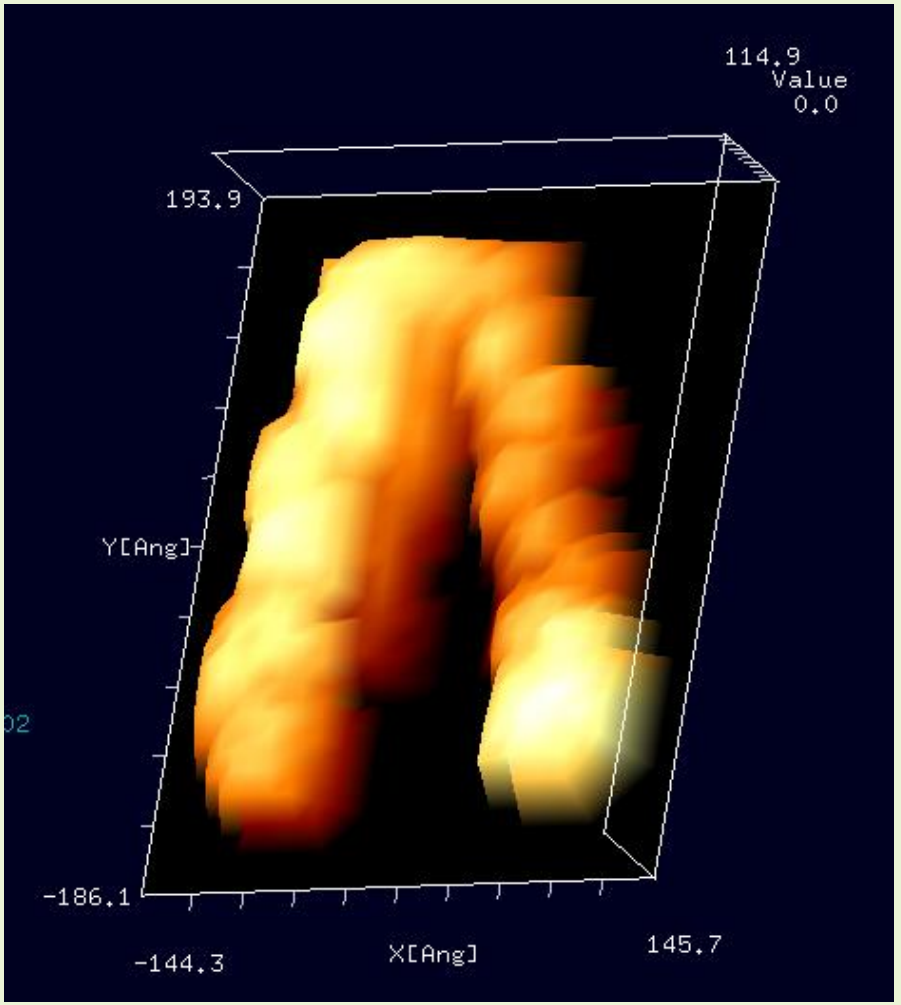


最大値:-9.53E-2[V]
最小値:-1.43E-1[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

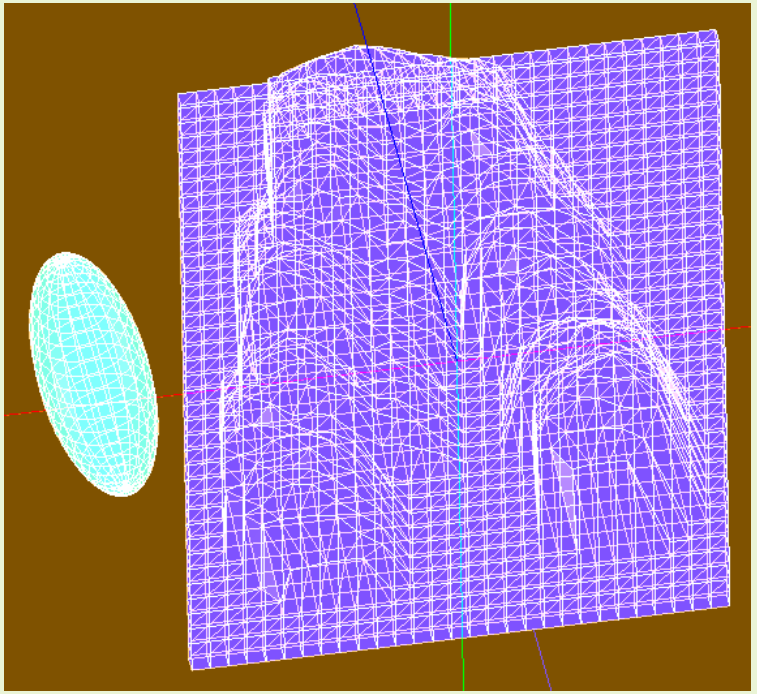
ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像





DNAの分子構造図

DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]のミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

探針は導体とする

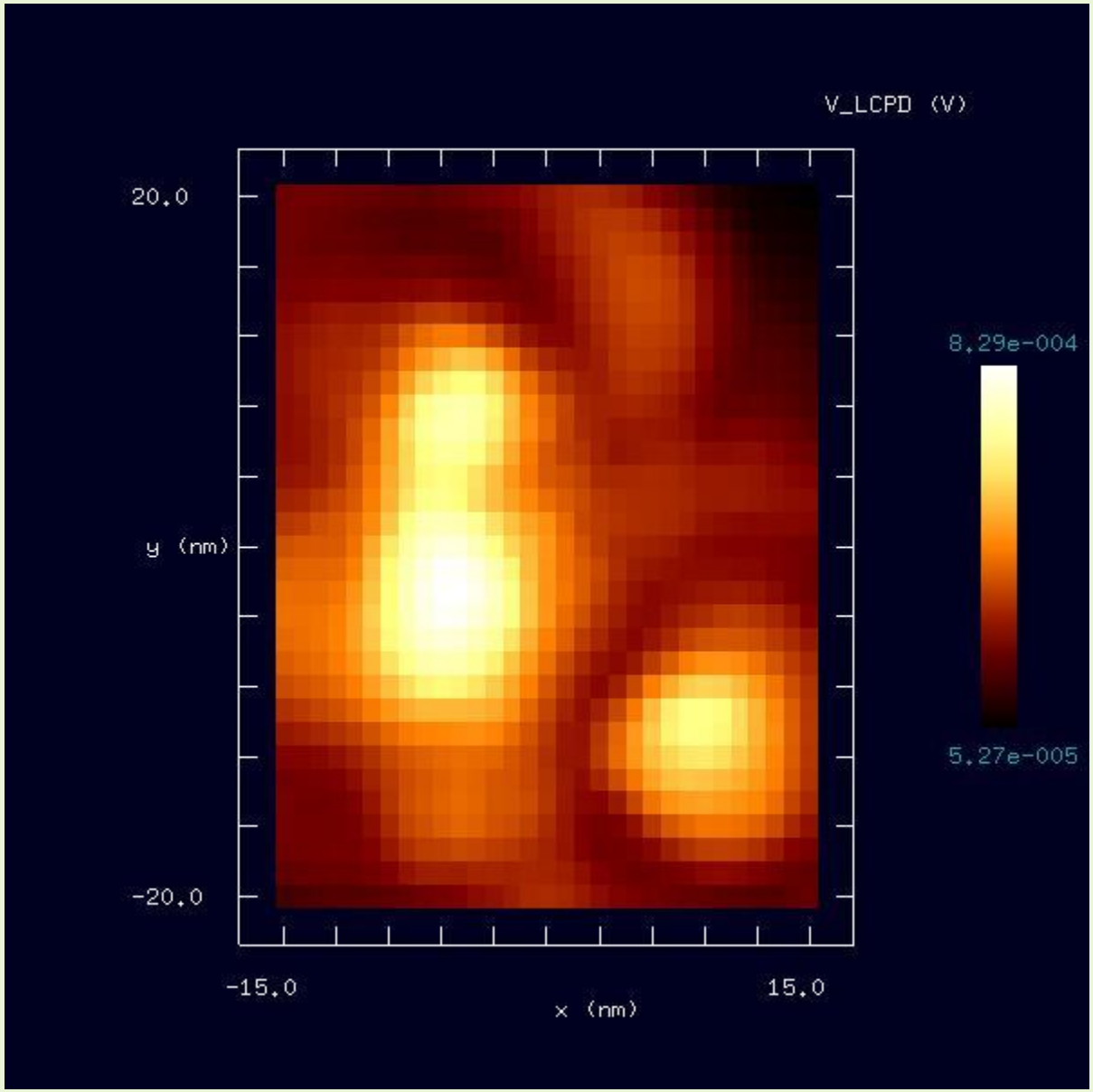
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

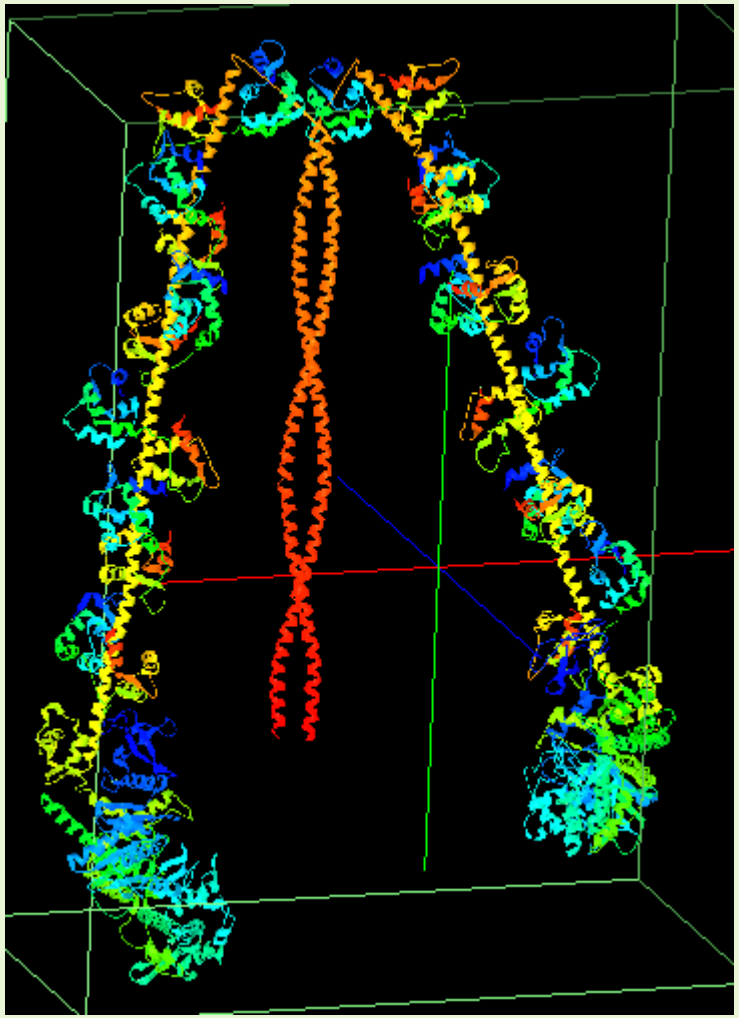
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

LCPD(局所接触電位差)像



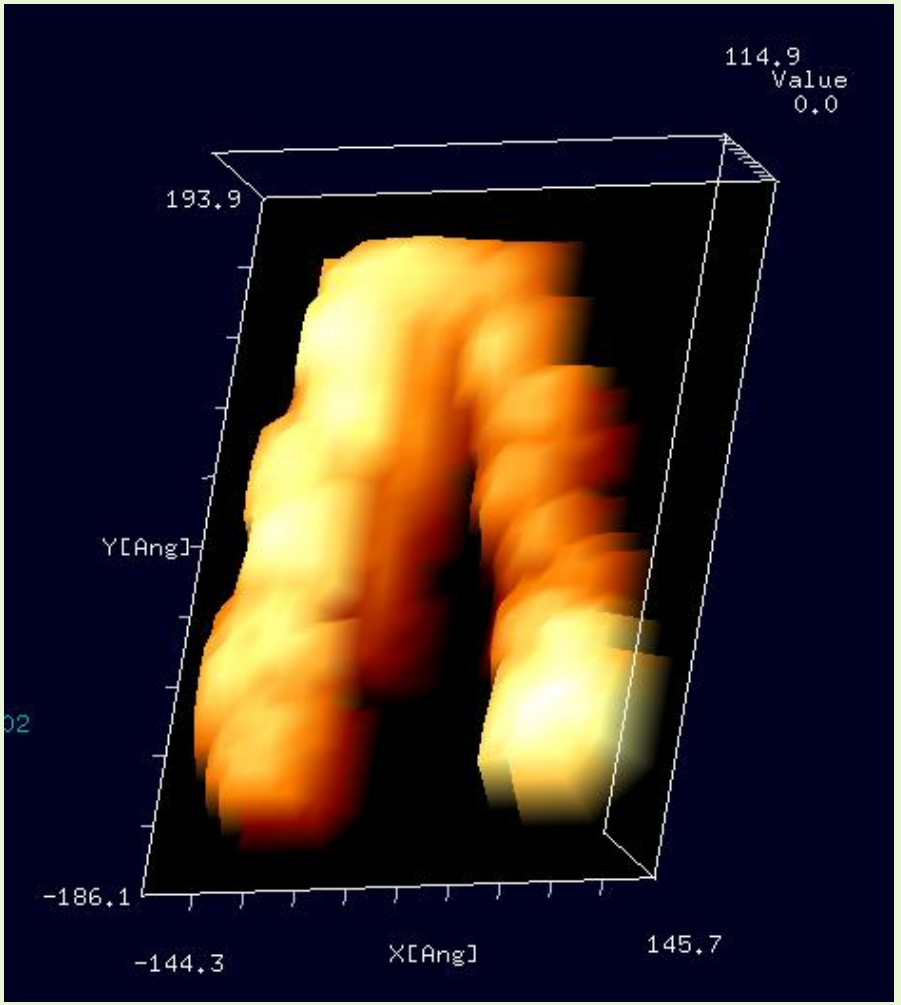
最大値:8.29E-4[V]
最小値:5.27E-5[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

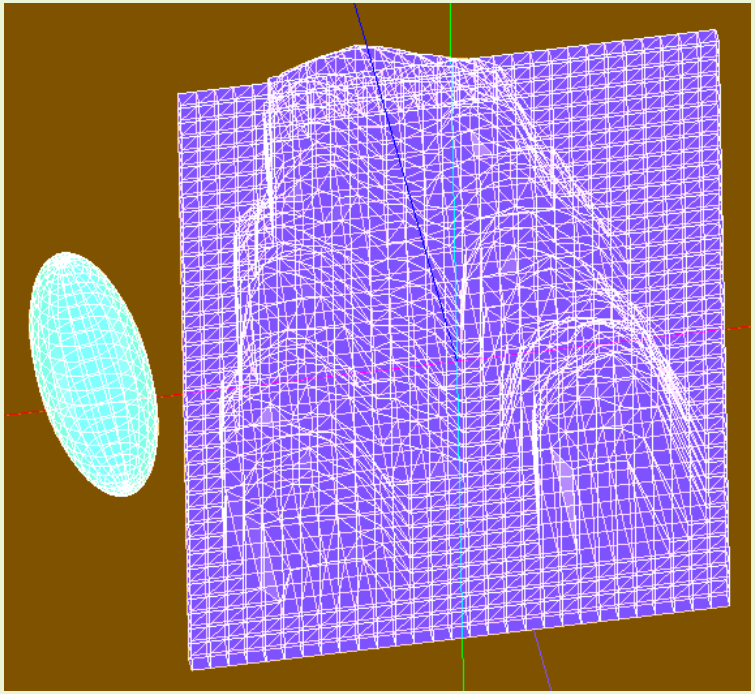


DNAの分子構造図

ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]のミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

探針は導体とする

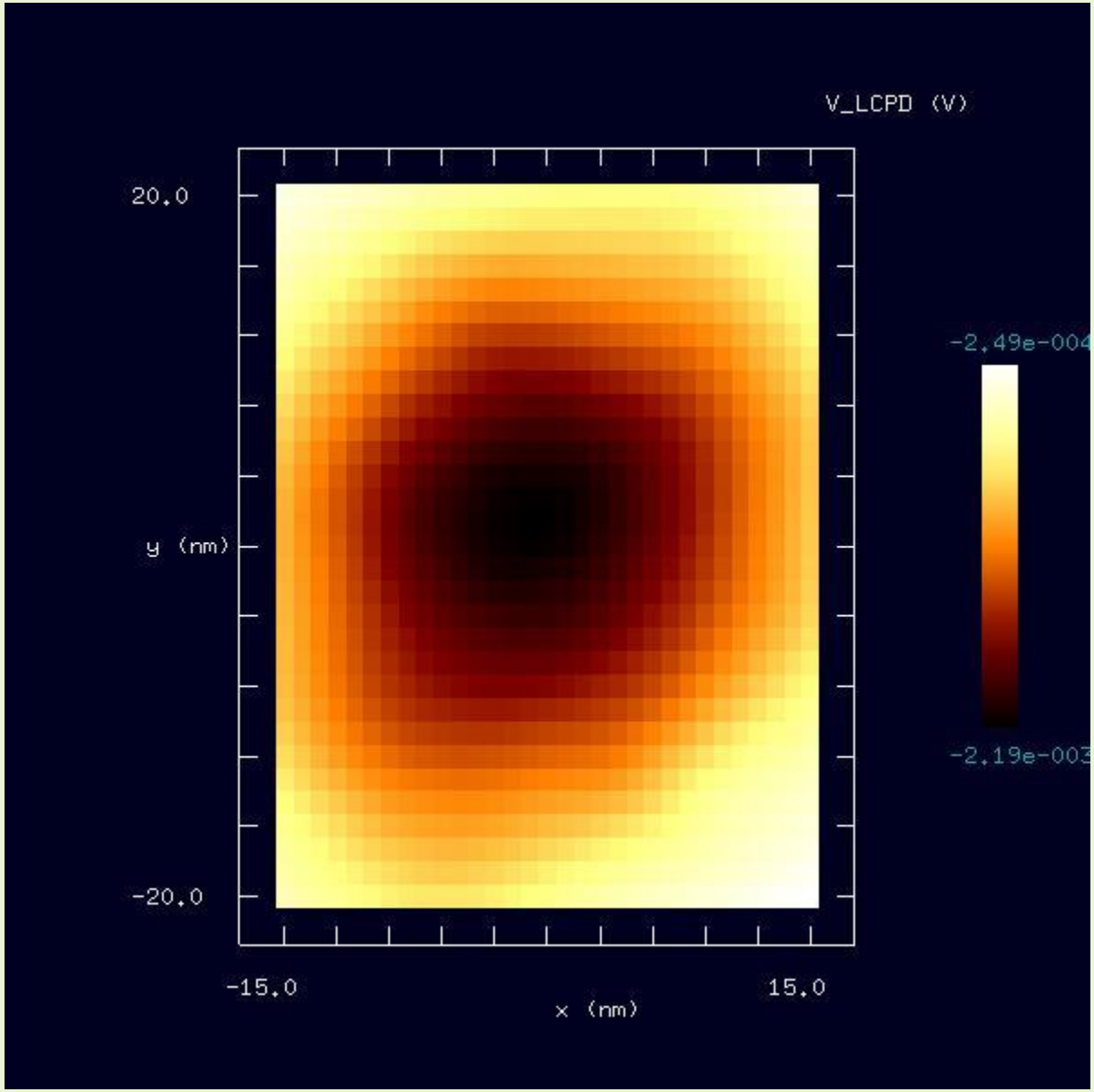
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

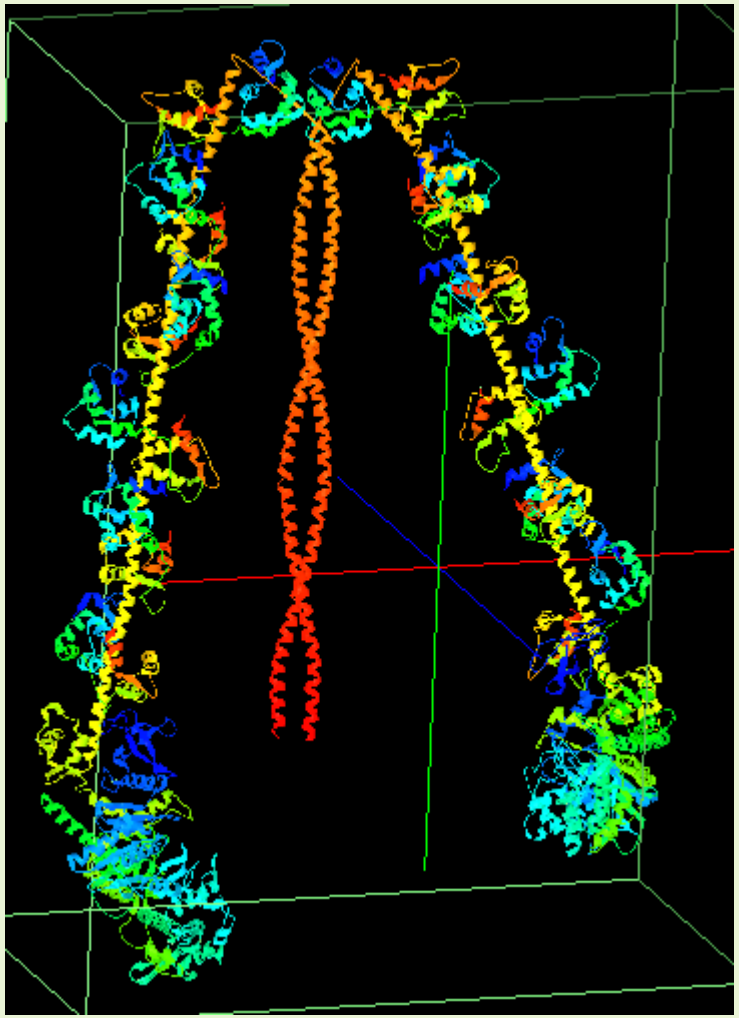
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

LCPD(局所接触電位差)像



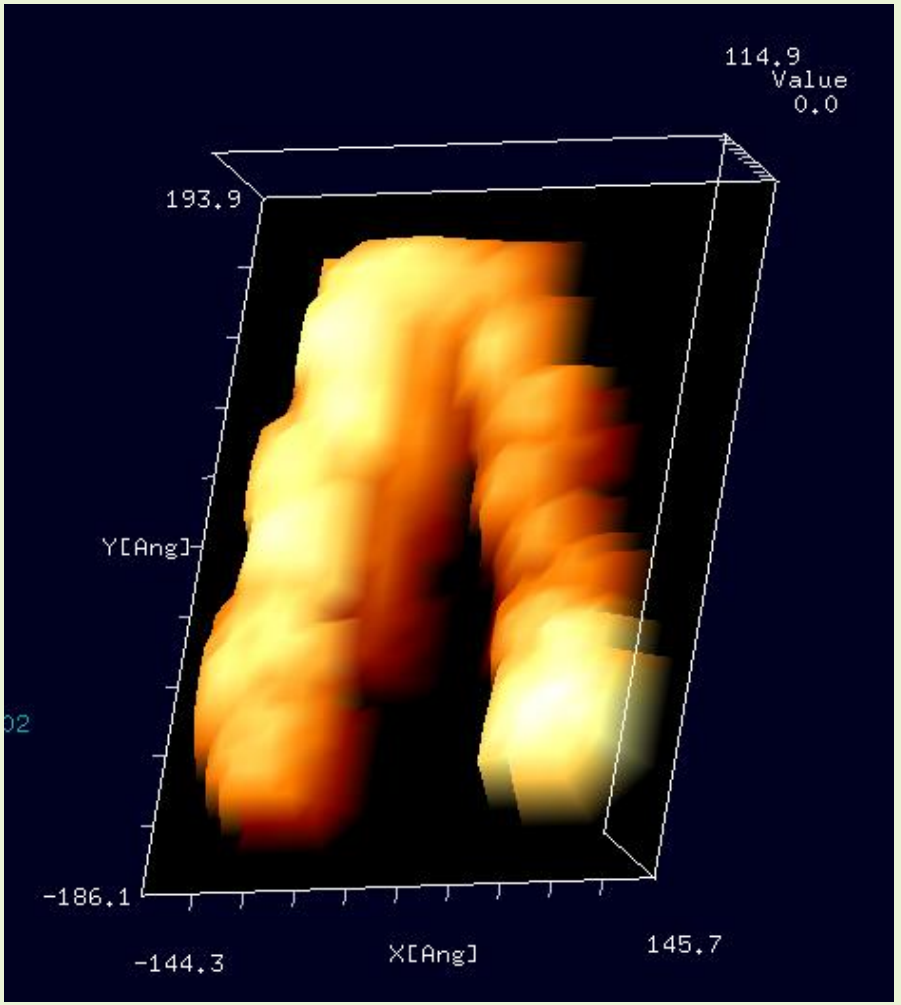
最大値:-2.49E-4[V]
最小値:-2.19E-3[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

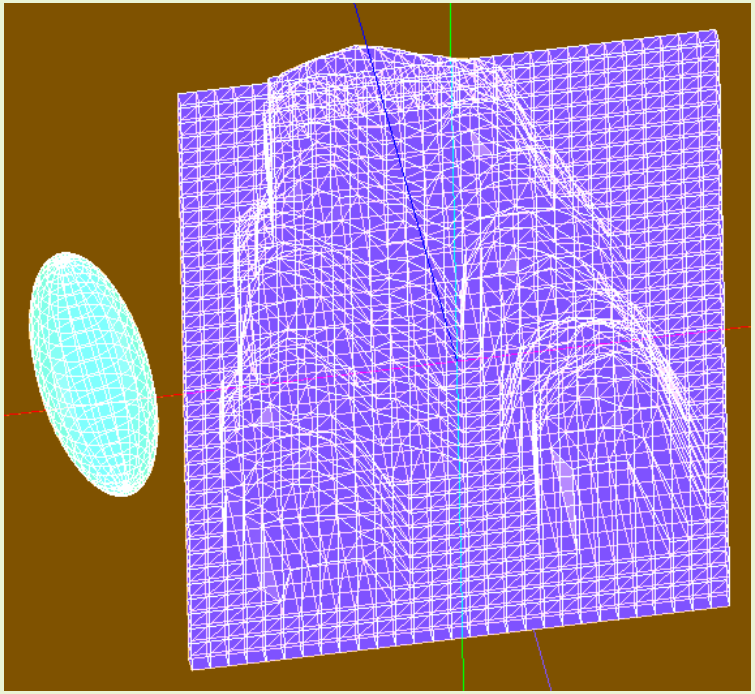


DNAの分子構造図

ミオシン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



DNA分子に対して、1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料：幅29[nm]、深さ38[nm]、高さ12.5[nm]のミオシン分子

試料のメッシュ幅は1.0[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：5.01[nm]

探針は導体とする

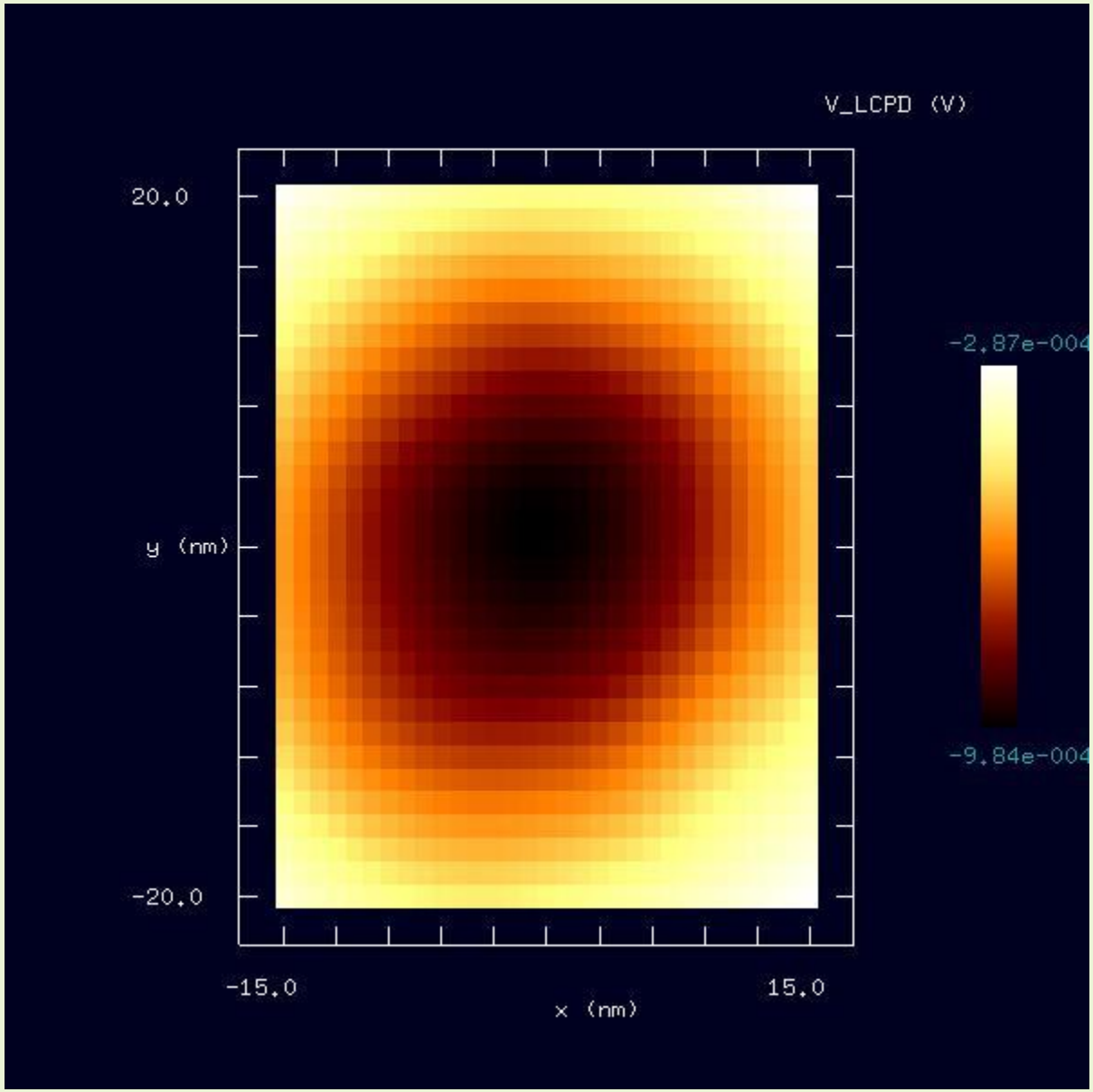
基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

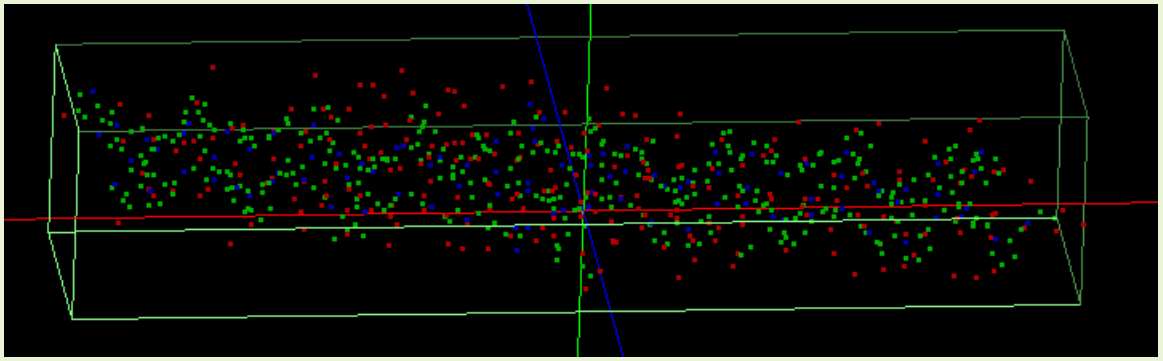
LCPD(局所接触電位差)像



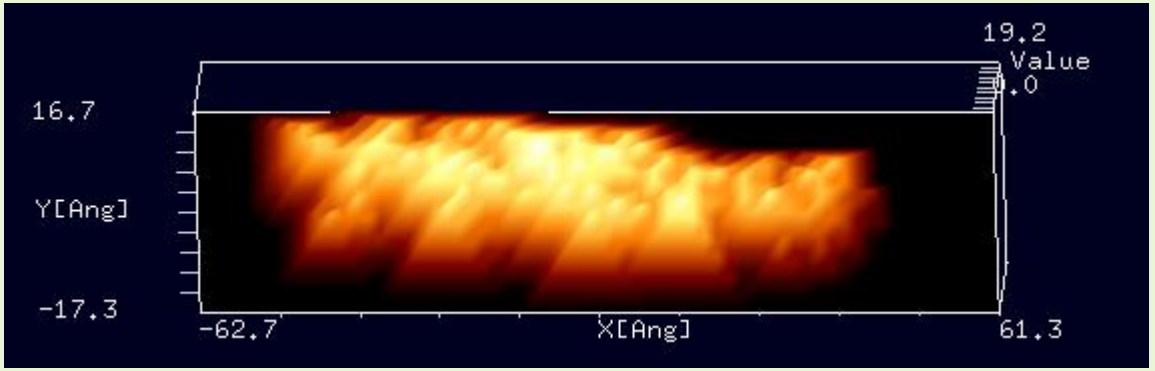
最大値:-2.87E-4[V]
最小値:-9.84E-4[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

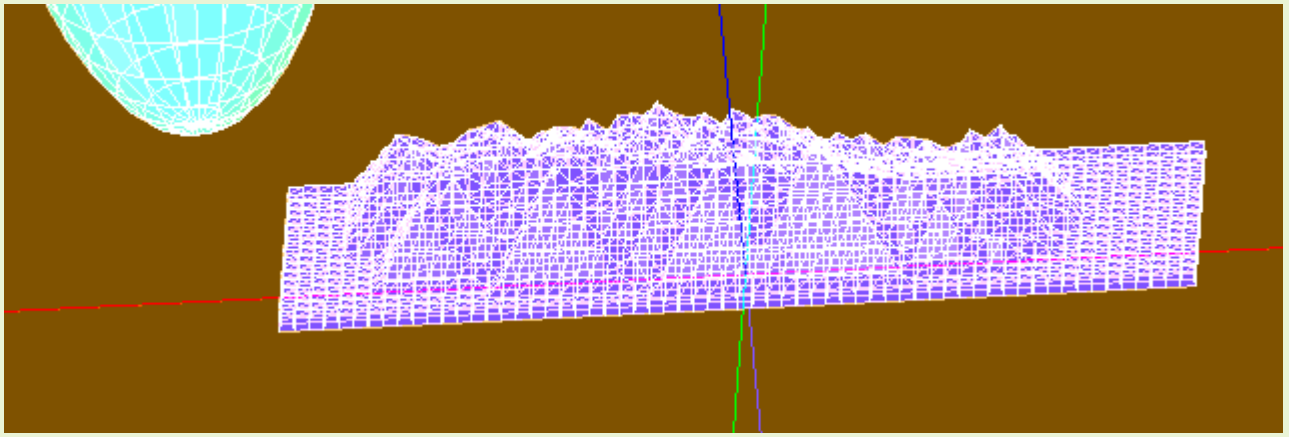
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

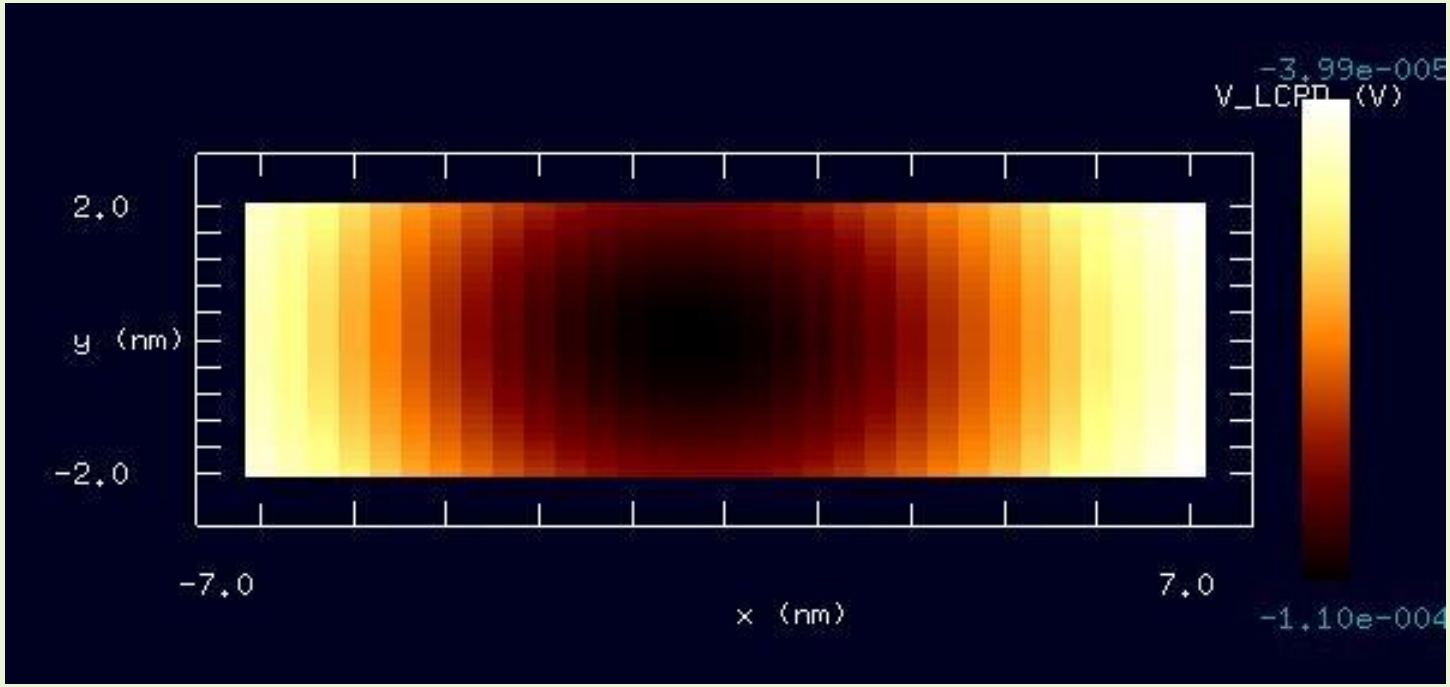
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

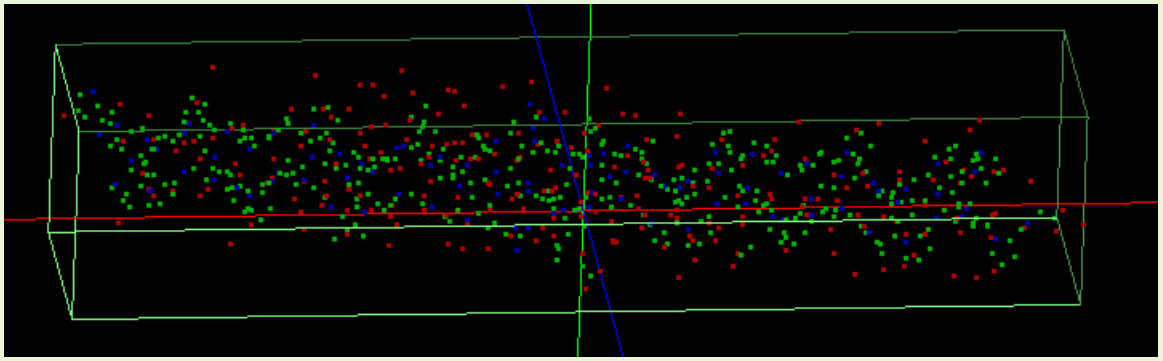
LCPD(局所接触電位差)像



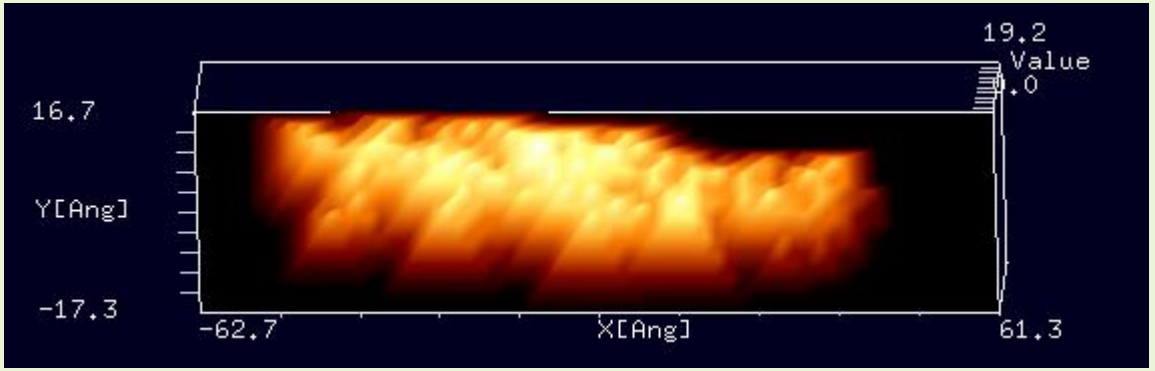
最大値:-3.99E-5[V]
最小値:-1.10E-4[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

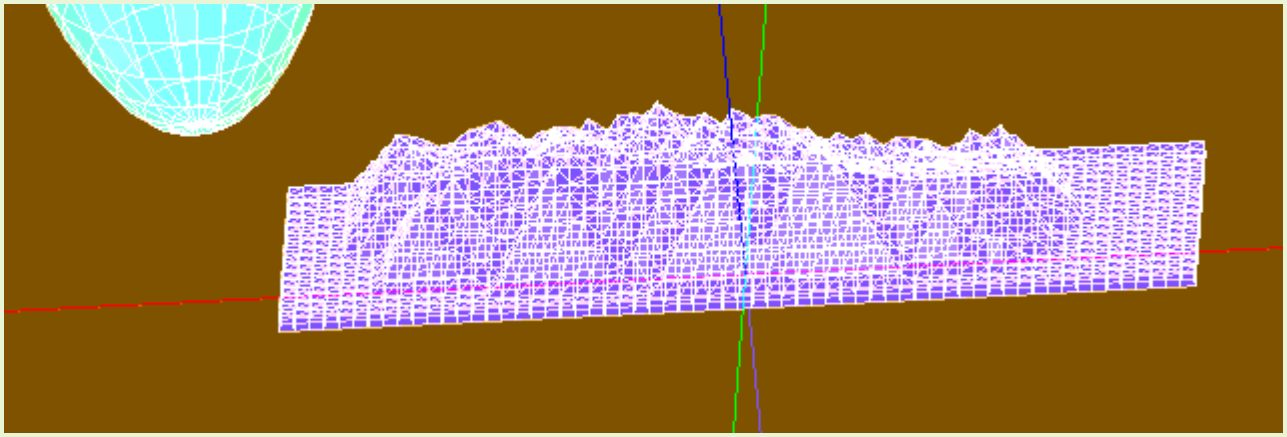
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

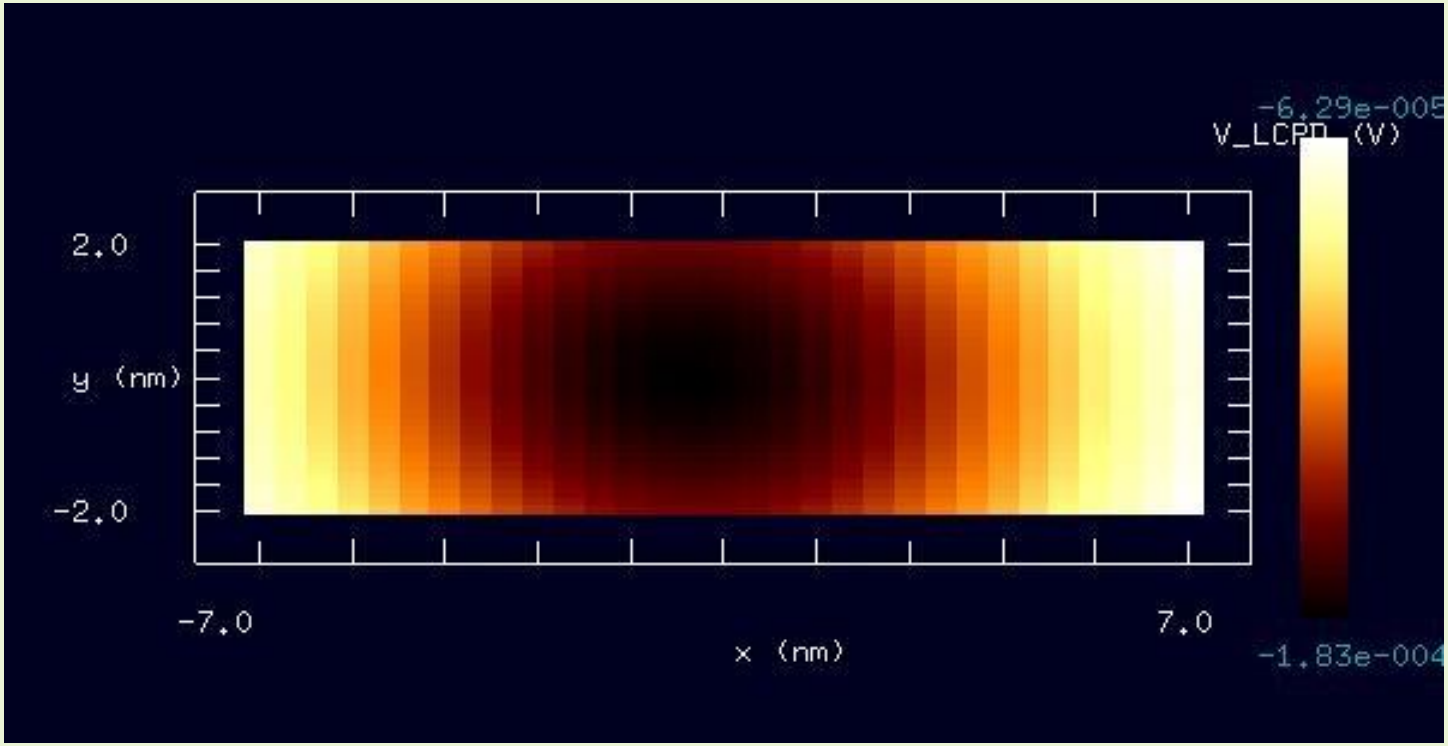
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

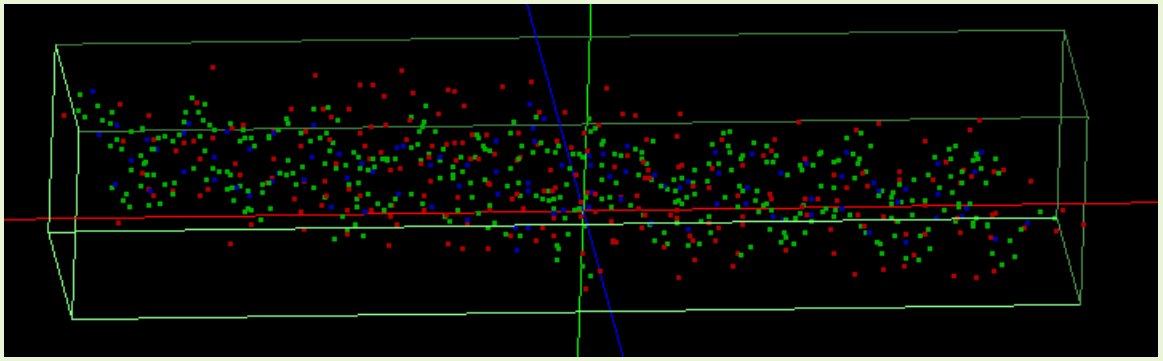
LCPD(局所接触電位差)像



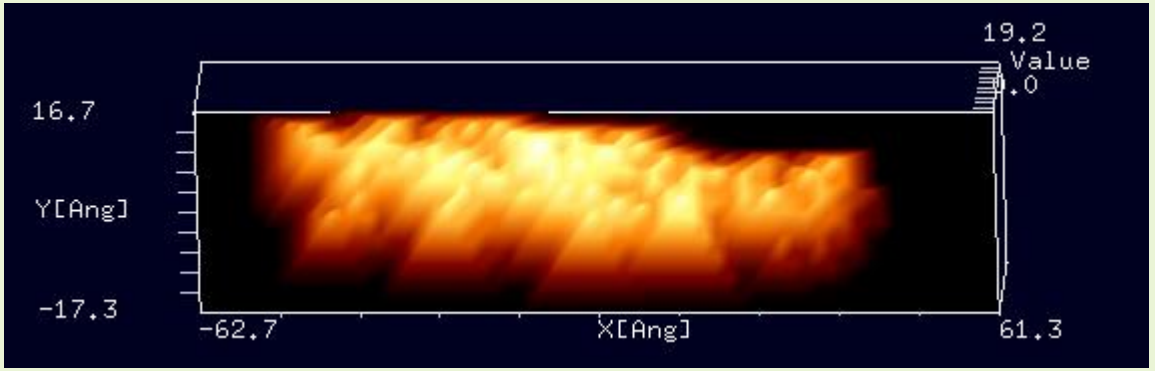
最大値:-6.29E-5[V]
最小値:-1.83E-4[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

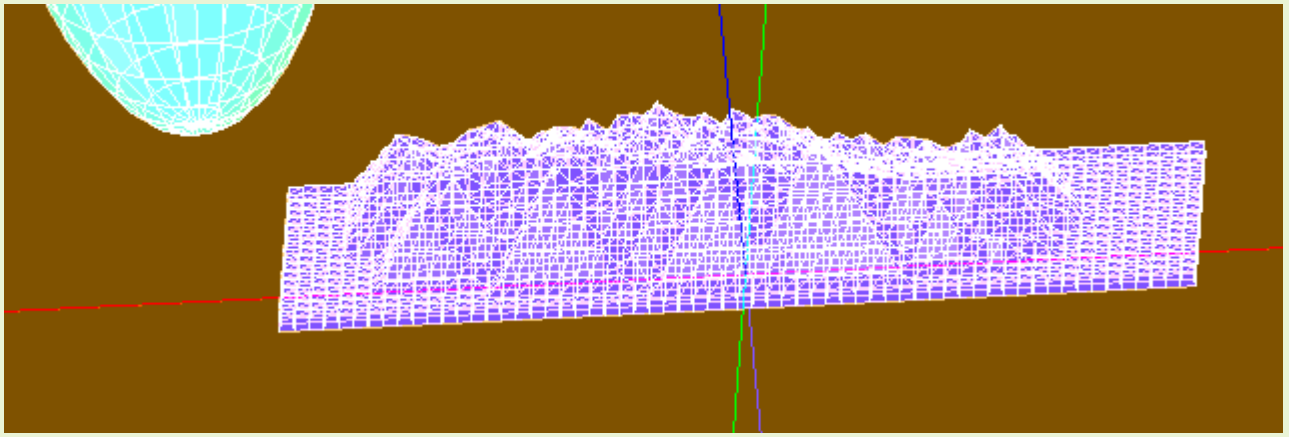
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

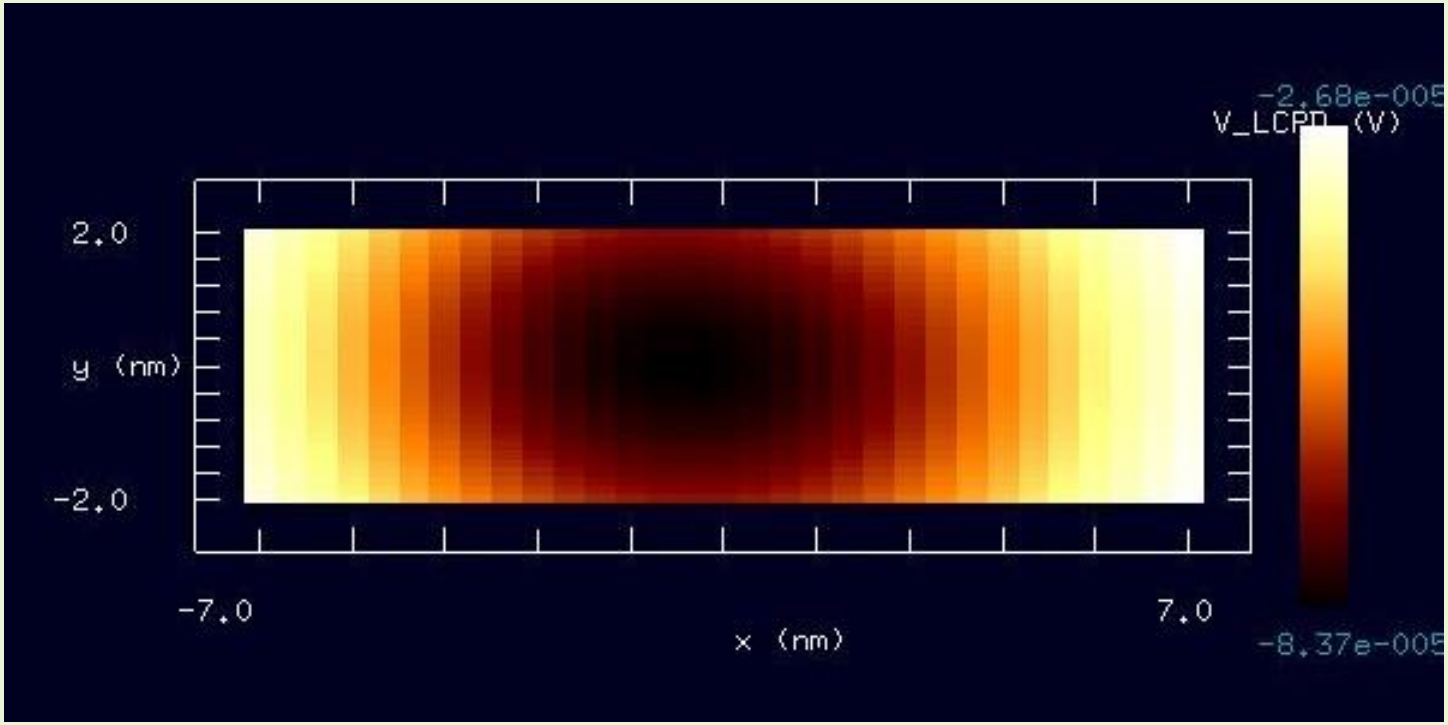
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

