

SPM シミュレータ・ガイドブック

目次

第1章	はじめに	6
1.1	本シミュレータの目的と開発の経緯	6
第2章	SPM シミュレータの概略とソフトウェア構成	7
2.1	SPM シミュレータの構成	7
2.2	SPM シミュレータにおけるソルバー選択の手引き	9
第3章	実験データ画像処理プロセッサ(Analyzer)	13
3.1	実験データの読み込みと一般的な画像処理	13
3.1.a	読み込み可能な実験データのファイルフォーマット一覧	13
3.1.b	基板面の傾き補正	14
3.1.c	画像のフーリエ解析	15
3.1.d	画像の高解像度化(Lanczos 補間法)	19
3.2	ニューラルネットワーク学習法による像補正	21
3.3	探針形状推定と探針影響除去	25
3.3.a	探針形状推定法(Blind Tip Reconstruction Method)の仕組み	25
3.3.b	アーティファクト除去の仕組み	28
3.4	実験データ・シミュレーション結果の比較のための画像処理機能	31
3.4.a	閾値による画像データの二値化	32
3.4.b	コントラストの調整(ガンマ補正)	33
3.4.c	エッジ抽出(Sobel フィルタ)処理	35
3.4.d	ノイズ除去(メディアンフィルタ処理)機能	37
3.4.e	断面図の表示	38
3.4.f	三点で指定される角度の計測	40
3.5	Analyzer 使用法の実際	41
第4章	高速相互予測 AFM シミュレータ(GeoAFM)	45
4.1	探針形状、試料形状、AFM 像の相互予測の仕組み・計算方法の概略	45
4.1.a	探針形状データおよび試料形状データから、AFM 像を推定する	45
4.1.b	探針形状データおよび AFM 像データから、試料形状を推定する	46
4.1.c	試料形状データおよび AFM 像データから、探針形状を推定する	47
4.2	種々の計算実例	47
4.2.a	探針形状データおよび試料形状データから、AFM 像を推定する	47
4.2.b	探針形状データおよび AFM 像データから、試料形状を推定する	48
4.2.c	試料形状データおよび AFM 像データから、探針形状を推定する	50
4.3	GeoAFM 使用法の実際 ー使用手引ー	51
4.3.a	探針形状データおよび試料形状データから、AFM 像を推定する	51
4.3.b	探針形状データおよび AFM 像データから、試料形状を推定する	51
4.3.c	試料形状データおよび AFM 像データから、探針形状を推定する	52
第5章	粘弾性接触問題の取り扱い方法	53
5.1	JKR(Johnson-Kendall-Roberts)理論の概要	53
5.2	ファンデルワールス力と JKR 理論との間の遷移(slip-in と slip-out)	56
5.3	軟らかいカンチレバーの場合	60
5.4	硬いカンチレバーの場合	68
5.5	パラメータ値の調節の難しさ	68
5.6	粘弾性接触力学の取り扱い方法の改良 ー今後の方針ー	69
第6章	連続弾性体 AFM シミュレータ(FemAFM)	71

