

第1回セミナーの内容

Analyzer

- SPMメーカー各社の実験データ・フォーマット読み込み機能(Omicron、UNISOKU等の主要メーカー各社のデータファイルを読み込みを実演します。)
- 探針形状推定機能(Blind Tip Reconstruction法により探針形状を推定する方法を紹介します。例として、Si結晶表面のSPM画像を用います。)
- AFM画像からの探針形状影響除去機能(Blind Tip Reconstruction法により得られた探針形状を利用して、AFM画像のアーティファクトを除去します。例として、Si結晶表面のSPM画像を用います。)

GeoAFM

- 探針・試料形状データからのAFM画像推定機能(例として、ミオシンV分子のAFM画像をシミュレーションします。)
- AFM実験画像と試料形状データからの探針形状推定機能(例として、人工的な構造物形状と、二股に欠損した探針を用いて得られたAFM画像を基にして、探針形状を推定する実演を行います。)

Protein Data Bankからのタンパク質構造データ・ダウンロードについて(Protein Data BankのWebサイトから、タンパク質の分子構造を記述したPDBファイルをダウンロードし、試料構造データとしてSPMシミュレータで読み込む実演を行います。)

FemAFM

連続弾性体モデルによるAFM画像のシミュレーション機能(例として、HOPG(Highly Oriented Pyrolytic Graphite：高配向熱分解黒鉛)上に配置されたCLG(ラクトン系高分子量ポリマー)のAFM画像シミュレーションを実演します。高さ一定モードのAFM画像と、周波数シフトAFM画像を求めます。)

LiqAFM

- 流体力学シミュレーションによるカンチレバー共振周波数の導出機能(液中環境下でのカンチレバーの動きをシミュレーションし、共振周波数を求めます。孔の開いた形状のカンチレバー等、様々な形状のカンチレバーのシミュレーション方法をご紹介します。)

粘弾性接触力学の一般論について

- FemAFMによる粘弾性接触力学シミュレーション
- LiqAFMによる粘弾性接触力学シミュレーション

(試料のヤング率、表面張力を考慮した、探針-試料間の凝着を再現するシミュレーションの原理について、簡単に説明します。また、フォースカーブのヒステリシスについても議論します。粘弾性接触モデルとして、JKR (Johnson, Kendall, Roberts)理論を採用します。具体的な計算例として、Si結晶表面上に薄い水の膜が張った試料での凝着をシミュレーションします。)

第2回セミナーの内容

LiqAFMの新機能について

- タッピング機能による周波数シフト・位相シフトAFM像シミュレーション(例として、DNA分子のAFM像シミュレーションを実演します。)
- タッピング逆問題機能による試料の物性値の推定(例として、周波数シフト、位相シフトの観測値から、試料のヤング率、基板からの高さを逆算する実演を行います。)

新規ソルバmacroKPFMについて

- 局所接触電位差(LCPD)像シミュレーション
 - フォース・マッピング像のシミュレーション
- (例として、帯電したトナー粒子、均一な表面電荷の分布したミオシンV分子のシミュレーションを行います。)

CG

- 周波数シフトAFM像シミュレーション機能
 - フォースカーブの算出
- (例として、ペンタセン分子のAFM像シミュレーションを行います。実験結果との比較も検討します。)

MD

- タンパク質等の試料の変形シミュレーション
- (例として、オクタン分子、抗血管新生ペプチド分子を試料としたシミュレーションを行います。)

DFTB

- Åオーダーにおける周波数シフトAFM像のシミュレーション
- ÅオーダーにおけるKPFM像のシミュレーション

(例として、水素終端したSi結晶表面のAFM像、KPFM像のシミュレーションを行います。)

SetModel

- 半導体結晶・カーボンナノチューブ等の構造データ作成方法

(カーボンナノチューブ、グラフェンシートの、構造データ作成方法を解説します。また、様々な金属・半導体結晶の構造データを、空間群番号、格子定数等のデータから生成する方法も説明します。これにより、あらゆる無機化合物の試料構造データが作成可能です。)

ChemSketch、OpenBabelによる有機物質試料の構造データ作成方法

(有機化合物の分子構造をChemSketchで作成して、OpenBabelによりxyz形式のデータに変換する方法を説明します。ChemSketchには構造最適化機能が付属しています。これにより、あらゆる有機化合物の試料構造データが作成可能です。)