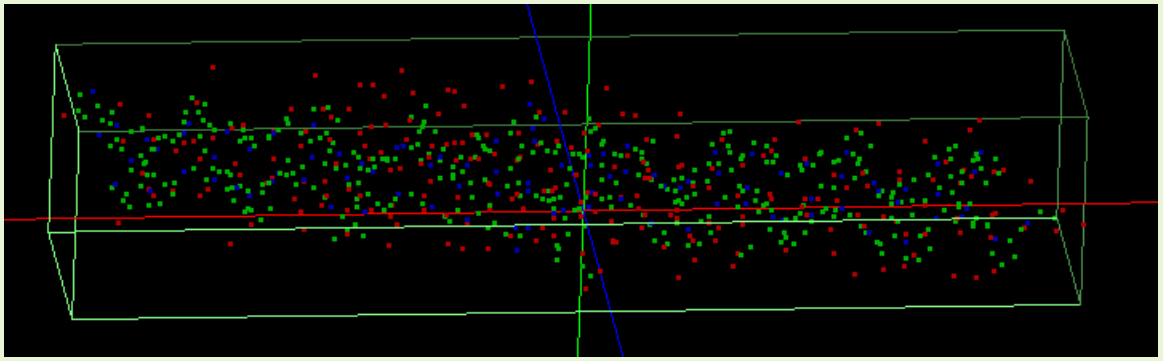
LCPD(局所接触電位差)像



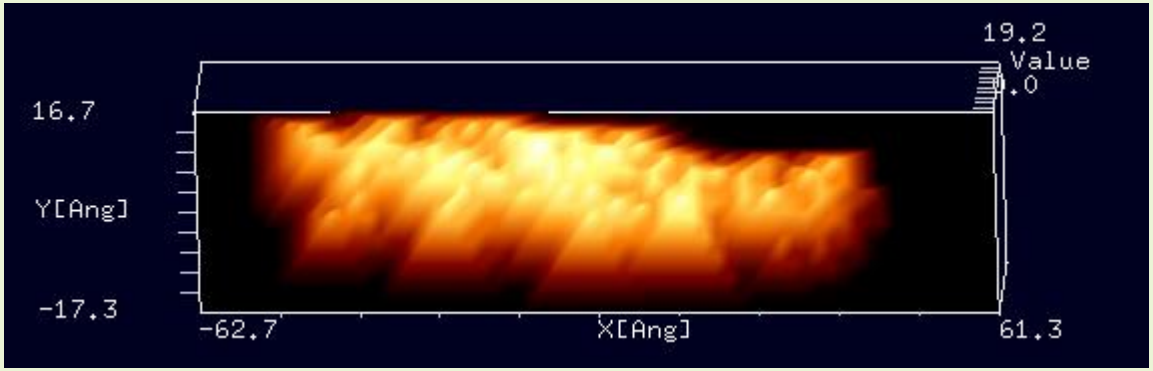
最大値:-2.68E-5[V]
最小値:-8.37E-5[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

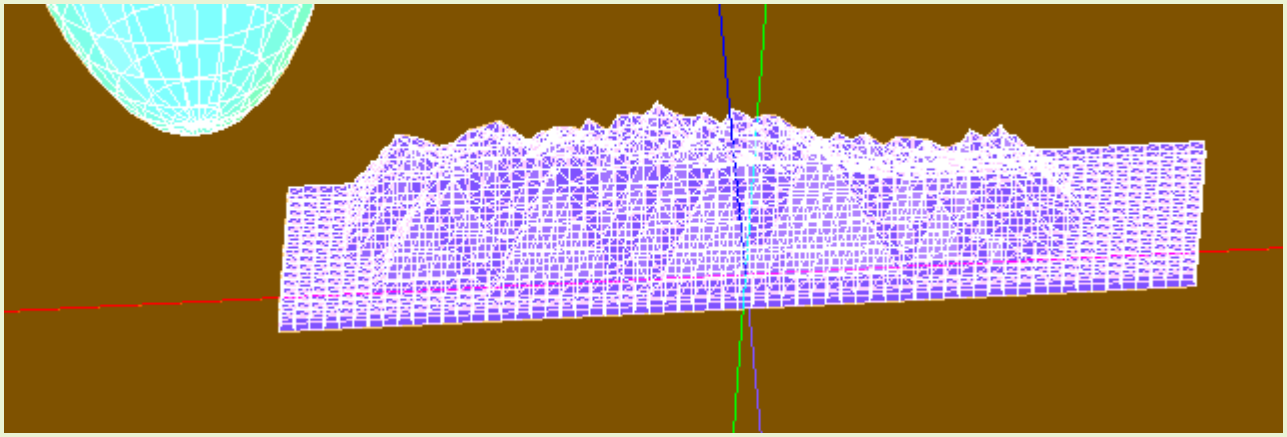
コラーゲン分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



コラーゲンの分子構造図



コラーゲン分子に対して、0.2[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.2[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：1.38[nm]

試料：幅12.4[nm]、深さ3.4[nm]、高さ2.12[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

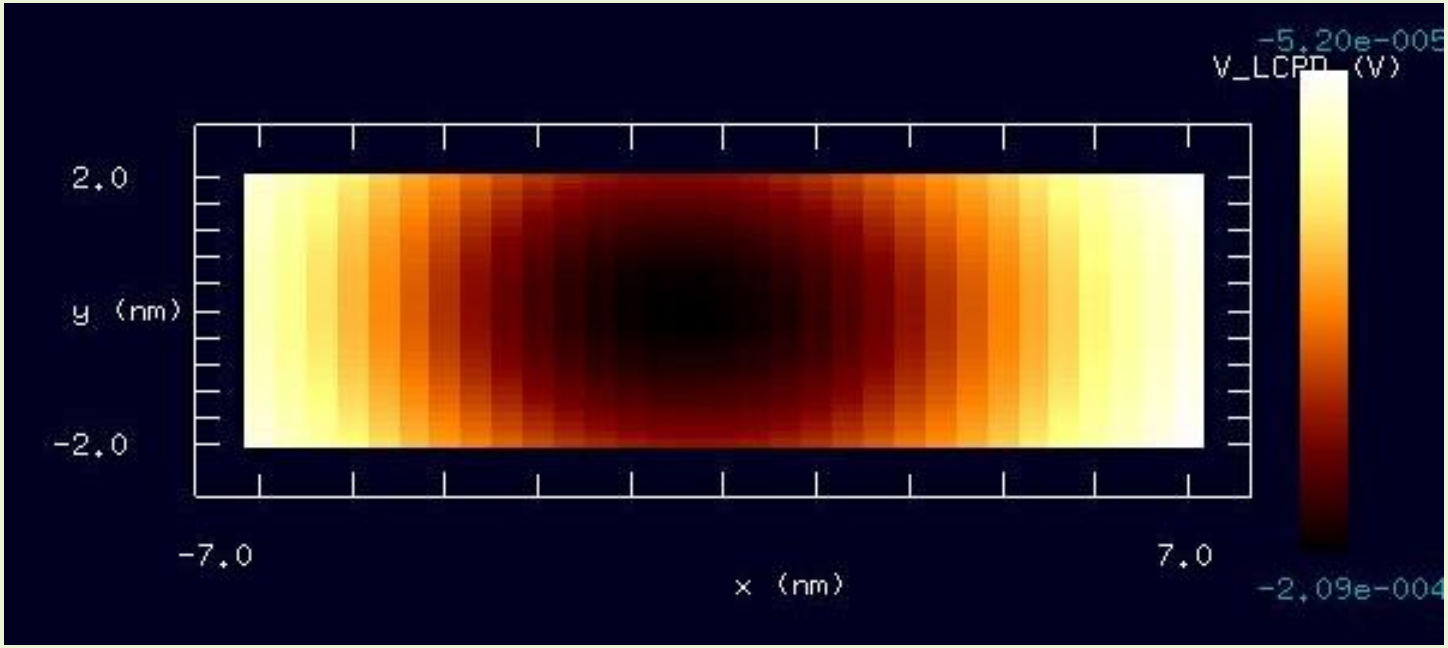
探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

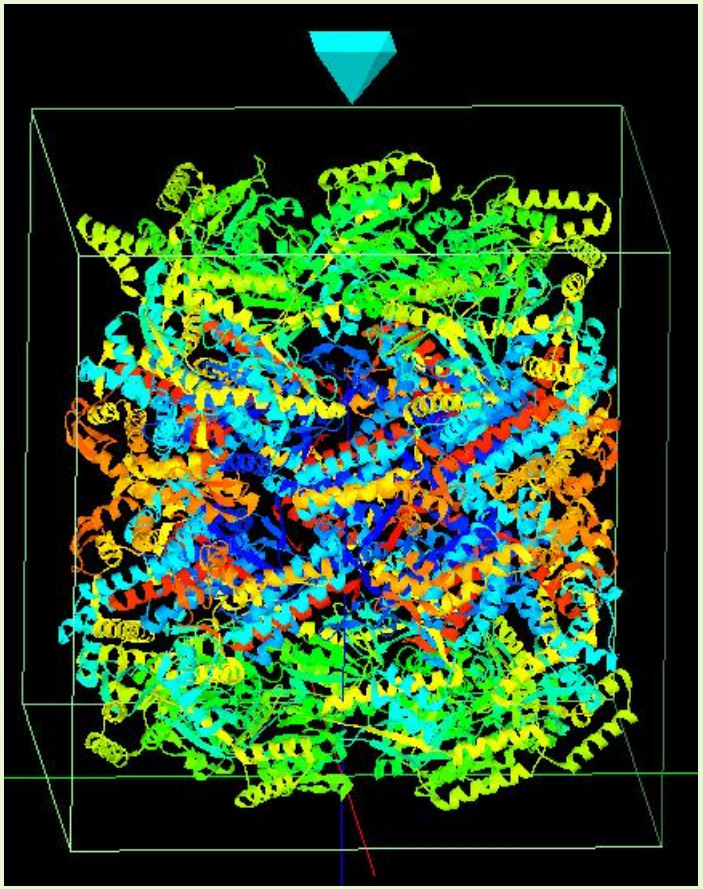
LCPD(局所接触電位差)像



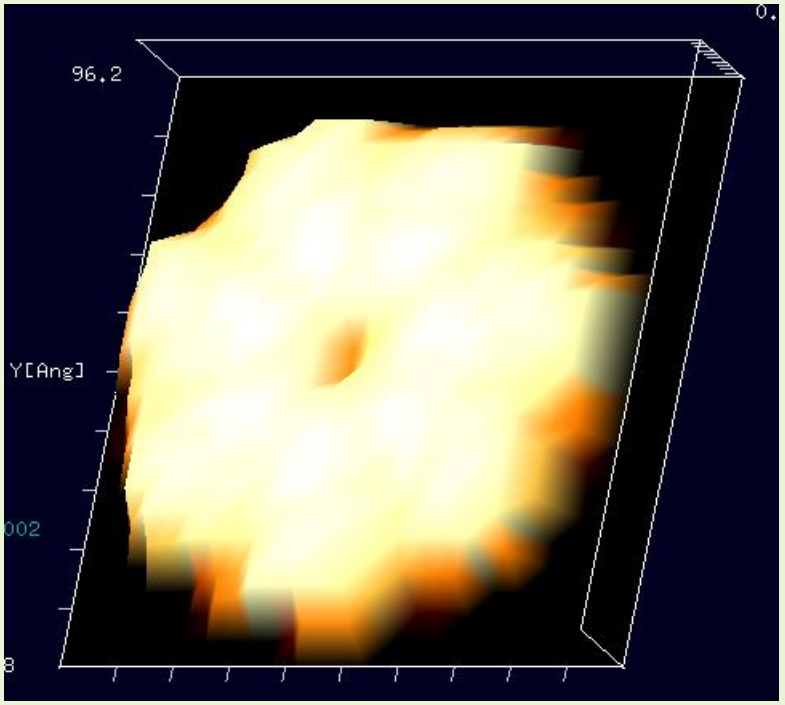
最大値:-5.20E-5[V]
最小値:-2.09E-4[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

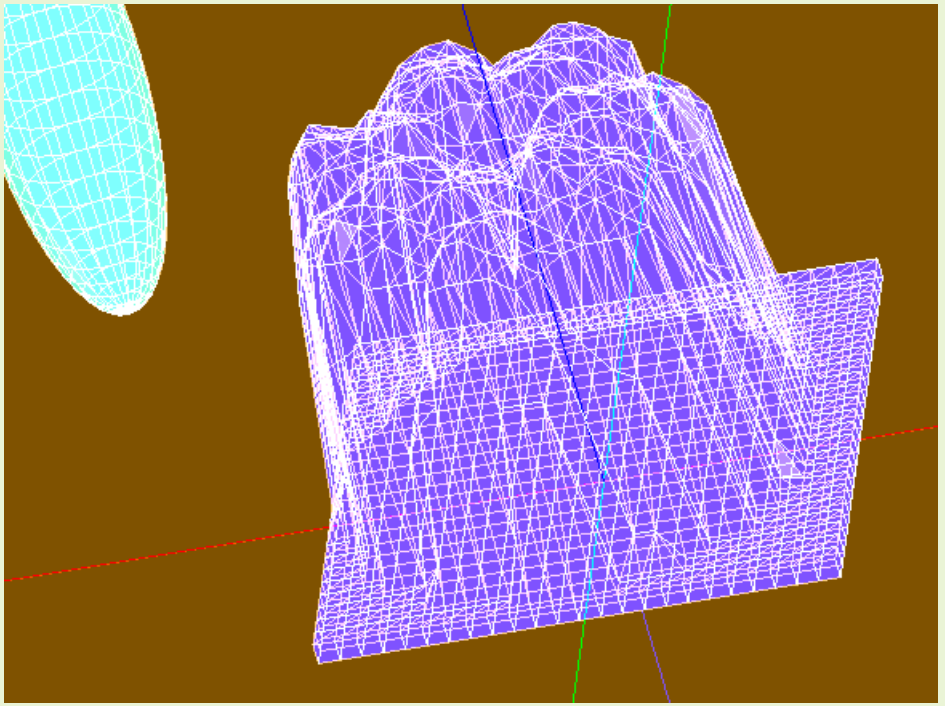
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

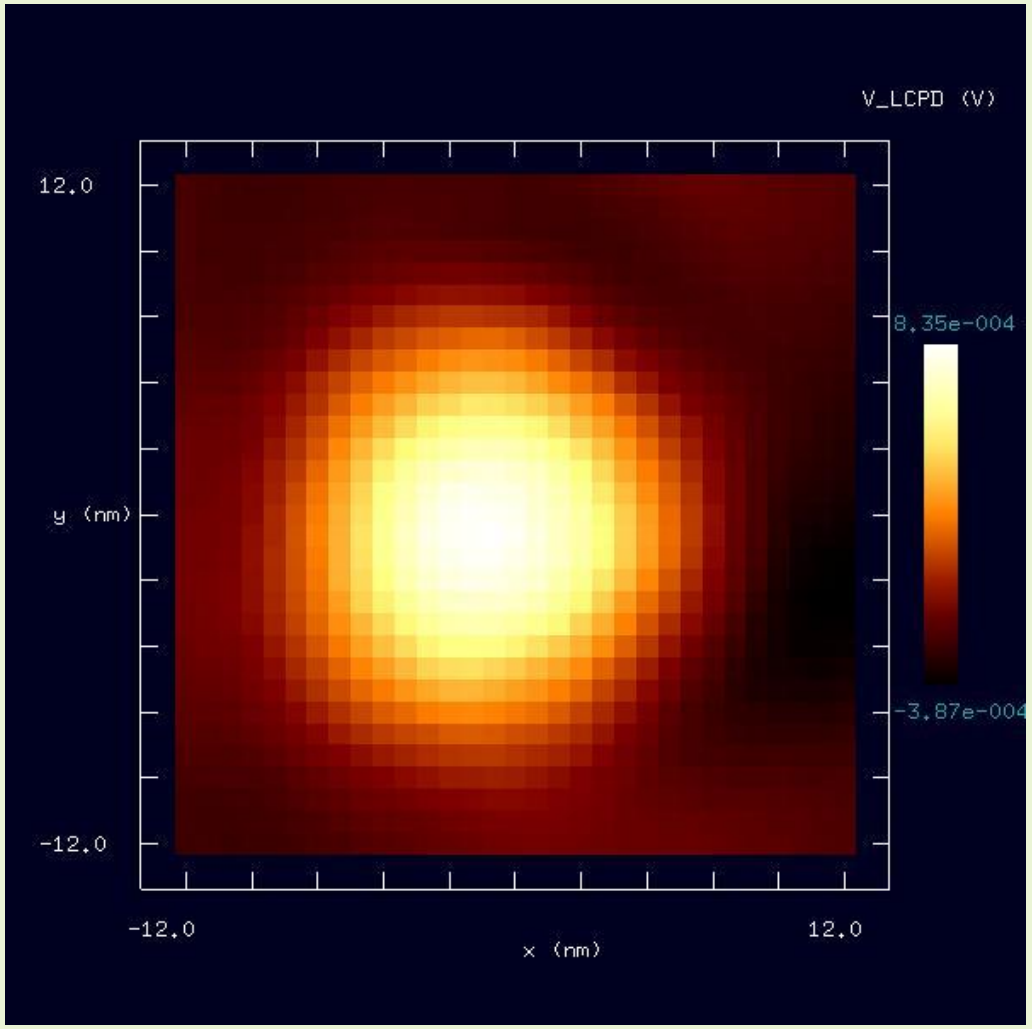
試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：1.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.309[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

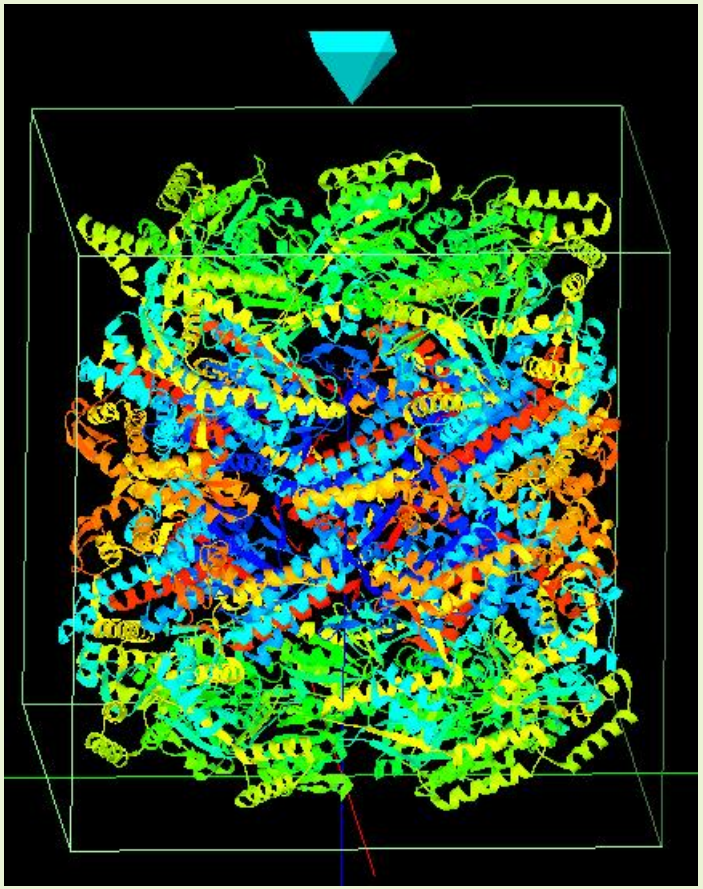
LCPD(局所接触電位差)像



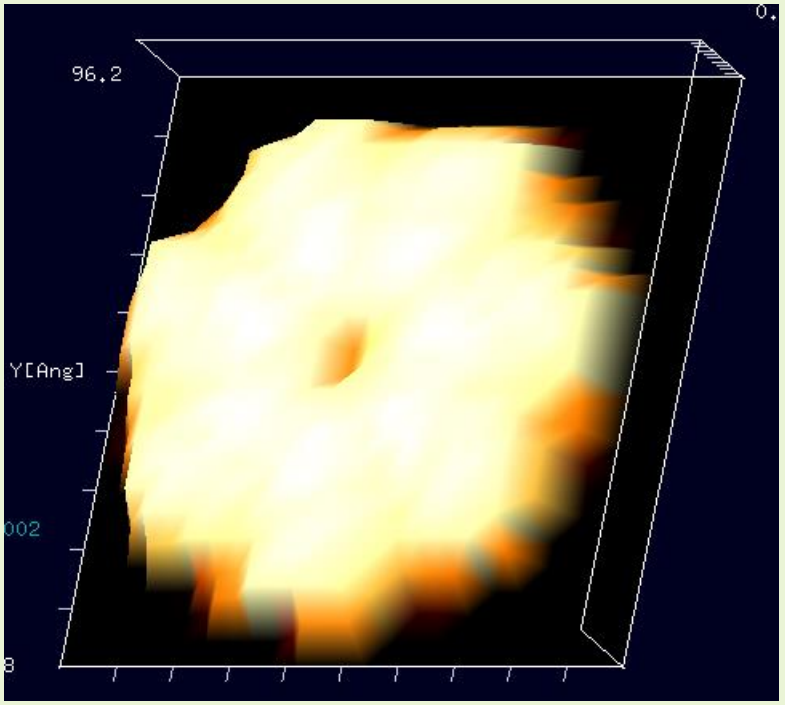
最大値:8.35E-4[V]
最小値:-3.87E-4[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

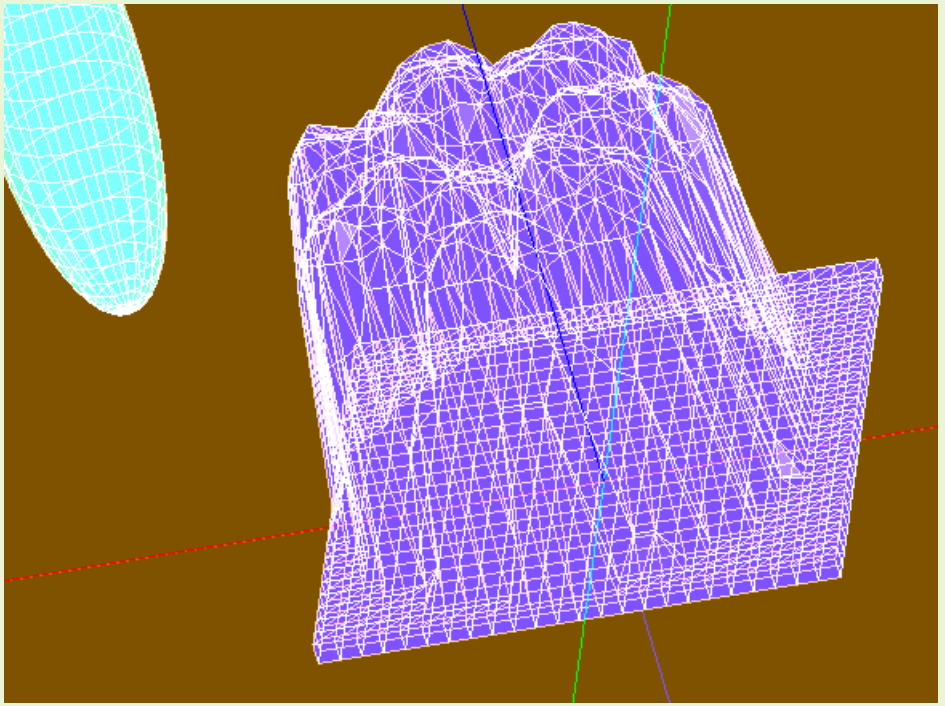
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

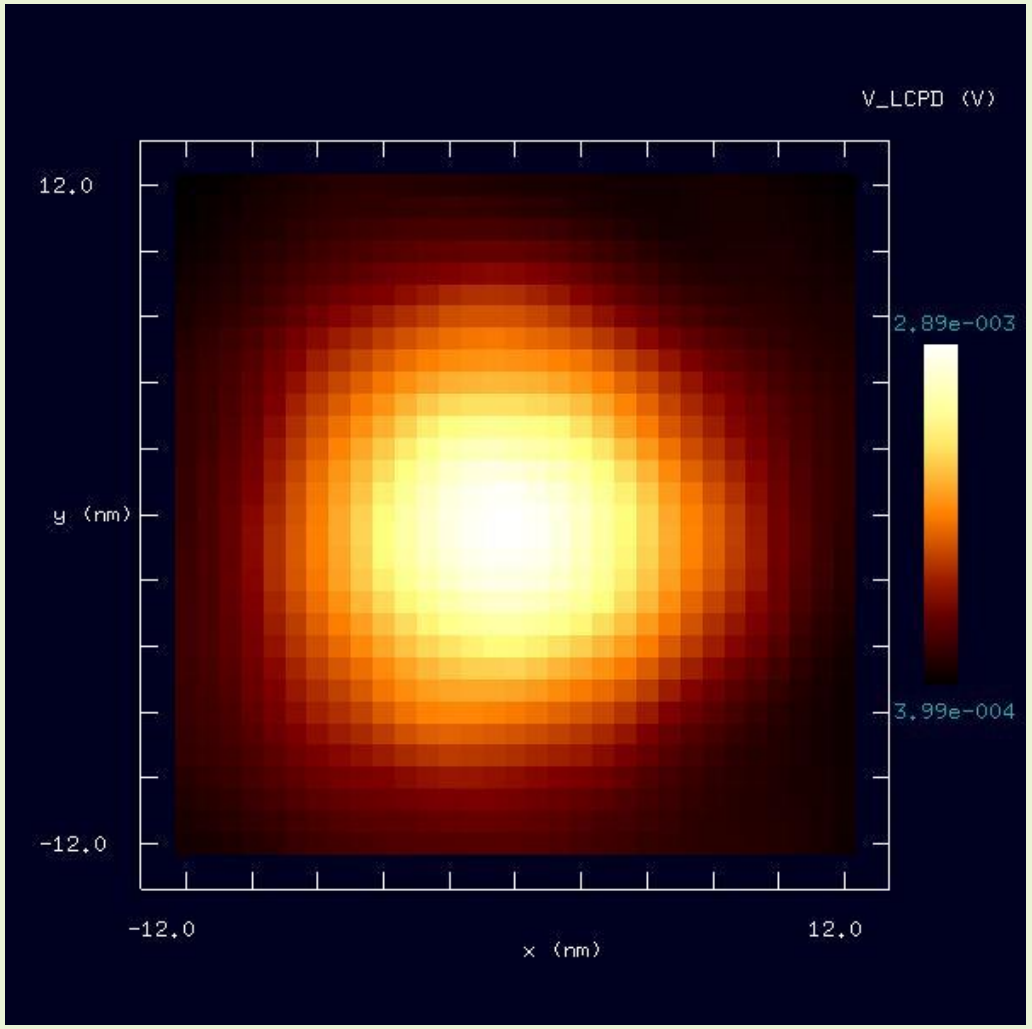
試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：10.0[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.0977[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

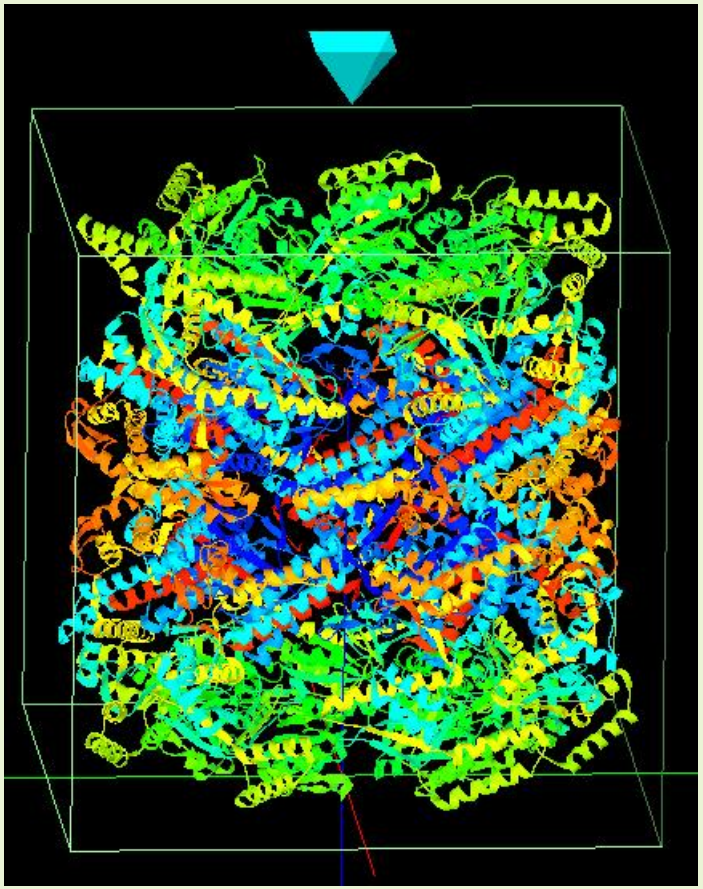
LCPD(局所接触電位差)像



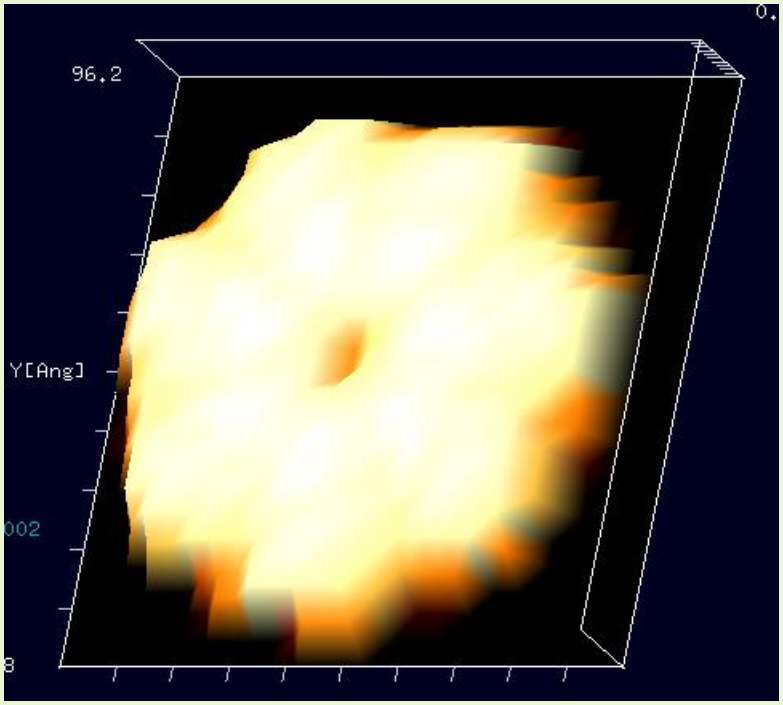
最大値:2.89E-3[V]
最小値:3.99E-4[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

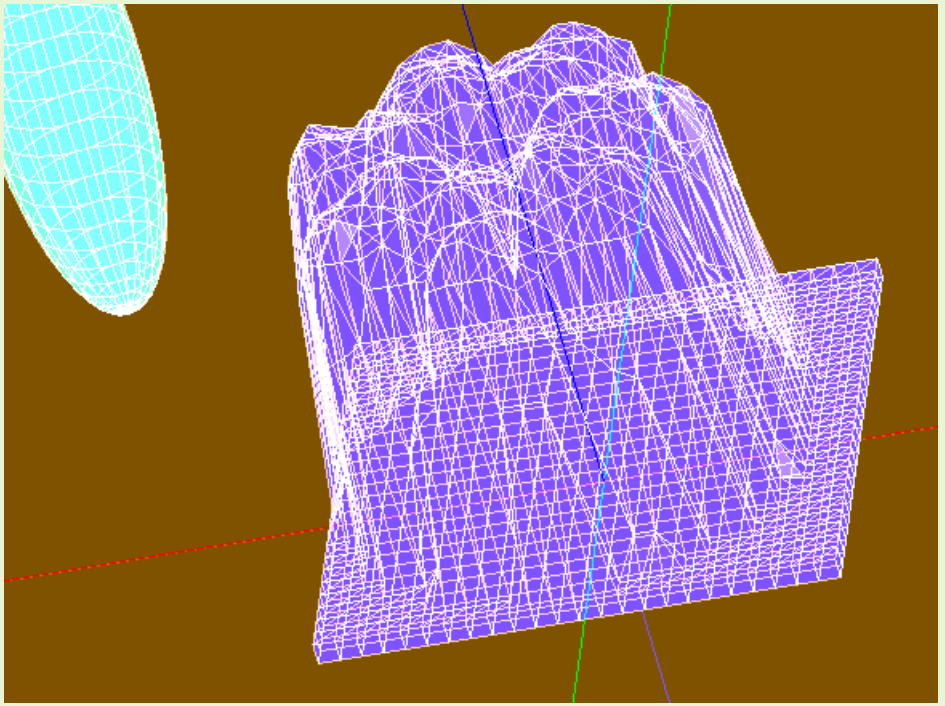
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、
0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

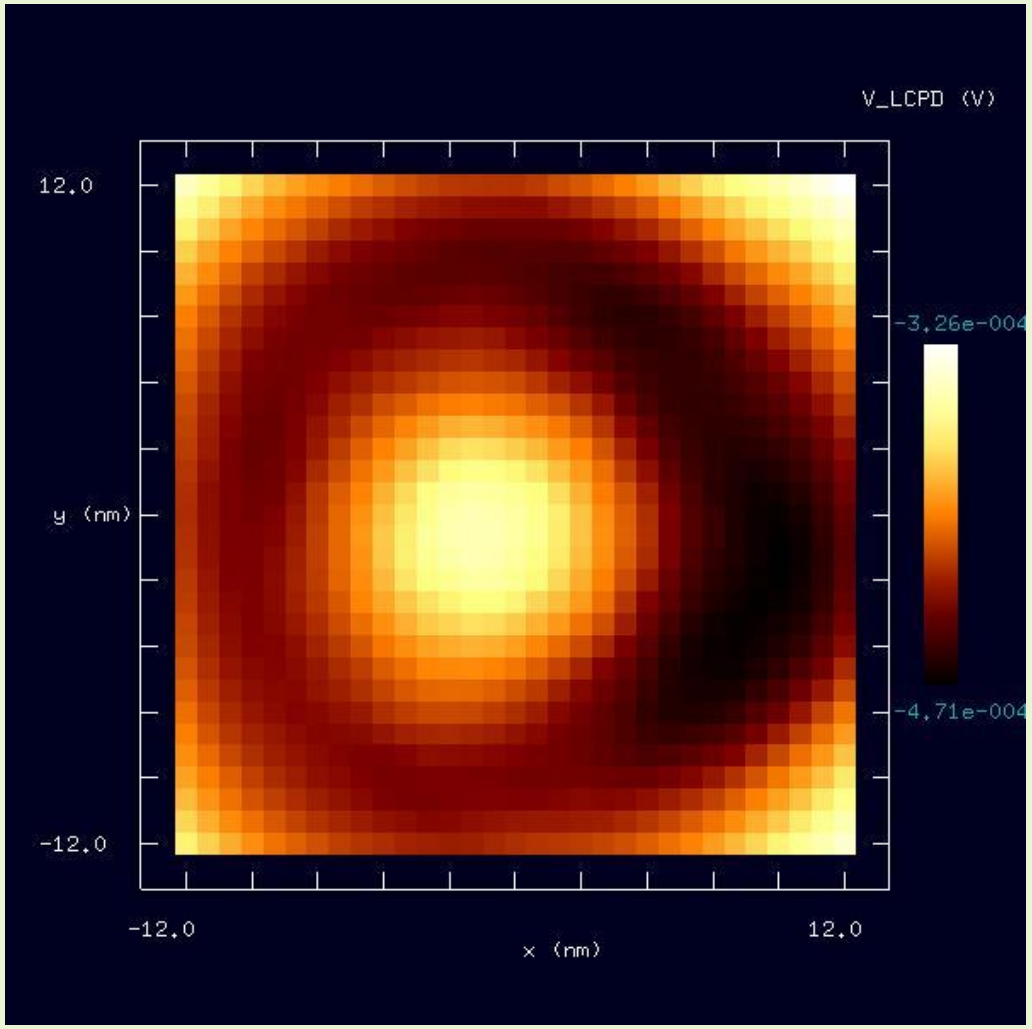
試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.1[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：0.977[nm]

探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

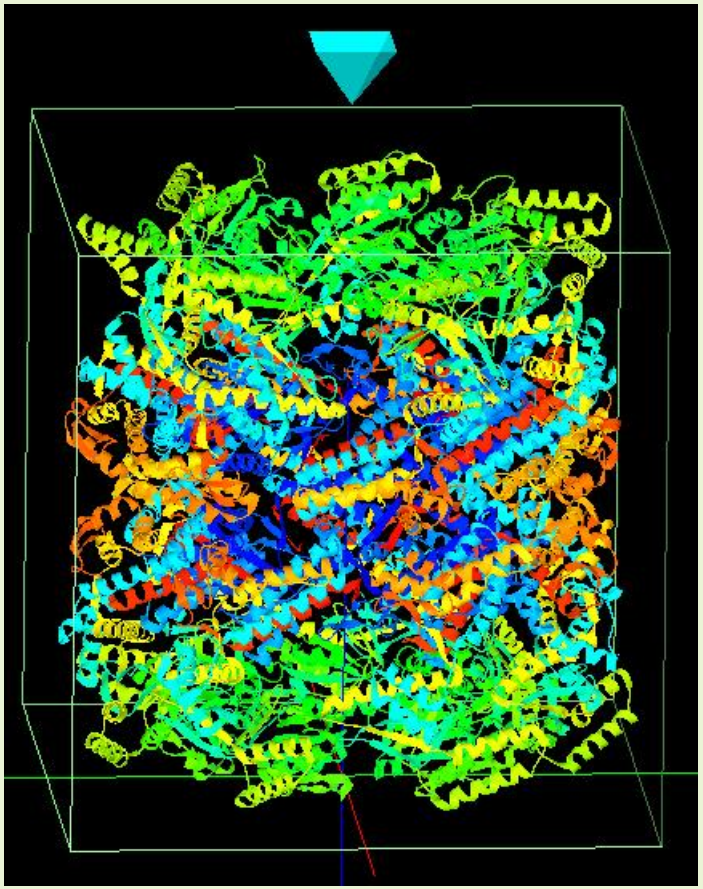
LCPD(局所接触電位差)像



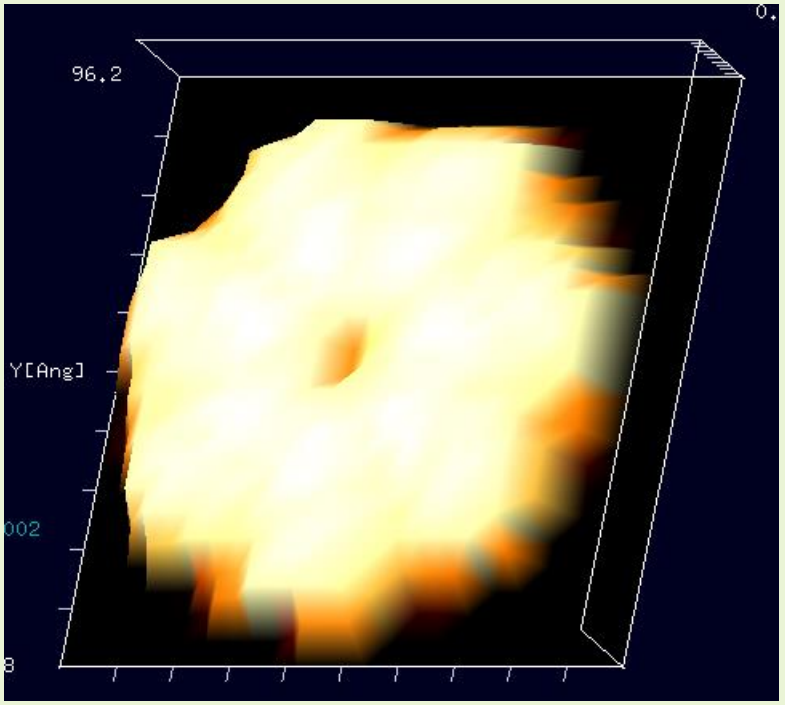
最大値:-3.26E-4[V]
最小値:-4.71E-4[V]

macroKPFM_DLVO_vanderWaals

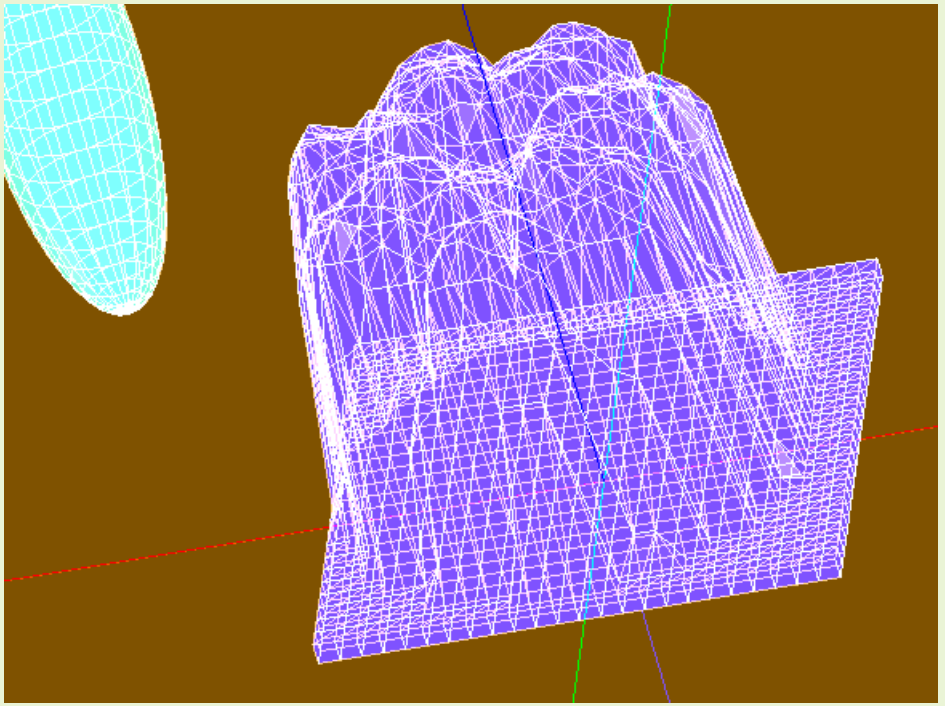
シャペロニンGroEL分子表面に均一電荷を分布させた場合のLCPD像



シャペロニンGroELの分子構造図



シャペロニンGroEL分子に対して、0.8[nm]の分解能で得られたAFM像



探針：幅6[nm]、深さ6[nm]、高さ20[nm]の回転楕円体

試料のメッシュ幅は0.8[nm]とした

探針先端と試料の最短距離：2.02[nm]

探針は導体とする

基板は電圧0[V]とする

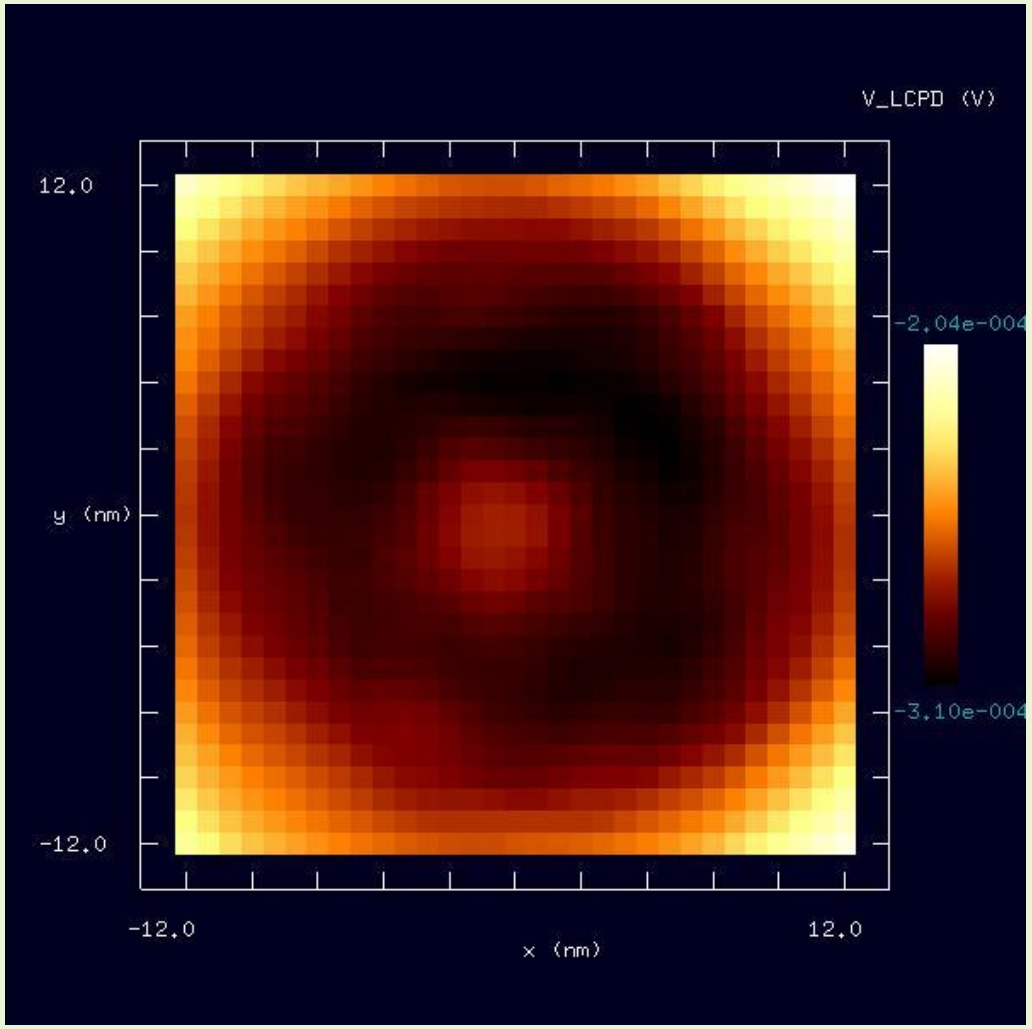
試料は、比誘電率80.4の誘電体とする
試料表面に、-1.0E-4[C/m^2]の電荷を分布させる

試料：幅19.2[nm]、深さ19.2[nm]、高さ15.5[nm]のコラーゲン分子

探針と試料を取り巻く電解質溶液
イオン濃度：0.01[M]　ただし、[M]=[mol/dm^3]
イオン電荷：+1
温度：300[K]
比誘電率：80.4
デバイ長さ：3.09[nm]

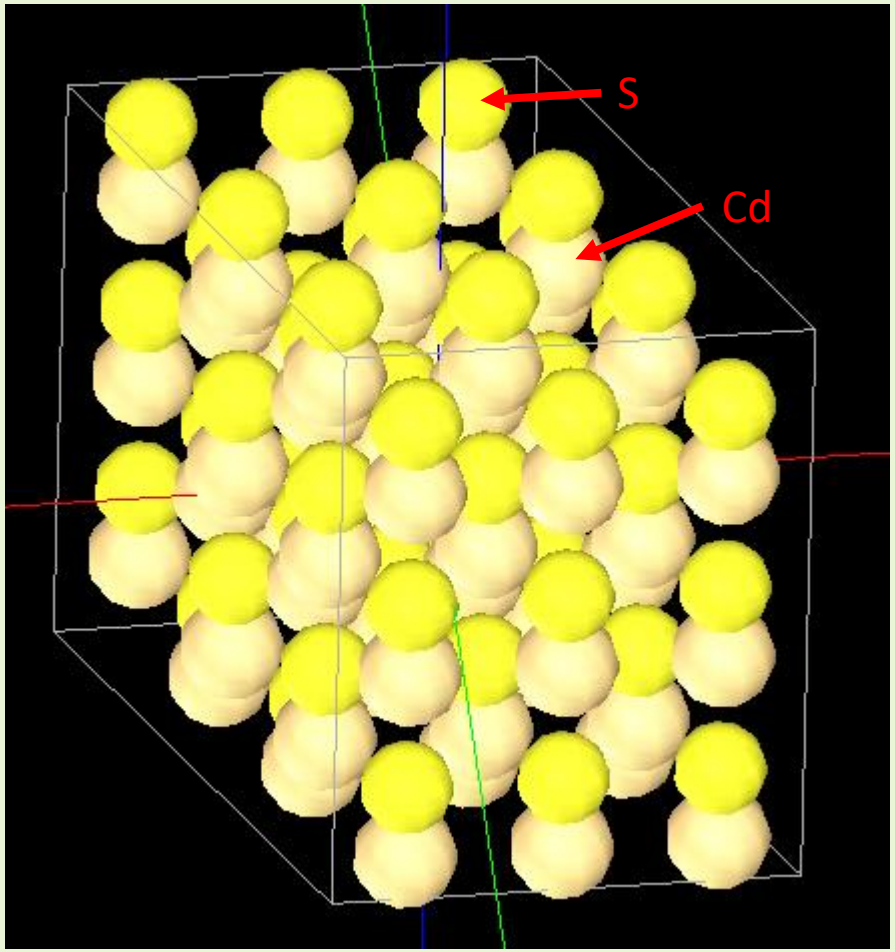
探針、試料のハマーカー定数は、ともに50[zJ]

LCPD(局所接触電位差)像



最大値:-2.04E-4[V]
最小値:-3.10E-4[V]

DFTB_BAND　CdSのバンド構造

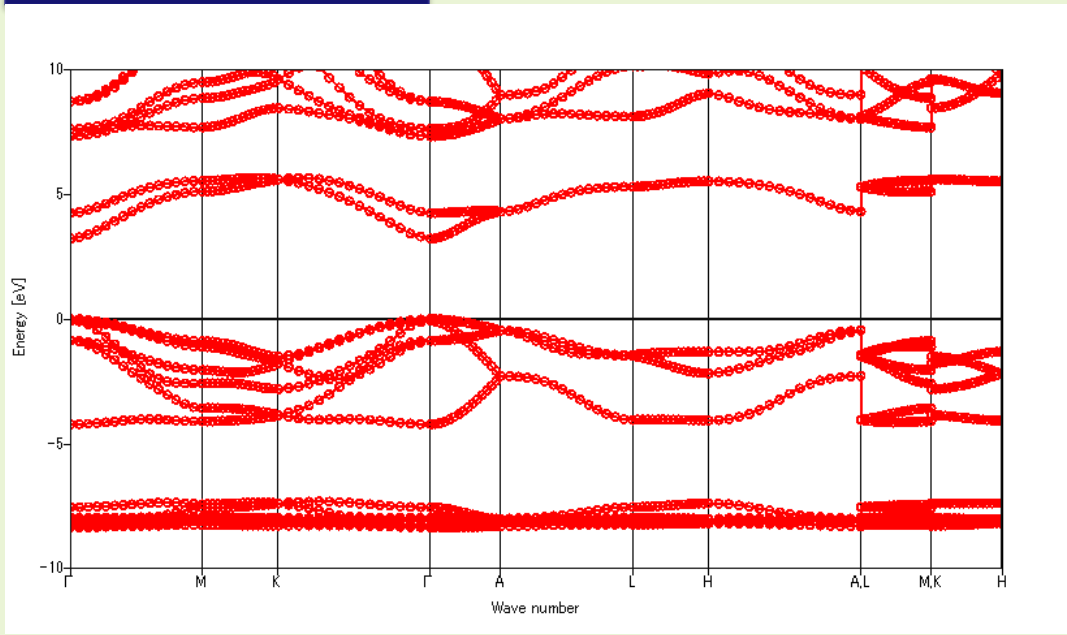


CdSの(001)面

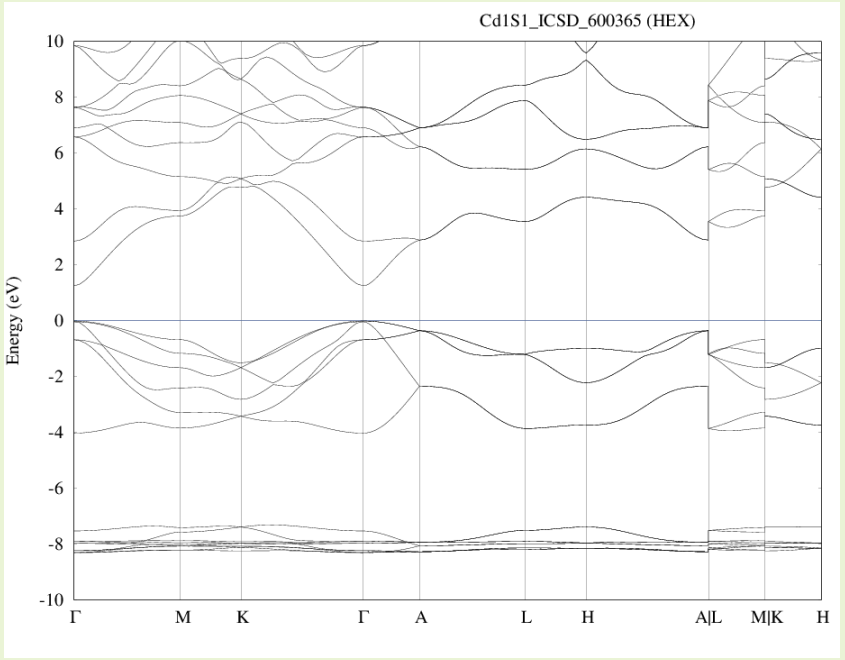
空間群：186
格子定数
長さ：a=b=4.189954[ang]
　　c=6.806707[ang]
角度：α=β=90[deg]
　　γ=120[deg]
原子の位置：
Cd: (0.6667, 0.3333, 0.0)
S: (0.6667, 0.3333, 0.3770)