6.1	連続弾性体模型とは.....	71
6.2	有限要素法による連続弾性体の記述.....	72
6.3	有限要素法による変形と探針・試料間力の計算方法.....	72
6.4	連続弾性体モデルでの周波数シフト像の計算方法(標準公式による場合) ...	73
6.5	連続弾性体モデルにおける試料表面への粘弾性接触力学の計算方法.....	74
6.6	種々の計算例.....	75
6.6.a	[femafm_Van_der_Waals_force]モードでの計算例.....	75
6.6.b	[femafm_frequency_shift]モードでの計算例.....	77
6.6.c	[femafm_JKR]モードでの計算例.....	77
6.7	FemAFM 使用法の実際 ー使用手引ー.....	79
6.7.a	[femafm_Van_der_Waals_force]モードでの計算の実際.....	79
6.7.b	[femafm_frequency_shift]モードでの計算の実際.....	79
6.7.c	[femafm_JKR]モードでの計算の実際.....	80
第7章	液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ(LiqAFM).....	82
7.1	液中カンチレバー振動の計算方法.....	82
7.1.a	カンチレバーのモデル化(一次元弾性梁モデル).....	82
7.1.b	流体のモデル化(二次元非圧縮性粘性流体).....	83
7.2	液中平板状カンチレバーの振動.....	85
7.2.a	固有振動解析と共鳴のピーク.....	85
7.2.b	カンチレバーの孔の効果と実効粘性率.....	86
7.3	液中カンチレバーによる試料表面への粘弾性接触力学の計算法.....	90
7.3.a	真空中、ばね定数が大きなカンチレバーの場合.....	91
7.3.b	真空中、小さいばね定数のカンチレバーの場合.....	92
7.3.c	液体中、ばね定数が大きなカンチレバーの場合.....	92
7.4	LiqAFM 使用法の実際 ー使用手引ー.....	93
7.4.a	液体中での、多数の孔を開けたカンチレバーのシミュレーション.....	93
7.4.b	真空中での、ばね定数が大きなカンチレバーのシミュレーション.....	98
7.4.c	真空中での、ばね定数が小さなカンチレバーのシミュレーション.....	101
7.4.d	液体中での、ばね定数が大きなカンチレバーのシミュレーション.....	103
第8章	構造最適化 AFM 像シミュレータ(CG).....	106
8.1	古典原子力場モデル.....	106
8.2	構造最適化計算.....	106
8.3	探針・試料相互作用力の計算.....	108
8.4	AFM 像の計算 ー標準公式法ー.....	108
8.5	エネルギー散逸.....	109
8.6	CG の使用法の実際 ー使用の手引ー.....	109
第9章	原子スケール液中 AFM 像シミュレータ(CG-RISM).....	111
9.1	RISM 法.....	111
9.2	RISM 方程式とクロージャー関係式.....	111
9.3	溶液系での方程式と自由エネルギー変化量.....	113
9.4	探針・試料相互作用力の計算.....	114
9.5	RISM 法計算の実際 ー使用の手引ー.....	114
第10章	分子動力学 AFM 像シミュレータ(MD).....	116
10.1	分子動力学計算の原理.....	116
10.2	古典原子力場モデル.....	117
10.3	温度の効果.....	117

10.4	探針・試料相互作用力の計算.....	117
10.5	AFM 像の計算 ー探針動力学法ー	118
10.6	液中計算法	118
10.7	種々の計算結果の実例.....	119
10.7.a	アポフェリチンの圧縮シミュレーション	119
10.7.b	水中におけるマイカ表面のフォースマップ	122
10.8	MD の使用法の実際 ー使用の手引ー	123
第 11 章	量子論的 SPM シミュレータ	126
11.1	DFTB 法の概略.....	126
11.1.a	密度汎関数法	126
11.1.b	擬原子軌道とプロット和	127
11.1.c	DFTB 法.....	128
11.2	STM のシミュレーション計算	130
11.2.a	表面の電子状態とバンド構造	131
11.2.b	トンネル電流の計算	132
11.2.c	トンネル電流像の計算例	135
11.3	STS のシミュレーション計算.....	136
11.4	AFM のシミュレーション計算	140
11.4.a	化学的結合力	140
11.4.b	ファンデルワースル力.....	140
11.4.c	NC-AFM と周波数シフト像	141
11.4.d	周波数シフト像の計算例	141
11.5	KPFM のシミュレーション計算	142
11.5.a	ケルビン法と仕事関数	143
11.5.b	KPFM と局所接触電位差.....	144
11.5.c	実空間分割密度汎関数モデルによる KPFM の計算法	144
11.5.d	局所接触電位差増の計算例	145
11.6	DFTB 使用法の実際 ー使用の手引きー	146
11.6.a	トンネル電流像の計算手順	146
11.6.b	トンネル電流分光の計算手順	147
11.6.c	周波数シフト像の計算手順	148
11.6.d	局所接触電位差像の計算手順	149
第 12 章	原子モデル作成法(SetModel)	152
12.1	原子モデル作成法の概要.....	152
12.2	結晶表面原子モデル作成法.....	152
12.3	探針原子モデル作成法	156
12.4	分子試料モデル作成法	158

SPMガイドブックに戻る