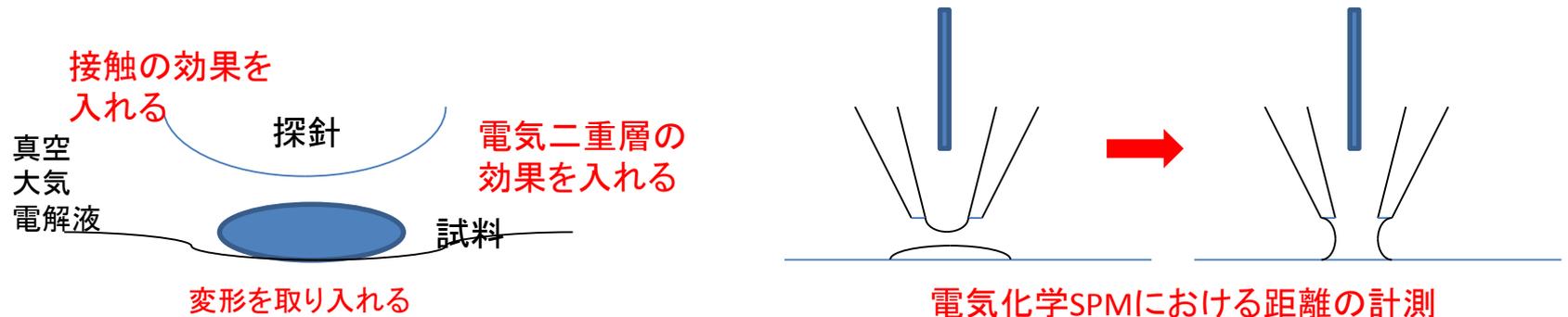


国プロ提案課題: ソフト・バイオマテリアルAFMシミュレータ



目的: バイオ系・高分子系・電気化学系のAFM計測に対応するシミュレータ開発

計測対象: 高分子系、粘弾性系、生体ナノ構造(細胞、たんぱく質等)、電気化学系、接触系

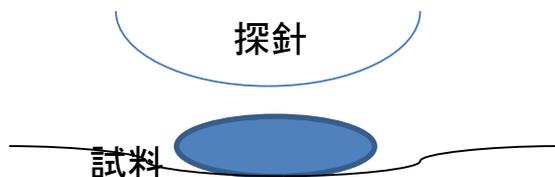
基礎となる現有シミュレータ: GeoAFM, FemAFM, LiqAFM(接触問題) + 新たな付加機能

特徴: 液中特に電界液中における探針試料間力をDLVO力などで扱い、試料の変形を含めたAFMシミュレーションを効率よく・迅速に行う。試料の表面電荷・電気二重層の効果を含め、バイオ系や電気化学系に対応する。必要に応じGeoAFMで簡単な試行像を得て、変形まで含めた詳細計算に移る。メニスカス形成距離を接触問題で扱い、電気化学SPM用のシミュレーションを行う。散逸量を計算して、バイオ系や粘弾性系・接触系のAFM法を提案し、そのシミュレータを開発する。

開発方針: 各分野の実験家(中嶋先生、末永先生、他、分担者候補でもある)のご意見を聞きつつ、どのようなシミュレーションを行うかの課題設定を行う。具体的なシミュレーション理論の研究と新たなソフト開発の検討を行う。国プロとして魅力的なストーリーを作る。

何をどうシミュレートするか

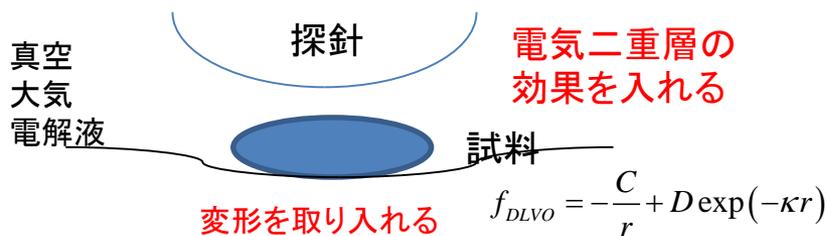
GeoAFM



GeoAFMでは力を計算しないので真空中、大気中、(電解)液中のいずれにも対応している。

ほぼできている。

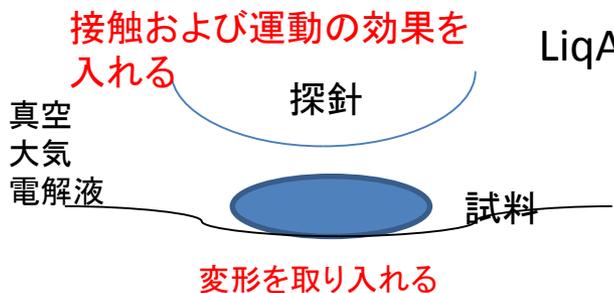
FemAFM



FemAFMでは、原子レベルではないが試料変形を取り入れることができる。また適当な力のモデルを採用して、真空中、大気中、(電解)液中の環境下の計測をシミュレーションできる。

多少の新規開発部が必要

LiqAFM+FemAFM?



接触問題を含め探針の動力学をとく。試料の粘弾性変形を含める。

理論モデルと計算法の開発が必要