Lattice_type: HEX

CdSのバンド構造

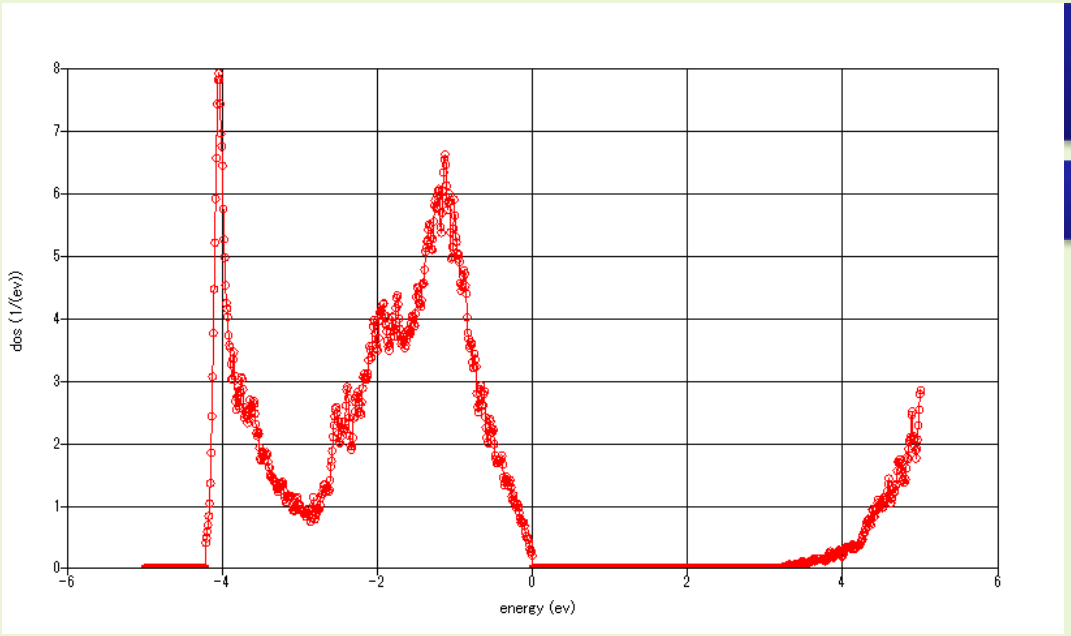


DFTBで求められたバンド構造



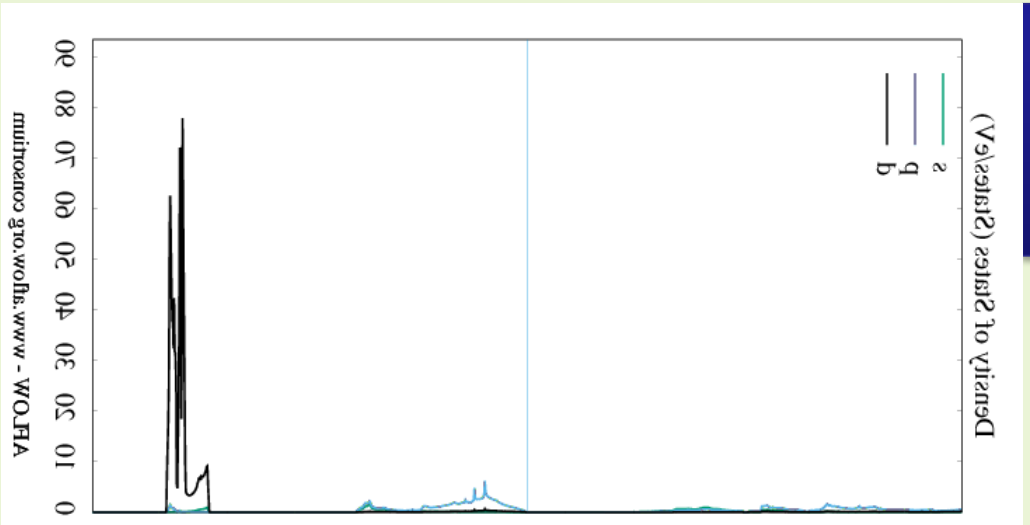
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:9ce2472f0e485f6d)

CdSの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　3.23[eV]

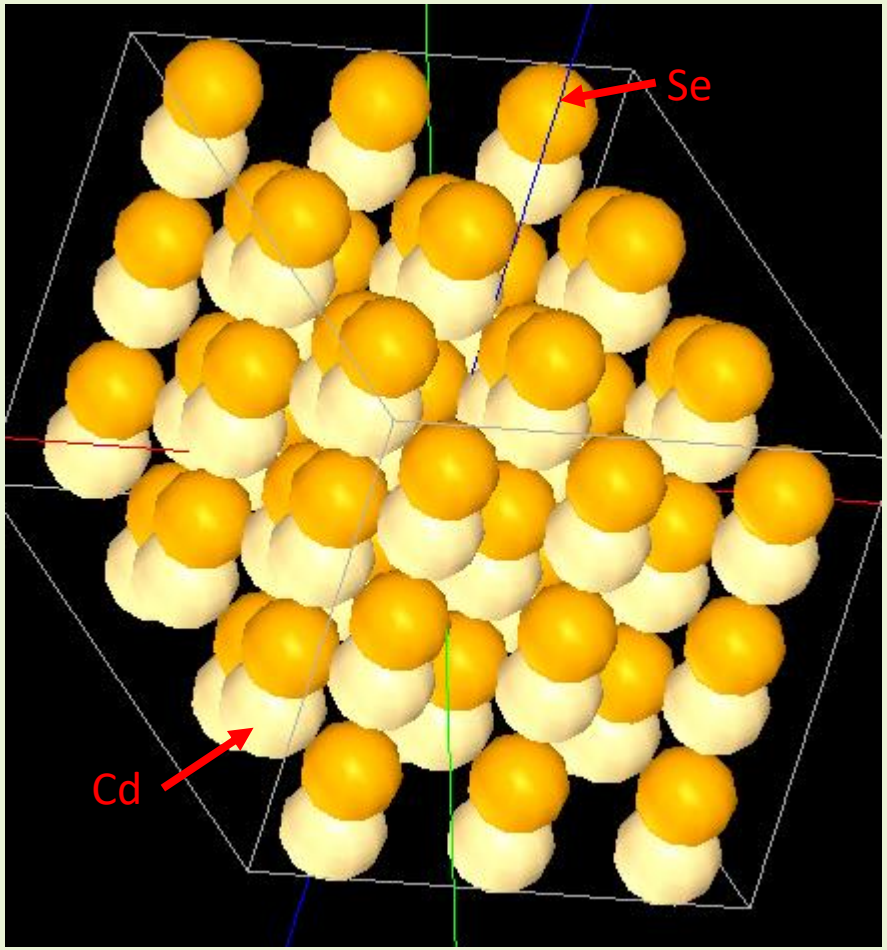
バンド・ギャップ観測値：2.42[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:9ce2472f0e485f6d)
バンド・ギャップ　2.6147[eV]

DFTB_BAND

CdSeのバンド構造

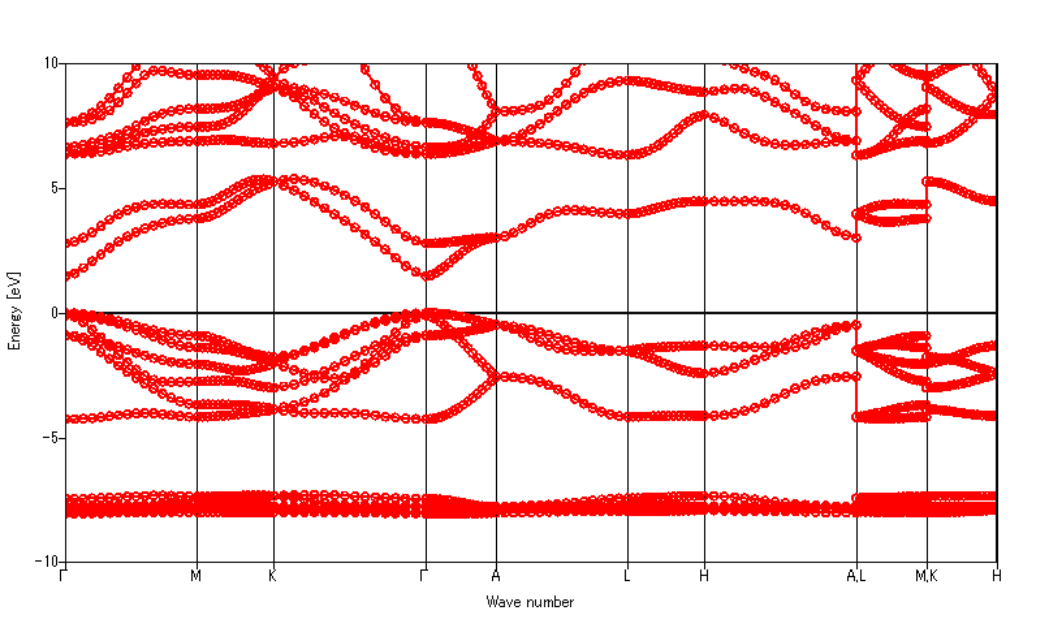


CdSeの(001)面

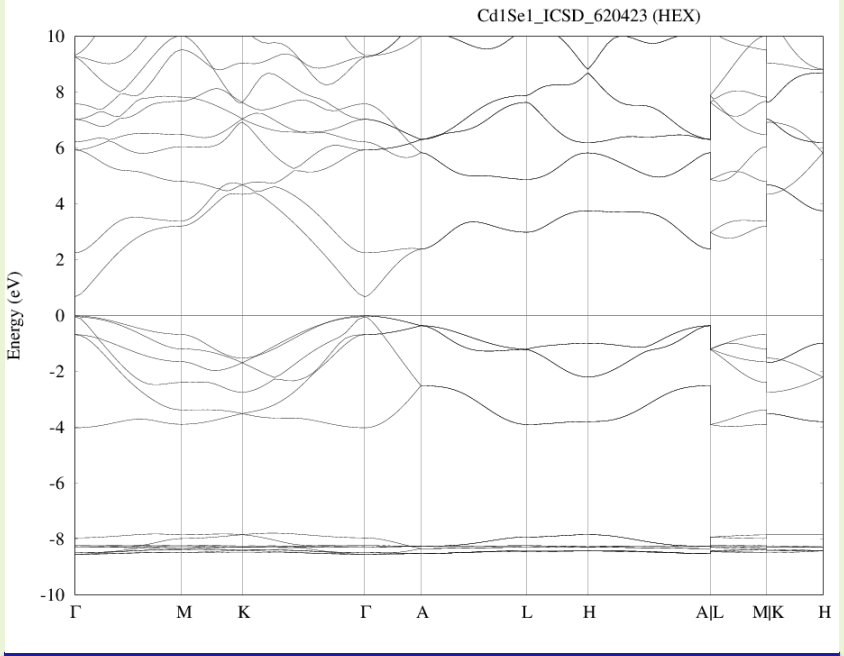
空間群：186
格子定数
長さ：a=b=4.373746[ang]
c=7.133453[ang]
角度：α=β=90[deg]
γ=120[deg]
原子の位置：
Cd: (0.6667, 0.3333, 0.0)
Se: (0.6667, 0.3333, 0.3760)

Lattice_type: HEX

CdSeのバンド構造

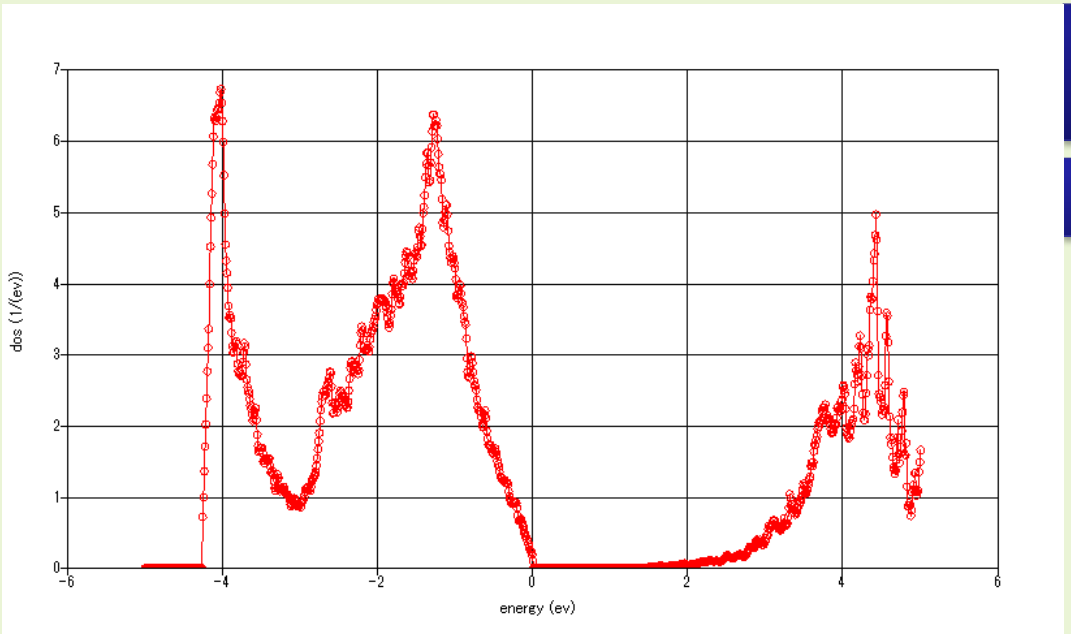


DFTBで求められたバンド構造



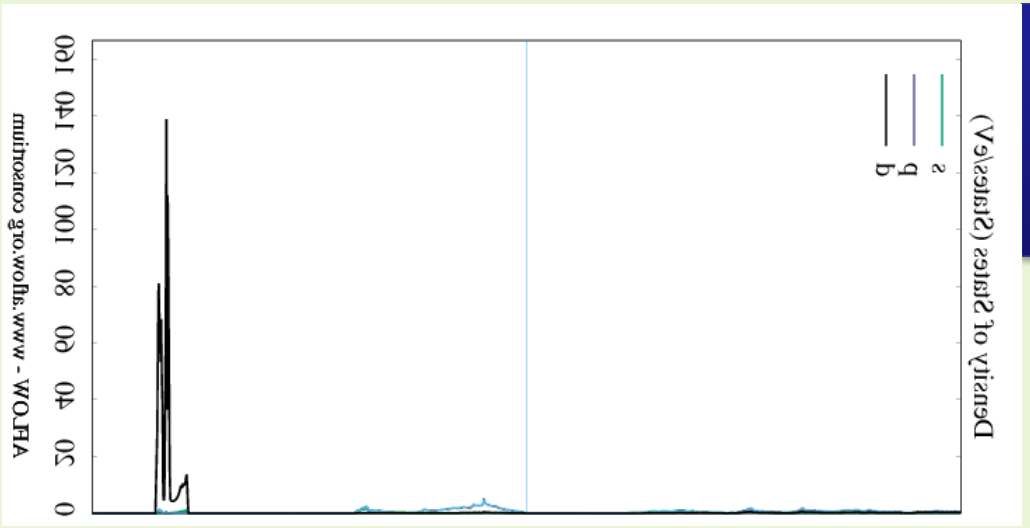
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:b65186709f8d3b70)

CdSeの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　1.48[eV]

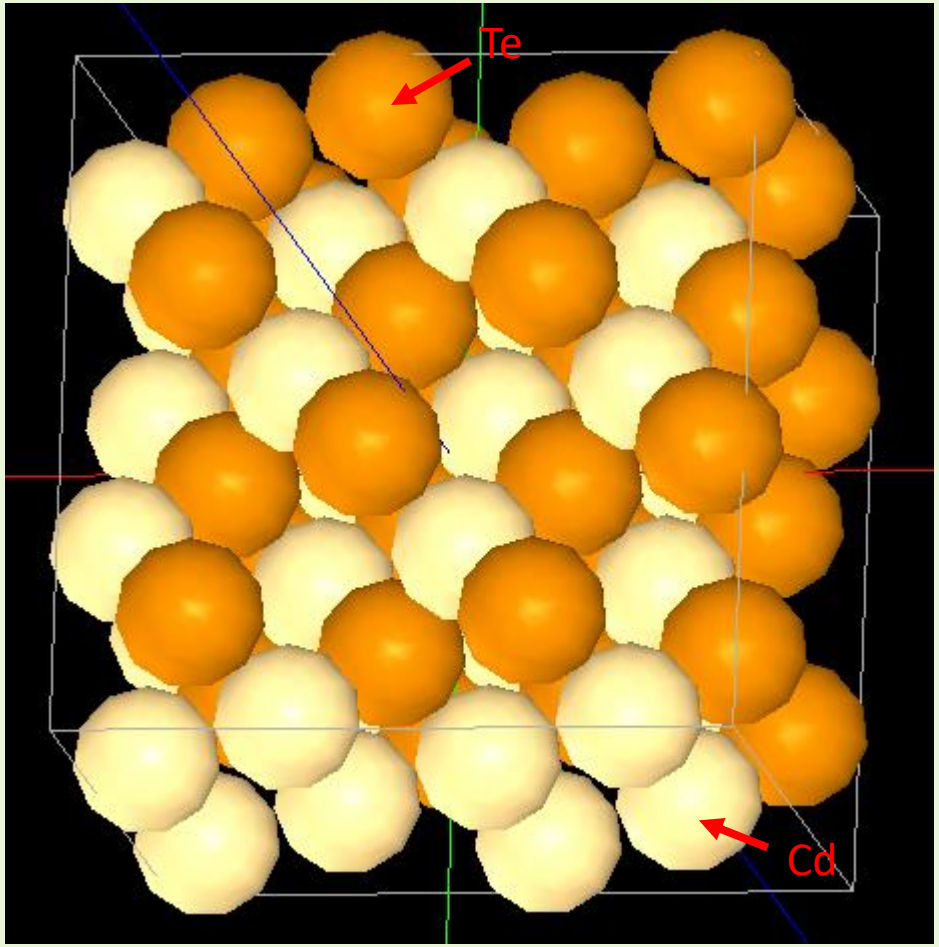
バンド・ギャップ観測値：1.73[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:b65186709f8d3b70)
バンド・ギャップ　1.8433[eV]

DFTB_BAND

CdTeのバンド構造

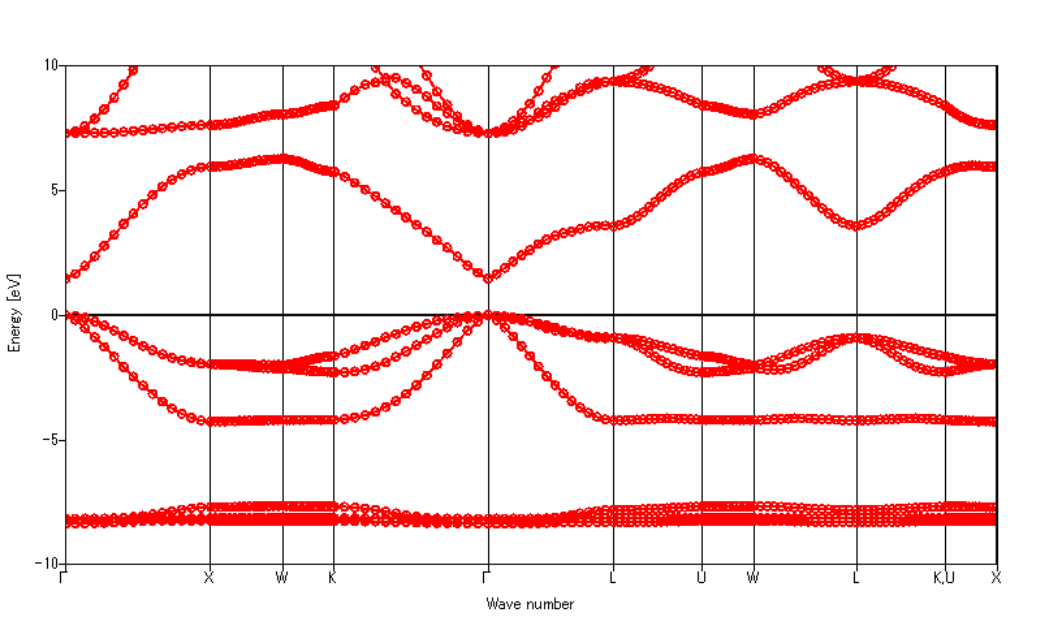


CdTeの(001)面

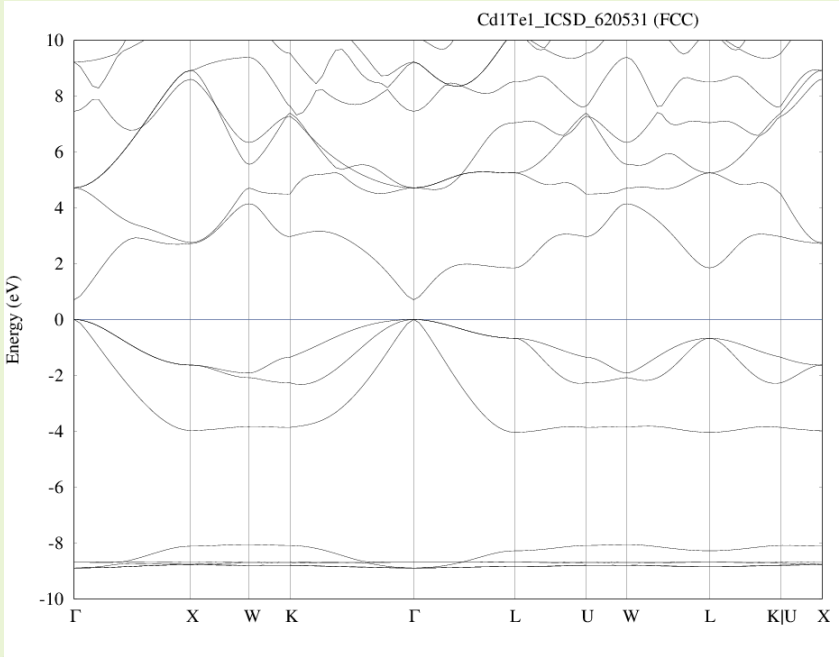
空間群：216
格子定数
長さ：a=b=c=6.601507[ang]
角度：α=β=γ=90[deg]
原子の位置：
Cd: (0.0, 0.0, 0.0)
Te: (0.75, 0.25, 0.25)

Lattice_type: FCC

CdTeのバンド構造

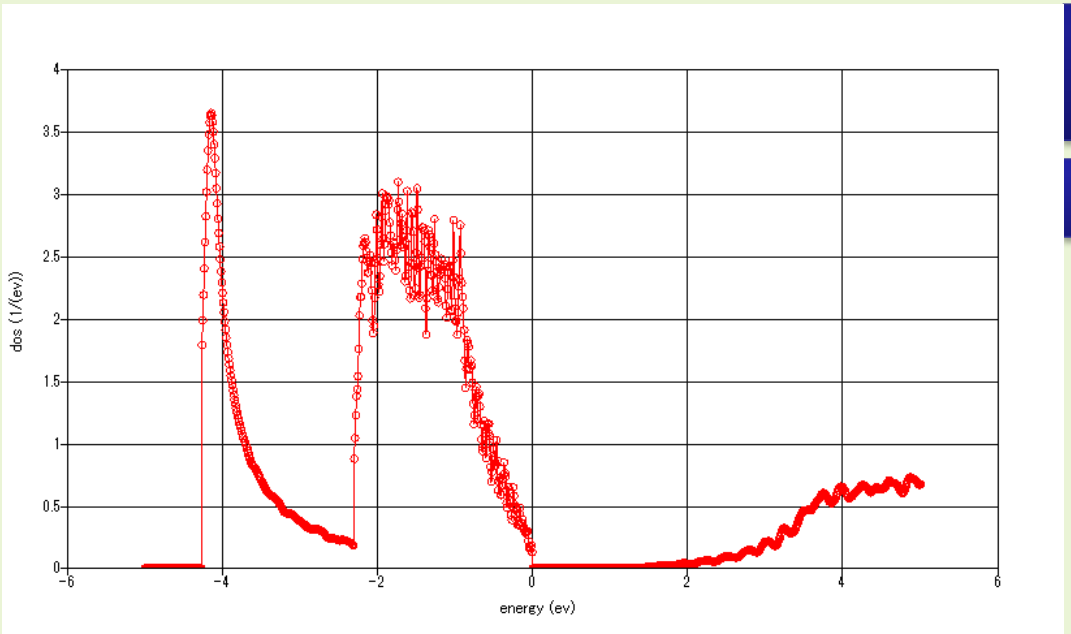


DFTBで求められたバンド構造



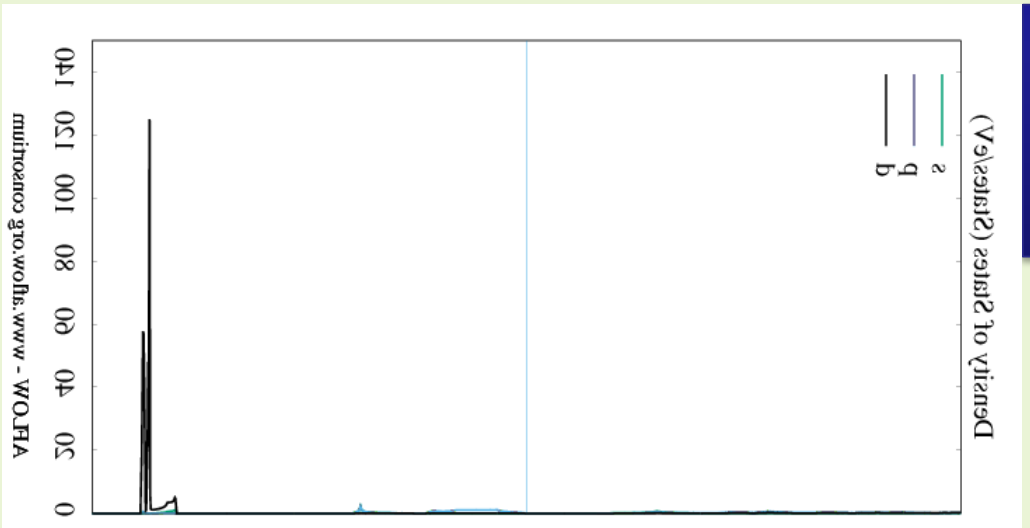
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:db372afbe5562f4f)

CdTeの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　1.46[eV]

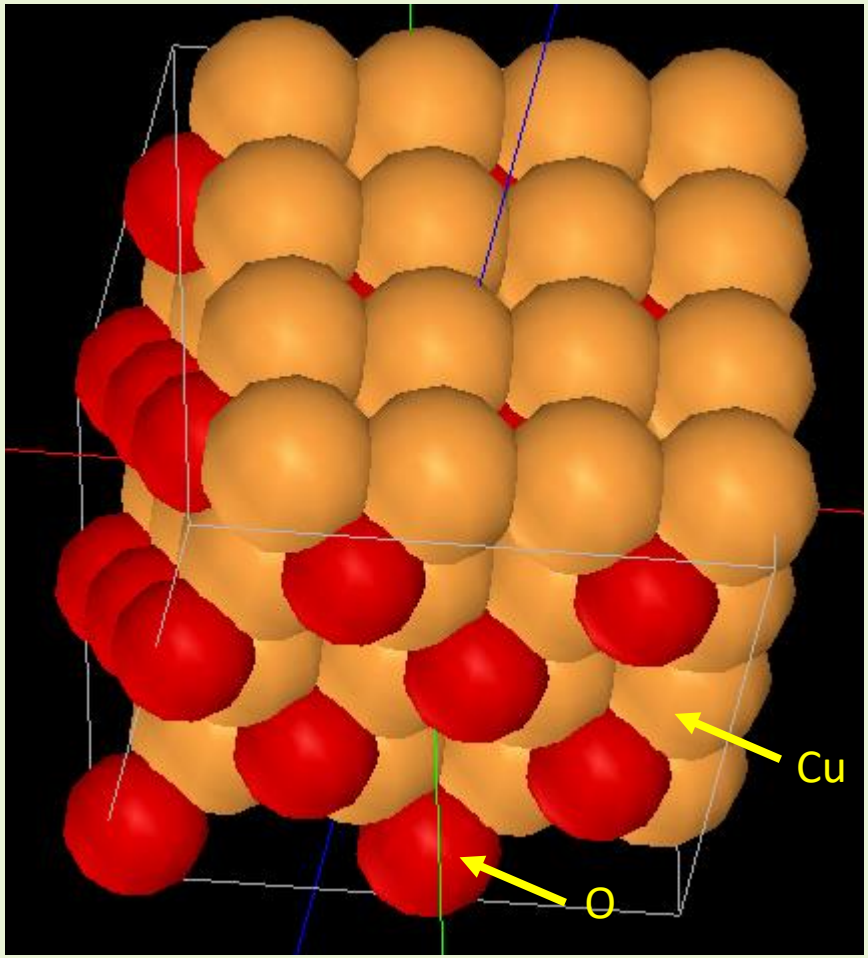
バンド・ギャップ観測値：1.49[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:db372afbe5562f4f)
バンド・ギャップ　1.8689[eV]

DFTB_BAND

Cu2Oのバンド構造

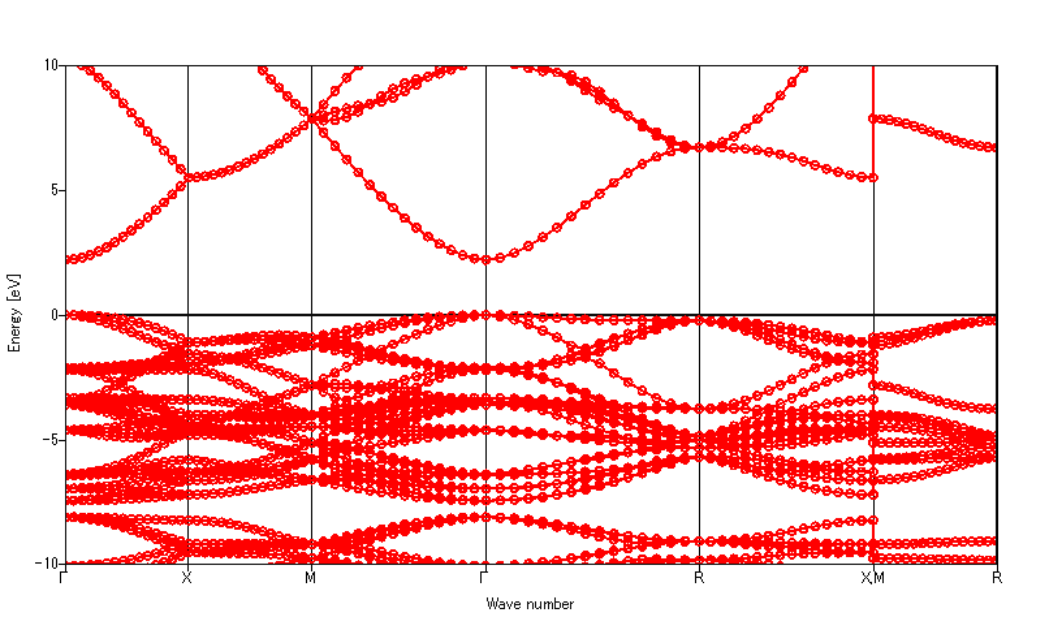


Cu2Oの(001)面

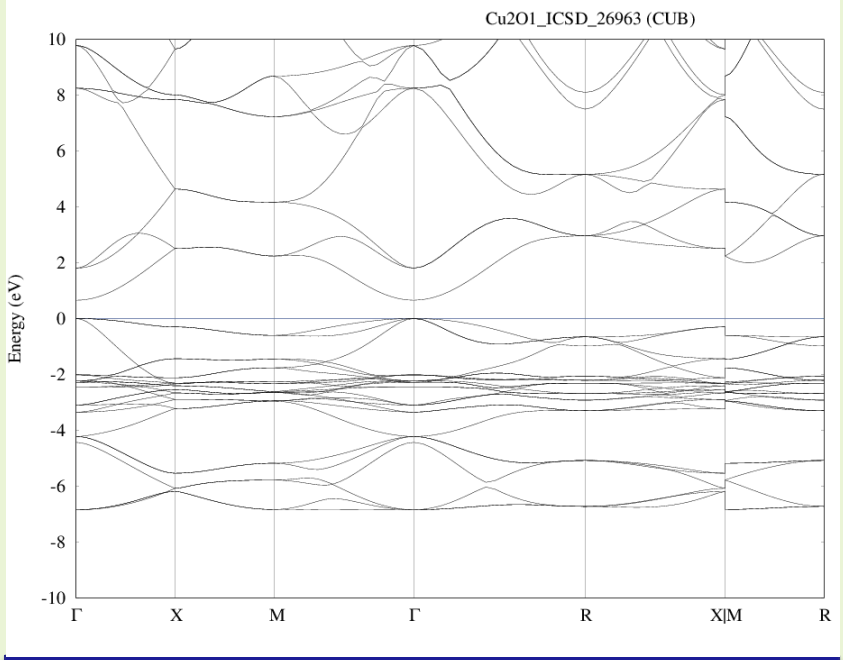
空間群：224
格子定数
長さ：a=b=c=4.290371[ang]
角度：α=β=γ=90[deg]
原子の位置：
Cu: (0.25, 0.25, 0.25)
Cu: (0.75, 0.75, 0.25)
O: (0.0, 0.0, 0.0)

Lattice_type: CUB

Cu2Oのバンド構造

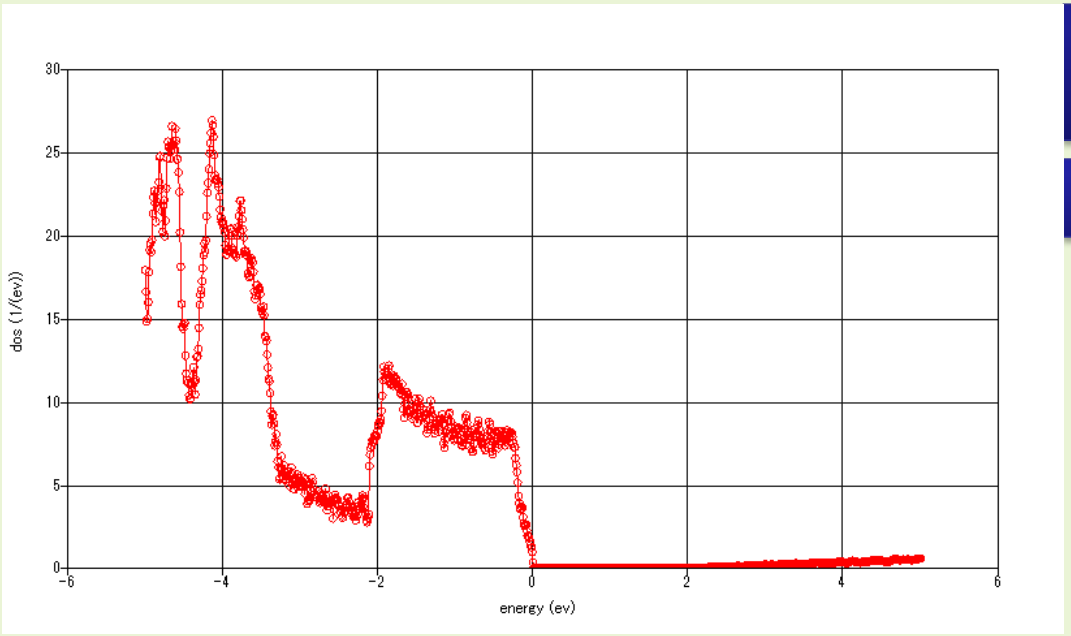


DFTBで求められたバンド構造



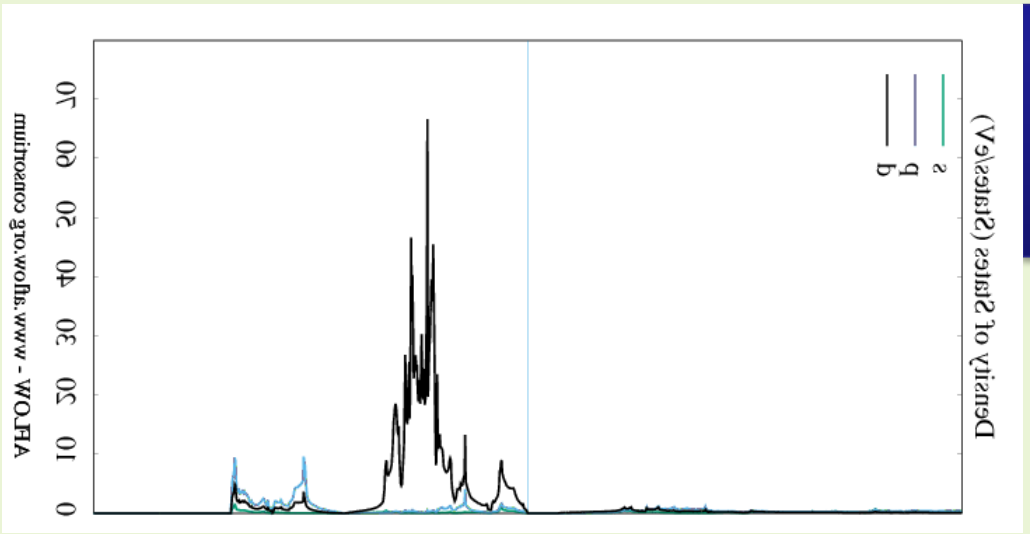
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:f0a3c1e6919f698d)

Cu2Oの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　2.21[eV]

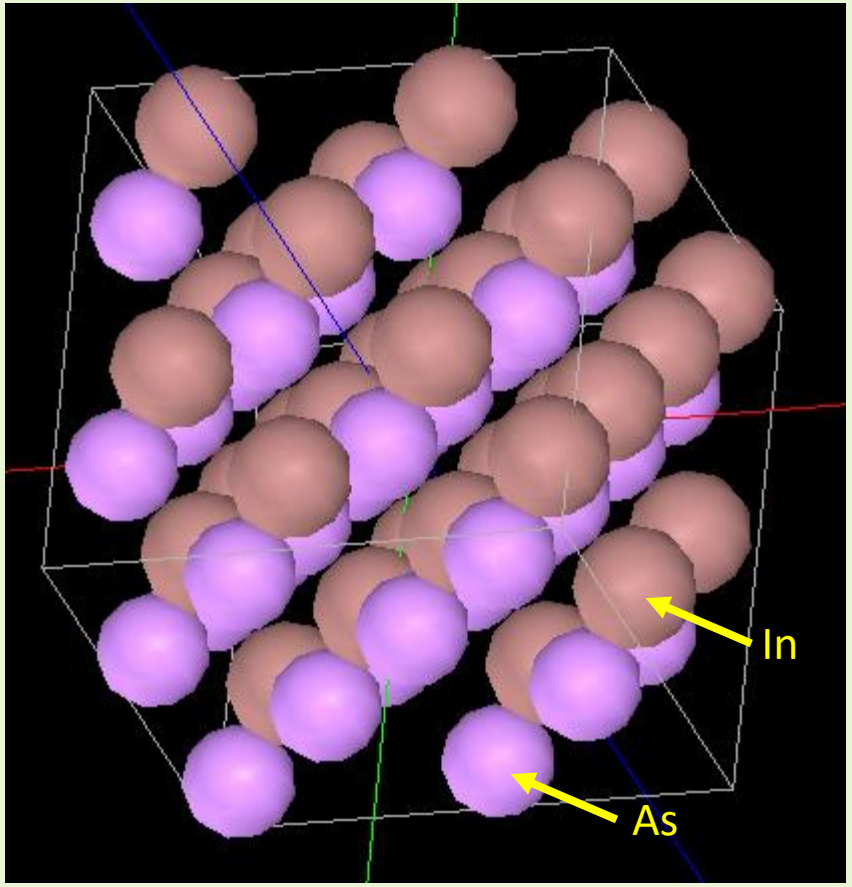
バンド・ギャップ観測値：2.1[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:f0a3c1e6919f698d)
バンド・ギャップ　1.7961[eV]

DFTB_BAND

InAsのバンド構造

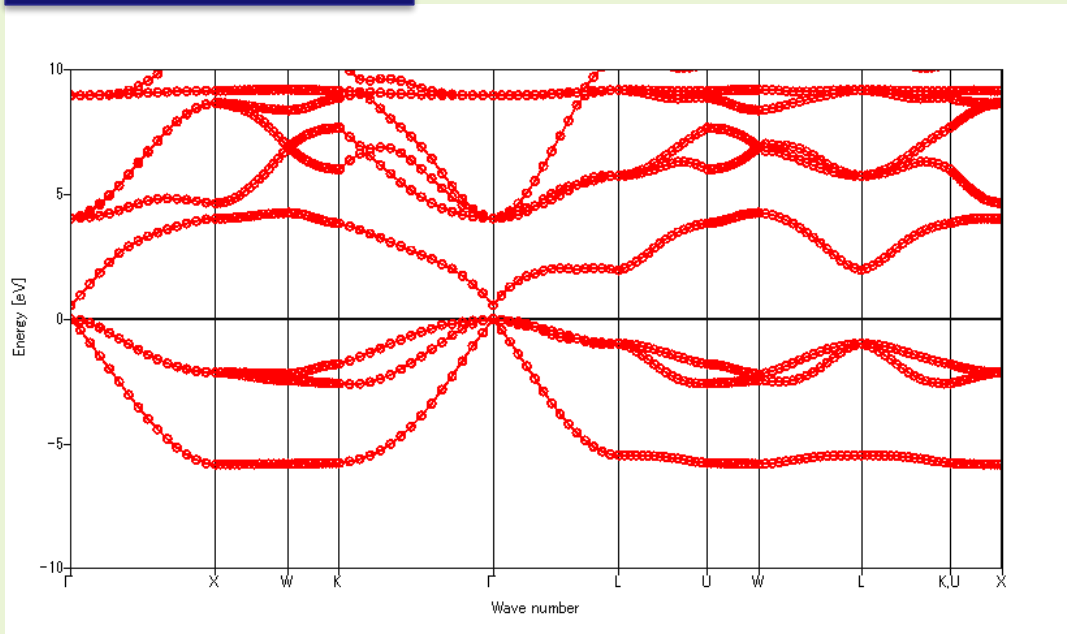


InAsの(001)面

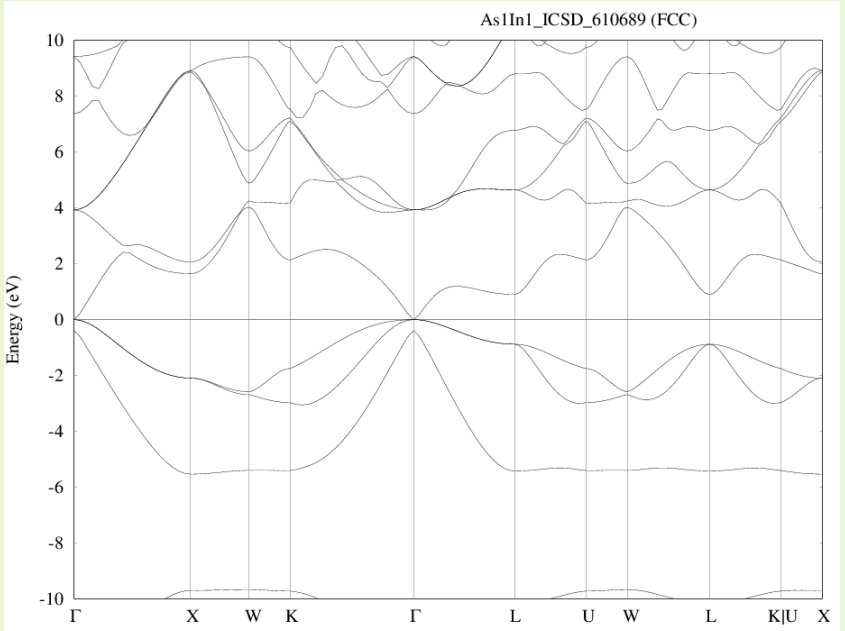
空間群：216
格子定数
長さ：a=b=c=6.162046[ang]
角度：α=β=γ=90[deg]
原子の位置：
As: (0.0, 0.0, 0.0)
In: (0.25, 0.25, 0.25)

Lattice_type: FCC

InAsのバンド構造

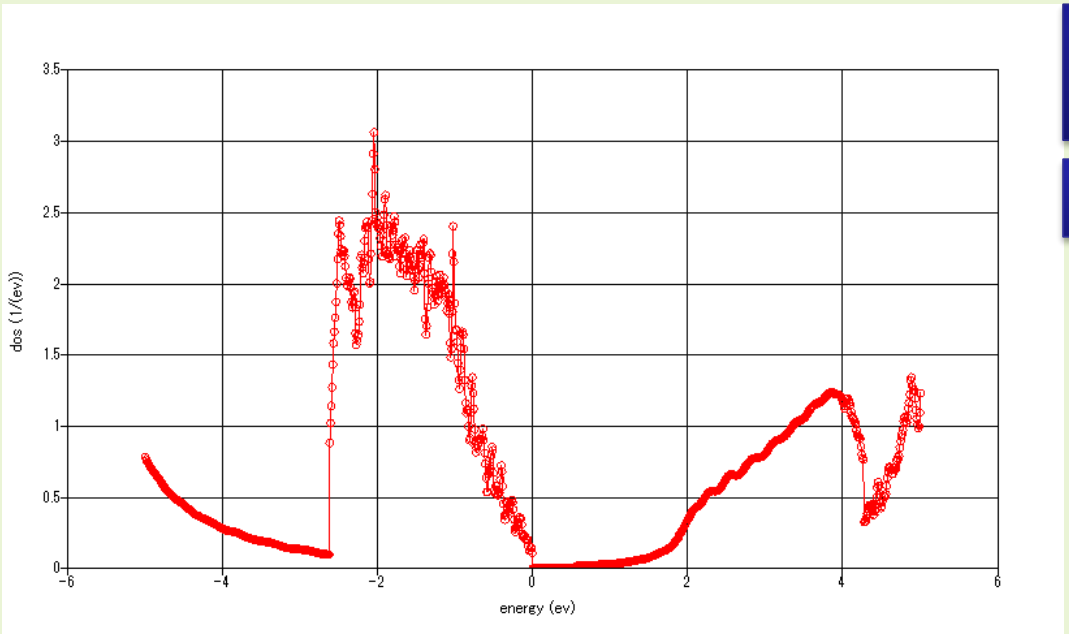


DFTBで求められたバンド構造



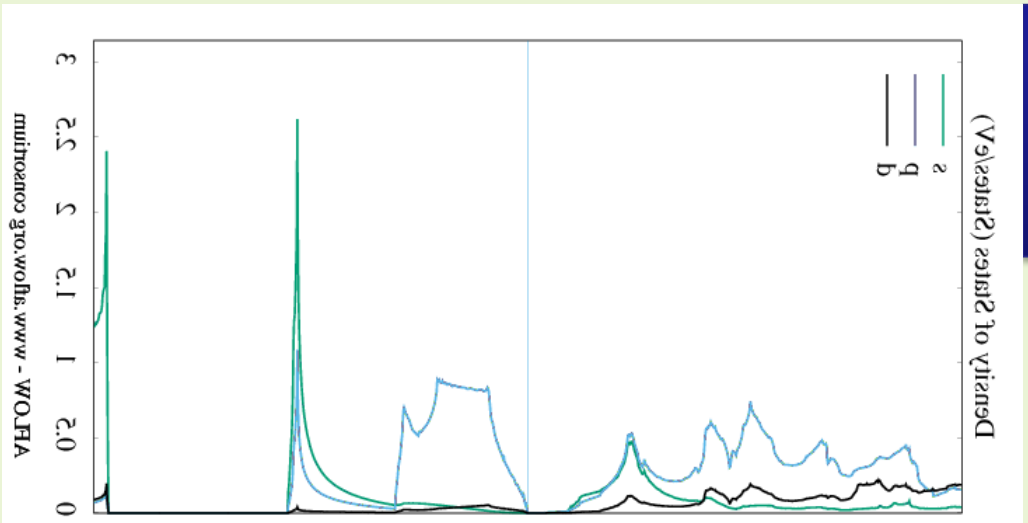
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:2ec55477d4d91ba6)

InAsの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　0.552[eV]

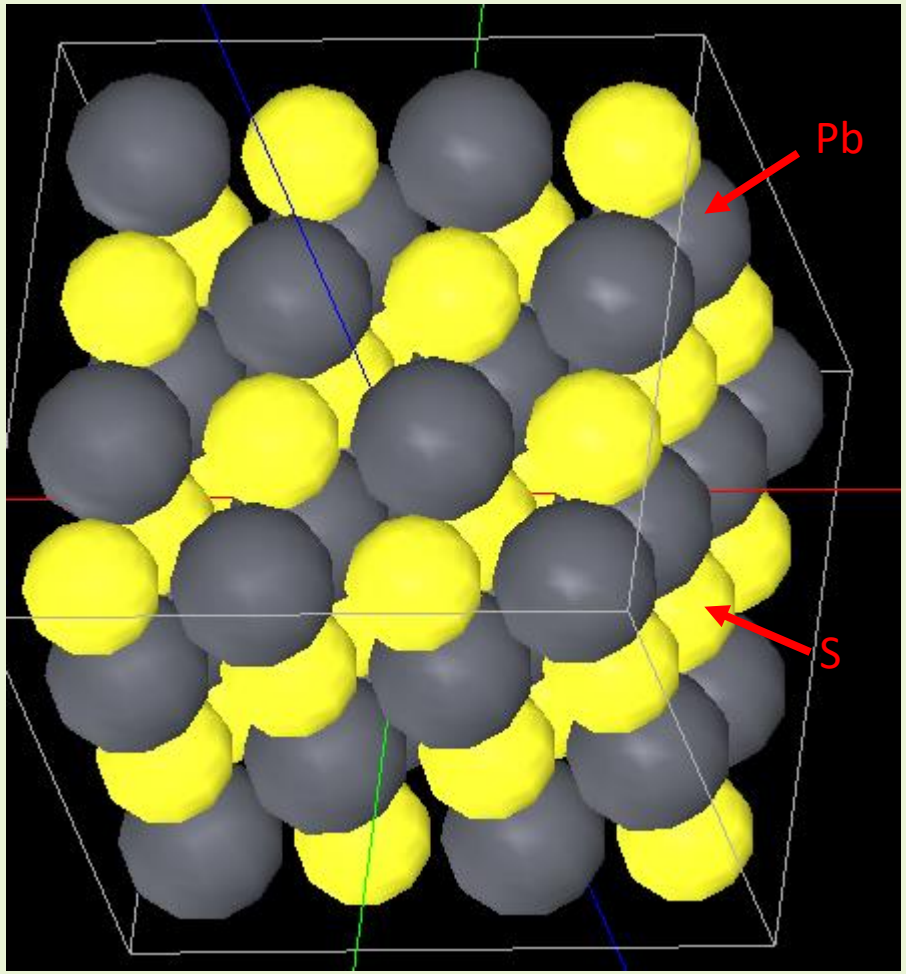
バンド・ギャップ観測値：0.36[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:2ec55477d4d91ba6)
バンド・ギャップ　0.0[eV]

DFTB_BAND

PbSのバンド構造

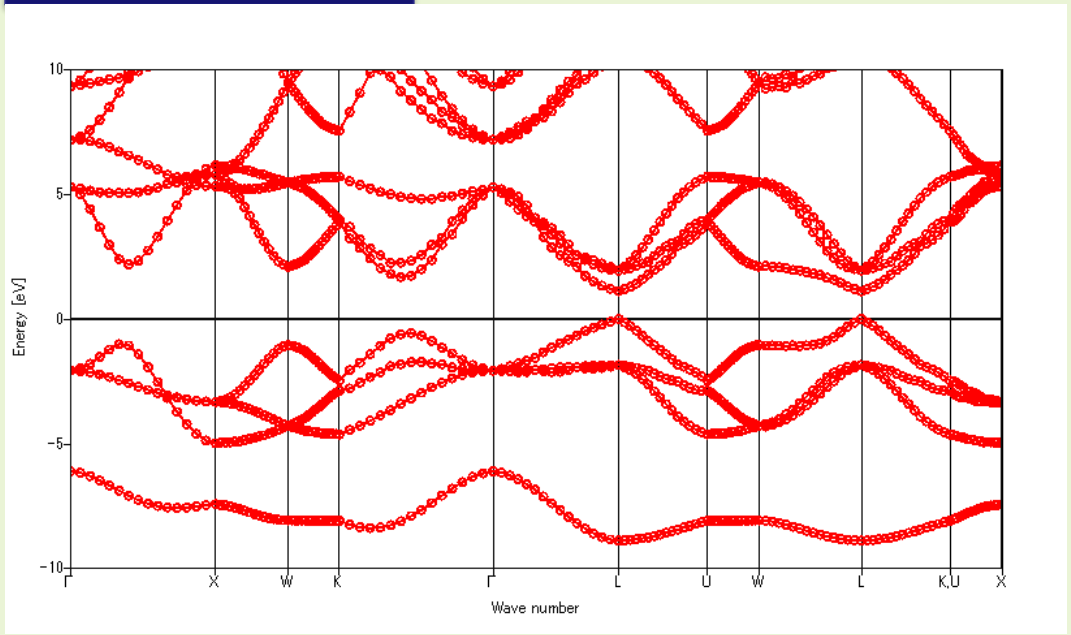


PbSの(001)面

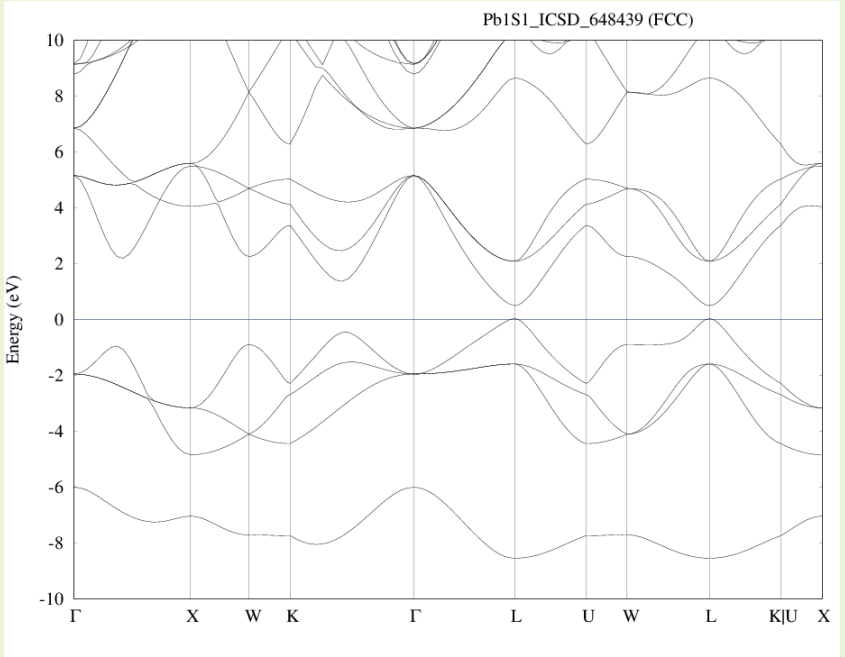
空間群：225
格子定数
長さ：a=b=c=6.005038[ang]
角度：α=β=γ=90[deg]
原子の位置：
Pb: (0.0, 0.0, 0.0)
S: (0.5, 0.0, 0.0)

Lattice_type: FCC

PbSのバンド構造

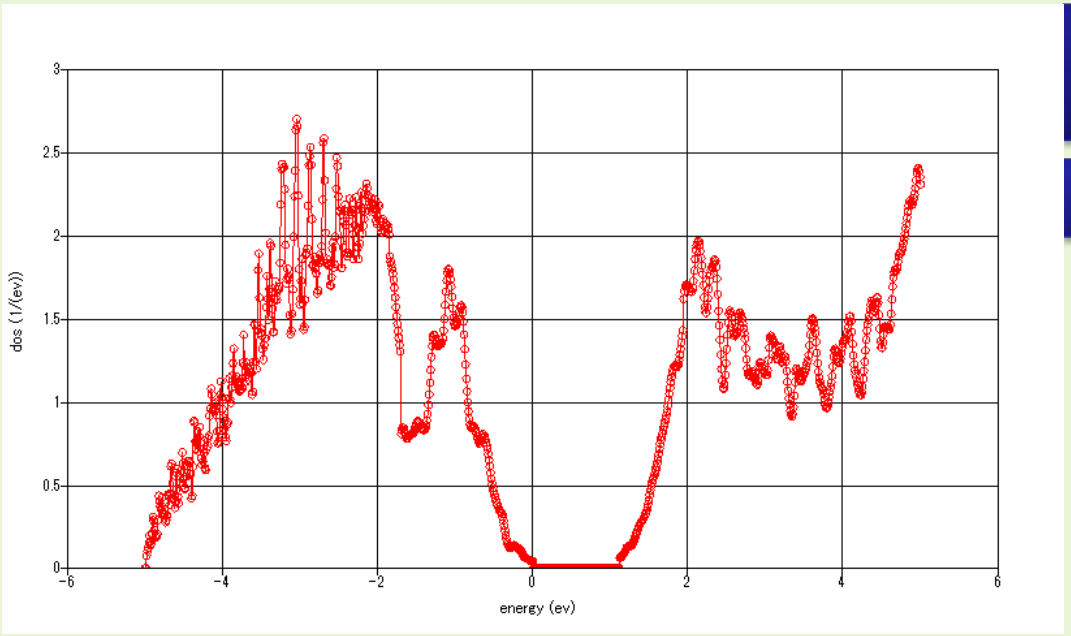


DFTBで求められたバンド構造



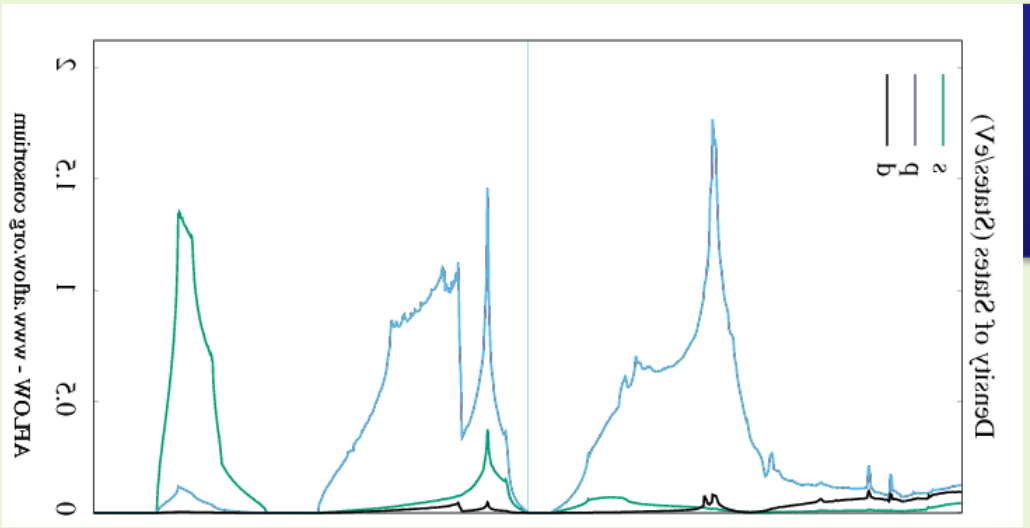
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:4c38605c54efa3f5)

PbSの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　1.11[eV]

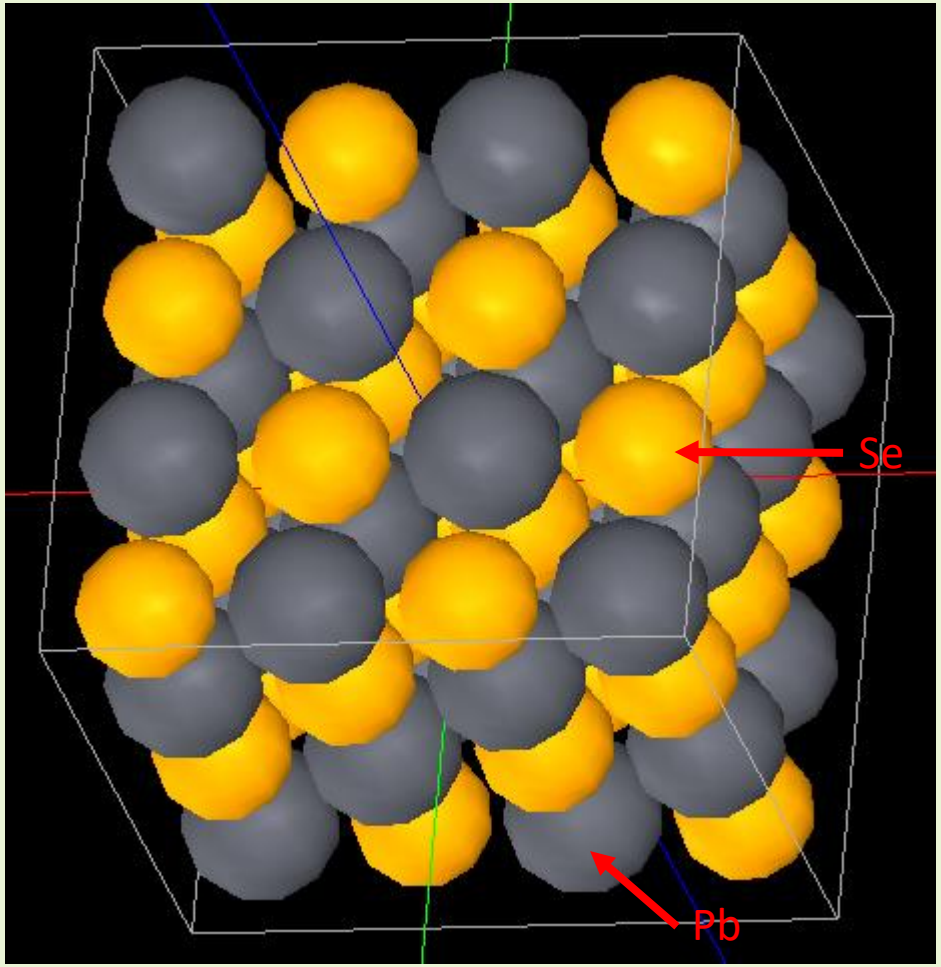
バンド・ギャップ観測値：0.37[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:4c38605c54efa3f5)
バンド・ギャップ　1.5404[eV]

DFTB_BAND

PbSeのバンド構造

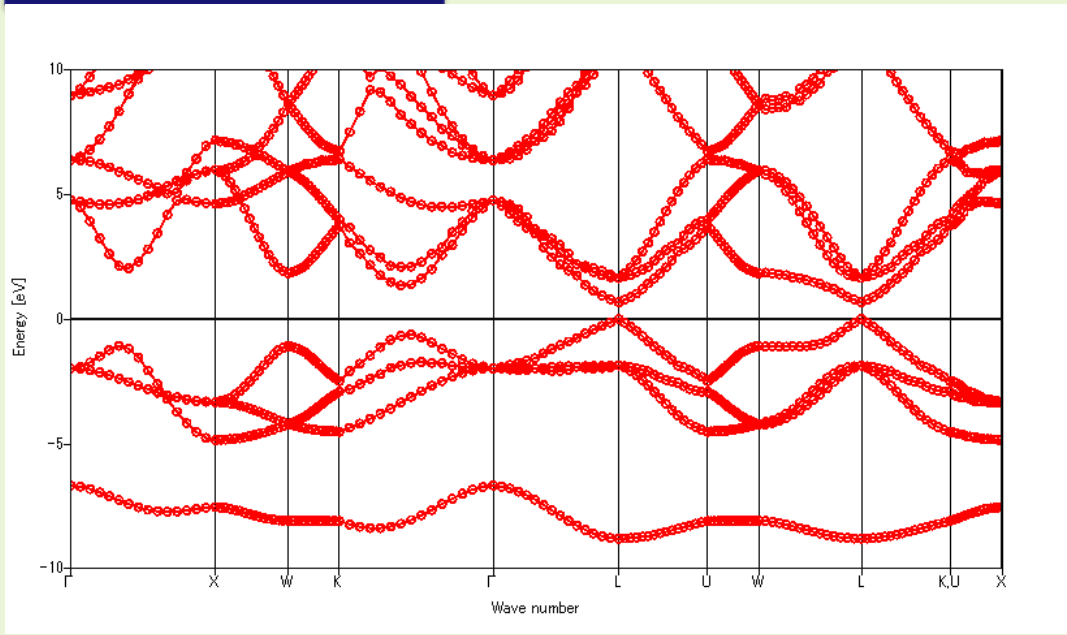


PbSeの(001)面

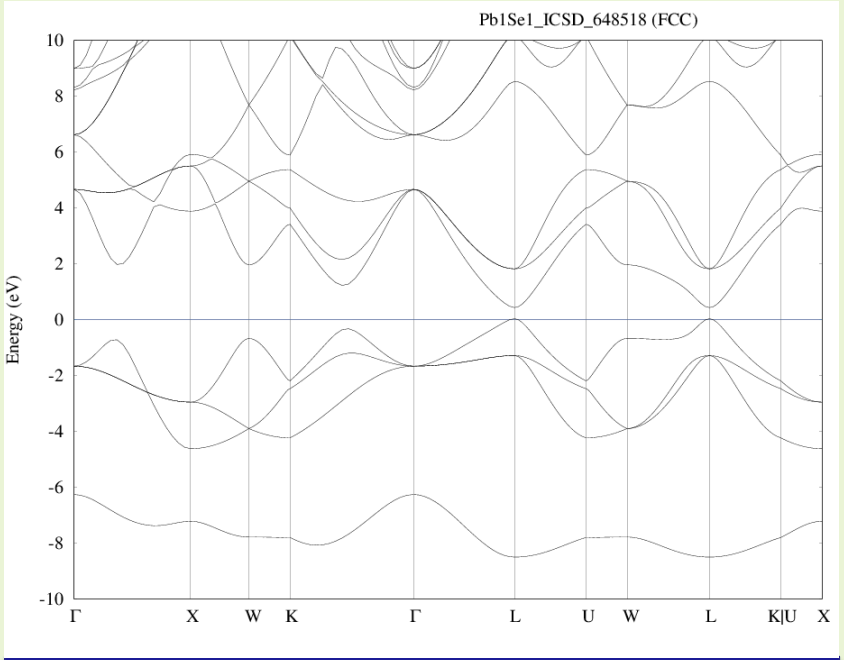
空間群：225
格子定数
長さ：a=b=c=6.203756[ang]
角度：α=β=γ=90[deg]
原子の位置：
Pb: (0.0, 0.0, 0.0)
Se: (0.5, 0.0, 0.0)

Lattice_type: FCC

PbSeのバンド構造

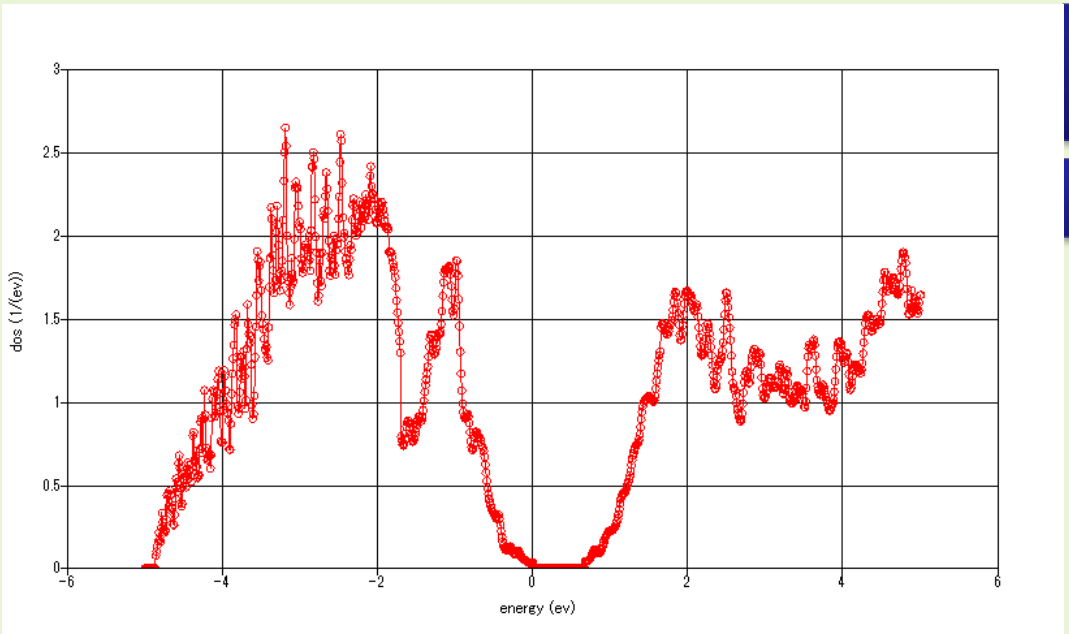


DFTBで求められたバンド構造



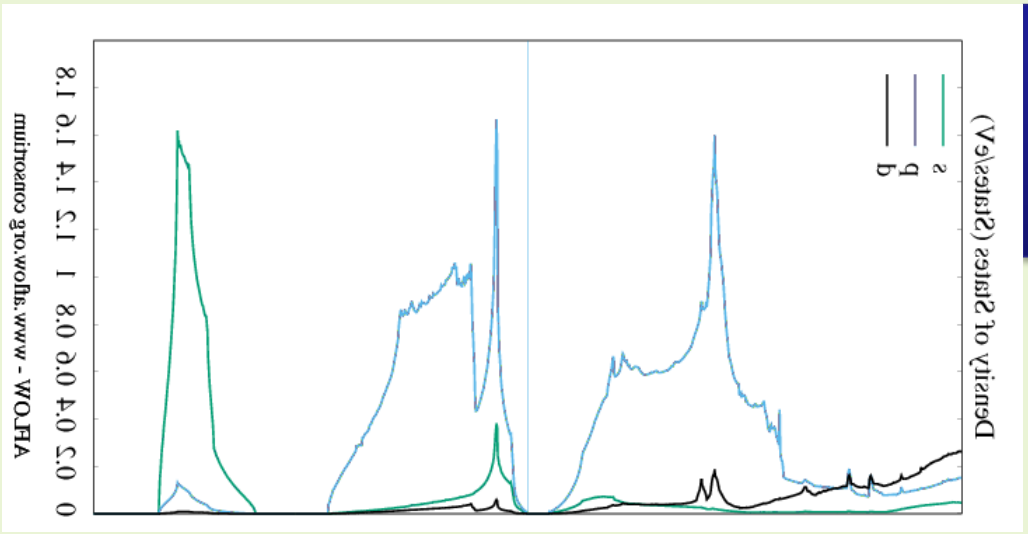
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:467a078dbc878742)

PbSeの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　0.668[eV]

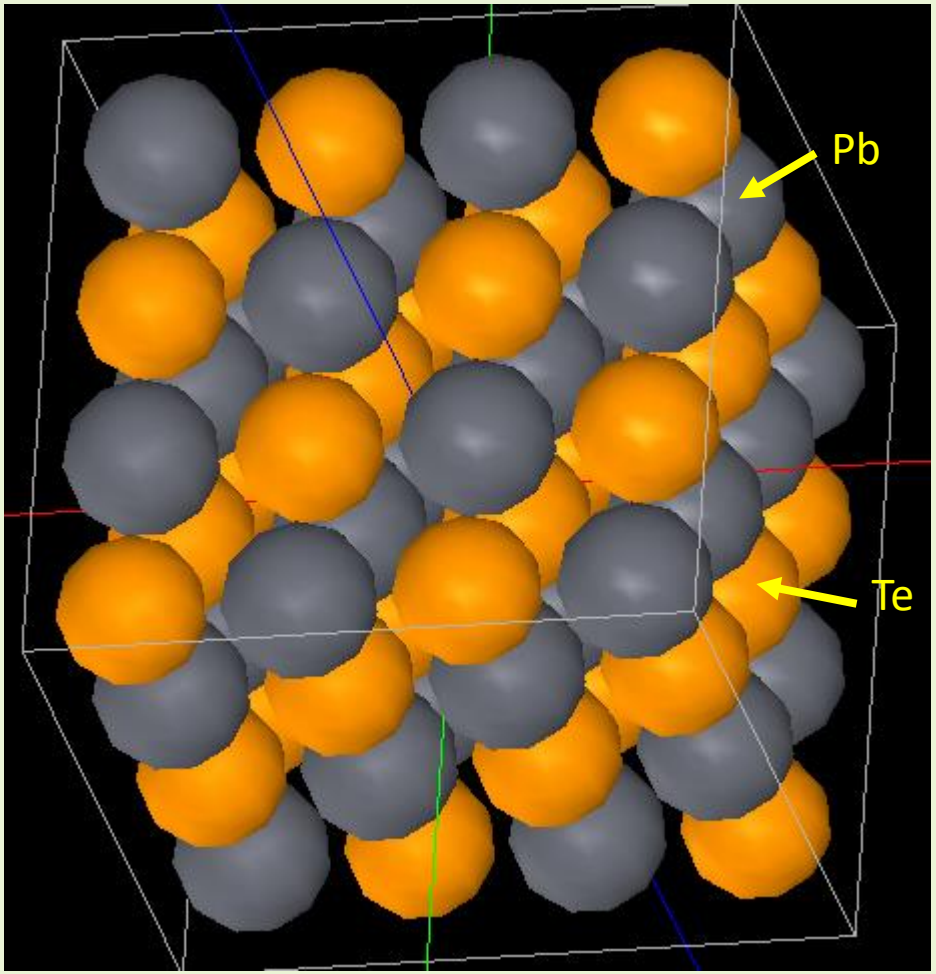
バンド・ギャップ観測値：0.27[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:467a078dbc878742)
バンド・ギャップ　1.4495[eV]

DFTB_BAND

PbTeのバンド構造

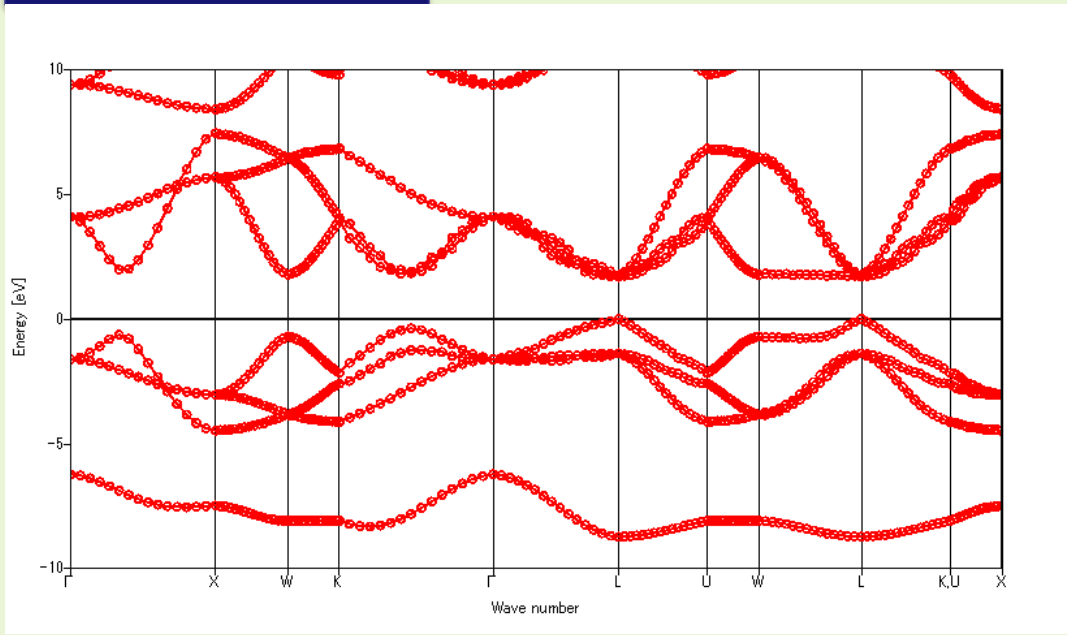


PbTeの(001)面

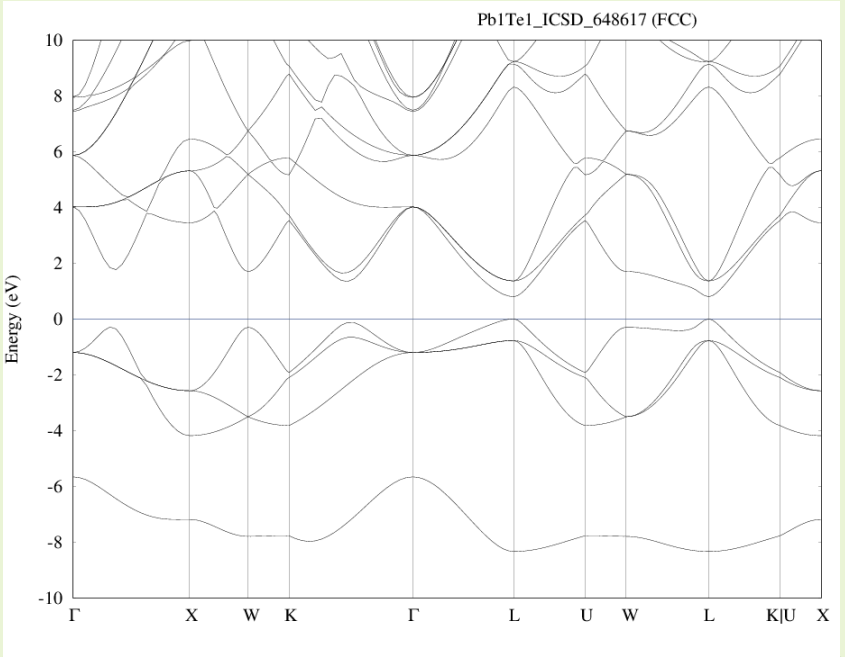
空間群：225
格子定数
長さ：a=b=c=6.554427[ang]
角度：α=β=γ=90[deg]
原子の位置：
Pb: (0.0, 0.0, 0.0)
Te: (0.5, 0.0, 0.0)

Lattice_type: FCC

PbTeのバンド構造

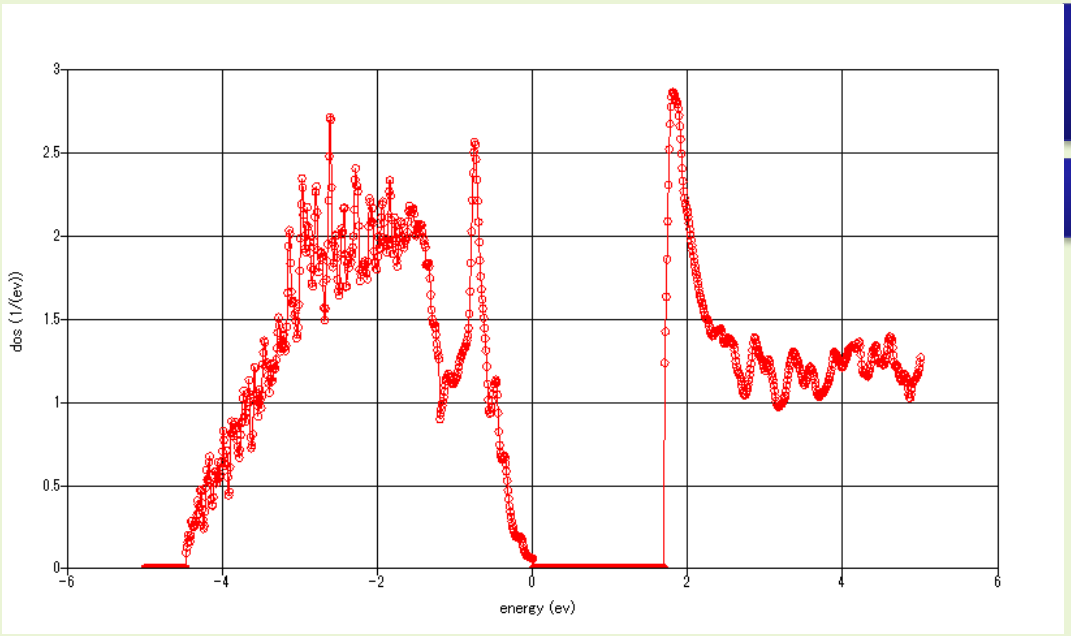


DFTBで求められたバンド構造



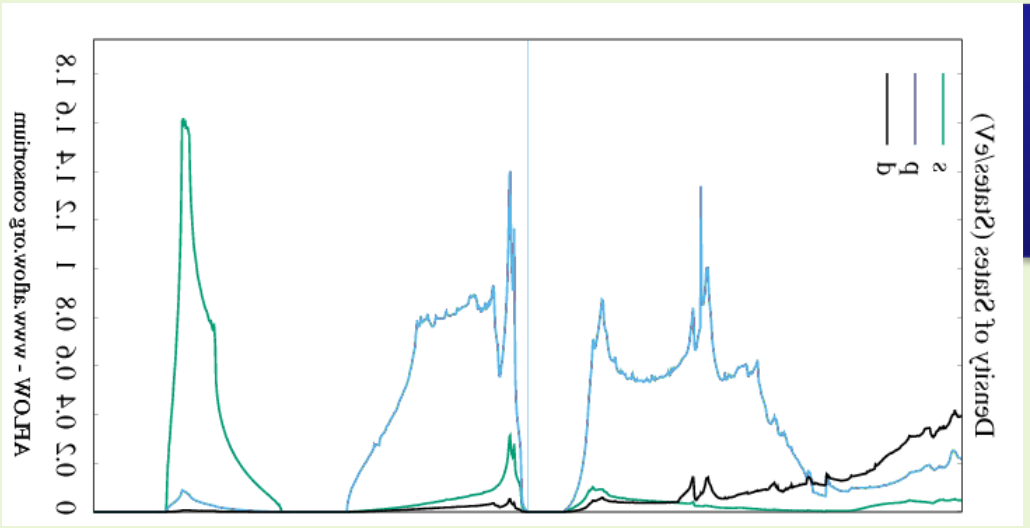
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:dcae00027a2c07bb)

PbTeの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　1.69[eV]

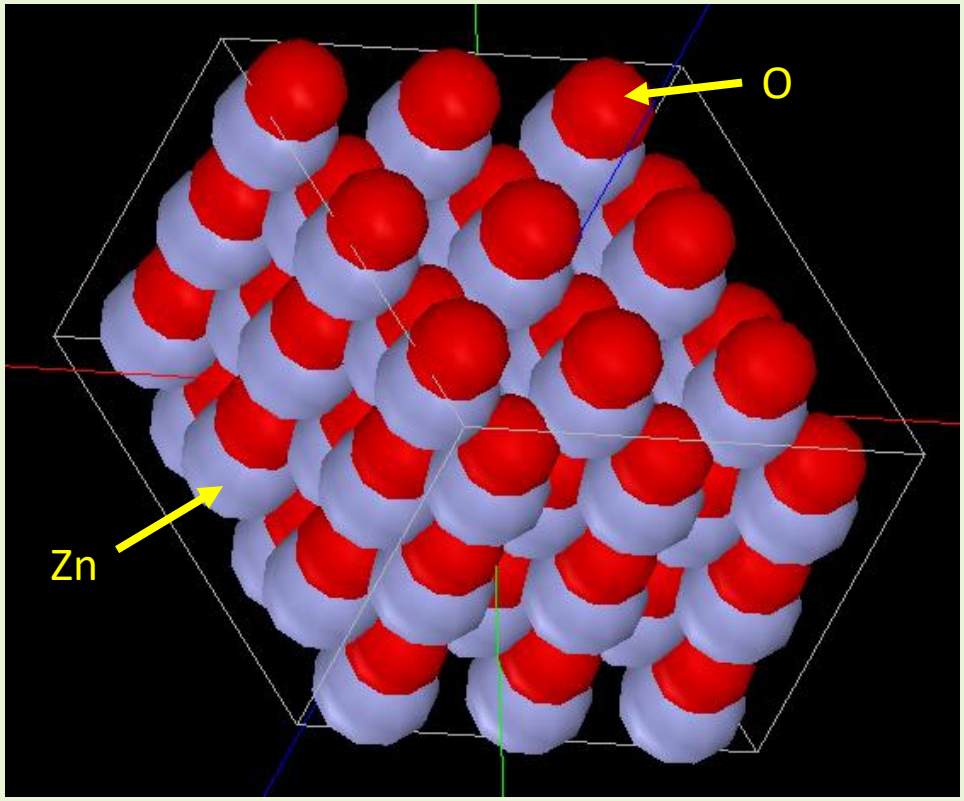
バンド・ギャップ観測値：0.29[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:dcae00027a2c07bb)
バンド・ギャップ　1.9868[eV]

DFTB_BAND

ZnOのバンド構造

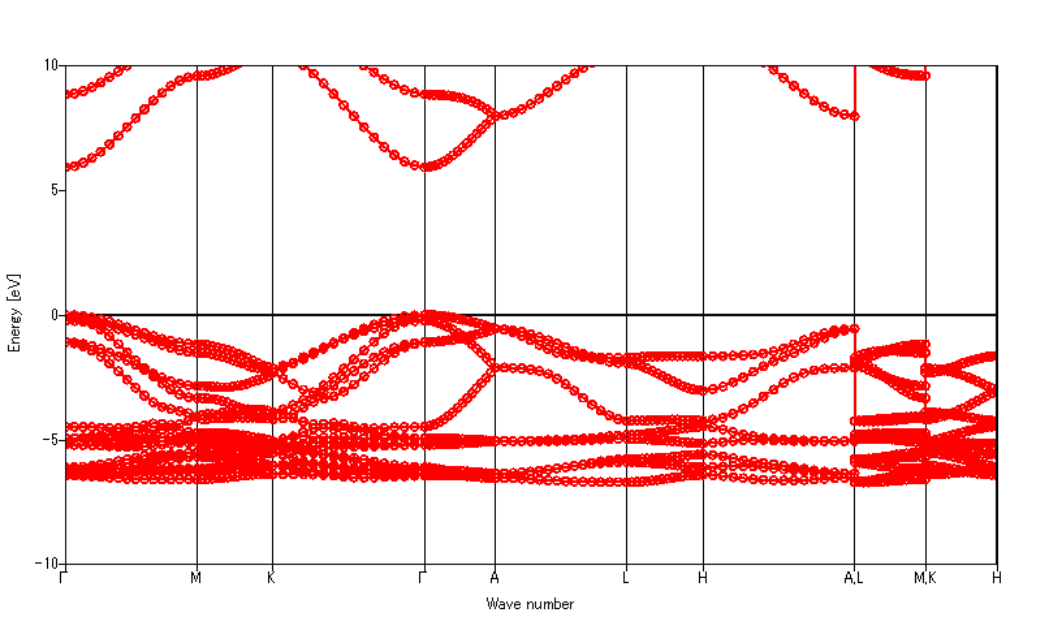


ZnOの(001)面

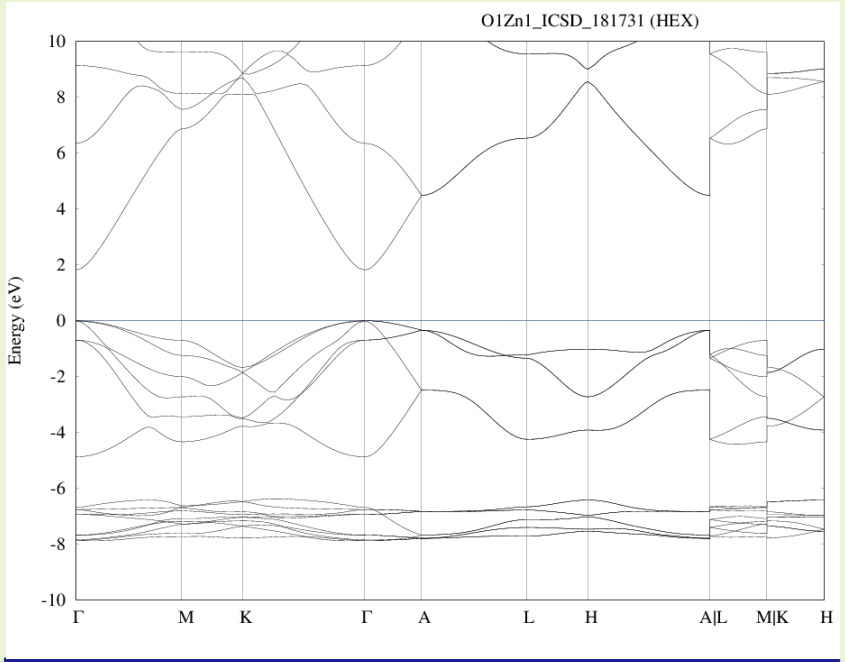
空間群：186
格子定数
長さ：a=b=3.197077[ang]
c=5.134032[ang]
角度：α=β=90[deg]
γ=120[deg]
原子の位置：
O: (0.6667, 0.3333, 0.3803)
Zn: (0.6667, 0.3333, 0.0)

Lattice_type: HEX

ZnOのバンド構造

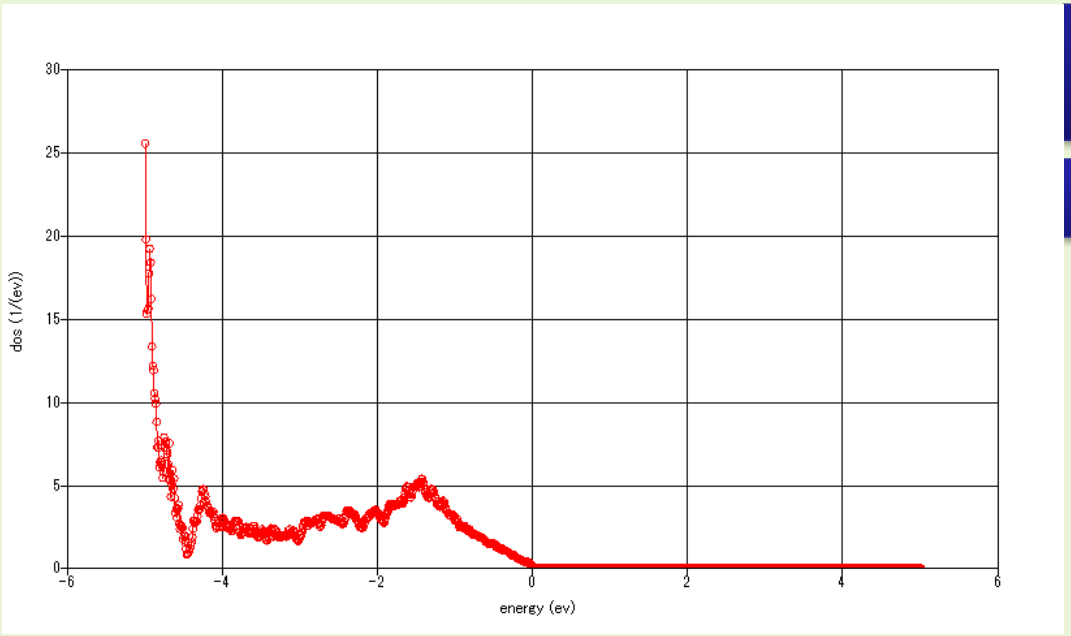


DFTBで求められたバンド構造



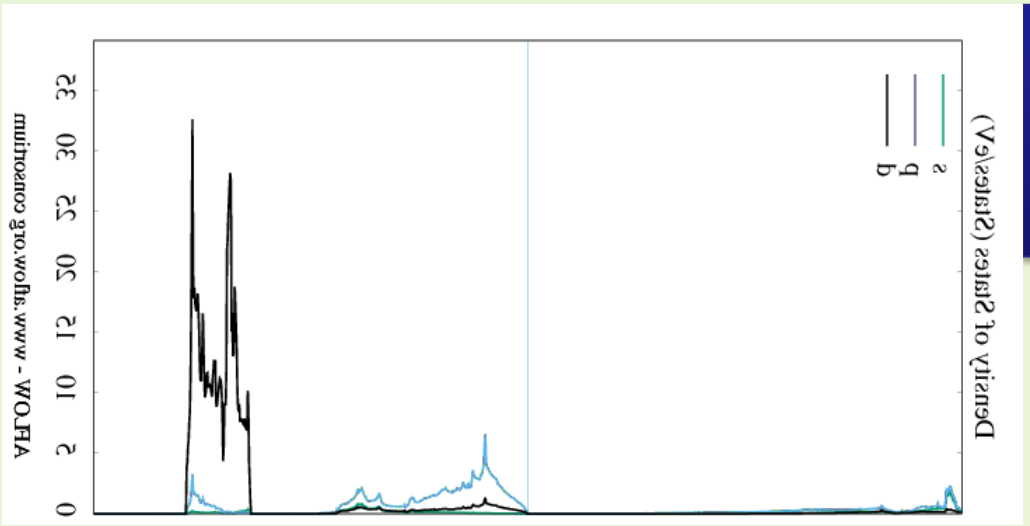
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:57079fbd7f89676a)

ZnOの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　5.92[eV]

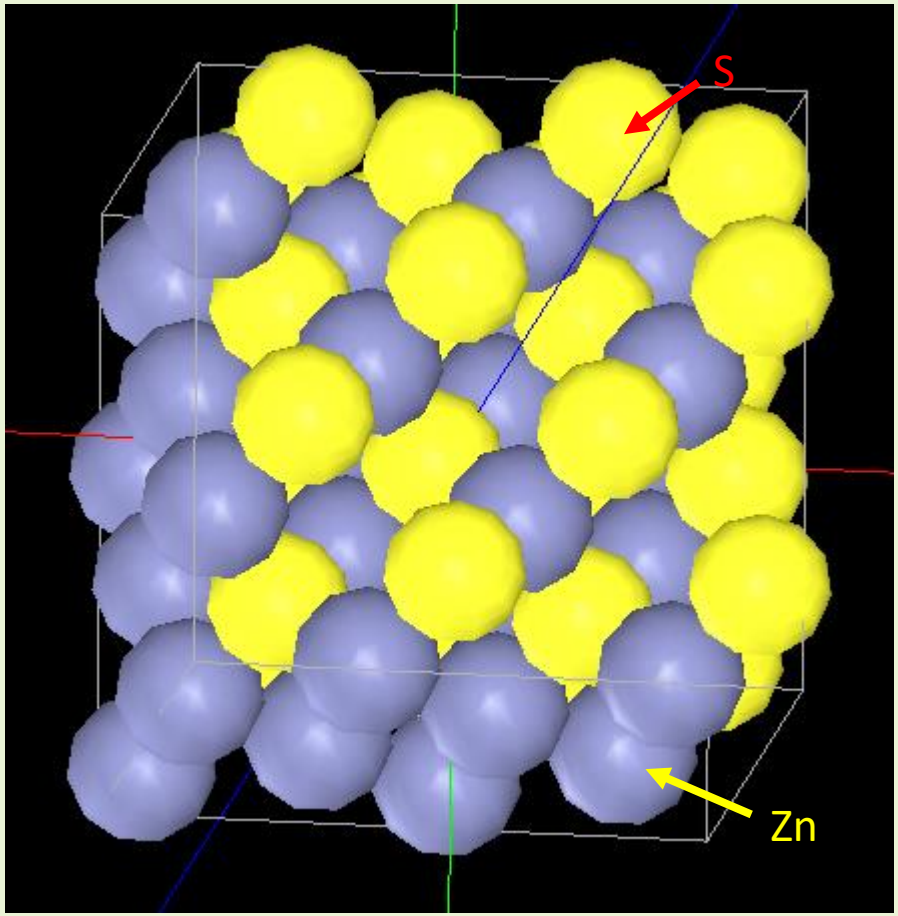
バンド・ギャップ観測値：3.37[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:57079fbd7f89676a)
バンド・ギャップ　3.3662[eV]

DFTB_BAND

ZnSのバンド構造

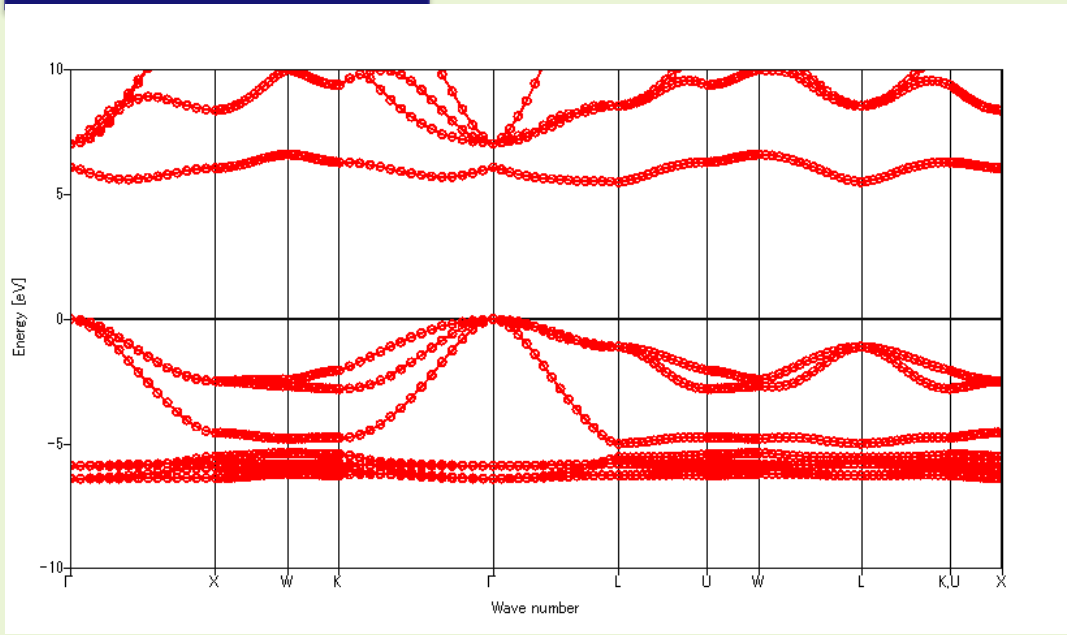


ZnSの(001)面

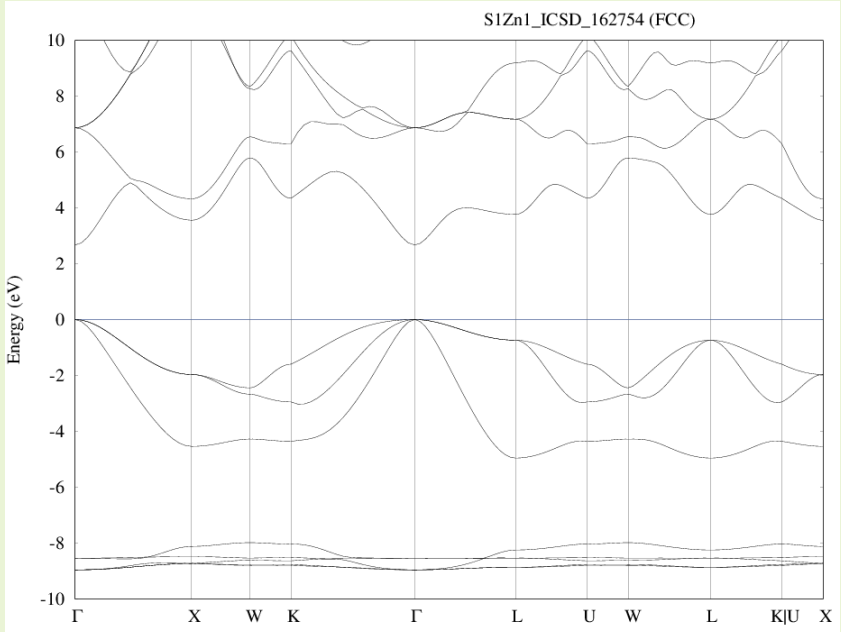
空間群：216
格子定数
長さ：a=b=c=5.373340[ang]
角度：α=β=γ=90[deg]
原子の位置：
S: (0.25, 0.25, 0.25)
Zn: (0.0, 0.0, 0.0)

Lattice_type: FCC

ZnSのバンド構造

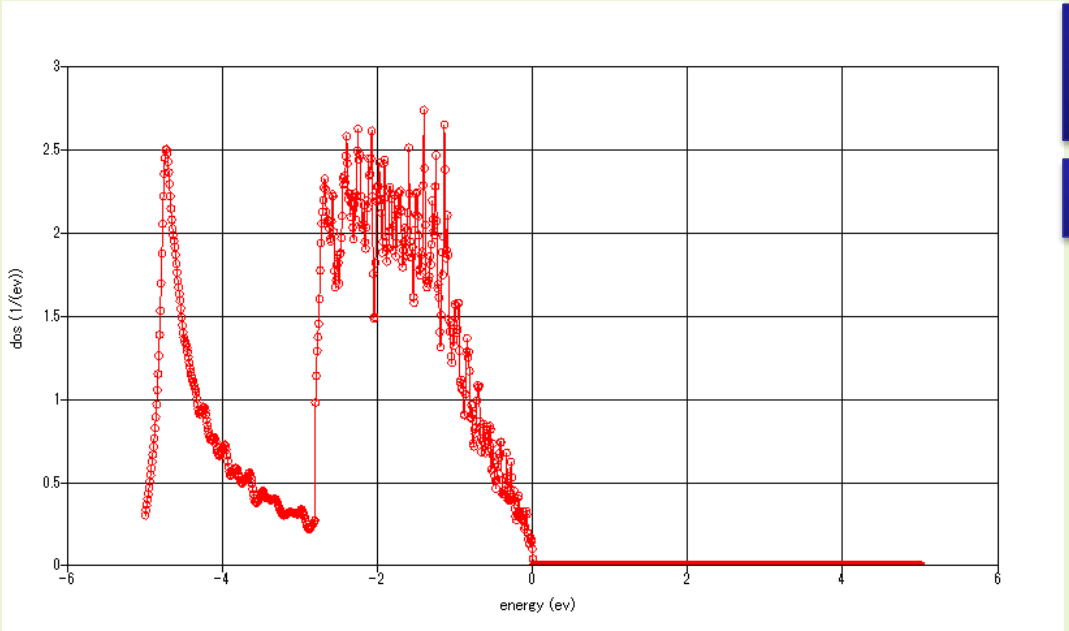


DFTBで求められたバンド構造



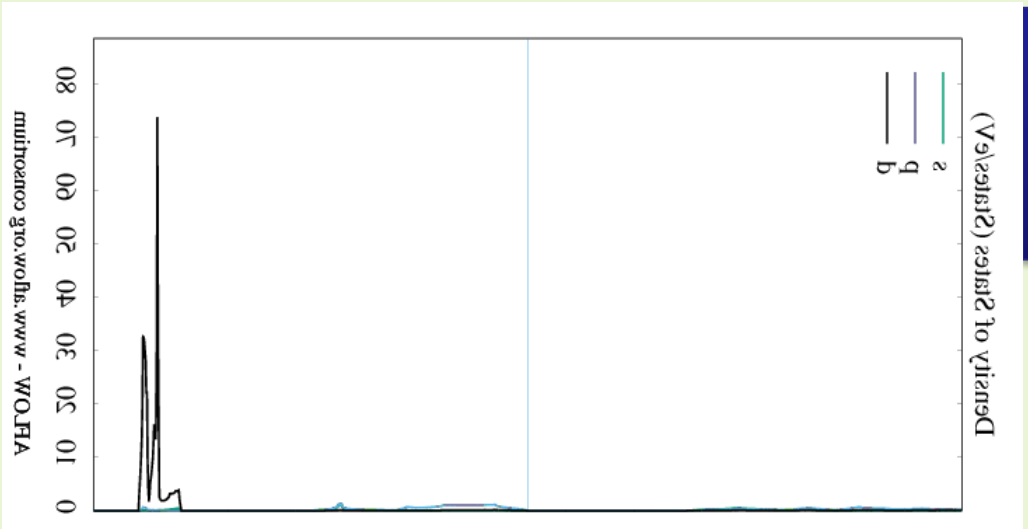
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:2a28550c11b13f31)

ZnSの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　5.49[eV]

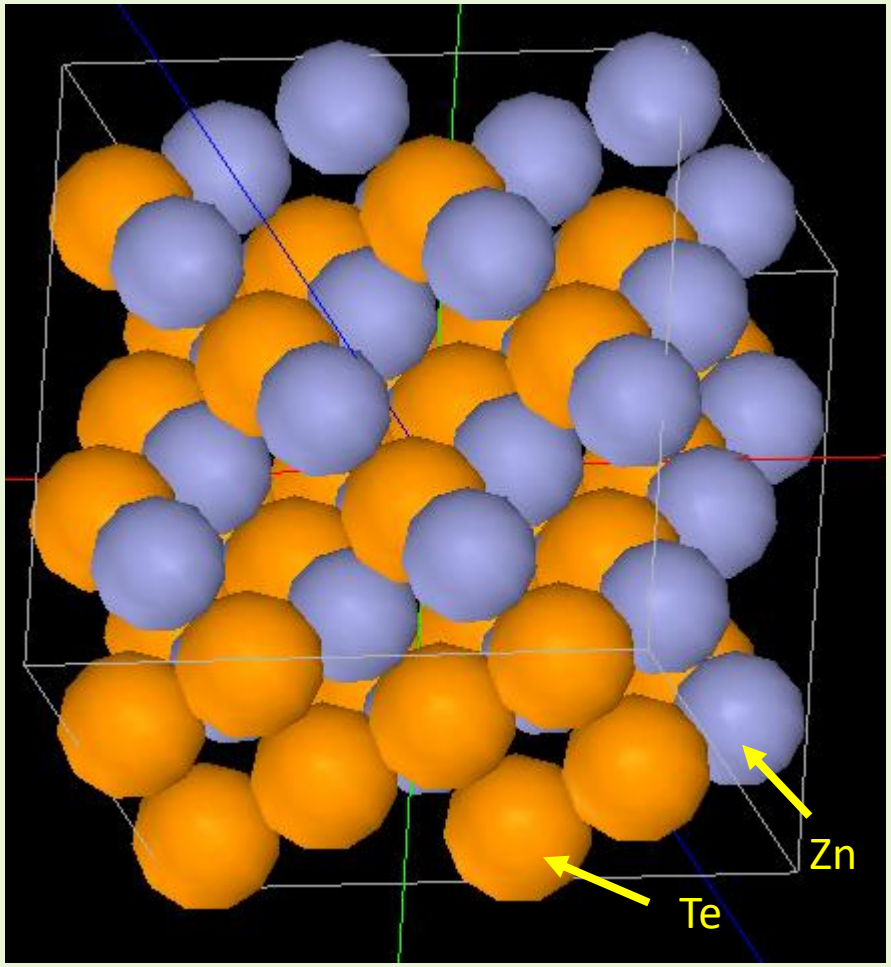
バンド・ギャップ観測値：3.6[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:2a28550c11b13f31)
バンド・ギャップ　4.5151[eV]

DFTB_BAND

ZnTeのバンド構造

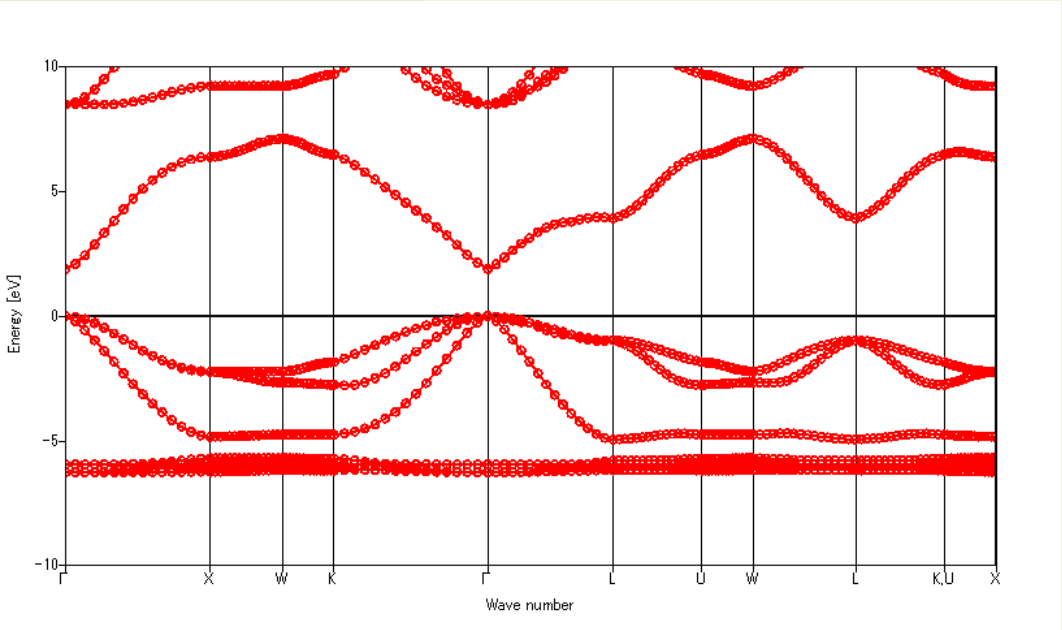


ZnTeの(001)面

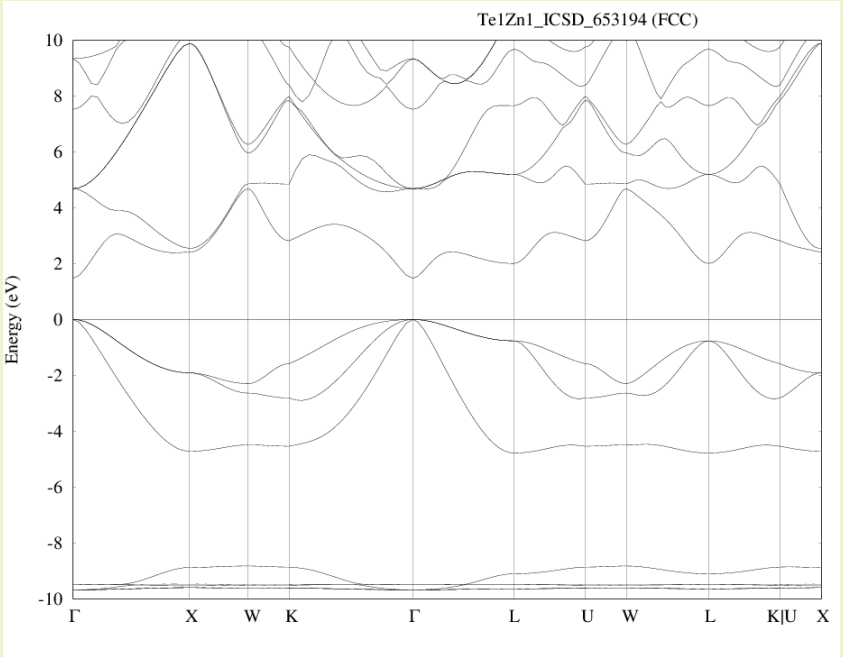
空間群：216
格子定数
長さ：a=b=c=6.139152[ang]
角度：α=β=γ=90[deg]
原子の位置：
Te: (0.0, 0.0, 0.0)
Zn: (0.75, 0.25, 0.25)

Lattice_type: FCC

ZnTeのバンド構造

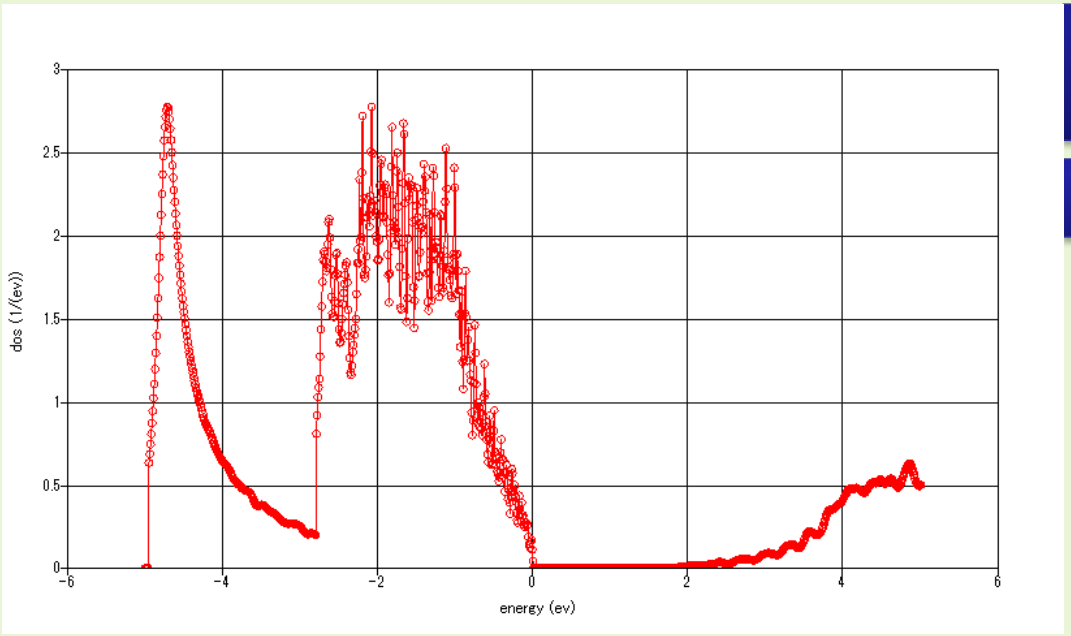


DFTBで求められたバンド構造



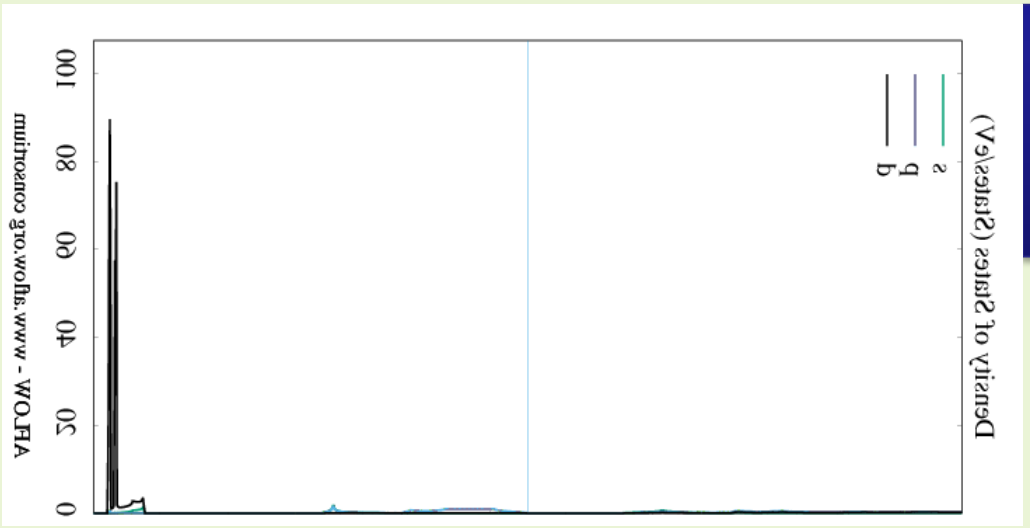
AFLOWで求められているバンド構造
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:8bc8a0bebdd41db2)

ZnTeの状態密度



DFTBで求められた状態密度
バンド・ギャップ　1.89[eV]

バンド・ギャップ観測値：2.25[eV]



AFLOWで求められている状態密度
(http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:8bc8a0bebdd41db2)
バンド・ギャップ　2.9056[eV]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -170.1997[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00056303[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

表面張力:0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ:
-0.07～0.29[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

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

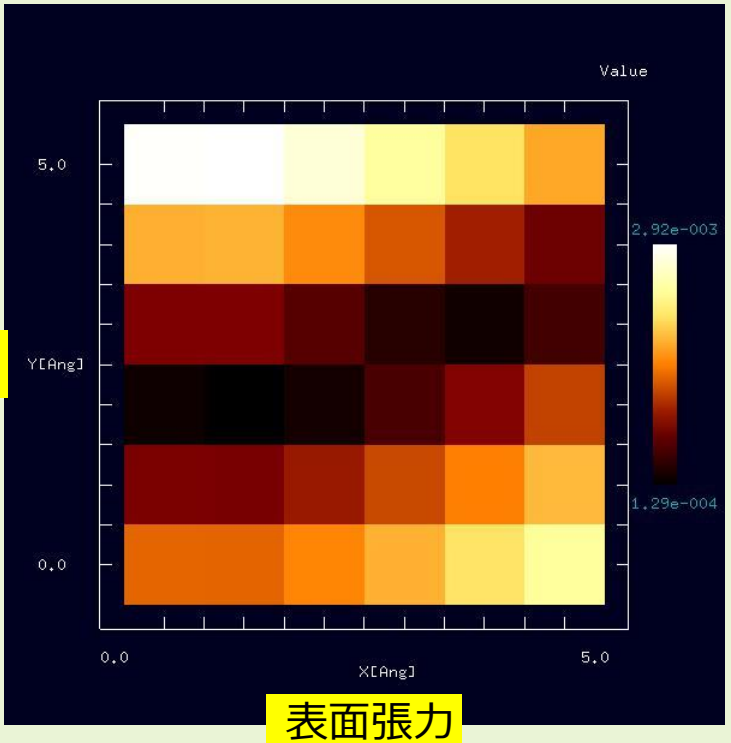
ω_0 :カンチレバーの共鳴振動周波数

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

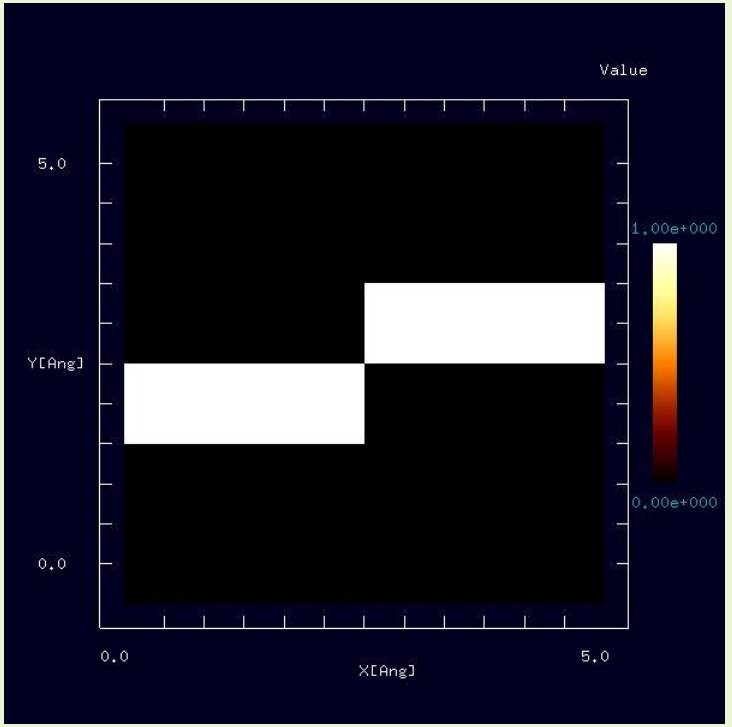
正解として、
表面張力:0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格

高さ



表面張力

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、6×6の区画で表した図

フィッティング直線:　$y = ax + b$

係数a=2.88724, b=0.280269

フィッティングで得られた直線を、100等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力:0.2508[N/m]、試料表面の基板からの高さ:0.100439[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -170.1997[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00056303[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

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

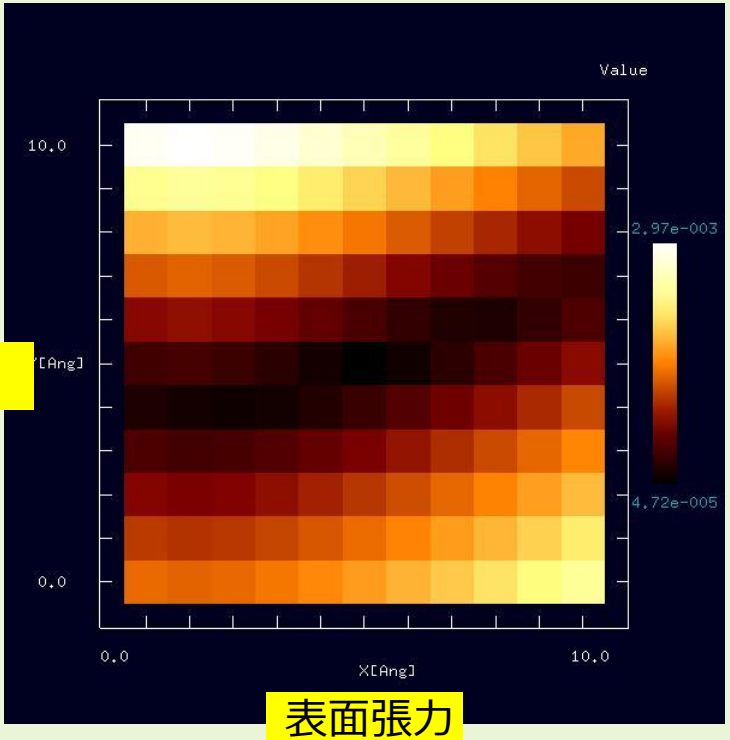
ω_0 :カンチレバーの共鳴振動周波数

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

表面張力:0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ:
-0.07～0.29[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

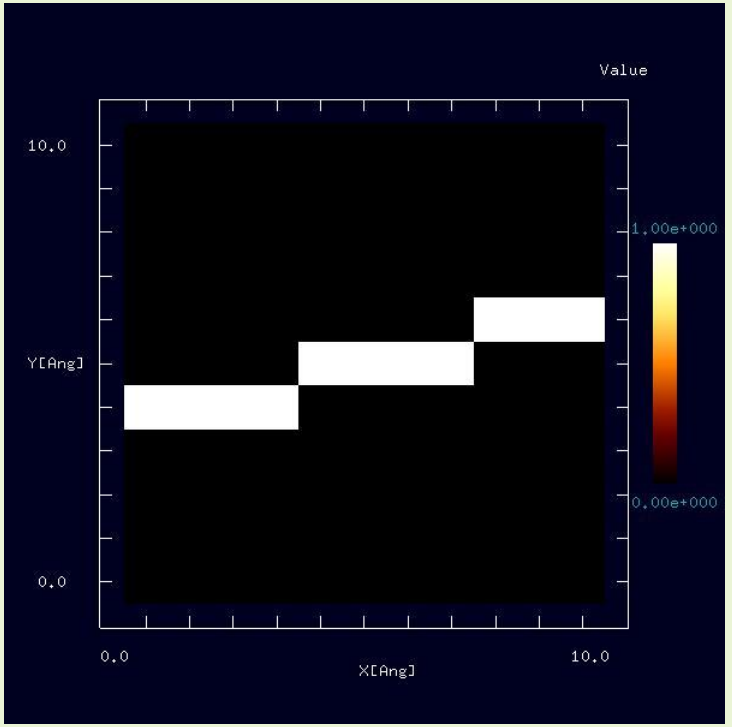
正解として、
表面張力:0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格



高さ

表面張力

標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、11×11の区画で表した図

フィッティング直線:　　$y = ax + b$

係数a=2.93077, b=0.291201

フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力:0.2588[N/m]、試料表面の基板からの高さ:0.104968[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -170.1997[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00056303[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

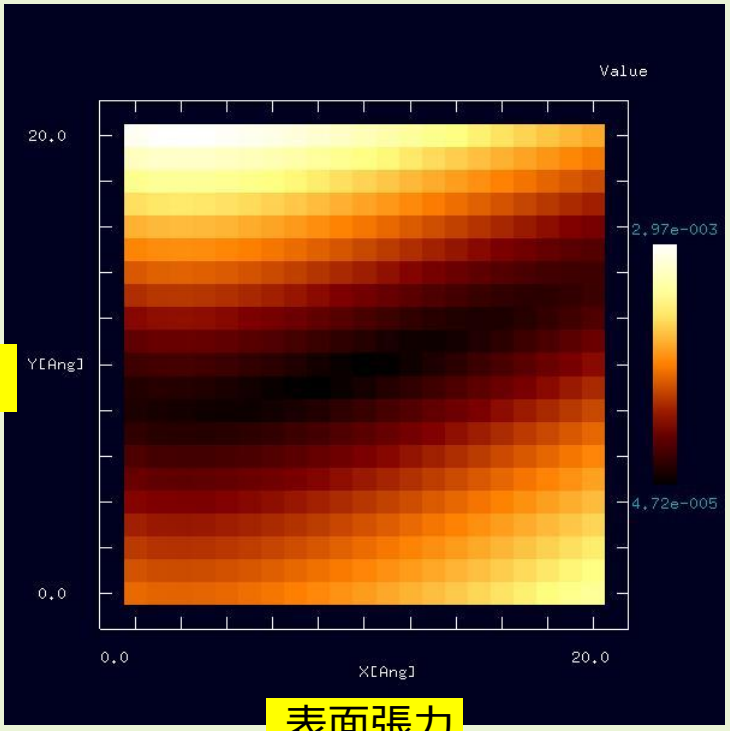
Φ :シミュレーション計算で得た位相シフト

Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

表面張力:0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ:
-0.07～0.29[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

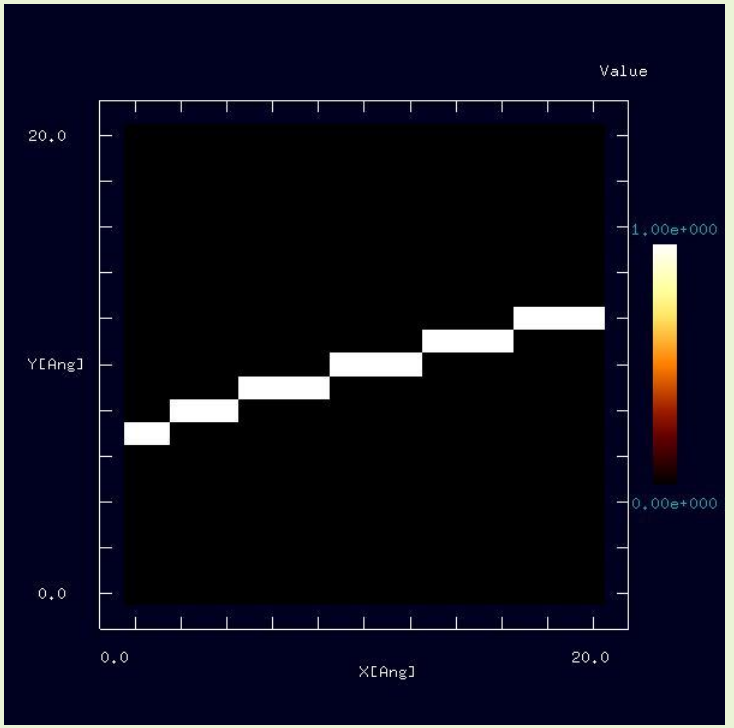
正解として、
表面張力:0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格

高さ



表面張力

標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、21×21の区画で表した図

フィッティング直線:　　$y = ax + b$

係数a=2.93925, b=0.276189

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力:0.2564[N/m]、試料表面の基板からの高さ:0.102981[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:20.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -39.7696[Hz]
位相シフトの観測値: -0.002084433[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:66.0～93.0[GPa]
表面張力:0.27～0.72[N/m]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
表面張力:0.5[N/m]
に近い値が得られたら合格

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

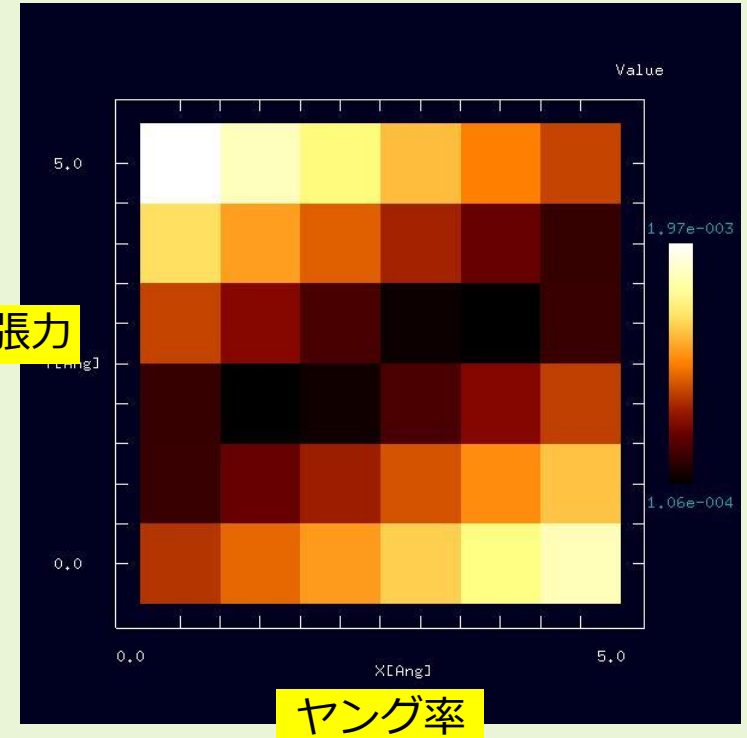
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$:観測値として得られた周波数シフト

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

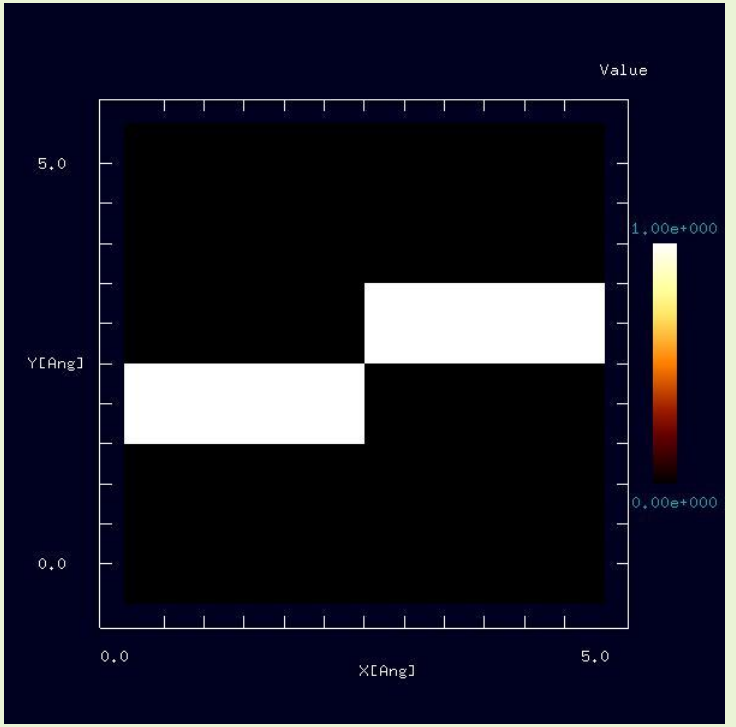
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

表面張力



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、6×6の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=0.00602018, b=0.016659

フィッティングで得られた直線を、100等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:79.77[GPa]、表面張力:0.496889[N/m]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:20.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -39.7696[Hz]
位相シフトの観測値: -0.002084433[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:66.0～93.0[GPa]
表面張力:0.27～0.72[N/m]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
表面張力:0.5[N/m]
に近い値が得られたら合格

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

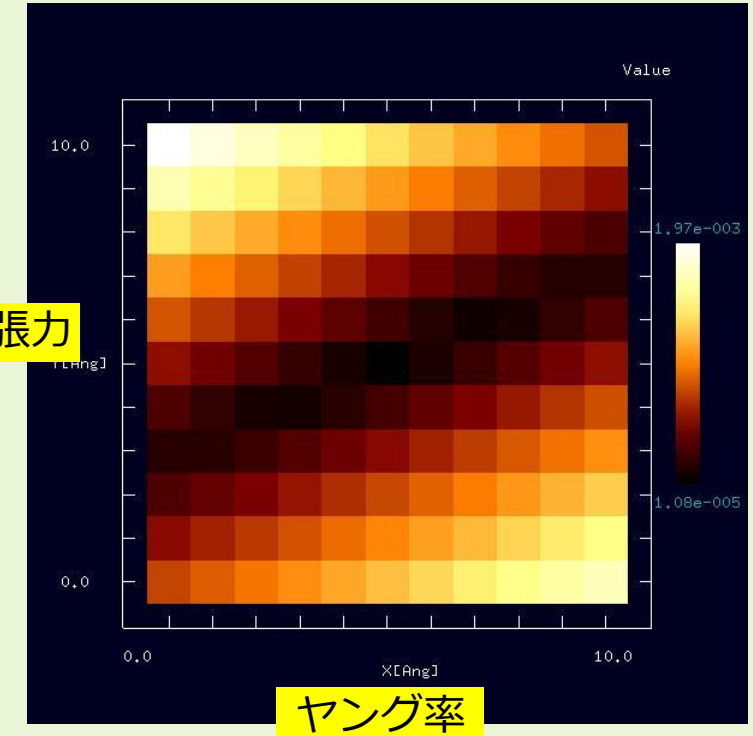
$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

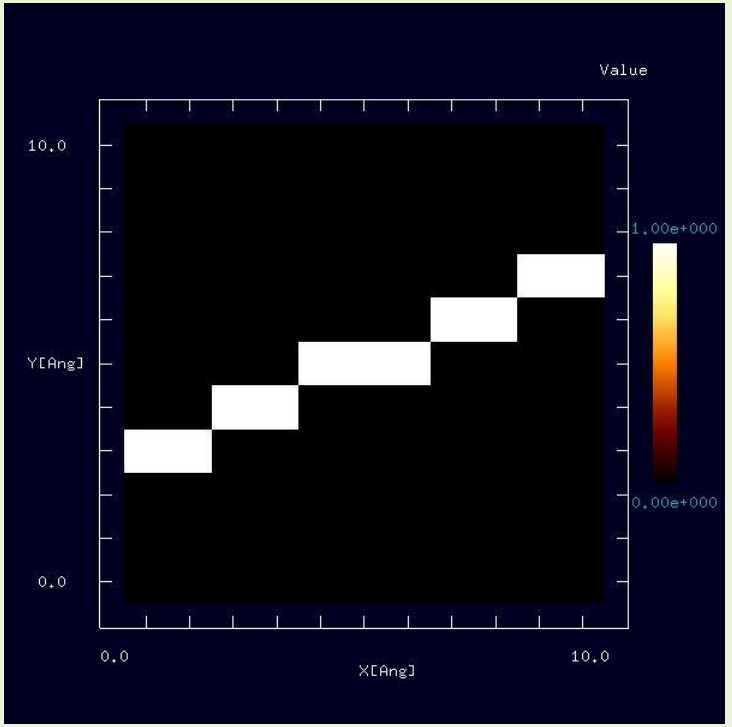
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト



表面張力

ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、11×11の区画で表した図

フィッティング直線：　$y = ax + b$

係数a=0.00639995, b=-0.0136682

フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率：79.77[GPa]、表面張力：0.496856[N/m]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:20.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -39.7696[Hz]
位相シフトの観測値: -0.002084433[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:66.0～93.0[GPa]
表面張力:0.27～0.72[N/m]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
表面張力:0.5[N/m]
に近い値が得られたら合格

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

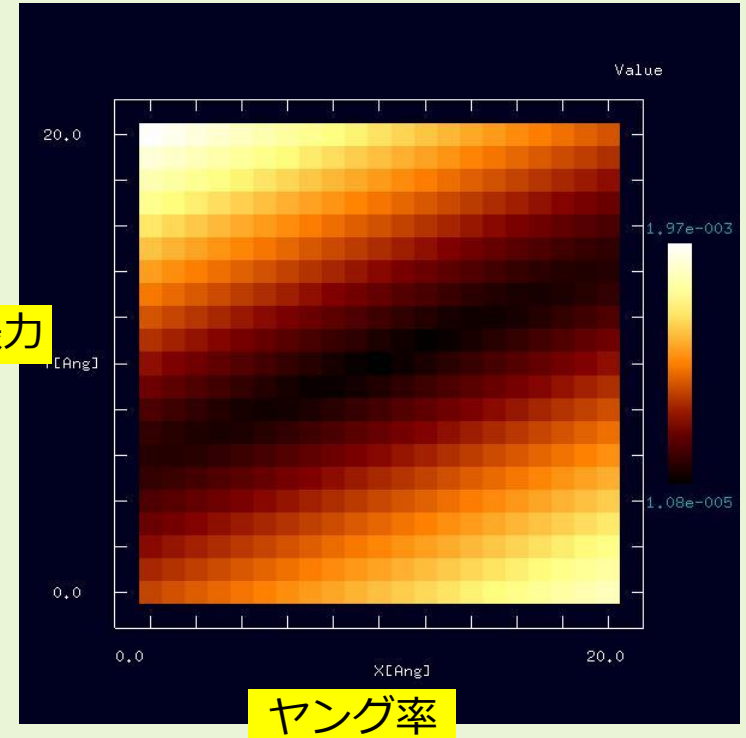
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$:観測値として得られた周波数シフト

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

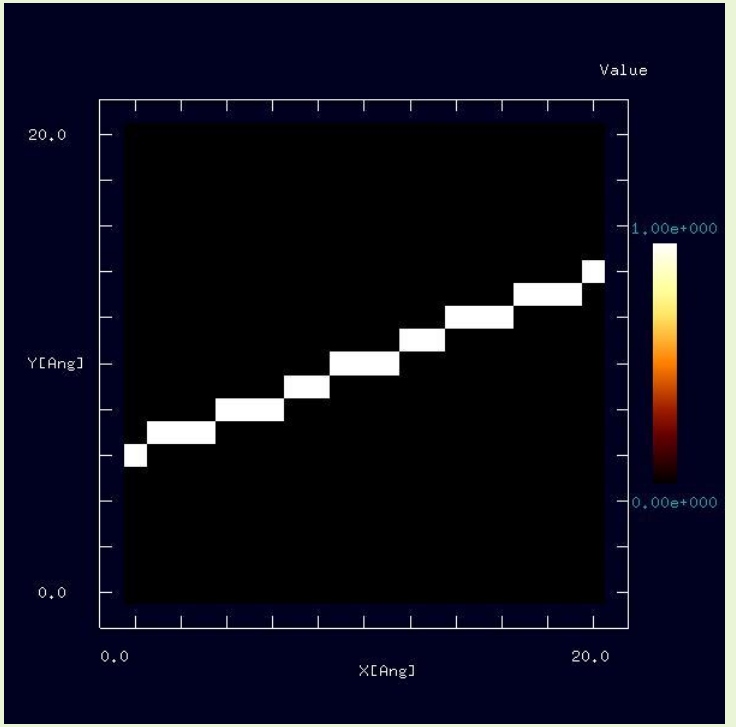
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

表面張力



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、21×21の区画で表した図

フィッティング直線：　$y = ax + b$

係数a=0.00638038, b=-0.011659

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率：79.8375[GPa]、表面張力：0.497735[N/m]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:11.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.5[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -702.8858[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00271521[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:67.0～94.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.0～2.7[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.5[nm]
に近い値が得られたら合格

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

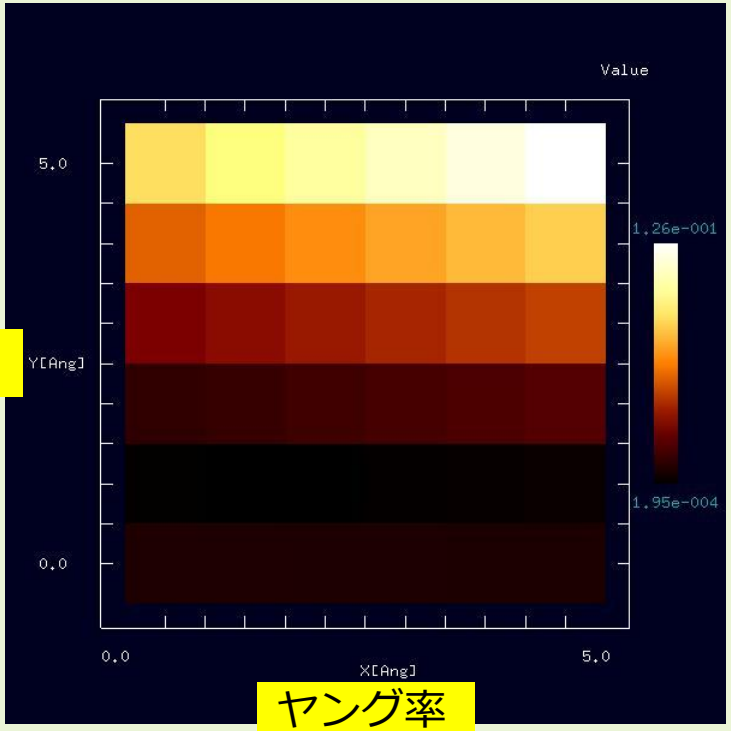
$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

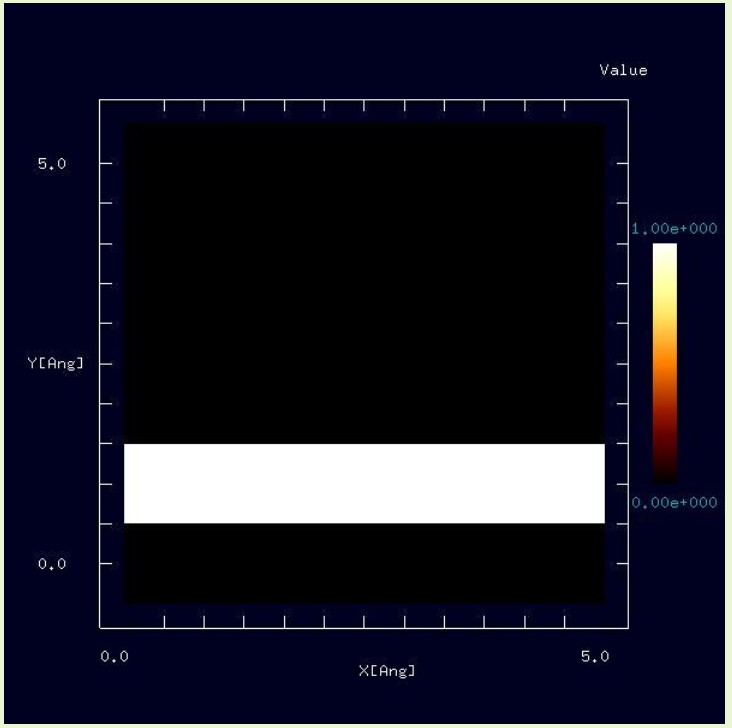
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト



高さ

ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、6×6の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=-0.0122675, b=6.28559

フィッティングで得られた直線を、100等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:74.02[GPa]、試料表面の基板からの高さ:0.537755[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:11.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.5[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -702.8858[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00271521[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:67.0～94.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.0～2.7[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

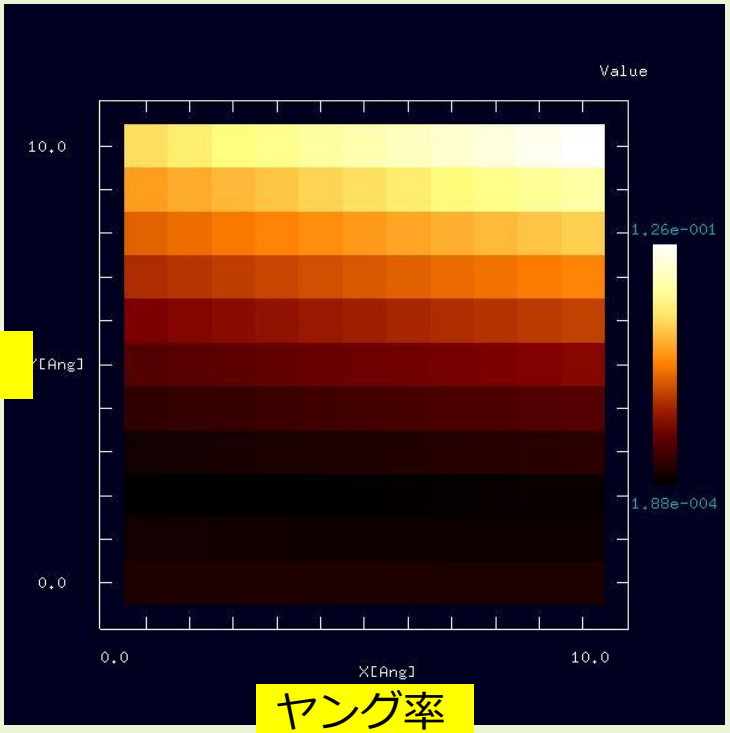
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$:観測値として得られた周波数シフト

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

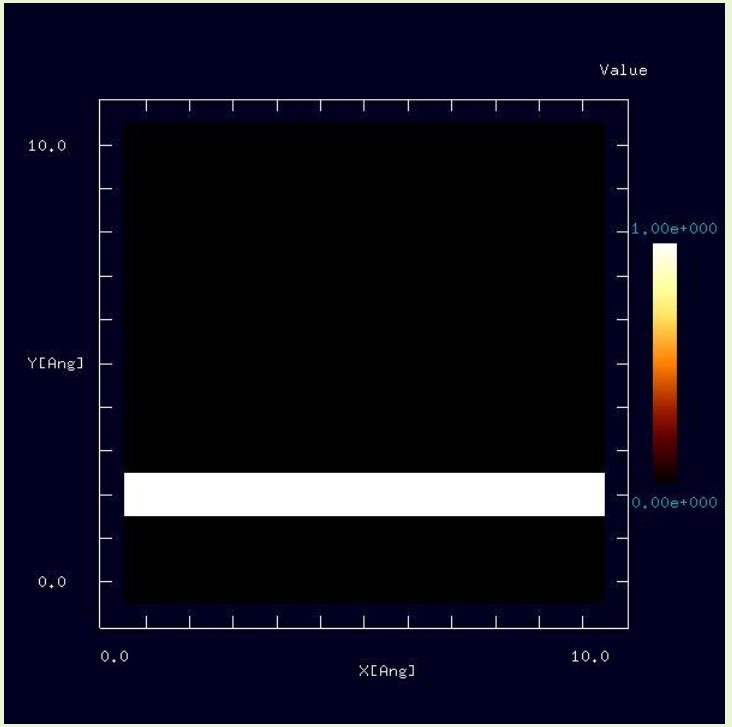
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.5[nm]
に近い値が得られたら合格



高さ

ヤング率



標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ

最小二乗法で得られた直線を、11×11の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=-0.0288849, b=7.51712

フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:74.155[GPa]、試料表面の基板からの高さ:0.537516[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:11.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.5[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -702.8858[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00271521[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:67.0～94.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.0～2.7[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

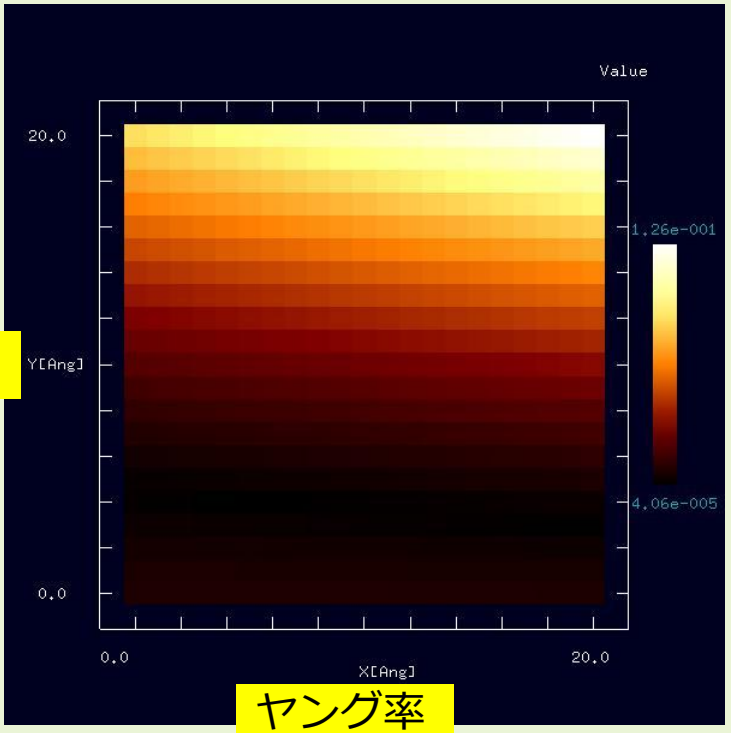
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$:観測値として得られた周波数シフト

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

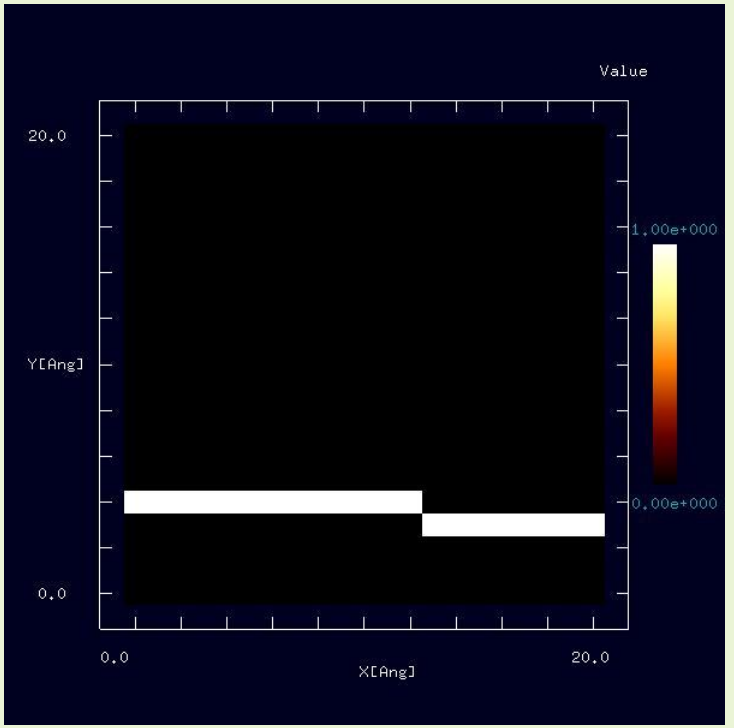
正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.5[nm]
に近い値が得られたら合格



高さ

ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、21×21の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=-0.0645746, b=10.1582

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:78.475[GPa]、試料表面の基板からの高さ:0.50907[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -170.1997[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00056303[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:69.0～92.0[GPa]
表面張力:0.11～0.42[N/m]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
表面張力:0.25[N/m]
に近い値が得られたら合格

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

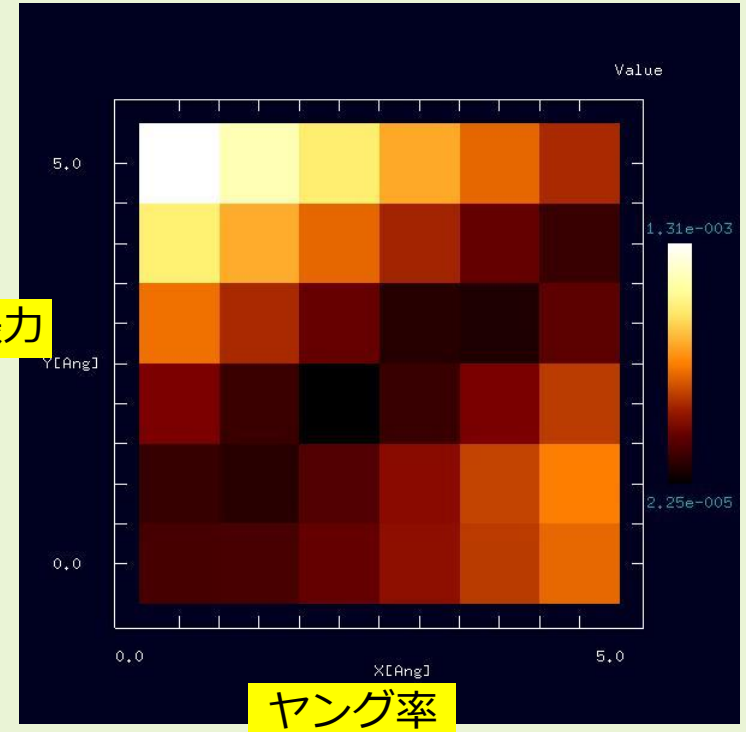
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$:観測値として得られた周波数シフト

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

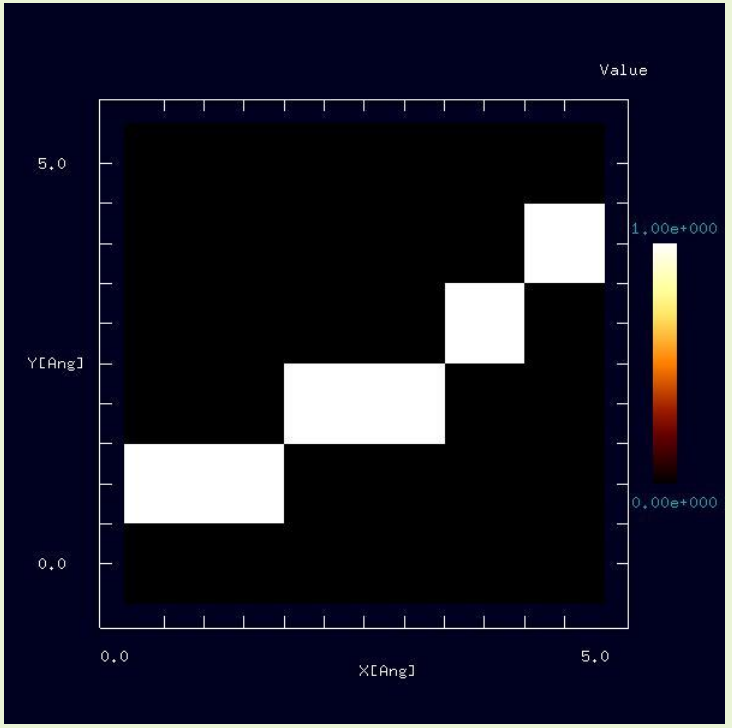
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

表面張力



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、6×6の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=0.00696994, b=-0.312991

フィッティングで得られた直線を、100等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:79.35[GPa]、表面張力:0.240074[N/m]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -170.1997[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00056303[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:69.0～92.0[GPa]
表面張力:0.11～0.42[N/m]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
表面張力:0.25[N/m]
に近い値が得られたら合格

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

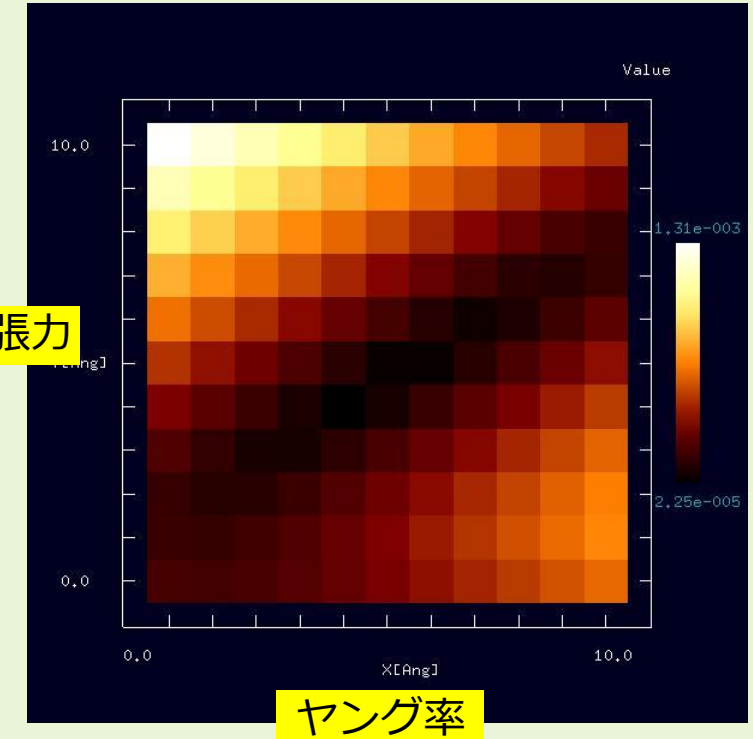
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$:観測値として得られた周波数シフト

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

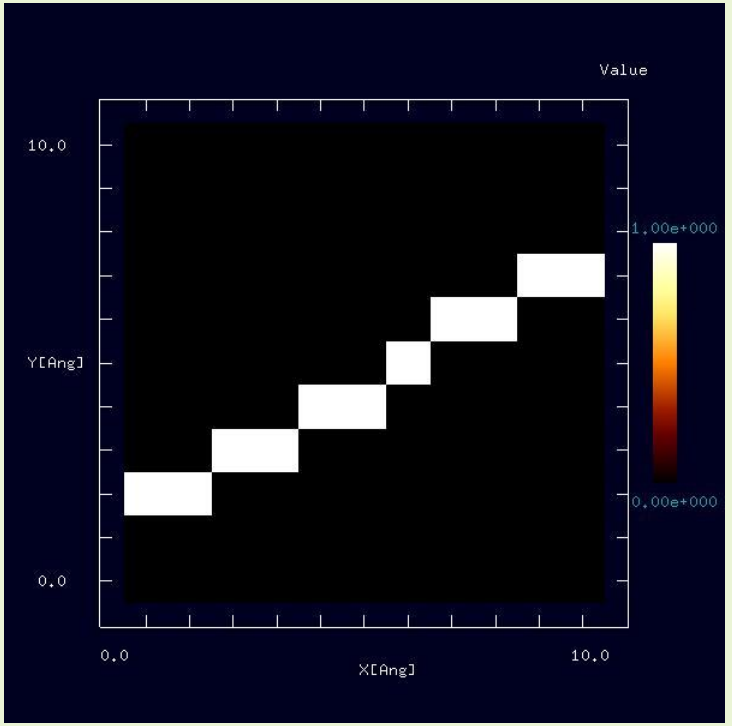
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

表面張力



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、11×11の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=0.00713769, b=-0.325783

フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:79.465[GPa]、表面張力:0.241413[N/m]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -170.1997[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00056303[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:69.0～92.0[GPa]
表面張力:0.11～0.42[N/m]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
表面張力:0.25[N/m]
に近い値が得られたら合格

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

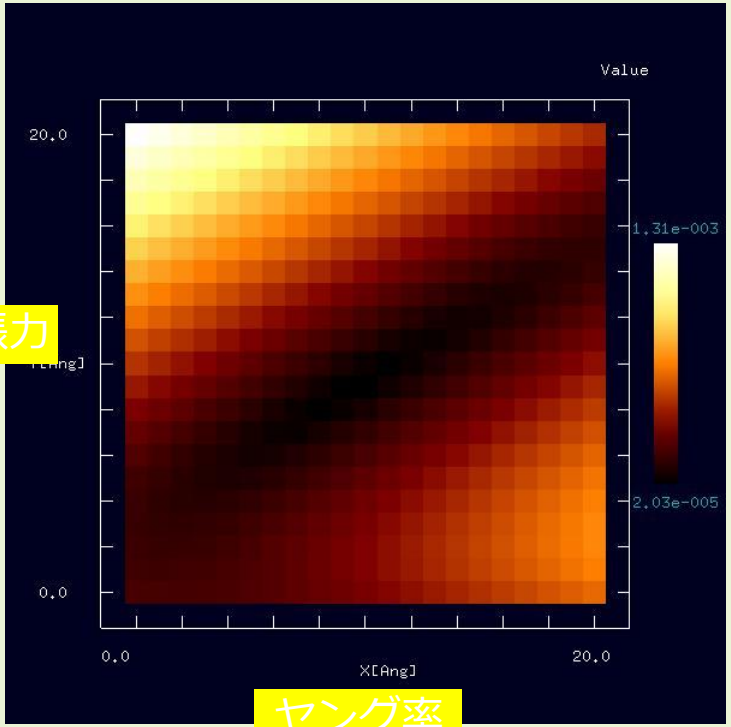
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$:観測値として得られた周波数シフト

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

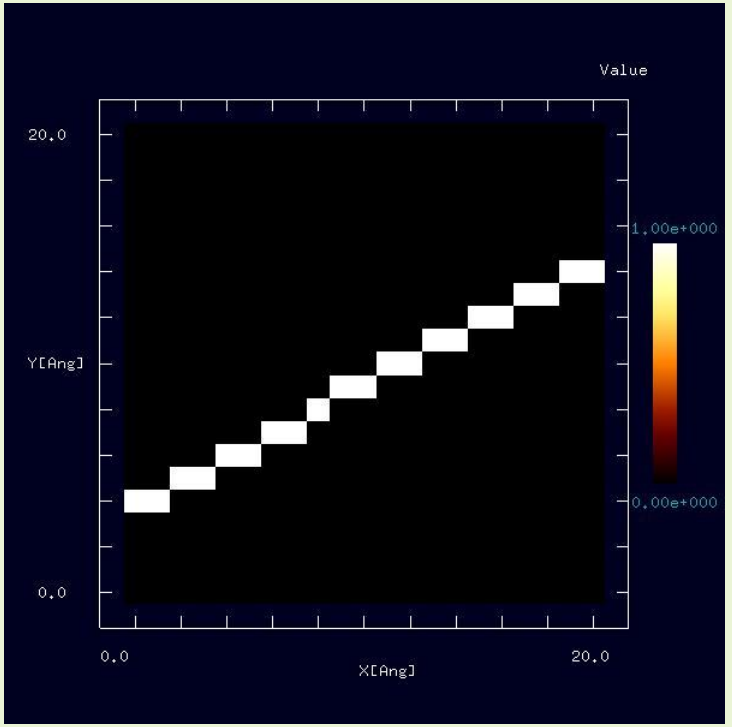
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

表面張力



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、21×21の区画で表した図

フィッティング直線：　$y = ax + b$

係数a=0.00718152, b=-0.32778

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率：79.6375[GPa]、表面張力：0.244138[N/m]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:20.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -39.7696[Hz]
位相シフトの観測値: -0.002084433[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:66.0～93.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:
-0.21～0.32[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

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

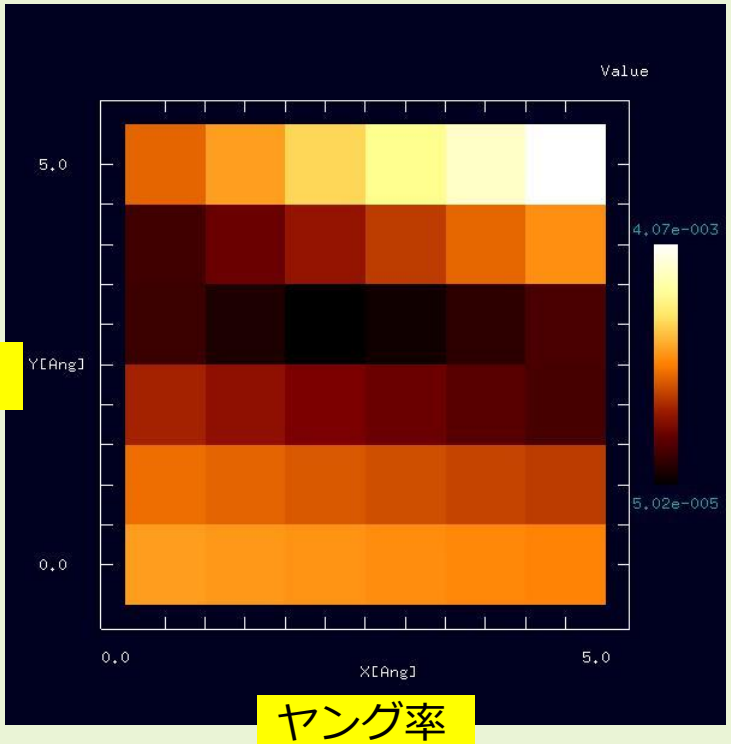
ω_0 :カンチレバーの共鳴振動周波数

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

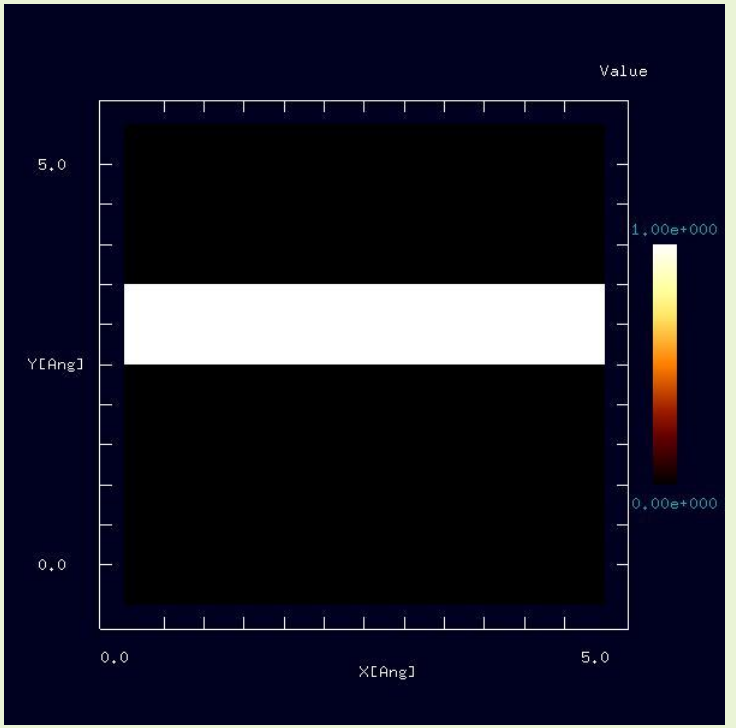
正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格

高さ



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、6×6の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=-0.0264091, b=3.10113

フィッティングで得られた直線を、100等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:80.85[GPa]、試料表面の基板からの高さ:0.0965959[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:20.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -39.7696[Hz]
位相シフトの観測値: -0.002084433[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:66.0～93.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:
-0.21～0.32[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

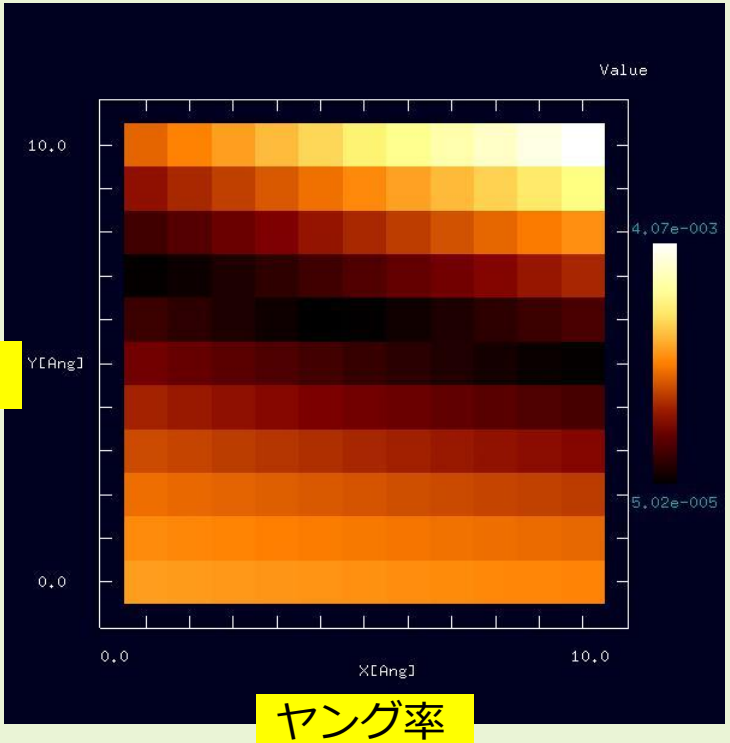
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$:観測値として得られた周波数シフト

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

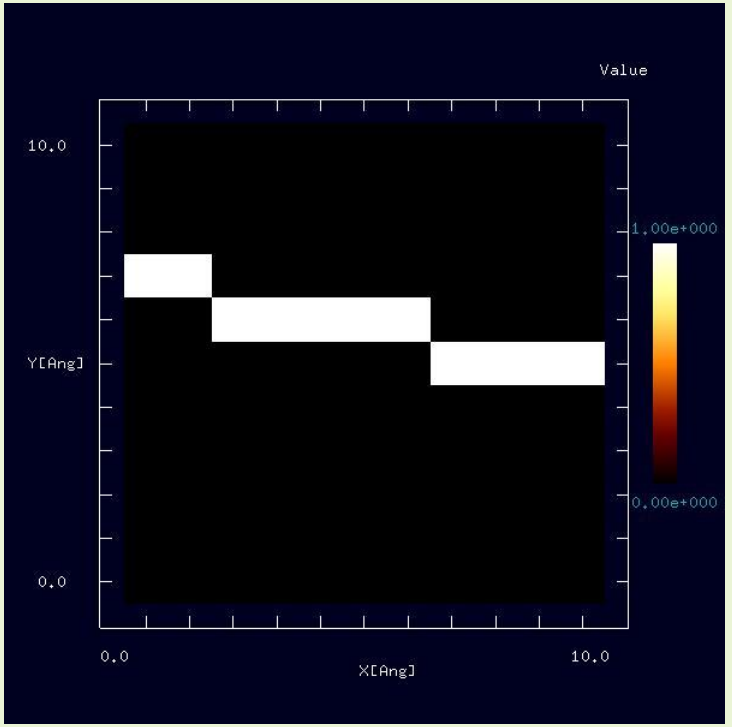
正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格



高さ

ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、11×11の区画で表した図

フィッティング直線:　$y = ax + b$

係数a=-0.0382662, b=4.05075

フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:79.905[GPa]、試料表面の基板からの高さ:0.0993086[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:20.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -39.7696[Hz]
位相シフトの観測値: -0.002084433[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:66.0～93.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:
-0.21～0.32[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

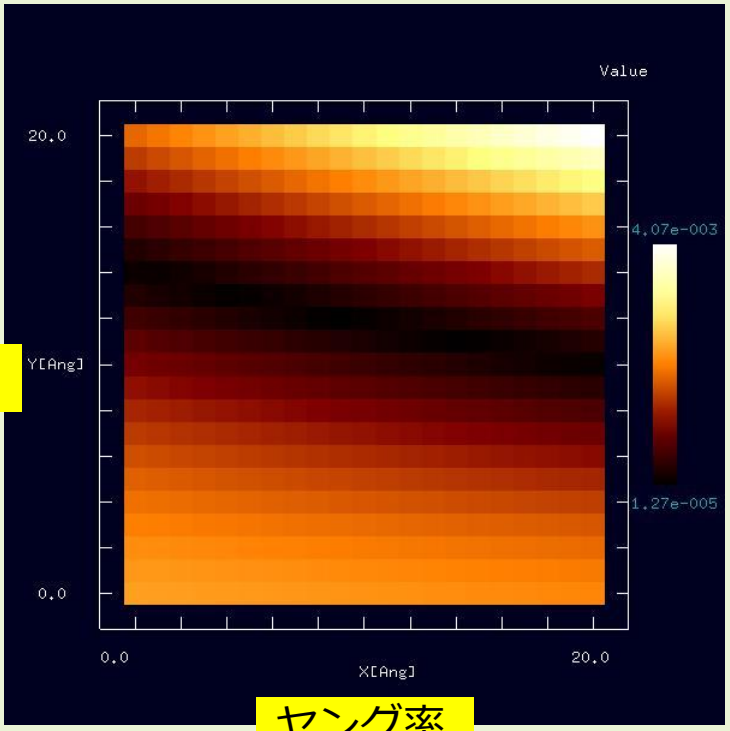
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$:観測値として得られた周波数シフト

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

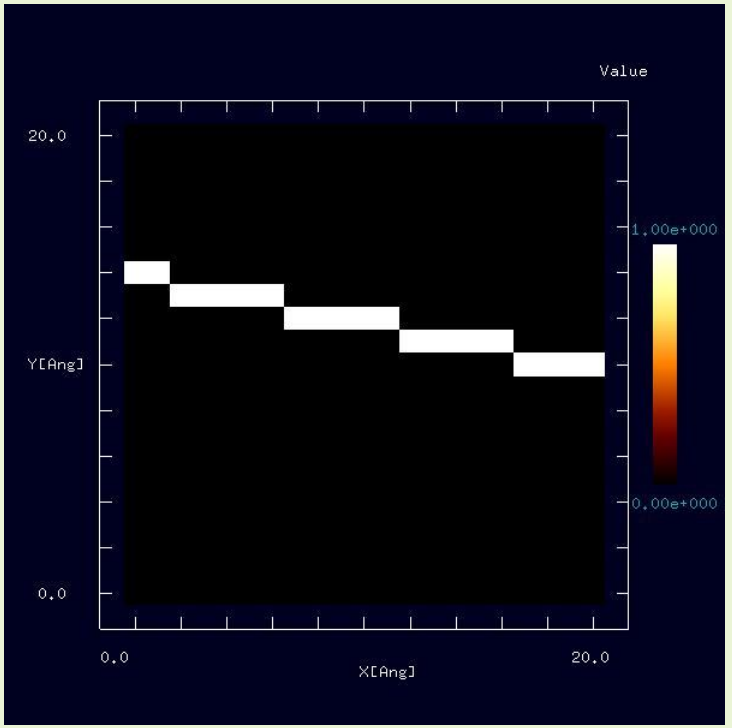
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格



高さ

ヤング率



標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ

最小二乗法で得られた直線を、21×21の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=-0.03789, b=4.03367

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:80.5125[GPa]、試料表面の基板からの高さ:0.0983049 [nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:11.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.5[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -702.8858[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00271521[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

表面張力:0.1～2.2[N/m]
試料表面の基板からの高さ:
-0.2～2.7[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

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

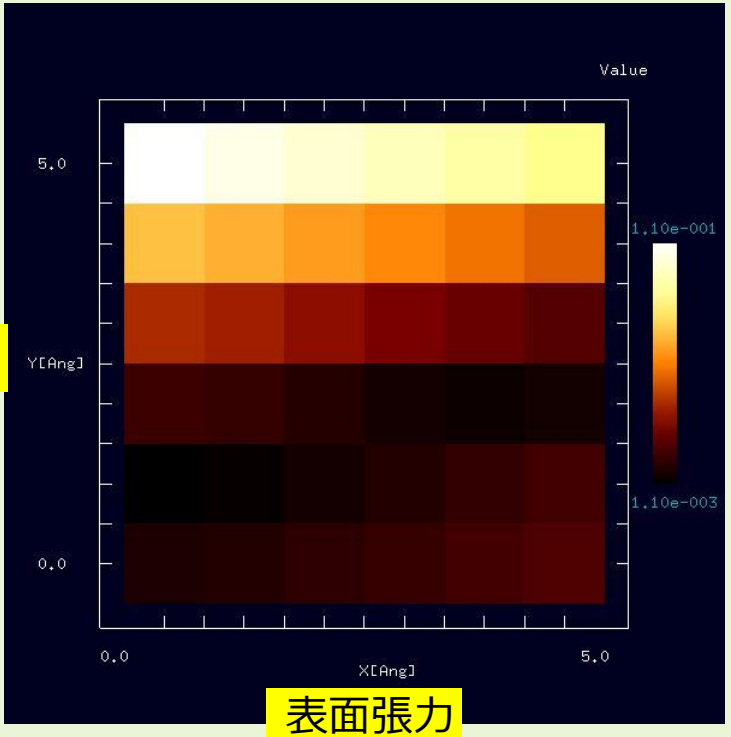
ω_0 :カンチレバーの共鳴振動周波数

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

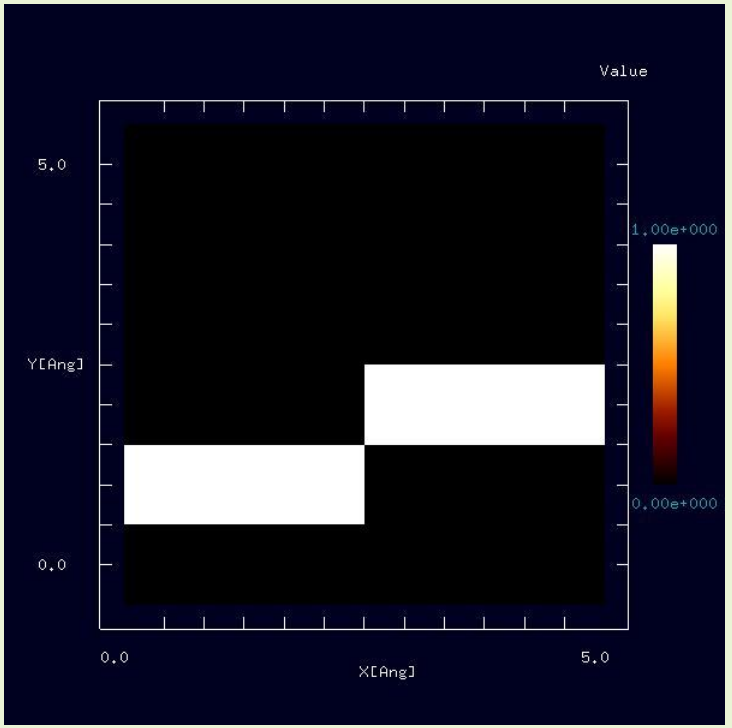
正解として、
表面張力:0.5[N/m]
試料表面の基板からの高さ:0.5[nm]
に近い値が得られたら合格

高さ



表面張力

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、6×6の区画で表した図

フィッティング直線:　$y = ax + b$

係数a=2.55876, b=3.27866

フィッティングで得られた直線を、100等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力:0.373[N/m]、試料表面の基板からの高さ:0.423308[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:11.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.5[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -702.8858[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00271521[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

表面張力:0.1～2.2[N/m]
試料表面の基板からの高さ:
-0.2～2.7[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

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

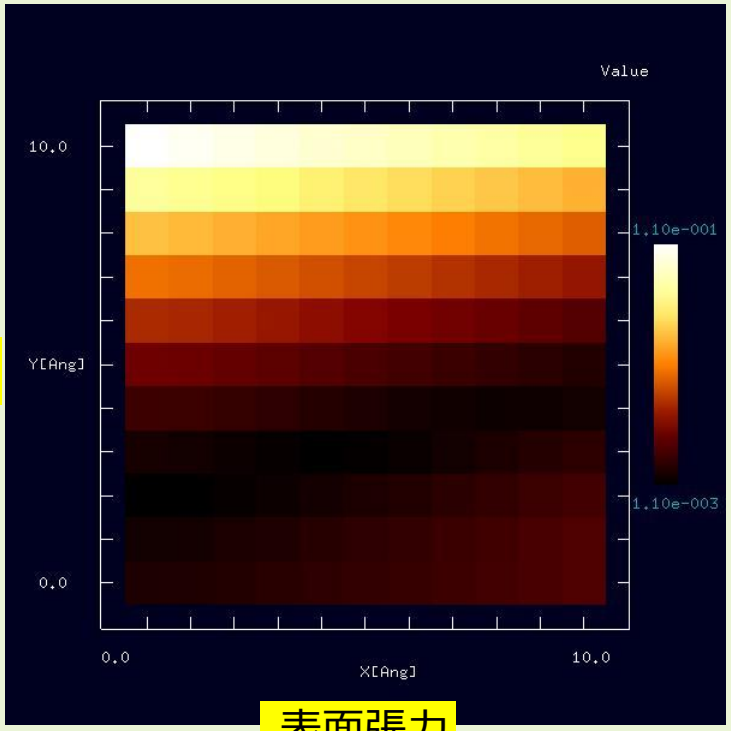
ω_0 :カンチレバーの共鳴振動周波数

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

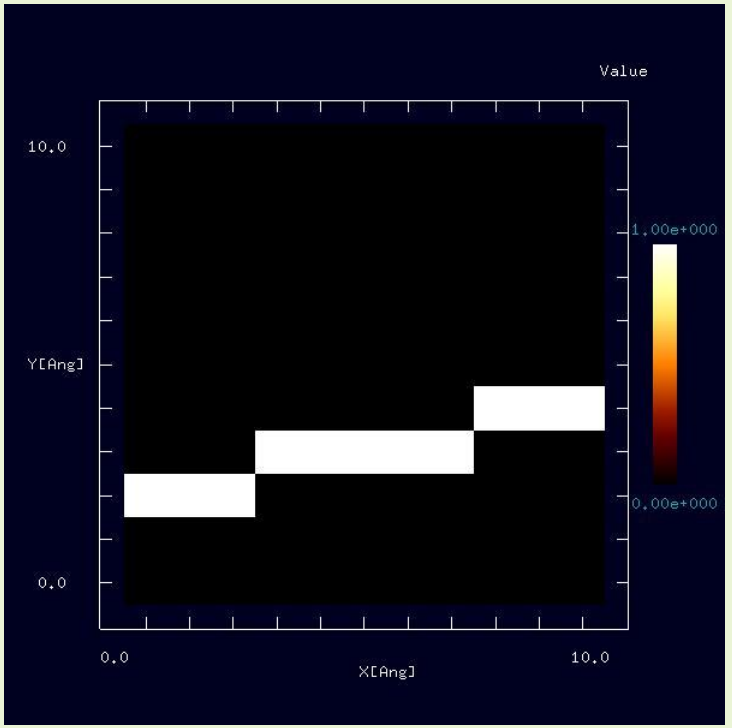
正解として、
表面張力:0.5[N/m]
試料表面の基板からの高さ:0.5[nm]
に近い値が得られたら合格

高さ



表面張力

標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、11×11の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=2.82603, b=3.2859

フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力:0.4465[N/m]、試料表面の基板からの高さ:0.454772[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

大気中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.5[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:11.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.5[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -702.8858[Hz]
位相シフトの観測値: -0.00271521[radian]

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

表面張力:0.1～2.2[N/m]
試料表面の基板からの高さ:
-0.2～2.7[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

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

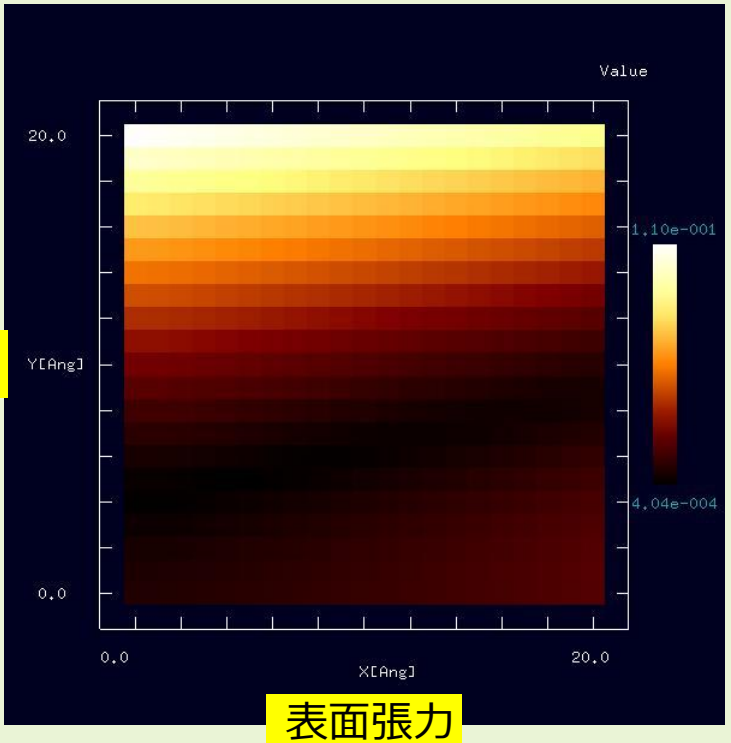
ω_0 :カンチレバーの共鳴振動周波数

Φ :シミュレーション計算で得た位相シフト

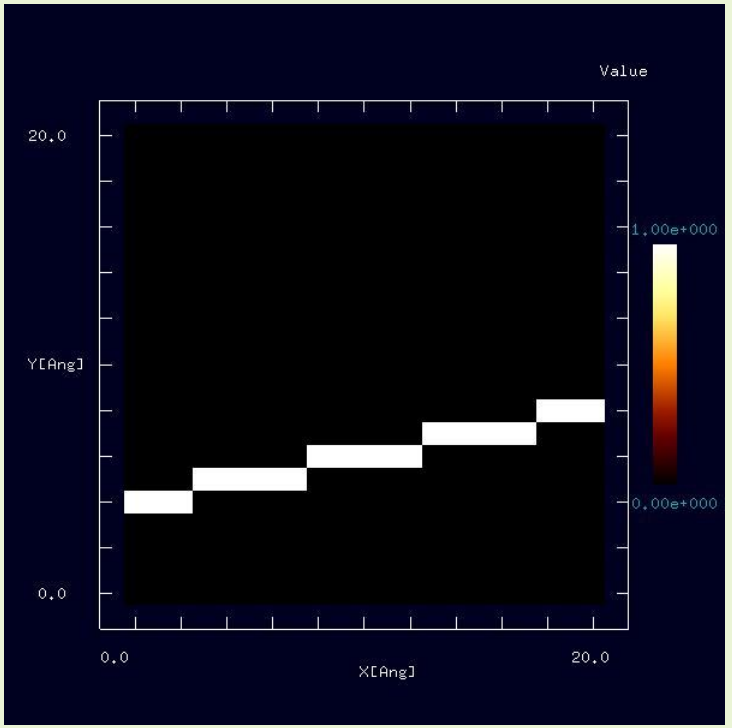
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

正解として、
表面張力:0.5[N/m]
試料表面の基板からの高さ:0.5[nm]
に近い値が得られたら合格

高さ



表面張力



標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ

最小二乗法で得られた直線を、21×21の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=2.67027, b=3.59619

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力:0.48325[N/m]、試料表面の基板からの高さ:0. 48866[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

液中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -221.8349[Hz]
位相シフトの観測値: 0.0004840706[radian]

液中環境パラメータ
動粘性率:0.25E-6[m^2/s]
密度:200[kg/m^3]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

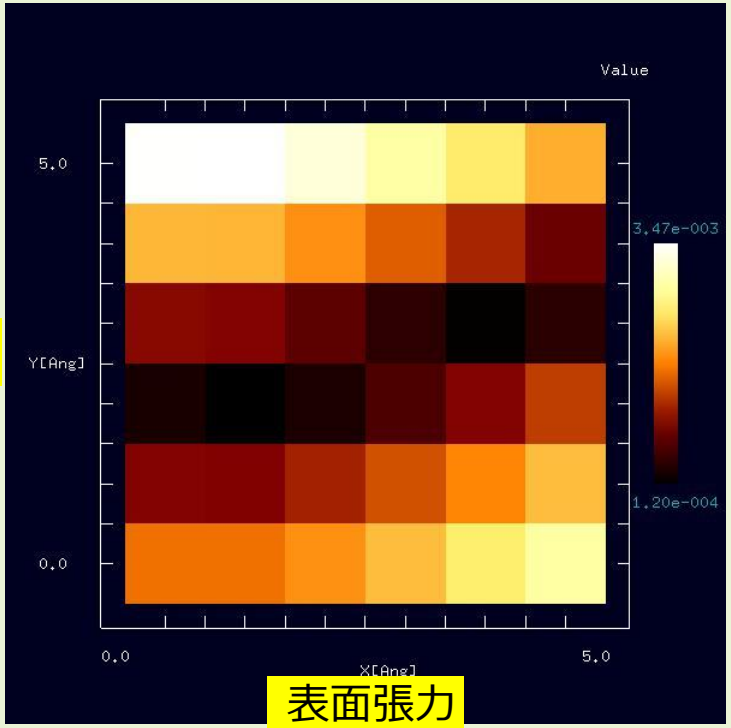
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

表面張力:0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ:-0.07～0.29[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

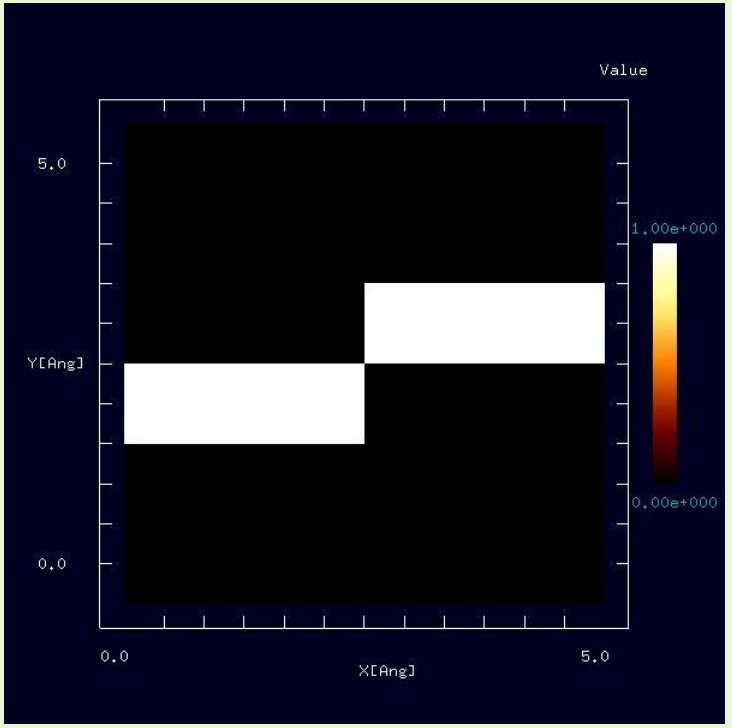
正解として、
表面張力:0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格

高さ



表面張力

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、6×6の区画で表した図

フィッティング直線:　$y = ax + b$

係数a=3.26185, b=0.203349

フィッティングで得られた直線を、100等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力:0.2508[N/m]、試料表面の基板からの高さ:0.102142[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

液中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -221.8349[Hz]
位相シフトの観測値: 0.0004840706[radian]

液中環境パラメータ
動粘性率:0.25E-6[m^2/s]
密度:200[kg/m^3]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

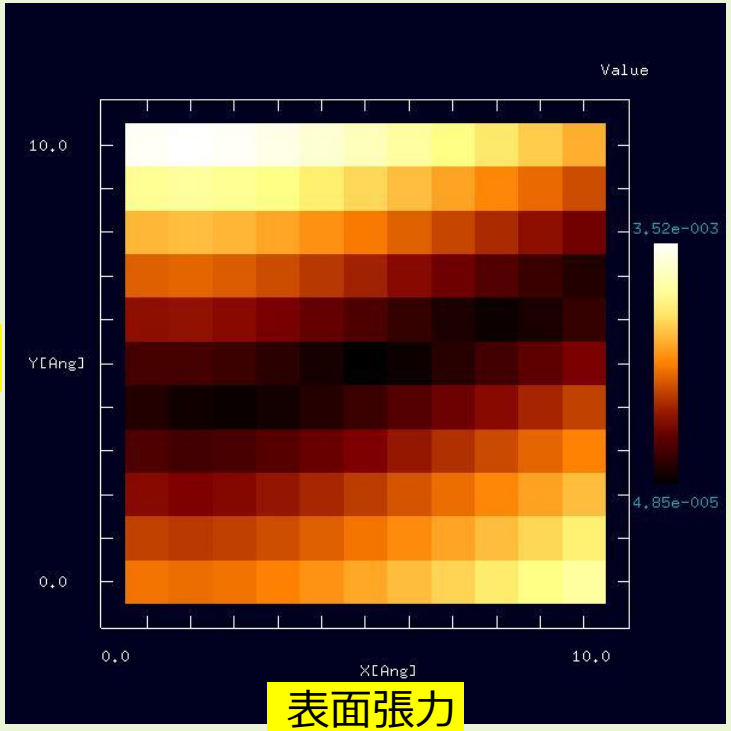
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

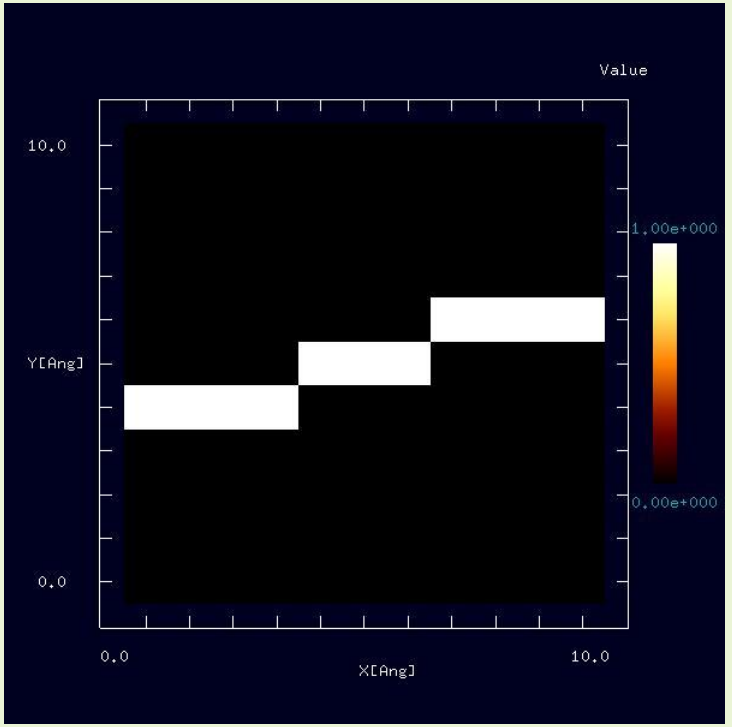
表面張力:0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ:-0.07～0.29[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

正解として、
表面張力:0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格

高さ



表面張力



標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ

最小二乗法で得られた直線を、11×11の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=3.12172, b=0.245788

フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力:0.2684[N/m]、試料表面の基板からの高さ:0.108366[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

液中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、表面張力と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -221.8349[Hz]
位相シフトの観測値: 0.0004840706[radian]

液中環境パラメータ
動粘性率:0.25E-6[m^2/s]
密度:200[kg/m^3]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

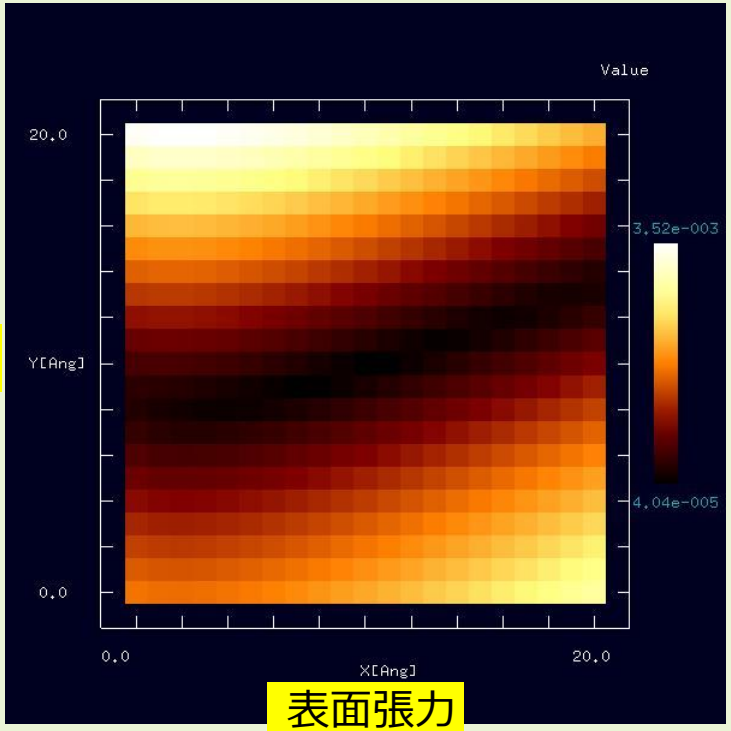
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

表面張力:0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ:-0.07～0.29[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

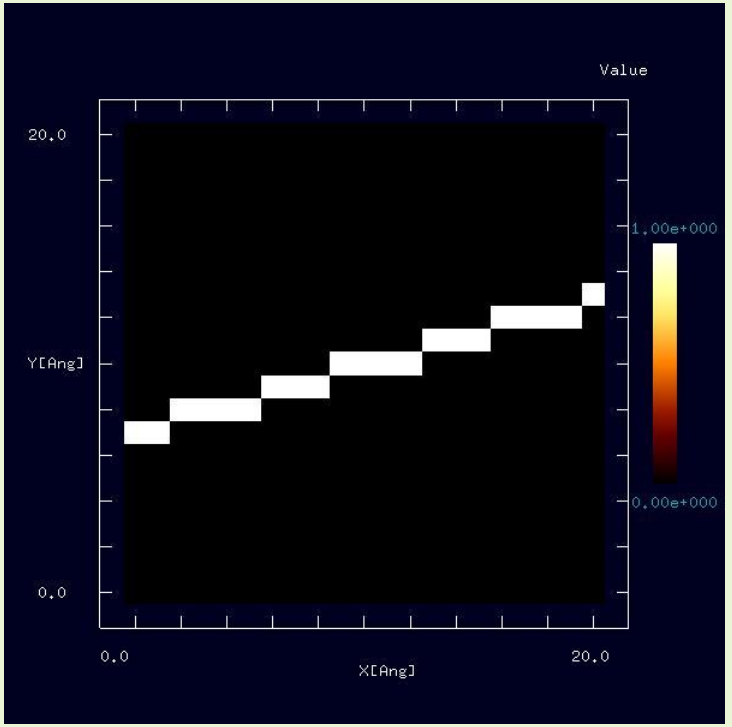
正解として、
表面張力:0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格

高さ



表面張力

標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、21×21の区画で表した図

フィッティング直線:　$y = ax + b$

係数a=3.12627, b=0.23324

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

表面張力:0.2596[N/m]、試料表面の基板からの高さ:0.104482[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

液中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -221.8349[Hz]
位相シフトの観測値: 0.0004840706[radian]

液中環境パラメータ
動粘性率:0.25E-6[m^2/s]
密度:200[kg/m^3]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

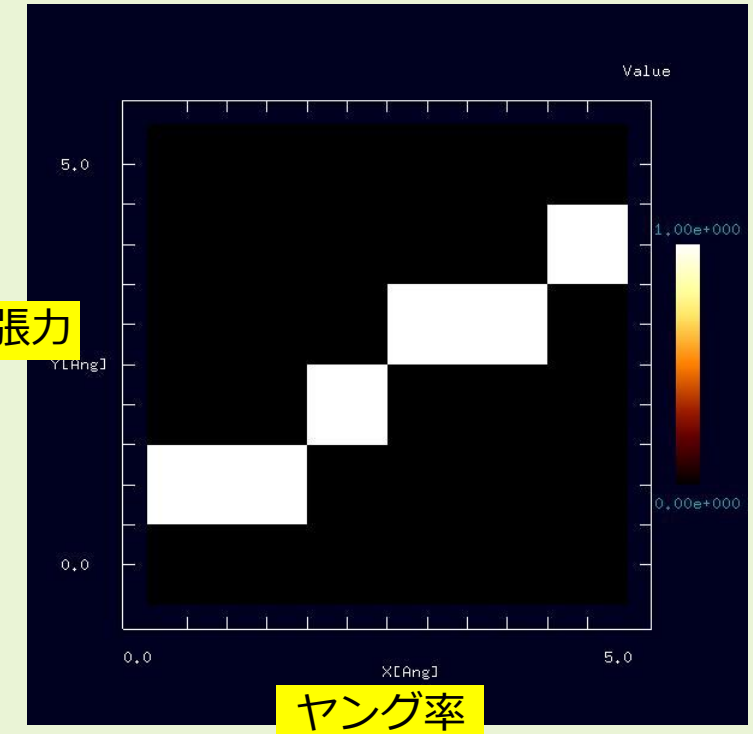
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:69.0～92.0[GPa]
表面張力:0.11～0.43[N/m]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

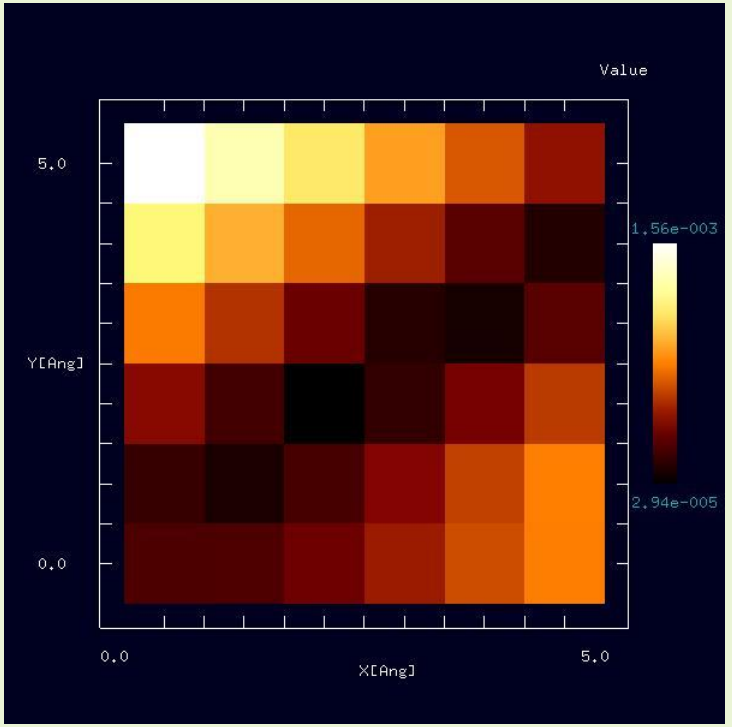
正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
表面張力:0.25[N/m]
に近い値が得られたら合格

表面張力



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、6×6の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=0.00787027, b=-0.380466

フィッティングで得られた直線を、100等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:79.81[GPa]、表面張力:0.24766[N/m]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

液中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -221.8349[Hz]
位相シフトの観測値: 0.0004840706[radian]

液中環境パラメータ
動粘性率:0.25E-6[m^2/s]
密度:200[kg/m^3]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

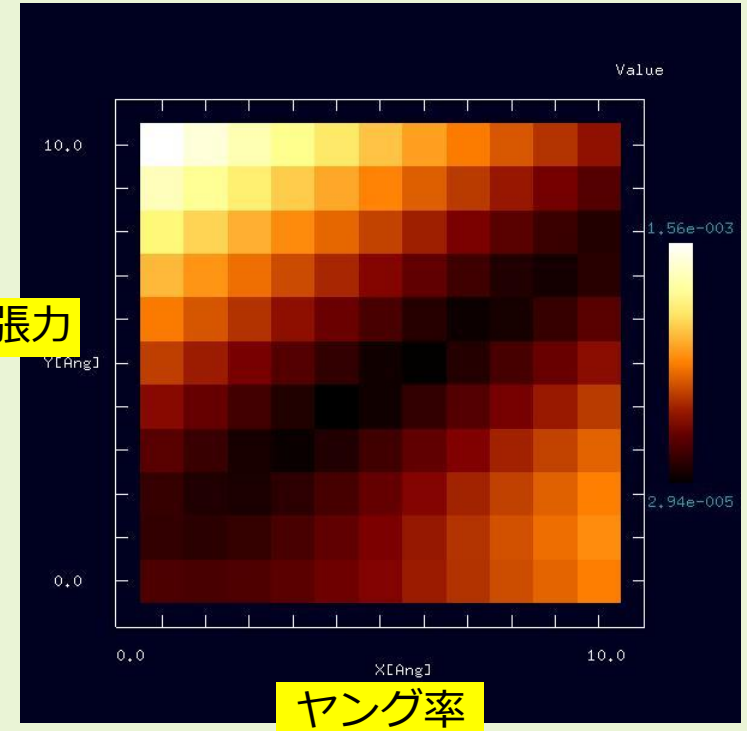
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:69.0～92.0[GPa]
表面張力:0.11～0.43[N/m]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

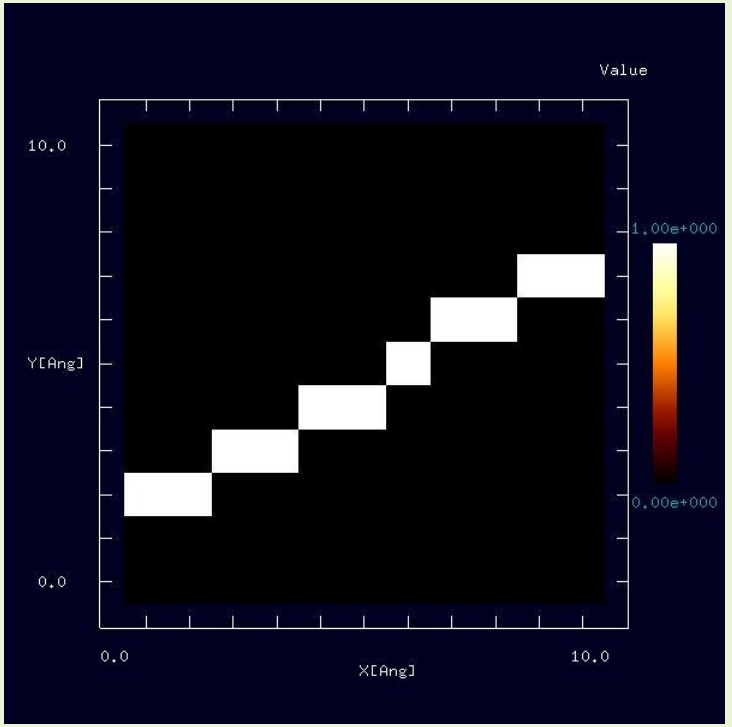
正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
表面張力:0.25[N/m]
に近い値が得られたら合格

表面張力



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、11×11の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=0.0080779, b=-0.398524

フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:79.81[GPa]、表面張力:0.246174[N/m]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

液中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -221.8349[Hz]
位相シフトの観測値: 0.0004840706[radian]

液中環境パラメータ
動粘性率:0.25E-6[m^2/s]
密度:200[kg/m^3]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

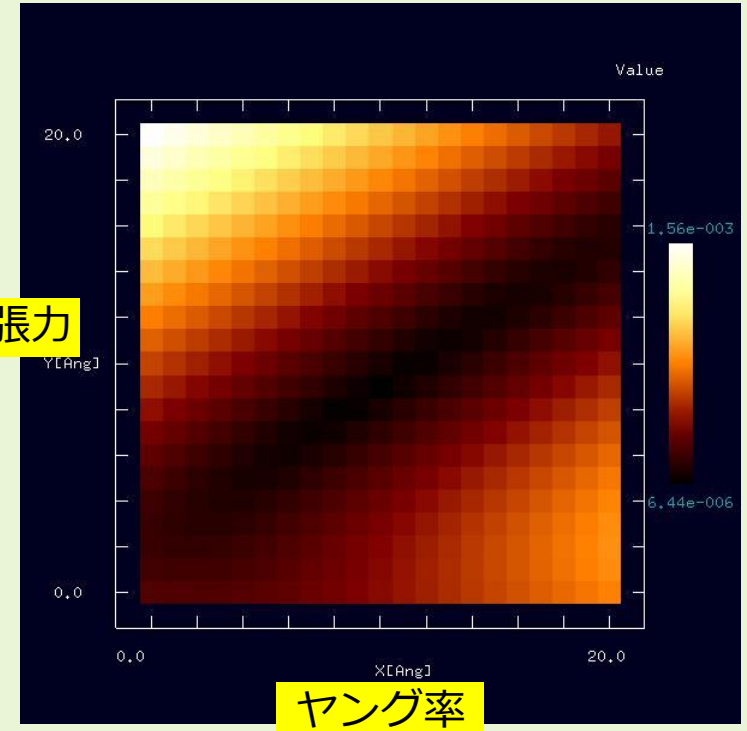
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:69.0～92.0[GPa]
表面張力:0.11～0.43[N/m]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

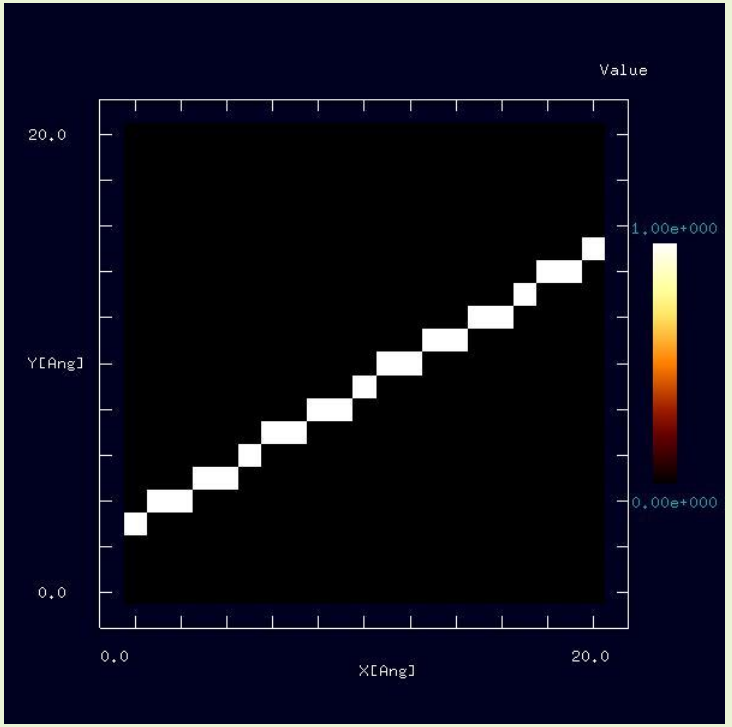
正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
表面張力:0.25[N/m]
に近い値が得られたら合格

表面張力



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、21×21の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=0.00817355, b=-0.404918

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:79.925[GPa]、表面張力:0.248352[N/m]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

液中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -221.8349[Hz]
位相シフトの観測値: 0.0004840706[radian]

液中環境パラメータ
動粘性率:0.25E-6[m^2/s]
密度:200[kg/m^3]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

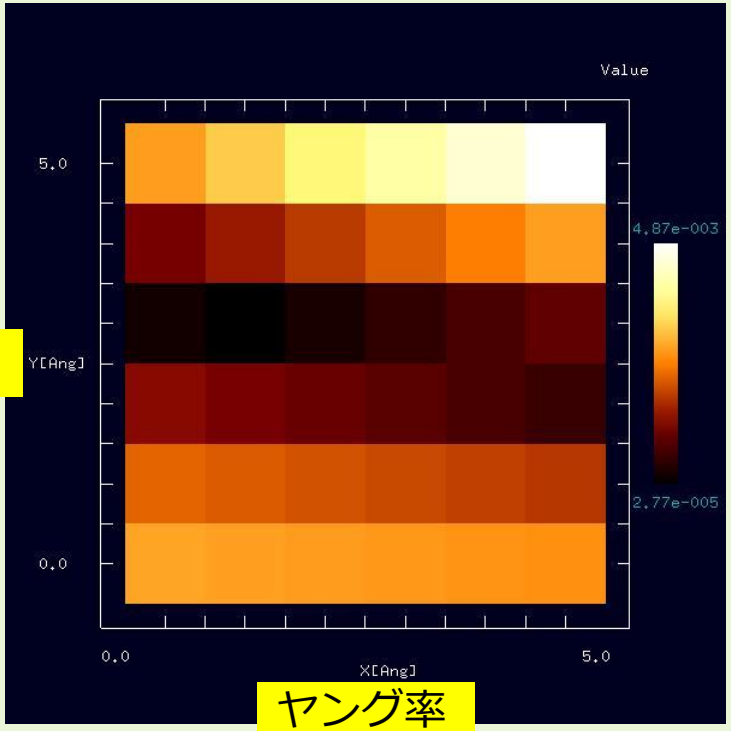
Φ :シミュレーション計算で得た位相シフト

Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:69.0～92.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:-0.17～0.32[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

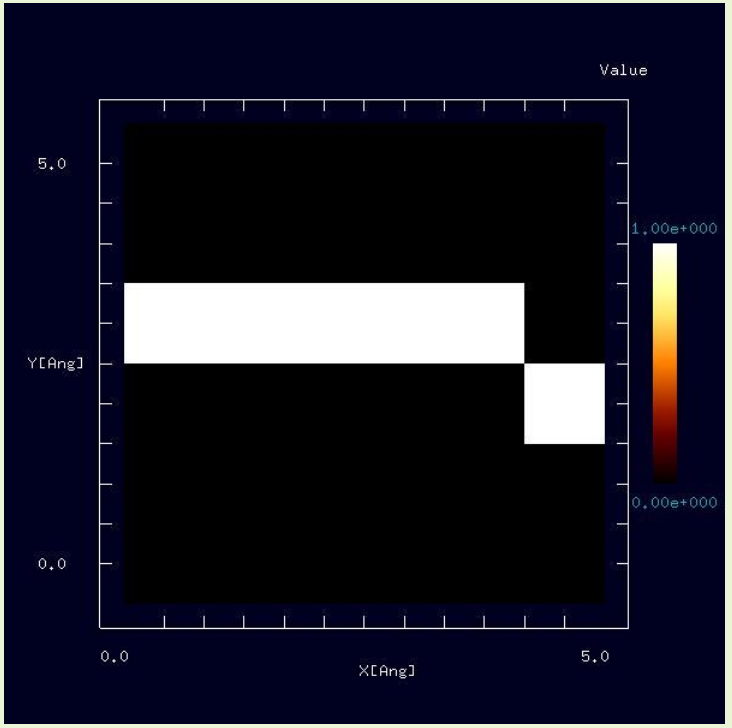
正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格



高さ

ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に6×6として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、6×6の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=-0.0324468, b=3.62404

フィッティングで得られた直線を、100等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:70.84[GPa]、試料表面の基板からの高さ:0.132551[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

液中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -221.8349[Hz]
位相シフトの観測値: 0.0004840706[radian]

液中環境パラメータ
動粘性率:0.25E-6[m^2/s]
密度:200[kg/m^3]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

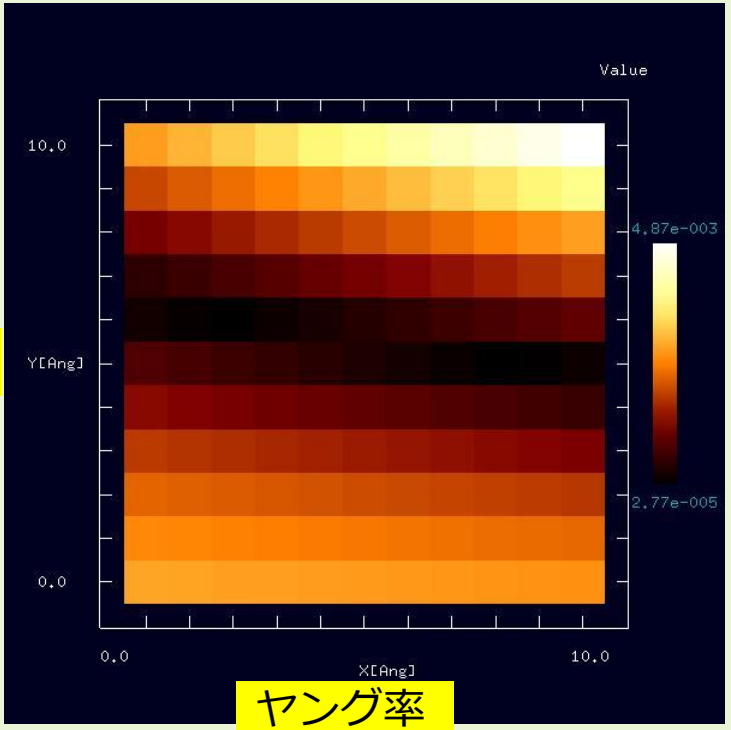
Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:69.0～92.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:-0.17～0.32[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

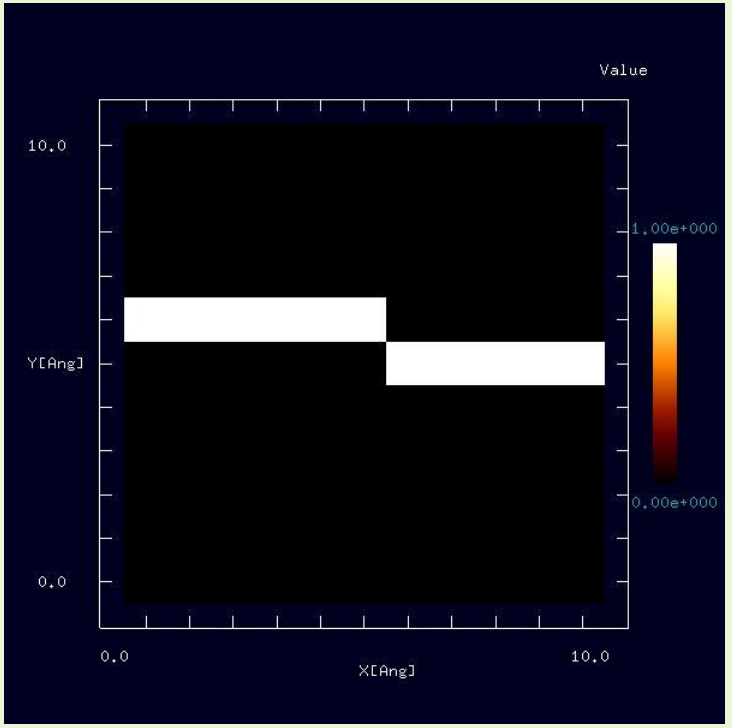
正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格

高さ



ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に11×11として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、11×11の区画で表した図

フィッティング直線: $y = ax + b$

係数a=-0.0320542, b=3.58204

フィッティングで得られた直線を、200等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:72.795[GPa]、試料表面の基板からの高さ:0.124865[nm]

LiqAFM tapping逆問題(global_mode_2)

液中環境下

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と試料表面の基板からの高さの2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率:80.0[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比:0.3
- 観測値を再現する表面張力:0.25[N/m]
- 観測値を再現する粘性率:12.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.1[nm]

カンチレバーの周波数: 20kHz
周波数シフトの観測値: -221.8349[Hz]
位相シフトの観測値: 0.0004840706[radian]

液中環境パラメータ
動粘性率:0.25E-6[m^2/s]
密度:200[kg/m^3]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

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

$\Delta\nu$:シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$: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

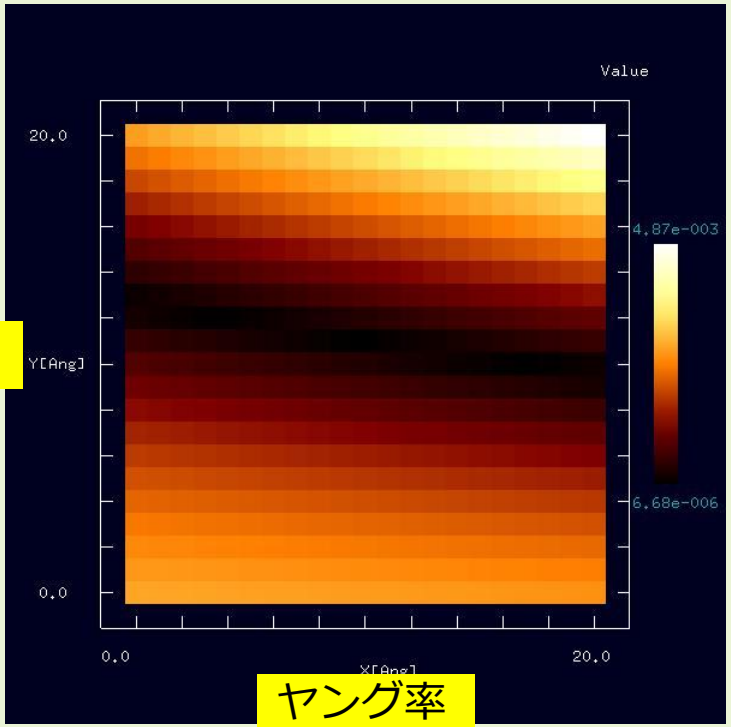
Φ :シミュレーション計算で得た位相シフト

Φ_{obs} :観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの振動の1周期を2048分割

ヤング率:69.0～92.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:-0.17～0.32[nm]
として、ずれ関数を最小にする点を探す問題を考える

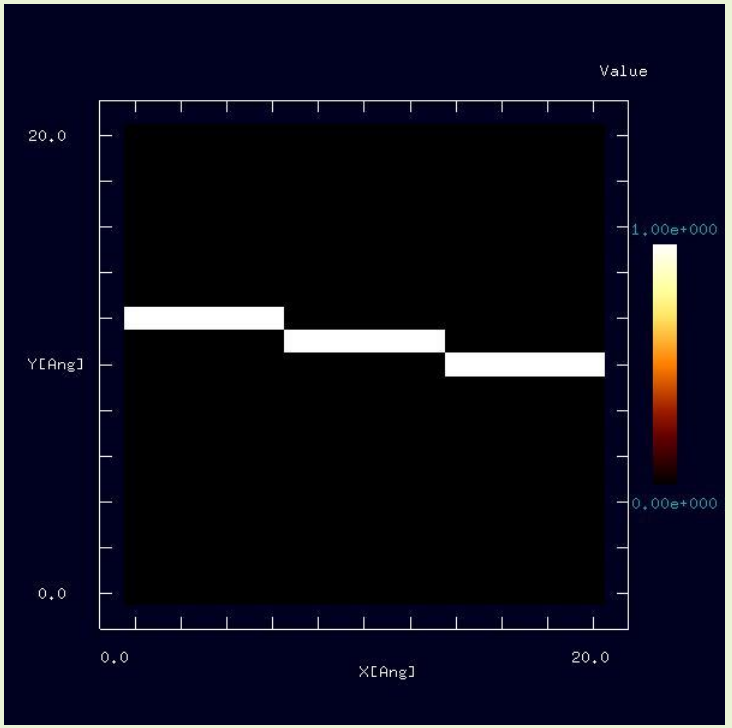
正解として、
ヤング率:80.0[GPa]
試料表面の基板からの高さ:0.1[nm]
に近い値が得られたら合格



高さ

ヤング率

標本点を2次元平面上で等間隔に21×21として、ずれ関数の値の分布を示したグラフ



最小二乗法で得られた直線を、21×21の区画で表した図

フィッティング直線:　　$y = ax + b$

係数a=-0.0306644, b=3.46385

フィッティングで得られた直線を、400等分して、ずれ関数が最小となる点を探す

ヤング率:75.785[GPa]、試料表面の基板からの高さ:0.113995[nm]

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-170.1997[Hz]
位相シフトの観測値を-0.00056303[radian]
粘性抵抗を12.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

真空環境下を仮定

ヤング率：74.0～89.0[GPa]
表面張力：0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ：-0.07～0.29[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、5等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：77.3[GPa]
表面張力：0.24808[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.10761[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

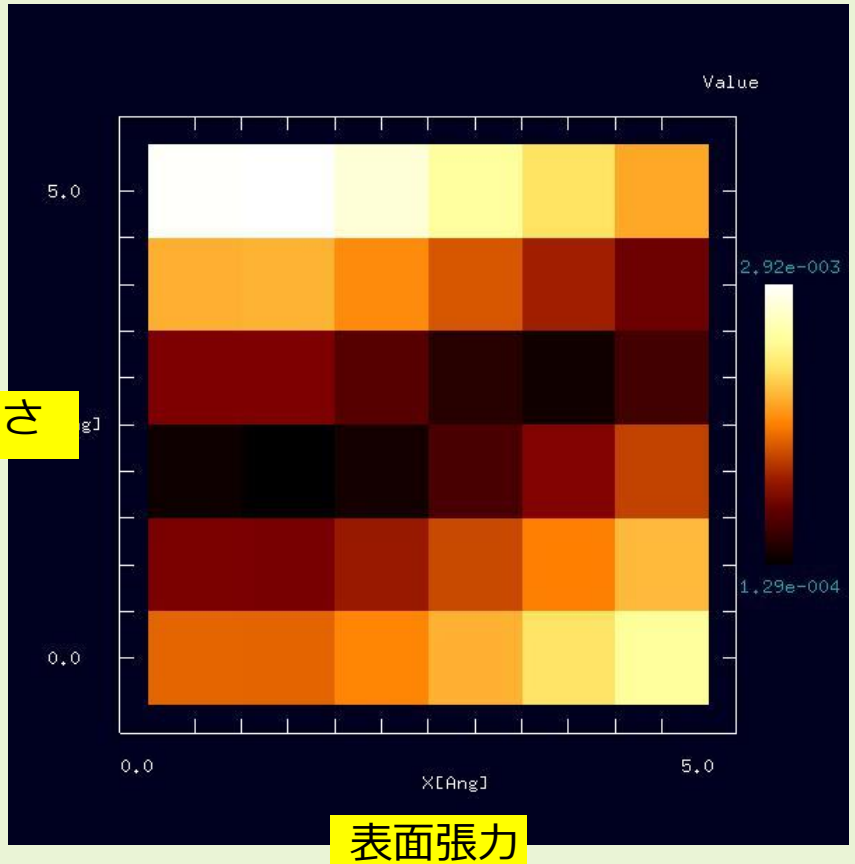
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

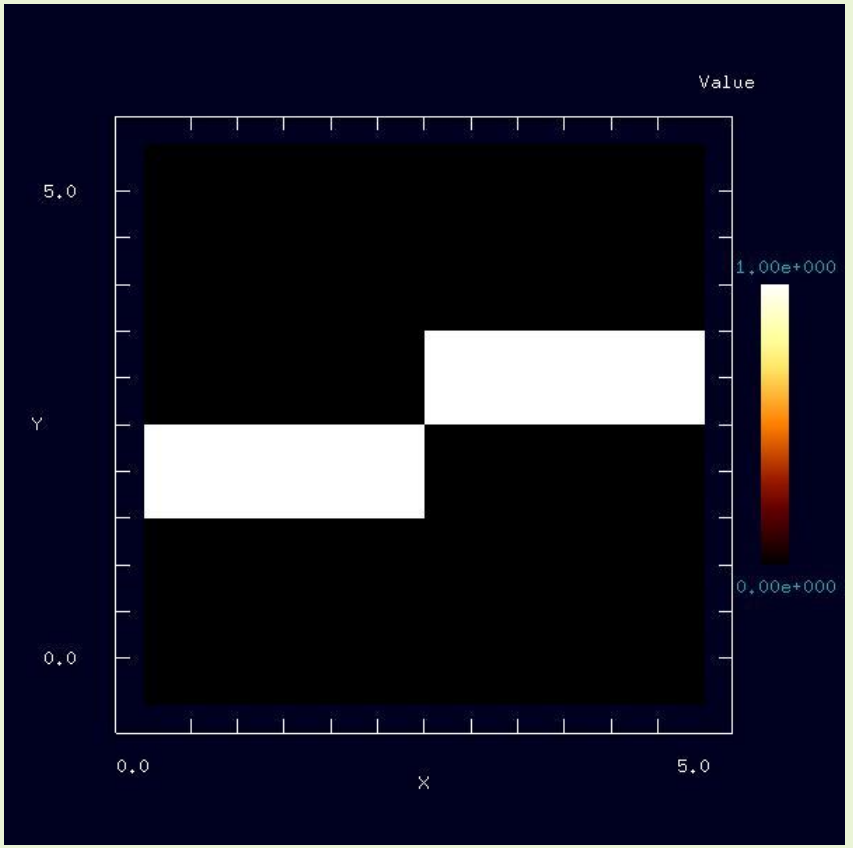
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を5等分した中で、下から2番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、5×5の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は100等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-170.1997[Hz]
位相シフトの観測値を-0.00056303[radian]
粘性抵抗を12.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

真空環境下を仮定

ヤング率：74.0～89.0[GPa]
表面張力：0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ：-0.07～0.29[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、10等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：74.09[GPa]
表面張力：0.239792[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.11581[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

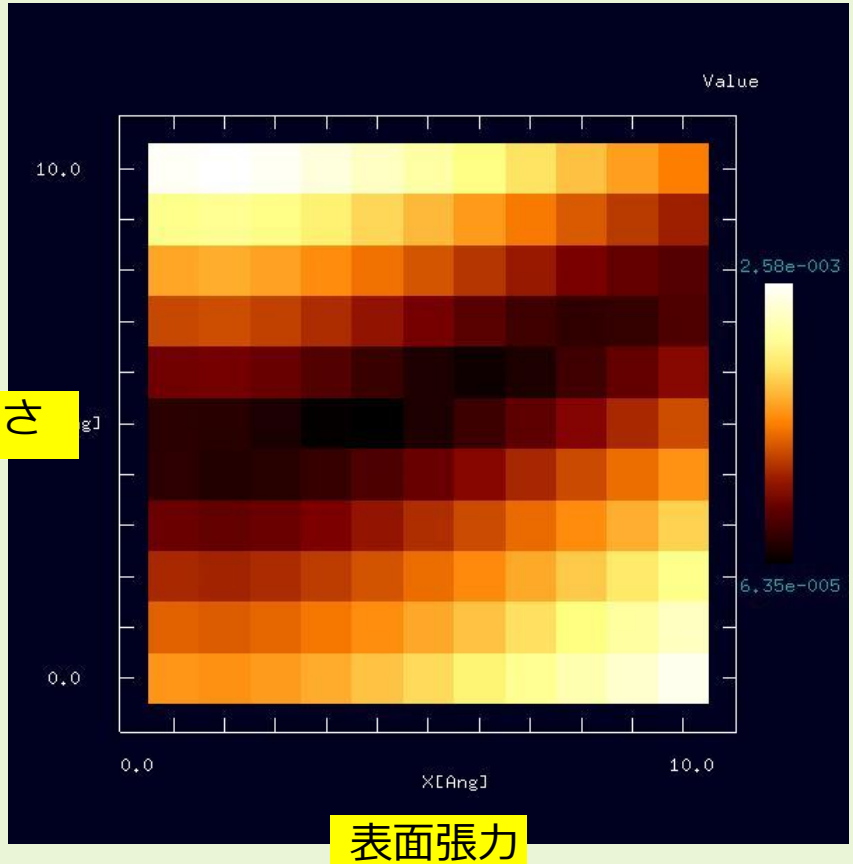
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

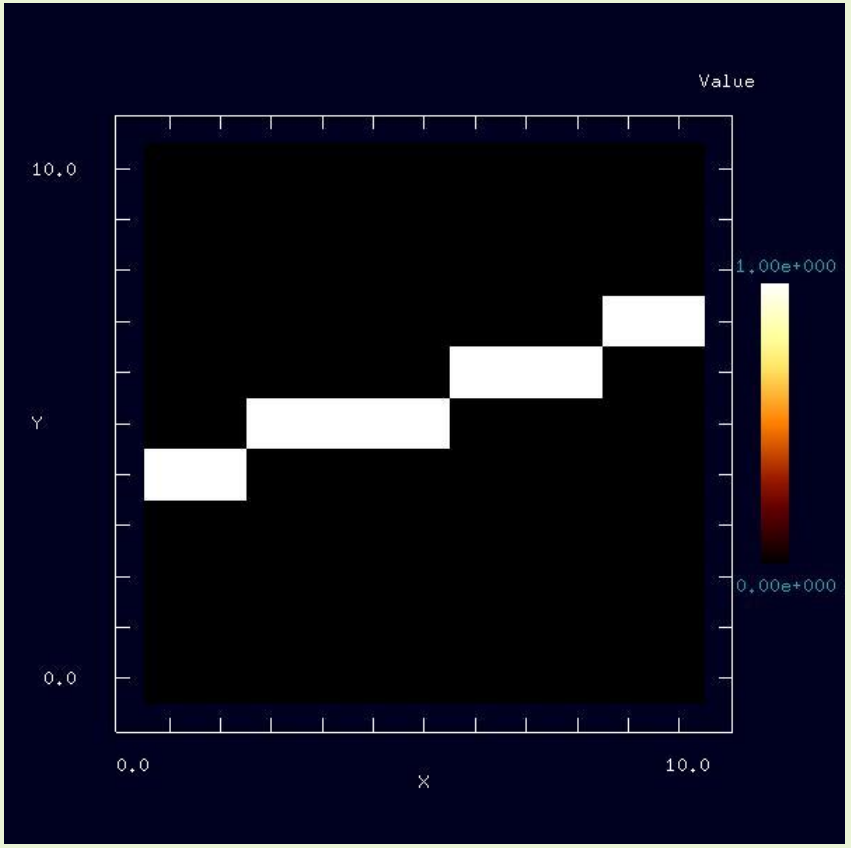
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を10等分した中で、下から0番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、10×10の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は200等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-170.1997[Hz]
位相シフトの観測値を-0.00056303[radian]
粘性抵抗を12.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

真空環境下を仮定

ヤング率：74.0～89.0[GPa]
表面張力：0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ：-0.07～0.29[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、20等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：76.2538[GPa]
表面張力：0.246014[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.111499[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

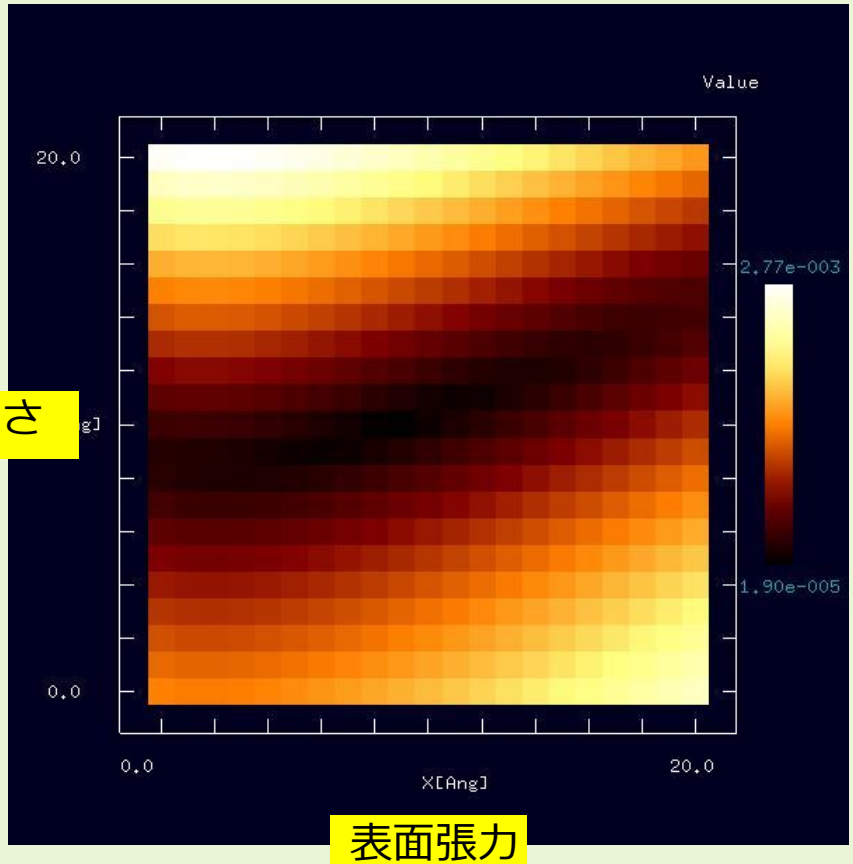
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

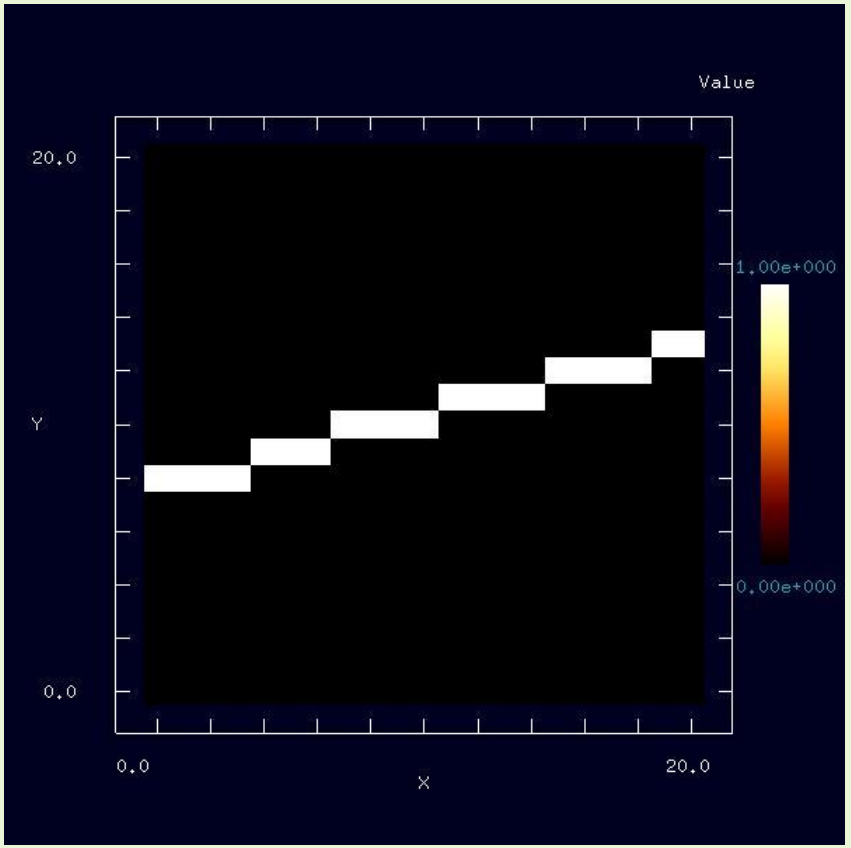
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を20等分した中で、下から4番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、20×20の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は400等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-39.7696[Hz]
位相シフトの観測値を-0.002084433[radian]
粘性抵抗を20.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

真空環境下を仮定

ヤング率：66.0～93.0[GPa]
表面張力：0.27～0.72[N/m]
試料表面の基板からの高さ：-0.3～0.4[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、5等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.5[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：86.52[GPa]
表面張力：0.50985[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.0614274[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

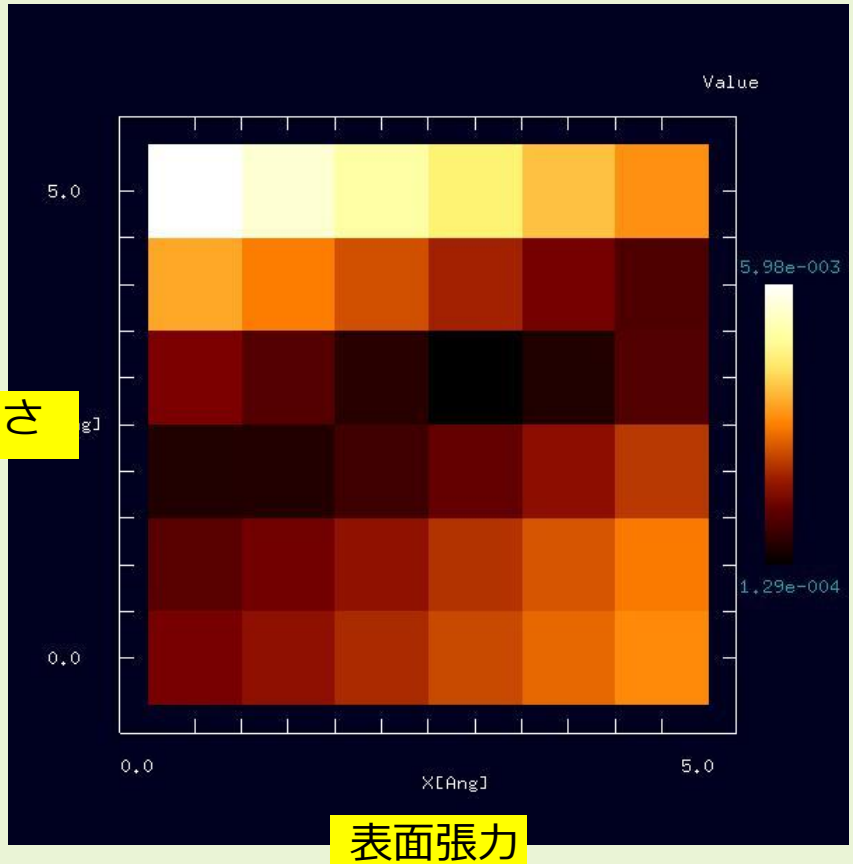
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

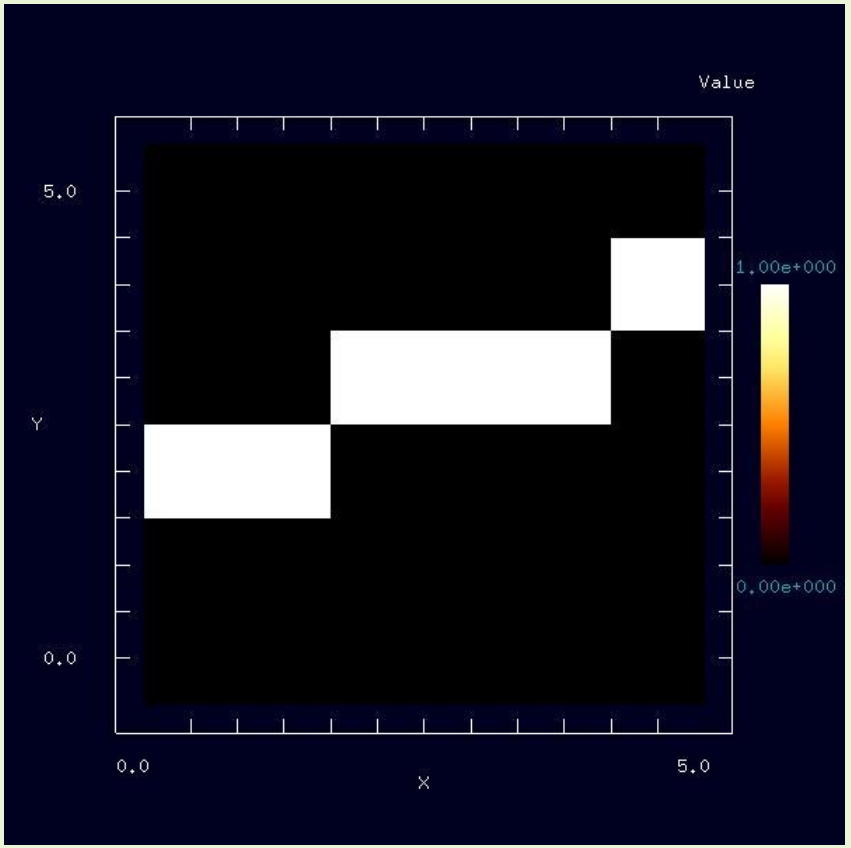
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を5等分した中で、下から3番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、5×5の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は100等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-39.7696[Hz]
位相シフトの観測値を-0.002084433[radian]
粘性抵抗を20.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

真空環境下を仮定

ヤング率：66.0～93.0[GPa]
表面張力：0.27～0.72[N/m]
試料表面の基板からの高さ：-0.3～0.4[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、10等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.5[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：86.8105[GPa]
表面張力：0.486[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.0937295[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

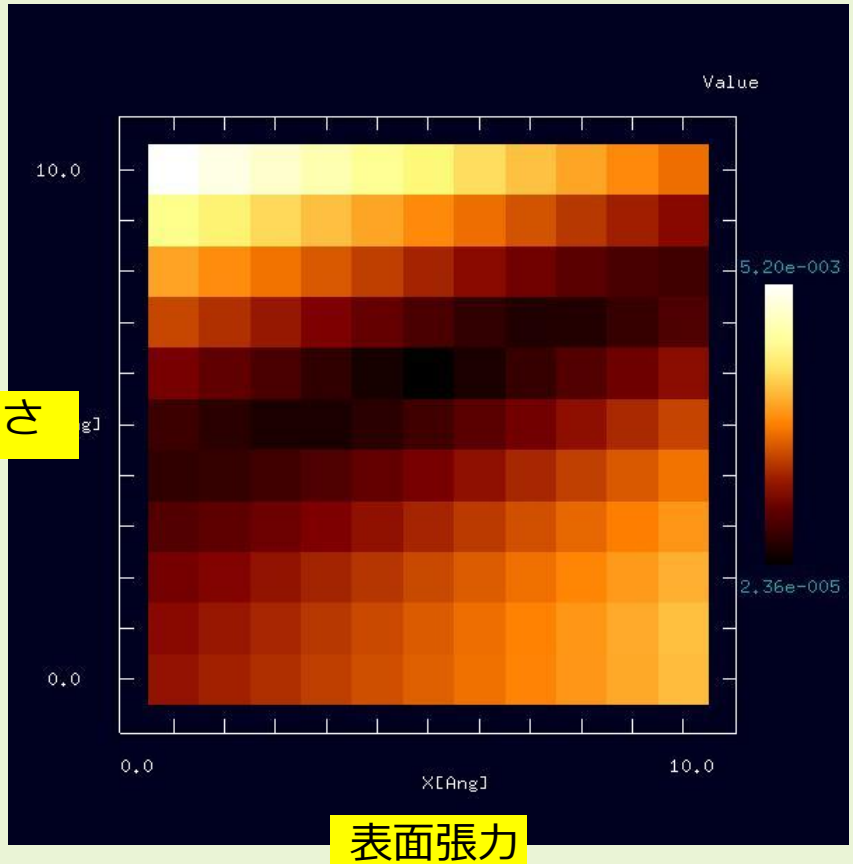
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

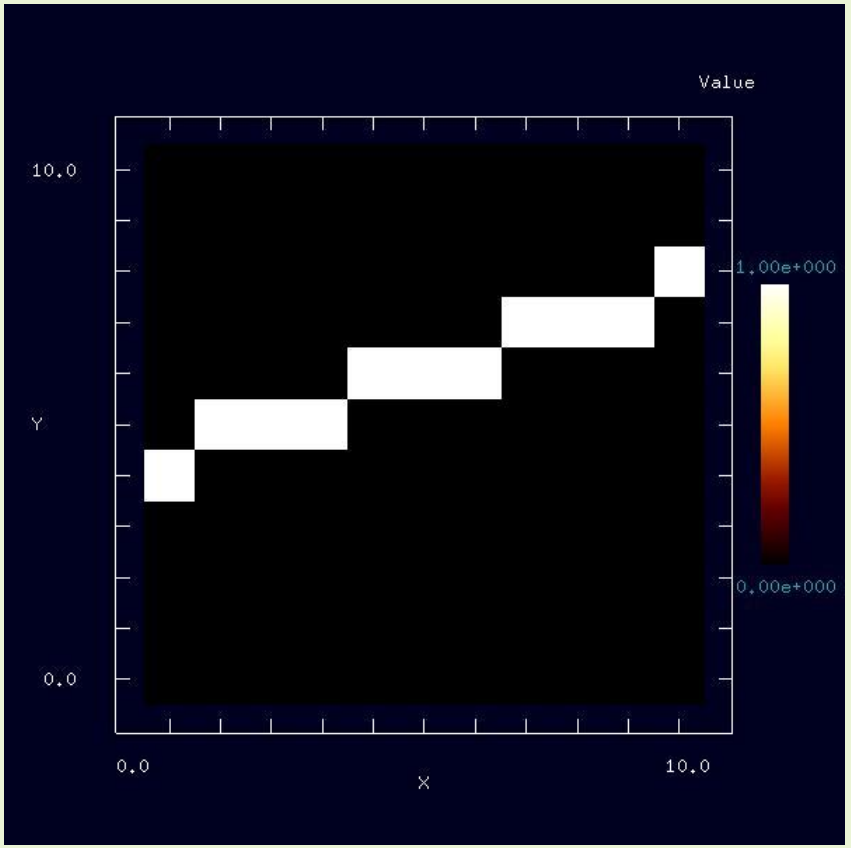
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を10等分した中で、下から3番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、10×10の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は200等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-39.7696[Hz]
位相シフトの観測値を-0.002084433[radian]
粘性抵抗を20.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

真空環境下を仮定

ヤング率：66.0～93.0[GPa]
表面張力：0.27～0.72[N/m]
試料表面の基板からの高さ：-0.3～0.4[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、10等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.5[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：87.6[GPa]
表面張力：0.51975[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.0777739[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

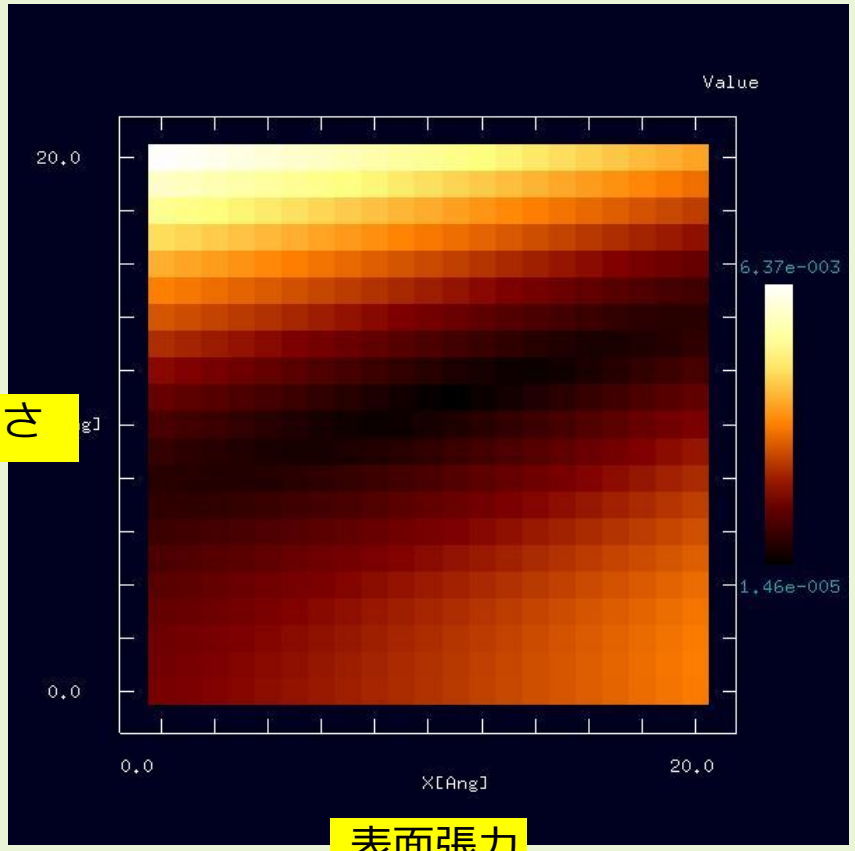
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

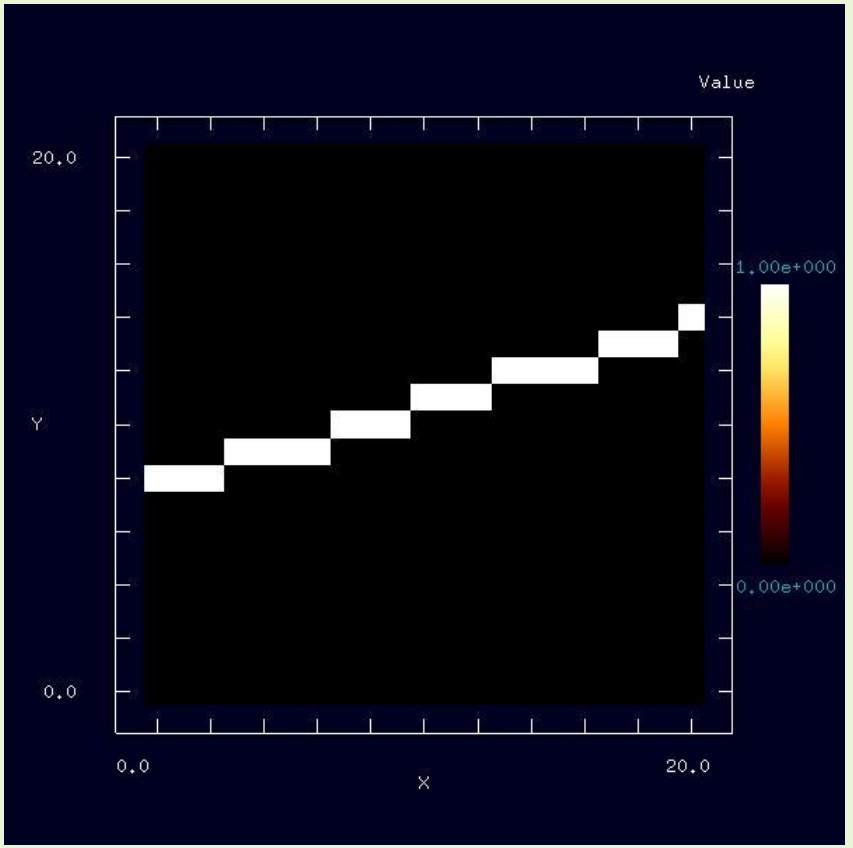
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を20等分した中で、下から15番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、20×20の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は400等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-702.8858[Hz]
位相シフトの観測値を-0.00271521[radian]
粘性抵抗を11.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

真空環境下を仮定

ヤング率：67.0～94.0[GPa]
表面張力：0.1～0.9[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.0～2.7[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、5等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.5[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.5[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：73.588[GPa]
表面張力：0.486[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.537466[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

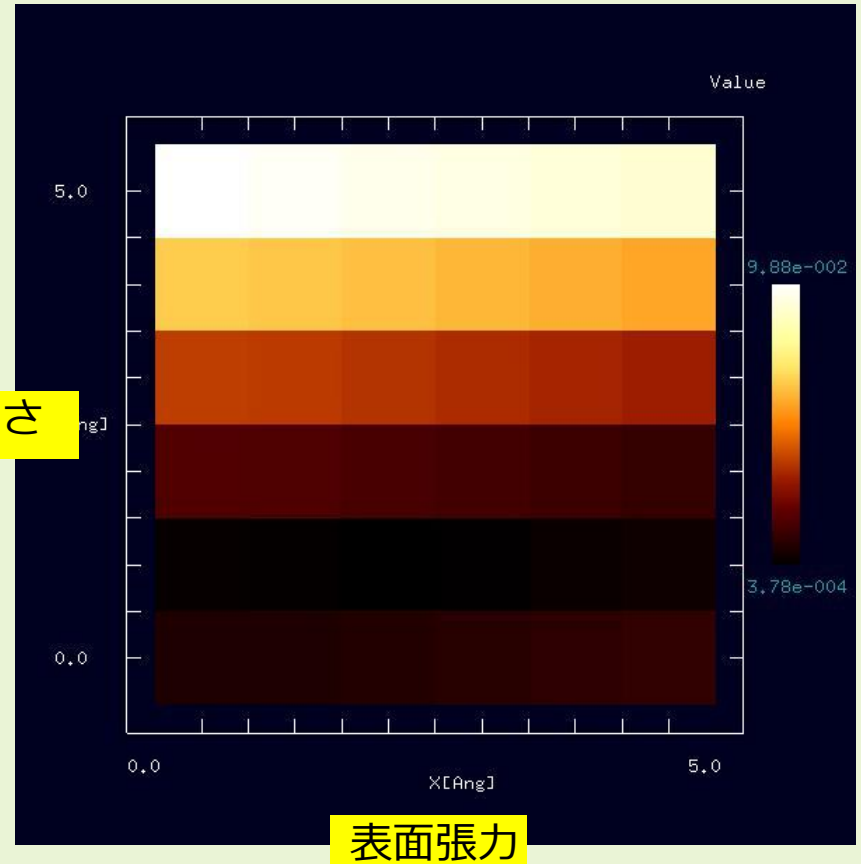
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

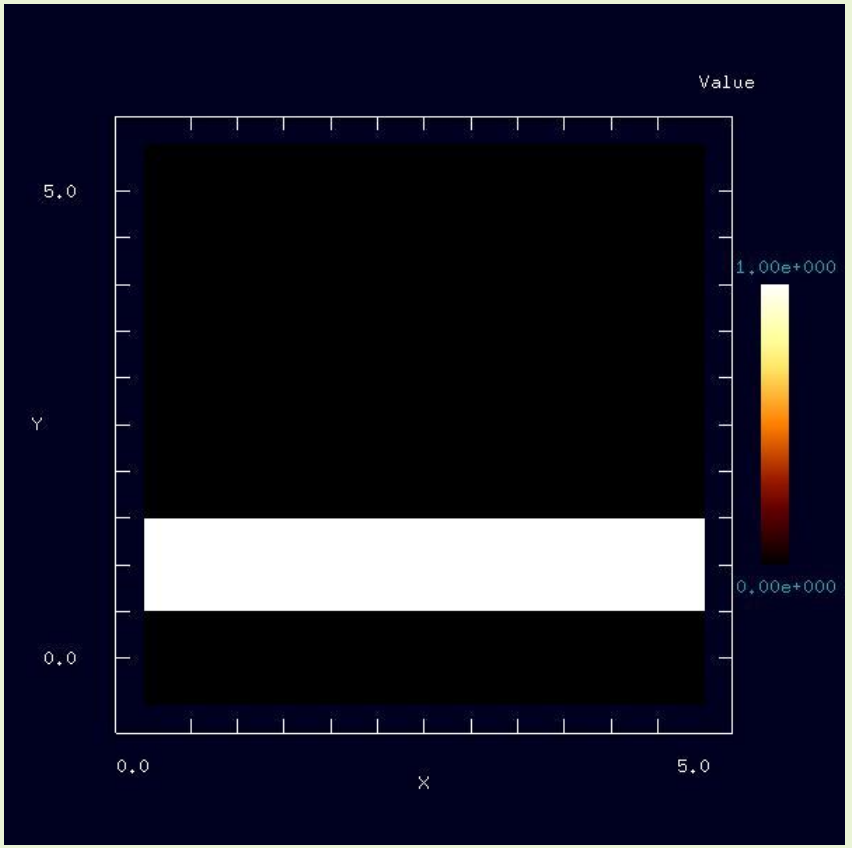
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を5等分した中で、下から1番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、5×5の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は100等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-702.8858[Hz]
位相シフトの観測値を-0.00271521[radian]
粘性抵抗を11.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

真空環境下を仮定

ヤング率：67.0～94.0[GPa]
表面張力：0.1～0.9[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.0～2.7[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、5等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.5[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.5[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：85.927[GPa]
表面張力：0.52404[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.478108[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

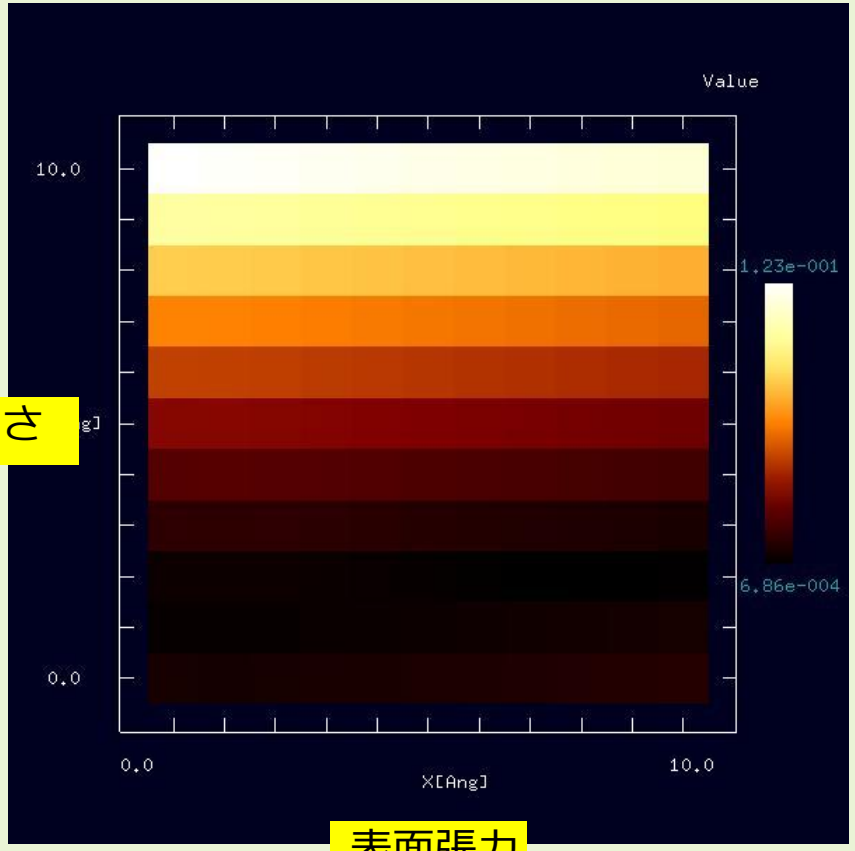
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

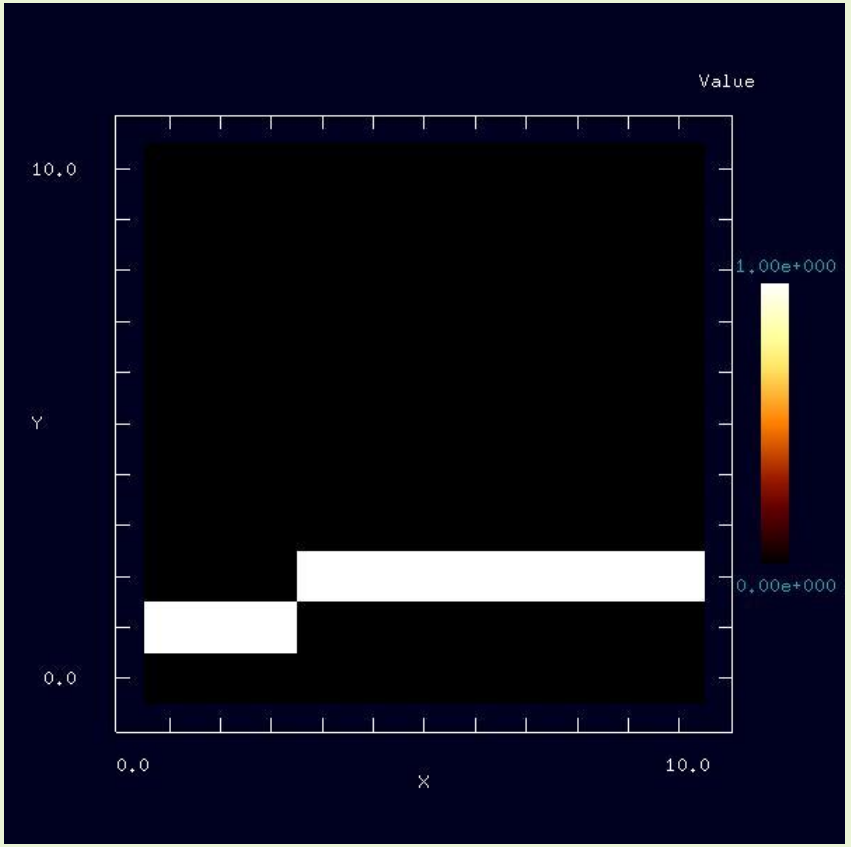
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を10等分した中で、下から8番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、10×10の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は200等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-702.8858[Hz]
位相シフトの観測値を-0.00271521[radian]
粘性抵抗を11.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

真空環境下を仮定

ヤング率：67.0～94.0[GPa]
表面張力：0.1～0.9[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.0～2.7[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、5等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.5[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.5[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：71.8735[GPa]
表面張力：0.4721[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.541311[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

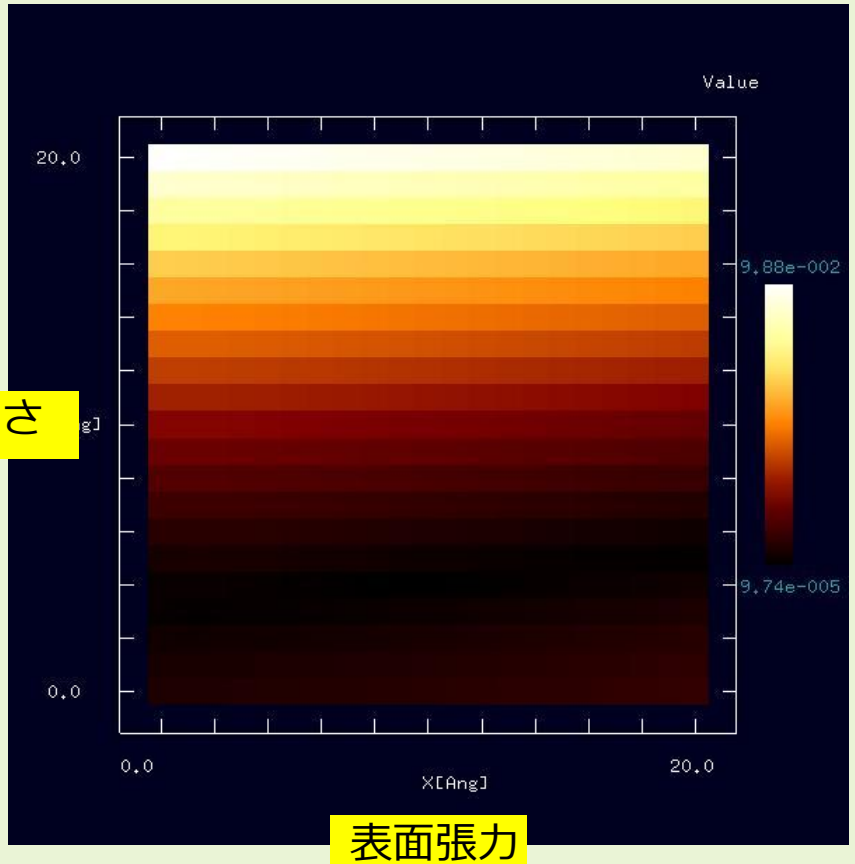
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

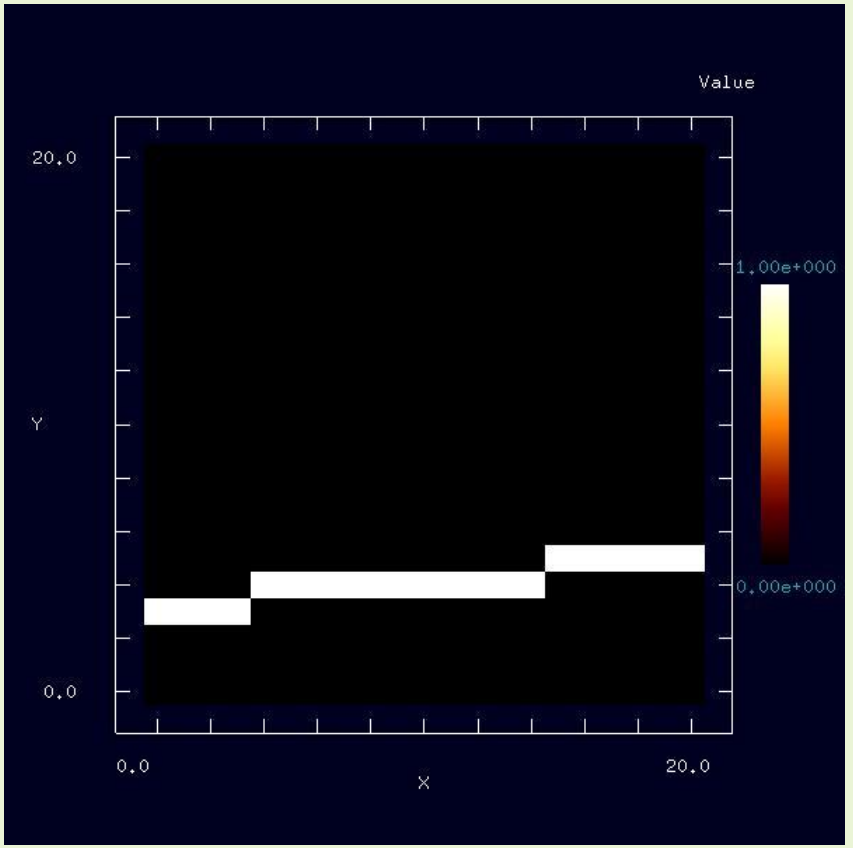
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を20等分した中で、下から4番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、20×20の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は400等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-221.8349[Hz]
位相シフトの観測値を0.0004840706[radian]
粘性抵抗を12.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

液中環境下を仮定

ヤング率：74.0～86.0[GPa]
表面張力：0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ：-0.07～0.29[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

流体の
動粘性率：0.25E-6[m^2/s]
密度：200[kg/m^3]

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、5等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：74.048[GPa]
表面張力：0.244464[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.121365[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

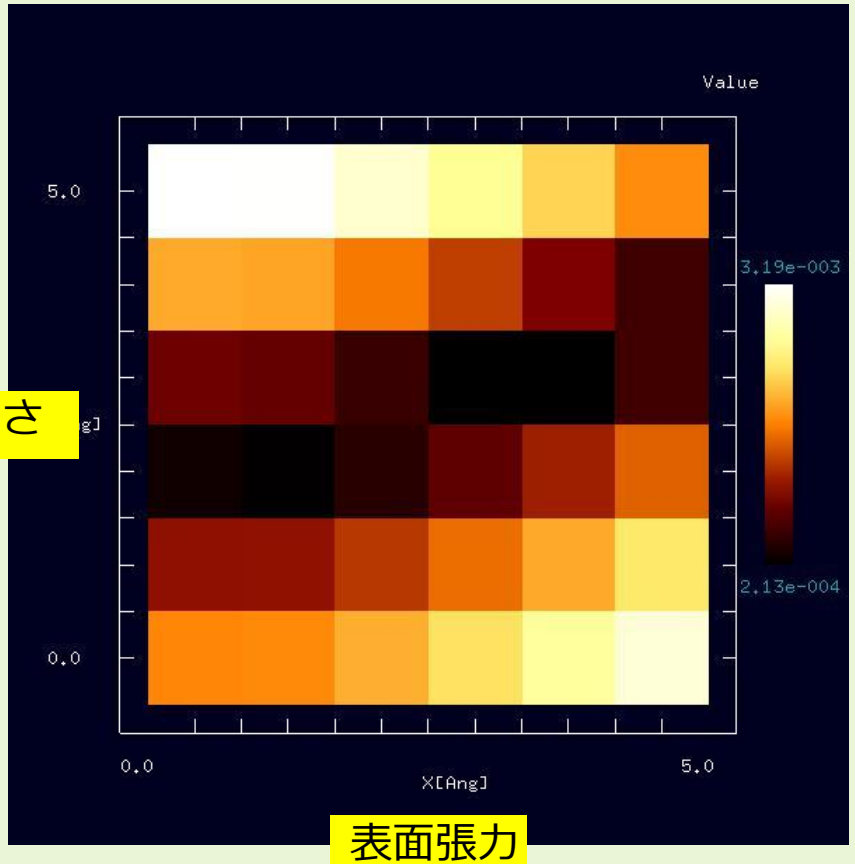
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

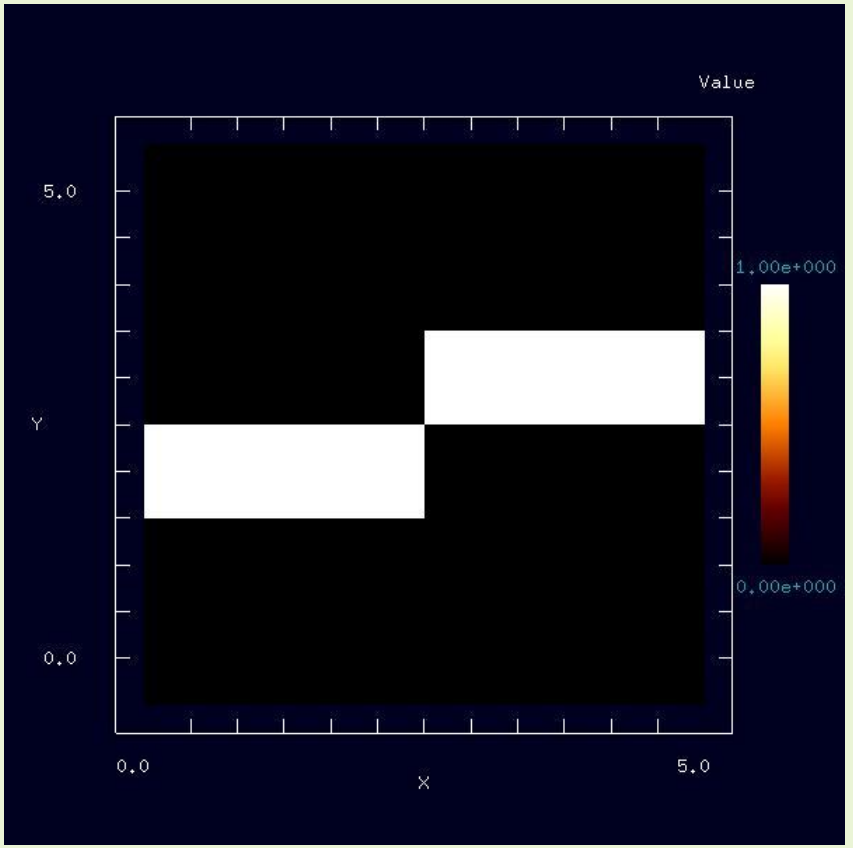
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を5等分した中で、下から1番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、5×5の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は100等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-221.8349[Hz]
位相シフトの観測値を0.0004840706[radian]
粘性抵抗を12.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

液中環境下を仮定

ヤング率：74.0～86.0[GPa]
表面張力：0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ：-0.07～0.29[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

流体の
動粘性率：0.25E-6[m^2/s]
密度：200[kg/m^3]

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、10等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：77.612[GPa]
表面張力：0.258848[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.111858[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

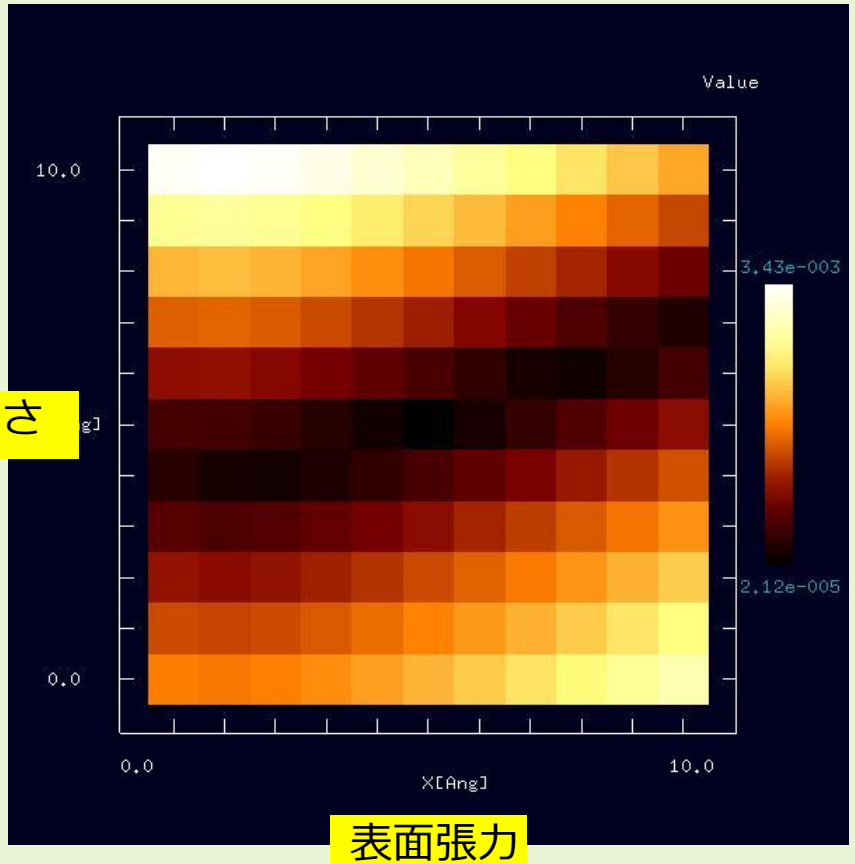
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

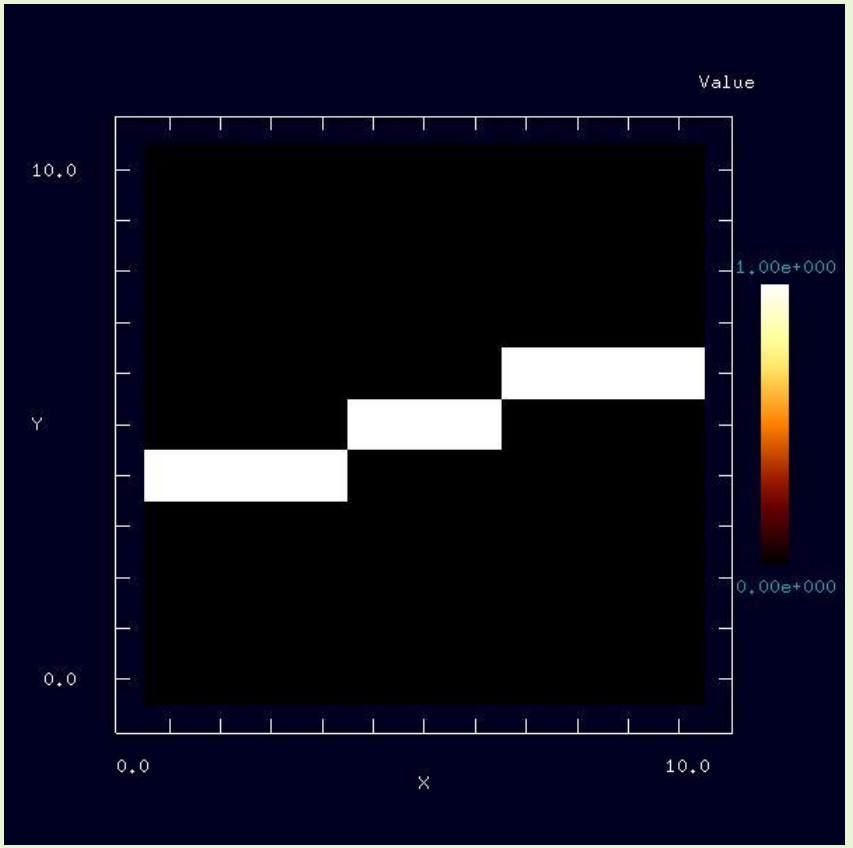
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を10等分した中で、下から4番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、10×10の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は200等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

周波数シフト、位相シフトから、ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを逆算する

周波数シフトの観測値を-221.8349[Hz]
位相シフトの観測値を0.0004840706[radian]
粘性抵抗を12.0[N/m]
ポアソン比を0.3とする

液中環境下を仮定

ヤング率：74.0～86.0[GPa]
表面張力：0.11～0.43[N/m]
試料表面の基板からの高さ：-0.07～0.29[nm]
として、LiqAFMタッピング機能でずれ関数を計算して、ずれ関数が最小となる点を探索する

流体の
動粘性率：0.25E-6[m^2/s]
密度：200[kg/m^3]

ヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さの範囲を、20等分する。

正解は、以下の値である
ヤング率：80.0[GPa]
表面張力：0.25[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.1[nm]

この計算例では、以下の結果を得た
ヤング率：82.403[GPa]
表面張力：0.258816[N/m]
試料表面の基板からの高さ：0.0960562[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数として、以下を定義する

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

$\Delta\nu$ ：シミュレーション計算で得た周波数シフト

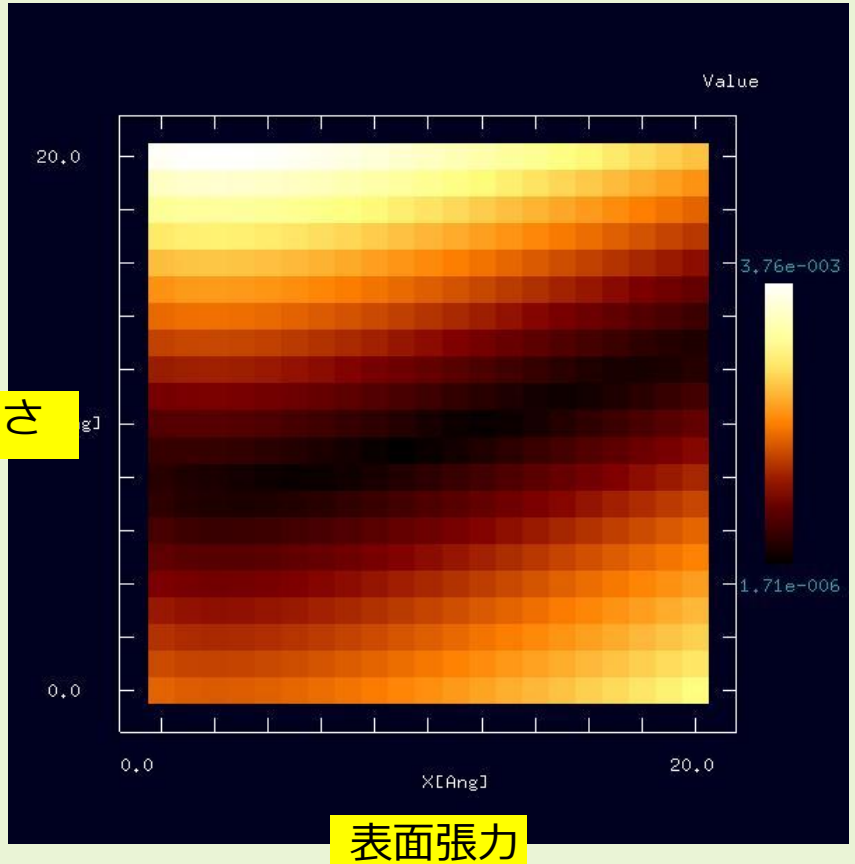
$\Delta\nu_{\mathrm{obs}}$ ：観測値として得られた周波数シフト

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

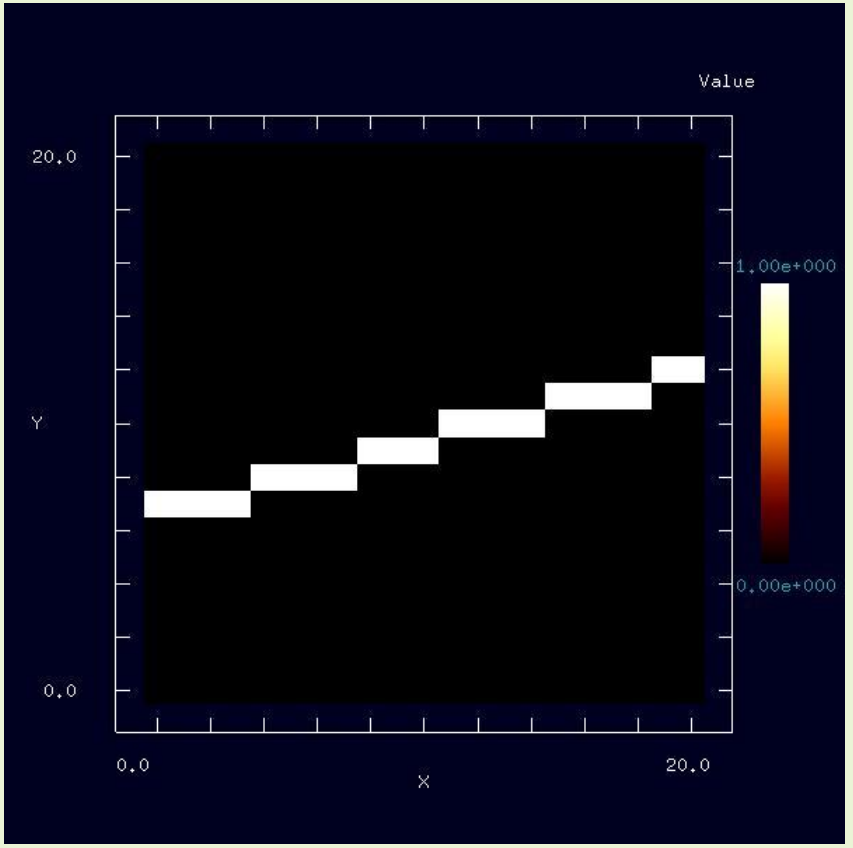
上記のずれ関数の値を最小にするようなヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めたいとする



高さ

表面張力

ヤング率の範囲を20等分した中で、下から15番目の値での、表面張力、試料表面の基板からの高さの2次元パラメータ空間を表したグラフである。ずれ関数の値が小さな領域が帯状に見える。



ずれ関数値が小さな帯状の領域に対して、最小二乗法でフィッテイングして得られた直線を表したグラフである。直線は、20×20の格子点上に描かれているので折れ線グラフのように見えるが、計算上は直線である。

直線は400等分して、ずれ関数値の最小点を探索する

SPM計算事例集&ニーズ/機能適応・類似計算例選択リスト

初心者(ユーザー)が希望する計算案件は右を満足させる必要がある

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	Blind Reconstruction法による探針形状推定	表面科学全般	Analyzer	SPM実験画像から探針形状を推定する逆問題のため、可能な探針形状は無数に存在する。そのため、パラメータを指定することで、ユーザーの好みの探針形状が選択できるようにされている。

類似計算例選択リスト

見方

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	Blind Reconstruction法による探針形状推定	表面科学全般	Analyzer	SPM実験画像から探針形状を推定する逆問題のため、可能な探針形状は無数に存在する。そのため、パラメータを指定することで、ユーザーの好みの探針形状が選択できるようにされている。

類似計算例選択リスト

【Analyzer】探針形状推定と探針影響除去

Blind Tip Reconstruction Methodにより、SPM実験データ画像から探針形状を推定し、この探針形状に関する情報を使って、オリジナルのSPM実験データ画像からアーティファクトを除去します。
先端が二股になった不完全な探針による人工的な立体構造のAFM像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルAFM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する
「操作の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

SPM実験画像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルSPM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する
「操作の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

SPM計算事例集&ニーズ/機能適応・類似計算例選択リスト

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	Blind Reconstruction法による探針形状推定	表面科学全般	Analyzer	SPM実験画像から探針形状を推定する逆問題のため、可能な探針形状は無数に存在する。そのため、パラメータを指定することで、ユーザーの好みの探針形状が選択できるようにされている。

【Analyzer】探針形状推定と探針影響除去

Blind Tip Reconstruction Methodにより、SPM実験データ画像から探針形状を推定し、この探針形状に関する情報を使って、オリジナルのSPM実験データ画像からアーティファクトを除去します。
先端が二股になった不完全な探針による人工的な立体構造のAFM像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルAFM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する

「操作の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

SPM実験画像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルSPM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する

「操作の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【Analyzer】探針形状推定・探針影響除去(1)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	SPM実験画像からのアーティファクト除去	表面科学全般	GeoAFM	Analyzerによって得られた推定探針形状をデータとして保存し、これと実験画像データを組み合わせることで、試料のオリジナル画像を得ることが可能となる。

【GeoAFM】探針形状データ、測定AFM像データから、試料表面形状を求めるモード

・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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像から、アーティファクトを除去した試料画像をシミュレーションによって求めたものです。

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【Analyzer】探針形状推定・探針影響除去(1)

【Analyzer】探針形状推定・探針影響除去(2)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	ニューラルネットワーク学習による、試料のオリジナル画像の推定	表面科学全般	Analyzer	SPM実験画像を元にして、探針の性質をニューラルネットワーク学習する。同一の探針で得られた実験画像であれば、試料のオリジナル画像を復元可能。

【Analyzer】ニューラルネットワーク学習法による像補正

ニューラルネットにより探針の描くSPM画像の特徴を学習し、この学習データを元に、探針によって生じたSPM画像のアーティファクトを除去します。
理想的な探針によるコラーゲン分子のAFM像と、先端が二股になった不完全な探針によるコラーゲン分子のAFM像を元にして、ニューラルネットワーク学習を行い、先端が二股になった不完全な探針によるポリマー高分子AFM像のアーティファクトを除去する

「操作の様子(前半)」
「操作の様子(後半)」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針形状推定	ステップのある標準試料を使った探針キャリブレーション	表面科学全般	GeoAFM	標準試料のオリジナル画像とSPM実験画像から、探針画像を高速で再現。

【GeoAFM】試料表面形状データ、測定AFM像データから、探針形状を求めるモード

・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG(HighlyOriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、GroEL(シャペロニン)のAFM像、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。)

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・Si(111)-(7×7)DAS構造のAFM像、および、結晶原子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
カンチレバー振幅の絶対値評価	実験で得られるフォースカーブにおいて、レバー/ピエゾ変位の校正直線を使って求められる振幅を、シミュレーション結果と比較したい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	LiqAFM	カンチレバーの振動解析により振幅を評価することが可能。

【LiqAFM】パラメータ･スキャンモード

・真空中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の無い短冊形状としています。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定･出力ファイル(Zip)

・液体中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の2個開いた短冊形状としています。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定･出力ファイル(Zip)

・液体中で振動する三角形状のカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定･出力ファイル(Zip)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
試料表面構造パラメータ自動推定	試料表面の傾斜を補正したい	表面科学全般	Analyzer	傾斜補正機能対応済みである。

【Analyzer】実験データの読み込み、基板面の傾き補正、および、立体表示機能

各メーカーのSPM実験装置から出力されたバイナリ形式の生の実験データを読み込み、基板面の傾斜を補正し、画像を立体表示します。

RHK Technology Inc.のsm4形式のSPM実験データを読み込む
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Agilent Technologies (Molecular Imaging)のstp形式のSPM実験データを読み込む(その1)
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Agilent Technologies (Molecular Imaging)のstp形式のSPM実験データを読み込む(その2)
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Asylum Researchのibw形式のSPM実験データを読み込む
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その1)
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その2)
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その3)
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

【Analyzer】デジタル画像処理機能(3)

<table>
<tr><th>ニーズ/機能</th><th>ニーズ詳細</th><th>適応分野</th><th>適応ソルバ</th><th>コメント</th></tr>
<tr><td rowspan="2">試料表面構造パラメータ自動推定</td><td>試料表面の構造をXYZ座標データに変換したい</td><td>表面科学全般</td><td>Analyzer,
GeoAFM</td><td>実験画像データを、独自のデータファイル形式(.cube)で保存することで可能。</td></tr>
<tr><td>結晶格子の長さ、角度、断面の様子を知りたい</td><td>無機材料、特殊合金、無機・有機半導体</td><td>Analyzer</td><td>SPM実験画像上において、マウスで2点を指定してその間の長さ、断面図を、3点を指定して角度を、計測・表示することが可能である。</td></tr>
<tr><td colspan="4">【Analyzer】断面図の表示
SPMデータ画像上に2点を指定して、その2点を結ぶ線分での断面図を表示します。
「操作の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル

【Analyzer】3点で表示される角度の計測
SPMデータ画像上において、3点A, B, Cを指定することにより、線分AB、線分BCの長さ、∠ABCの角度を測定します。
Si(111)-(7×7)DAS構造のSPM実験画像上に、三点A, B, Cを指定して、線分AB、線分BCの長さ、および∠ABCを測定する
「操作の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【Analyzer】Si(111)-(7x7)DASの実測・計算の比較例</td></tr>
</table>

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
SPM実験データ画像の読み込み	様々なメーカーのSPM実験装置から出力されるバイナリデータを画像表示したい	表面科学全般	Analyzer	Unisoku, Omicron, Asylum, JEOL, Agilent, Shimadzuなど主要SPMメーカーのデータ形式に対応済み。

【Analyzer】実験データの読み込み、基板面の傾き補正、および、立体表示機能

各メーカーのSPM実験装置から出力されたバイナリ形式の生の実験データを読み込み、基板面の傾斜を補正し、画像を立体表示します。

RHK Technology Inc.のsm4形式のSPM実験データを読み込む
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Agilent Technologies (Molecular Imaging)のstp形式のSPM実験データを読み込む(その1)
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Agilent Technologies (Molecular Imaging)のstp形式のSPM実験データを読み込む(その2)
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Asylum Researchのibw形式のSPM実験データを読み込む
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その1)
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その2)
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

Omicronのpar形式のSPM実験データを読み込む(その3)
- 「操作の様子」
- 計算手順書(Excel)
- 設定・出力ファイル(Zip)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
カンチレバー形状	様々な形状のカンチレバー、多数の孔の開いたカンチレバーなどの、構造特性を知りたい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	LiqAFM	カンチレバー形状指定機能を充実させており、対応済み。

【LiqAFM】パラメータ･スキャンモード

・真空中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の無い短冊形状としています。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定･出力ファイル(Zip)

・液体中で振動するカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。カンチレバーは孔の2個開いた短冊形状としています。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定･出力ファイル(Zip)

・液体中で振動する三角形状のカンチレバーの共鳴曲線を求め、共振周波数を決定します。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定･出力ファイル(Zip)

【LiqAFM】液中カンチレバーの固有振動解析

【LiqAFM】非粘弾性試料解析モード

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
エネルギー散逸	探針ー試料間の相互作用によるエネルギーの散逸に関する情報を得たい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	FemAFM, CG, DFTB	周波数シフトAFM像のシミュレーションに関して対応済み。

【FemAFM】周波数シフト像モード

・Si(001)表面の周波数シフトAFM像をシミュレーションによって求めたものです。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示 」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・HOPG(HighlyOriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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)の周波数シフトAFM像をシミュレーションによって求めたもの。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・Collagen(Collagen alpha-1(III) chain)の周波数シフトAFM像をシミュレーションによって求めたもの。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・Collagen(COLLAGEN ALPHA 1)の周波数シフトAFM像をシミュレーションによって求めたもの。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【CG】高さ一定・ノンコンタクトモード

探針を振動させながら高さ一定で平面上を走査し、探針に作用する力を計算します。周波数シフト像を得ることができます。

・CO探針による、ペンタセン分子の周波数シフト像シミュレーション

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
SPM実験データのデジタル画像処理	実験データ画像に対して、以下のデジタル加工を施したい •3D表示 •非線形コントラスト調整 •ノイズ除去 •エッジ抽出 •フーリエ変換による特定周波数成分の強調表示		Analyzer	Analyzerには、様々なデジタル画像処理機能が実装済みである。

【Analyzer】コントラスト調整機能

ガンマ補正により、SPMデータ画像に対してコントラスト調整を行います。

「操作の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【Analyzer】ノイズ除去機能

メディアンフィルタ処理により、SPMデータ画像に対してノイズ除去できます。

「操作の様子」
計算手順書
設定・出力ファイル(Zip)

【Analyzer】エッジ抽出機能

Sobelフィルタにより、SPMデータ画像に対してエッジ抽出できます。

「操作の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【Analyzer】画像のフーリエ解析

SPM実験画像データをフーリエ解析し、特定の周波数成分を強調した図に変換します。
SPM実験データ画像をフーリエ解析することにより高周波を強調した画像に変換する

「操作の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

SPM実験データ画像をフーリエ解析することにより低周波を強調した画像に変換する

「操作の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

SPM実験データのデジタル画像処理	実験データ画像に対して、以下のデジタル加工を施したい •3D表示 •非線形コントラスト調整 •ノイズ除去 •エッジ抽出 •フーリエ変換による特定周波数成分の強調表示	【Analyzer】画像のフーリエ解析 【Analyzer】画像のフーリエ解析・高解像度化 【Analyzer】デジタル画像処理機能(1)

<table>
<tr><th>ニーズ/機能</th><th>ニーズ詳細</th><th>適応分野</th><th>適応ソルバ</th><th>コメント</th></tr>
<tr><td rowspan="3">KPFM対応</td><td rowspan="2">半導体表面のドーパントの位置、電子状態、深さ方向の分布について調べたい</td><td>無機・有機半導体</td><td>DFTB</td><td>DFTBにより、KPFMシミュレーションが実行可能。</td></tr>
<tr><td colspan="3">【DFTB】KPFMモード
・KPFMを用いて、不純物の窒素でドープさせたSi(001)面の局所接触電位差像(LCPD像)を計算したものです。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)
・KPFMを用いて、TiO_2(110)表面のLCPD像を計算したものです。
(*)この計算を実行するためには、別途、チタン(Ti)と白金(Pt)のパラメータを購入していただく必要があります。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像</td></tr>
<tr><td>AFM, KPFM同時測定をシミュレーションしたい</td><td>無機・有機半導体</td><td>DFTB</td><td>DFTBにより、周波数シフトAFM像、KPFM像をシミュレーション可能。</td></tr>
<tr><td colspan="3">【DFTB】周波数シフトAFM像、KPFM像の計算例
【DFTB】Olympiceneの周波数シフトAFMシミュレーション</td></tr>
</table>

<table>
<tr><th>ニーズ/機能</th><th>ニーズ詳細</th><th>適応分野</th><th>適応ソルバ</th><th>コメント</th></tr>
<tr><td rowspan="4">原子モデリング・ツール機能の充実</td><td rowspan="2">実験対象試料として、ユーザーの好みに応じて、自由に原子種を選んで、結晶薄膜構造モデルを作成したい</td><td>無機半導体、特殊合金、無機材料一般</td><td>SetModel</td><td>SetModelを使えば、簡単に結晶構造モデルを作成可能。</td></tr>
<tr><td colspan="3">"New Slab"タブのその他の機能 [動画] [操作手順書] [関連ファイル]
・ミラー指数の設定方法
・空いている結合の手を水素終端する方法
・結晶構造情報のAtom Positionsの編集方法
【SetModel】原子モデル作成　欠陥のあるグラファイトの作成
【SetModel】原子モデル作成　カーボンナノチューブモデルの作成</td></tr>
<tr><td rowspan="2">実験対象探針として、ユーザーの好みに応じて、自由に原子種を選んで、立体構造モデルを作成したい</td><td>無機半導体、特殊合金、無機材料一般</td><td>SetModel</td><td>SetModelを使えば、簡単に探針構造モデルを作成可能。</td></tr>
<tr><td colspan="3">シリコンクラスターの探針モデルの作り方 [動画] [操作手順書] [関連ファイル]</td></tr>
</table>

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
高分子(タンパク質、DNAなど)のAFM像	高分子構造をProtein Data Bank等から取り込み、AFM像シミュレーションを行いたい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	GeoAFM, FemAFM	GeoAFM, FemAFMでは、Protein Data Bankに登録されているデータを読み込み、これを実験試料としてAFMシミュレーション可能

【GeoAFM】探針形状データ、試料表面形状データから、測定AFM像データを求めるモード

・Cone型探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・先端が二股になっている不完全な探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【GeoAFM】試料表面形状データ、測定AFM像データから、探針形状を求めるモード

・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG(HighlyOriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【FemAFM】ノンコンタクトモード

・DNA(Self-assembled Three-Dimensional DNA)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

高分子(タンパク質、DNAなど)のAFM像	【FemAFM】double-tipを使った、HOPG基板上の1-clgのAFM像、周波数シフト像シミュレーション 【GeoAFM】$P2X_4$受容体のAFM像 【GeoAFM】生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション 【GeoAFM】RhodopsinのAFM像 【GeoAFM】液中のtubulinのFM-AFM観察とAFMシミュレーション 【GeoAFM】水溶液中のDNAの直接観察とシミュレーション 【GeoAFM】液中の正方晶リゾチーム単結晶(110)表面の決定 【GeoAFM】回転分子モーターF_1-ATPaseのAFM観察とシミュレーション 【FemAFM】ラクトン系高分子ポリマーのAFMシミュレーション 【FemAFM】ノンコンタクトモード 【GeoAFM】試料とAFM像から探針形状を予測 【GeoAFM】バクテリオロドプシンのAFM像 【GeoAFM】タバコモザイクウィルスのAFM像 【FemAFM】DNAのAFM像、周波数シフトAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
試料表面の粘弾性の取り扱い	大気中で、探針ー試料間の粘弾性接触力学を考慮したフォースカーブ等を得たい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	FemAFM	FemAFMにおいて、大気中にでの、試料表面に表面張力で指定される凝着の効果を取り入れた、粘弾性接触力学シミュレーションに対応済み。

【FemAFM】粘弾性接触解析モード

・粘弾性のあるSi(001)表面に探針が凝着する際の、探針の垂直方向の変位、および、探針の感じる外力の時間変化をシミュレーションによって求めたもの。(ばね定数が小さい場合)

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「Excelファイルからのグラフの表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・粘弾性のあるSi(001)表面に探針が凝着する際の、探針の垂直方向の変位、および、探針の感じる外力の時間変化をシミュレーションによって求めたもの。(ばね定数が大きい場合)

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「Excelファイルからのグラフの表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
試料表面の粘弾性の取り扱い	液体中で、探針ー試料間の粘弾性接触力学を考慮したフォースカーブ等を得たい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	LiqAFM	LiqAFMにおいて、液体中での、試料表面に表面張力で指定される凝着の効果を取り入れた、粘弾性接触力学シミュレーションに対応済み。

【LiqAFM】粘弾性試料接触解析モード

・真空中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。真空中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとします。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的小さな値に設定されているとします。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「Excelファイルからのグラフの表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・液体中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。液体中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとします。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的大きな値に設定されているとします。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「Excelファイルからのグラフの表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【LiqAFM】溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較

【LiqAFM】粘弾性接触解析

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
AFM像の高速シミュレーション	ミクロンスケールでの、探針・試料・測定AFM画像の、簡便かつ高速なシミュレーションを行いたい[基板上のC_{60}吸着層(欠陥を含む)、微粒子のAFM像など]	ナノマテリアル、無機材料一般、化学、薬学、バイオサイエンス	GeoAFM	GeoAFMでは、幾何学的手法による、高速相互予測シミュレーションが可能。(あくまで幾何学的手法であり、物理学的な考察は乏しいが、分子・原子の形状を再現し、適用範囲が極めて広い。)

【GeoAFM】生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション

【GeoAFM】標準型および簡易高速型AFMシミュレーションの比較

【GeoAFM】バクテリオロドプシンのAFM像

【GeoAFM】タバコモザイクウィルスのAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
探針・試料の、原子間力による変形効果	探針・試料のファンデルワールス力による変形効果を考慮した、AFMシミュレーションを行いたい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	FemAFM	FemAFMでは、生体材料等の柔らかい物質表面をAFM探針で調べる際の、探針・試料間のファンデルワールス力による変形効果を考慮したシミュレーションが可能 。

【FemAFM】ノンコンタクトモード

・HOPG(HighlyOriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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像をシミュレーションによって求めたものです。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・DNA(Self-assembled Three-Dimensional DNA)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・Collagen(Collagen alpha-1(III) chain)のAFM像をシミュレーションによって求めたもの。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・Collagen(COLLAGEN ALPHA 1)のAFM像をシミュレーションによって求めたもの。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【FemAFM】試料モデルからの相互作用・変形による測定画像の予測

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
構造最適化 AFM像シミュレーション機能	エネルギー的に安定な原子配置の分子に対する、AFMシミュレーション画像を得たい •基板に吸着したポルフィリン、フタロシアニン等やや大きめの分子のAFM像 •金属表面上の自己組織化膜、長鎖分子のAFM像	無機・有機半導体、有機高分子	CG	CGは、古典力場法、分子力学(MM)法によって、エネルギー的に安定な原子配置を探索し、AFM測定における、探針・試料間の相互作用による分子構造の変形を調べることが可能。(安定な構造を見出すだけで、時間変化は調べられない。)

【CG】フォースカーブ測定モード

あるxy位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します。

・カーボンナノチューブ探針による、4つのオクタン分子鎖の構造最適化AFMフォースカーブシミュレーション
この例では試料構造の変形を考慮に入れた計算を行います。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【CG】方解石(calcite, $CaCO_3$)の周波数シフトAFM像

【CG】ポリアセチレン分子の周波数シフトAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
分子動力学 AFM像シミュレーション機能	分子構造の時間変化を調べて、AFMシミュレーションに反映させたい ·TiO_2(110)表面に吸着したギ酸などの分子のAFM像 ·金属表面上の自己組織化膜、長鎖分子のAFM像	無機・有機半導体、有機高分子	MD	MDは、古典分子動力学法に従って、分子構造の時間変化を数値計算し、AFM測定において、探針・試料間の相互作用による分子構造の時間変化を、シミュレーションすることが可能 。
		【MD】1層、2層、3層カーボンナノチューブの側面を押し込んでフォース・カーブを測定 【MD】apo-ferritinの圧縮実験 【MD】GFPの圧縮実験 【MD】MD法によるタンパク質分子の圧縮・伸長実験		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
液体中での原子スケール構造最適化AFM像シミュレーション機能	試料・探針が、液体中環境と相互作用することによって生じる自由エネルギーの変化を考慮した上で、エネルギー的に安定な原子配置の分子に対する、AFMシミュレーション画像を得たい[純水中で、カーボンナノチューブを探針として、グラフェンシートに近付けたときのフォースカーブを調べる、等で有効]	無機・有機半導体、有機高分子	CG-RISM	CGーRISMは、Reference Interaction Site Model (RISM)法の採用により、液体中での、エネルギー的に安定な原子配置の探索を実行する。これにより、AFM測定における、探針・試料間の相互作用による分子構造の変形をシミュレーションすることが可能(。安定な構造を見出すだけで、時間変化は調べられない。)

【CG】フォースカーブ測定モード

あるxy位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します。
・カーボンナノチューブ探針による、グラフェンシートの水中AFMフォースカーブシミュレーション、および真空中AFMフォースカーブシミュレーション

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
「設定項目を再入力、計算、結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイルその1(Zip)
設定・出力ファイルその2(Zip)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
温度の効果を取り入れた、分子動力学AFM像シミュレーション機能	温度の効果による緩和を取り入れた、分子構造の時間変化を調べ、AFMシミュレーションに反映させたい	無機・有機半導体、有機高分子	MD	MDでは、統計力学の原理に従い、温度の効果が、原子の速度に取り入れられる仕様となっています。従って、温度一定の条件下で、分子構造の時間変化を数値計算し、AFMシミュレーションすることが可能となっています。

【MD】緩和計算

シミュレーションの前準備として試料分子の構造の緩和計算を行います。

・ジクロロベンゼンの構造緩和

「設定項目の入力、計算開始、結果の表示」

計算手順書(Excel)

設定・出力ファイル(Zip)

・ポルフィリンの構造緩和

「設定項目の入力、計算開始、結果の表示」

計算手順書(Excel)

設定・出力ファイル(Zip)

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
ソフトマテリアルの周波数シフトAFM像	タンパク質、DNAなどのソフトマテリアルの、 •周波数シフトAFM像をシミュレーションしたい •シフトした周波数の絶対値を評価したい •カンチレバーの運動エネルギーが、試料に緩和されてゆくことを確認したい	ナノマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス	FemAFM, CG, DFTB	FemAFM、CG、および、DFTBは、周波数シフトAFM像シミュレーション機能を備えています。FemAFMは、試料の大きさがμmオーダーの有機高分子などの場合に適しています。CGは、試料の大きさが数十Åオーダーの有機分子などを調べるのに適しています。DFTBは、さらに小さな数Åオーダーの試料を調べるのに適しています。ユーザーの好みに応じて、ソルバーを使い分けることができるようになっています。

【FemAFM】周波数シフト像モード

・Collagen(COLLAGEN ALPHA 1)の周波数シフトAFM像をシミュレーションによって求めたもの。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【CG】カー定モード

平面上の各位置において、探針に作用する力が設定した値と近くなる探針高さを求めます。（水中計算は対応していません。）
・ダイヤモンド探針による、コラーゲン鎖のカー定モードAFM像シミュレーション
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

ソフトマテリアルの周波数シフトAFM像	タンパク質、DNAなどのソフトマテリアルの、 •周波数シフトAFM像をシミュレーションしたい •シフトした周波数の絶対値を評価したい •カンチレバーの運動エネルギーが、試料に緩和されてゆくことを確認したい	【FemAFM】double-tipを使った、HOPG基板上の1-clgのAFM像、周波数シフトAFM像シミュレーション 【CG】ペンタセンキノン分子の周波数シフトAFM像シミュレーション 【CG】ペンタセンのAFM(周波数シフト像)観察とシミュレーション 【FemAFM】ラクトン系高分子ポリマーのAFMシミュレーション 【FemAFM】周波数シフト像モード 【DFTB】ペンタセン分子のAFM, STM観察とシミュレーション 【CG】DNAのNC-AFMシミュレーション 【FemAFM】DNAのAFM像、周波数シフトAFM像 【DFTB】HOPGのSTM像およびAFM像 【CG】HOPGの周波数シフトAFM像 【DFTB】Au(111)基板上の水分子のSTM像およびAFM像 【DFTB】ルブレン分子のSTM像およびAFM像 【CG】ルブレン分子の周波数シフトAFM像 【DFTB】TPD分子のSTM像およびAFM像 【CG】TPD分子の周波数シフトAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
STM, AFMの 高度な シミュレータ	第一原理DFTに基づく 像シミュレーション	ナノマテリアル、 ナノエレクトロ ニクス、表面 物性	DFTB	量子力学的な電子状態の計算に よりSPM像をシミュレート。

【DFTB】AFMモード

・AFMを用いて、水素終端されたSi(001)面を走査した、周波数シフト像を計算したものです。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【DFTB】STMモード

・STMを用いて、水素終端されたSi(001)面から水素を一つ取り除いた表面のトンネル電流像を計算したものです。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・STMを用いて、Si(001)-3x1:H表面のトンネル電流像を計算したものです。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・STMを用いて、Au(001)-5x1表面のトンネル電流像を計算したものです。
(*)この計算を実行するためには、別途、金(Au)のパラメータを購入していただく必要があります。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

STM, AFMの 高度な シミュレータ	第一原理DFTに基づく 像シミュレーション	【DFTB】RuO_2(110)表面のSTM像 【DFTB】Bardeenの摂動法とDFTB法によるSTM像のシミュレーション 【DFTB】ポルフィリンのSTM像 【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション 【DFTB】ペンタセン分子のAFM, STM観察とシミュレーション 【DFTB】Si(111)√3×√3-AgのSTM像 【DFTB】Ag(111)上のBi原子のSTM像 【DFTB】Ag(111)√3×√3-BiのSTM像 【DFTB】銅フタロシアニンのトンネル電流像 【DFTB】C_6Br_6モノレイヤーのSTMシミュレーション 【DFTB】炭化水素$C_{26}H_{14}$のSTMシミュレーション 【DFTB】Olympiceneの周波数シフトAFMシミュレーション 【DFTB】 Mo(111)のconstant current STM像 【DFTB】 InAs-GaSb界面の(110)面のconstant current STM像 【DFTB】 Perylene on Ag(110)のconstant current STM像 【DFTB】 ポリチオフェンワイヤのconstant current STM像 【DFTB】 HOPGのSTM像およびAFM像 【DFTB】 Au(111)基板上の水分子のSTM像およびAFM像 【DFTB】 ルブレン分子のSTM像およびAFM像 【DFTB】 TPD分子のSTM像およびAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
STM, AFMの高度なシミュレータ	測定モード(FM-AFM, STM)毎に原子レベルでのAFM像、STM像、トンネル分光スペクトル、KPFM像を予測	ナノマテリアル、ナノエレクトロニクス、ナノデバイス、量子化学、表面物性	DFTB	STM, STS, AFM, KPFMの4つの測定モードに対応。

【DFTB】AFMモード

・AFMを用いて、水素終端されたSi(001)面を走査した、周波数シフト像を計算したものです。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【DFTB】KPFMモード

・KPFMを用いて、不純物の窒素でドープさせたSi(001)面の局所接触電位差像(LCPD像)を計算したものです。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【DFTB】STMモード

・STMを用いて、水素終端されたSi(001)面から水素を一つ取り除いた表面のトンネル電流像を計算したものです。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【DFTB】STSモード

・STSを用いて、Si(001)-3x1:H表面のトンネル電流分光を計算したものです。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

STM, AFMの 高度な シミュレータ	測定モード(FM−AFM, STM)毎に原子レベルでのAFM像、STM像、トンネル分光スペクトル、KPFM像を予測	【DFTB】RuO_2(110)表面のSTM像 【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像 【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像 【DFTB】TiO_2(110)表面のLCPD像 【DFTB】周波数シフトAFM像、KPFM像の計算例 【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション 【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のSTM像シミュレーション 【DFTB】Au(001)再構成表面のSTM観察とシミュレーション 【DFTB】ペンタセン分子のAFM, STM観察とシミュレーション 【DFTB】TiO_2(110)面のAFM, KPFM観察とシミュレーション 【DFTB】Olympiceneの周波数シフトAFMシミュレーション 【DFTB】Mo(111)のconstant current STM像 【DFTB】InAs-GaSb界面の(110)面のconstant current STM像 【DFTB】Perylene on Ag(110)のconstant current STM像 【DFTB】ポリチオフェンワイヤのconstant current STM像 【DFTB】HOPGのSTM像およびAFM像 【DFTB】Au(111)基板上の水分子のSTM像およびAFM像 【DFTB】ルブレン分子のSTM像およびAFM像 【DFTB】TPD分子のSTM像およびAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
観測中のサンプルをシミュレート	•サンプルの形状変化 •サンプルの動的反応	バイオサイエンス、有機化学	FemAFM, LiqAFM, MD	生体高分子などの連続弾性体はFEM、LIQが対応。オクタンなどの低分子はMDが対応。

【LiqAFM】粘弾性試料接触解析モード

・真空中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。真空中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとします。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的大きな値に設定されているとします。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「Excelファイルからのグラフの表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・真空中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。真空中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとします。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的小さな値に設定されているとします。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「Excelファイルからのグラフの表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・液体中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。液体中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとします。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的大きな値に設定されているとします。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「Excelファイルからのグラフの表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【MD】フォースカーブ測定モード

あるxy位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します。

・オクタン分子のフォースカーブ

「設定項目の入力、計算開始、結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

観測中のサンプルをシミュレート	【FemAFM】試料モデルからの相互作用・変形による測定画像の予測 【MD】apo-ferritinの圧縮実験 【MD】GFPの圧縮実験 【MD】MD法によるタンパク質分子の圧縮・伸長実験 【MD】フォースカーブ測定モード 【MD】高さ一定モード

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
カンチレバーの取り付け角度	探針の角度による影響	バイオサイエンス	GeoAFM, FemAFM, CG, MD, DFTB	GUIで探針の傾きを設定可能。
		【MD】原子分子ナノ材料AFM像シミュレータの活用事例		
	水中計測におけるカンチレバー角度の影響	バイオサイエンス	LiqAFM	カンチレバーの傾きを考慮して水中でのカンチレバーの振動をシミュレート可能。
カンチレバーの環境設定	・大気中で温度、湿度の影響 ・液中で溶液の種類	バイオサイエンス	LiqAFM	大気の温度、湿度の影響、或いは、溶液の種類は流体の密度、粘性で指定可能。
		【LiqAFM】溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較		

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
バイオ関係分子のAFM像	コラーゲン分子のシミュレーション	バイオサイエンス、医学、薬学	GeoAFM, FemAFM, CG, MD	高速で計算するにはGeoAFMが適しており、精密に計算するにはCG, MDが適している。

【GeoAFM】探針形状データ、試料表面形状データから、測定AFM像データを求めるモード

・Cone型探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【FemAFM】ノンコンタクトモード

・Collagen(Collagen alpha-1(III) chain)のAFM像をシミュレーションによって求めたもの。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【CG】カー定モード

平面上の各位置において、探針に作用する力が設定した値と近くなる探針高さを求めます。（水中計算は対応していません。）

・ダイヤモンド探針による、コラーゲン鎖のカー定モードAFM像シミュレーション

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【MD】高さ一定・ノンコンタクトモード

探針を振動させながら高さ一定で平面上を走査し、周波数シフトを計算します。

・ノンコンタクトモードでコラーゲン分子を走査したときの、周波数シフト像を計算します。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

バイオ関係分子のAFM像	コラーゲン分子のシミュレーション	【FemAFM】ノンコンタクトモード 【MD】HOPG基板上のコラーゲンのAFMシミュレーション 【MD】高さ一定･ノンコンタクトモード 【GeoAFM】探針と試料からAFM像を予測 【GeoAFM】試料とAFM像から探針形状を予測

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
バイオ関係分子のAFM像	コラーゲン細繊維、染色体、DNA、アミロイド、微小管、蛋白質のシミュレーション	バイオサイエンス、医学、薬学	GeoAFM, FemAFM	非常に分子量の大きい組織をシミュレートするにはGeoAFMが適している。弾性体として精密に計算するにはFemAFMが適している。

【GeoAFM】探針形状データ、試料表面形状データから、測定AFM像データを求めるモード

・Cone型探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・先端が二股になっている不完全な探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【GeoAFM】試料表面形状データ、測定AFM像データから、探針形状を求めるモード

・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、GroEL(シャペロニン)のAFM像、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。)

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【FemAFM】double-tipを使った、HOPG基板上の1-clgのAFM像、周波数シフトAFM像シミュレーション

【GeoAFM】$P2X_4$受容体のAFM像

【GeoAFM】生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション

バイオ関係分子のAFM像	コラーゲン細繊維、染色体、DNA、アミロイド、微小管、蛋白質のシミュレーション	【GeoAFM】RhodopsinのAFM像 【GeoAFM】液中のtubulinのFM-AFM観察とAFMシミュレーション 【GeoAFM】水溶液中のDNAの直接観察とシミュレーション 【GeoAFM】液中の正方晶リゾチーム単結晶(110)表面の決定 【GeoAFM】回転分子モーターF_1-ATPaseのAFM観察とシミュレーション 【MD】apo-ferritinの圧縮実験 【MD】GFPの圧縮実験 【MD】MD法によるタンパク質分子の圧縮･伸長実験 【GeoAFM】探針と試料からAFM像を予測 【GeoAFM】試料とAFM像から探針形状を予測 【GeoAFM】バクテリオロドプシンのAFM像 【GeoAFM】タバコモザイクウィルスのAFM像 【FemAFM】DNAのAFM像、周波数シフトAFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
高分子化合物の特性	タイヤ(ゴム)、ポリマーのAFM像、フォースカーブ	バイオサイエンス、有機材料	GeoAFM, FemAFM, CG, MD	各ソルバーのAFM像のほかに、FemAFMの粘弾性接触解析、CG、MDのフォースカーブ計算が可能。

【GeoAFM】探針形状データ、試料表面形状データから、測定AFM像データを求めるモード

・ピラミッド型探針を使用した、HOPG(HighlyOriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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、シミュレーションによって求めたものです。

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・先端が二股になっている不完全な探針を使って、HOPG(HighlyOriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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像をシミュレーションによって求めたものです。

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【GeoAFM】探針形状データ、測定AFM像データから、試料表面形状を求めるモード

・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG(HighlyOriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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像から、アーティファクトを除去した試料画像をシミュレーションによって求めたものです。

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【GeoAFM】試料表面形状データ、測定AFM像データから、探針形状を求めるモード

・先端が二股になっている不完全な探針を使って得られた、HOPG(HighlyOriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置された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、および、分子構造データから得られる試料画像データから、探針形状画像をシミュレーションによって求めたものです。

「設定項目の入力、および、計算の様子」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

高分子化合物の特性	タイヤ(ゴム)、ポリマーのAFM像、フォースカーブ	【FemAFM】double-tipを使った、HOPG基板上の1-clgのAFM像、周波数シフトAFM像シミュレーション 【FemAFM】ラクトン系高分子ポリマーのAFMシミュレーション

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
ナノ材料の特性	CNT、グラフェンの形状、硬さ	ナノマテリアル、有機材料	CG, MD	AFM像、フォースカーブの計算が可能。CGは水中フォースカーブにも対応している。

【CG】フォースカーブ測定モード

あるxy位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します。
・カーボンナノチューブ探針による、グラフェンシートの水中AFMフォースカーブシミュレーション、および真空中AFMフォースカーブシミュレーション
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
「設定項目を再入力、計算、結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイルその1(Zip)
設定・出力ファイルその2(Zip)

【MD】細いCNT探針を太いCNT試料の内部に差し込んで、フォース・カーブを測定する

【MD】1層、2層、3層カーボンナノチューブの側面を押し込んでフォース・カーブを測定

【CG】高さ一定モード

【CG】力最小モード

【CG】CNTに対するフォースカーブのヒステリシス

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
サンプルの状態と観測結果	基板上にある分子試料の固定状態	有機化学	CG, MD	CG, MDで構成原子ごとに固定するかしないかを選択可能。MDは分子の時間変化をシミュレート可能。

【CG】フォースカーブ測定モード

あるxy位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します。

・カーボンナノチューブ探針による、4つのオクタン分子鎖の構造最適化AFMフォースカーブシミュレーション

この例では試料構造の変形を考慮に入れた計算を行います。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」

「結果の表示」

計算手順書(Excel)

設定・出力ファイル(Zip)

【MD】緩和計算

シミュレーションの前準備として試料分子の構造の緩和計算を行います。

・ジクロロベンゼンの構造緩和

「設定項目の入力、計算開始、結果の表示」

計算手順書(Excel)

設定・出力ファイル(Zip)

【MD】ブタジエン分子を基板上に並べ、CNT探針を接近させてフォース・カーブを測定

【MD】apo-ferritinの圧縮実験

【MD】GFPの圧縮実験

【MD】MD法によるタンパク質分子の圧縮・伸長実験

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
液中、大気中	液中、大気中での分析	バイオサイエンス	LiqAFM, CG	LiqAFMは液中、大気中の振動解析、粘弾性解析をシミュレート可能。CGは水中フォースカーブをシミュレート可能。

【LiqAFM】粘弾性試料接触解析モード

・液体中での粘弾性解析を考慮したシミュレーションを行います。液体中でカンチレバーを外部から強制的に励振させ、試料に接触させます。試料は粘弾性を持っており、探針と接触すると、表面張力で指定される凝着力が働くとします。探針が試料に接触し、試料内部に押し込まれ、その後、反発して試料表面から離脱するまでの過程での、探針の変位と探針にかかる外力の変化をグラフ化します。カンチレバーのばね定数は、比較的大きな値に設定されているとします。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「Excelファイルからのグラフの表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【CG】フォースカーブ測定モード

あるxy位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します。

・カーボンナノチューブ探針による、グラフェンシートの水中AFMフォースカーブシミュレーション、および真空中AFMフォースカーブシミュレーション

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
「設定項目を再入力、計算、結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイルその1(Zip)
設定・出力ファイルその2(Zip)

【LiqAFM】溶媒を変えたときの粘弾性解析の比較

【LiqAFM】粘弾性接触解析

【CG】高さ一定モード

【CG-RISM】水中のフォースカーブシミュレーション

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
ケルビンプローブフォース顕微鏡の実験画像予測	半導体、金属表面における原子解像度の局所接触電位差像(LCPD像)の予測	表面物性、ナノデバイス、ナノエレクトロニクス	DFTB	Si(001)-c(4x2)、Si(001)-p(2x1):H、Si(111)-(5x5)等の計算を論文発表している。

【DFTB】KPFMモード

・KPFMを用いて、不純物の窒素でドープさせたSi(001)面の局所接触電位差像(LCPD像)を計算したものです。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・KPFMを用いて、TiO_2(110)表面のLCPD像を計算したものです。
(*)この計算を実行するためには、別途、チタン(Ti)と白金(Pt)のパラメータを購入していただく必要があります。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像

【DFTB】TiO_2(110)表面のLCPD像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
半導体表面の仕事関数の分布	半導体表面の局所接触電位差像	無機材料、ナノデバイス、ナノエレクトロニクス	DFTB	不純物を添加したP型、N型半導体表面のケルビンプローブフォース顕微鏡による局所接触電位差像のシミュレート。

【DFTB】KPFMモード

・KPFMを用いて、不純物の窒素でドープさせたSi(001)面の局所接触電位差像(LCPD像)を計算したものです。

「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
金属、半導体などの表面構造	金属、半導体表面のトンネル電流像の予測	無機材料、ナノデバイス、ナノエレクトロニクス	DFTB	Si(001)表面のSTM像、Au(001)表面のSTM像、基板上の分子のSTM像などをシミュレート。

【DFTB】STMモード

・STMを用いて、水素終端されたSi(001)面から水素を一つ取り除いた表面のトンネル電流像を計算したものです。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・STMを用いて、Si(001)-3x1:H表面のトンネル電流像を計算したものです。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

・STMを用いて、Au(001)-5x1表面のトンネル電流像を計算したものです。
(*)この計算を実行するためには、別途、金(Au)のパラメータを購入していただく必要があります。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【DFTB】RuO_2(110)表面のSTM像

【DFTB】Bardeenの摂動法とDFTB法によるSTM像のシミュレーション

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション

<table>
<tr><th>ニーズ/機能</th><th>ニーズ詳細</th><th>適応分野</th><th>適応ソルバ</th><th>コメント</th></tr>
<tr><td rowspan="2">金属、半導体などの表面構造</td><td rowspan="2">半導体、絶縁体表面の周波数シフト像の予測</td><td>無機材料、ナノデバイス</td><td>DFTB</td><td>Si(001)表面のAFM像、TiO2(110)表面のAFM像などをシミュレート。</td></tr>
<tr><td colspan="3">【DFTB】AFMモード
・AFMを用いて、水素終端されたSi(001)面を走査した、周波数シフト像を計算したものです。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)</td></tr>
<tr><td rowspan="2">半導体表面のドーパントの推定</td><td rowspan="2">ドーパント(不純物)の位置、深さ、種類などを数値計算により推定</td><td>無機材料、ナノデバイス、ナノエレクトロニクス、半導体</td><td>DFTB</td><td>不純物を埋め込んだSi表面のSTM像、KPFM像などをシミュレート。</td></tr>
<tr><td colspan="3">【DFTB】KPFMモード
・KPFMを用いて、不純物の窒素でドープさせたSi(001)面の局所接触電位差像(LCPD像)を計算したものです。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像
【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像</td></tr>
</table>

<table>
<tr><th>ニーズ/機能</th><th>ニーズ詳細</th><th>適応分野</th><th>適応ソルバ</th><th>コメント</th></tr>
<tr><td rowspan="4">金属、半導体の物性の推定</td><td rowspan="2">半導体、金属表面の状態密度予測</td><td>無機材料、ナノデバイス、ナノエレクトロニクス</td><td>DFTB</td><td>半導体、金属表面の設定した探針位置での走査トンネル分光(STS)のシミュレート。</td></tr>
<tr><td colspan="3">【DFTB】STSモード
・STSを用いて、Si(001)-3x1:H表面のトンネル電流分光を計算したものです。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)</td></tr>
<tr><td rowspan="2">触媒反応で重要な材料についての物性</td><td>表面物性、触媒化学</td><td>DFTB</td><td>Pt, Ru等の触媒金属表面でのSTS像、KPFM像のシミュレート。</td></tr>
<tr><td colspan="3">【DFTB】KPFMモード
・KPFMを用いて、TiO_2(110)表面のLCPD像を計算したものです。
(*)この計算を実行するためには、別途、チタン(Ti)と白金(Pt)のパラメータを購入していただく必要があります。
「設定項目を入力して、計算を始めるまで」
「結果の表示」
計算手順書(Excel)
設定・出力ファイル(Zip)
【DFTB】TiO_2(110)面のAFM, KPFM観察とシミュレーション</td></tr>
</table>

ニーズ/機能	ニーズ詳細	適応分野	適応ソルバ	コメント
オリジナルの探針形状データの作成／使用	オリジナルの探針形状データの作成／使用	表面科学全般	GeoAFM 計算環境	作成した探針形状データは、GeoAFMおよびFemAFMによる計算に利用できる。

【GeoAFM】オリジナルの探針形状データの作成／使用

探針形状を想定した画像データを作り、それから探針形状データを作成／利用する。