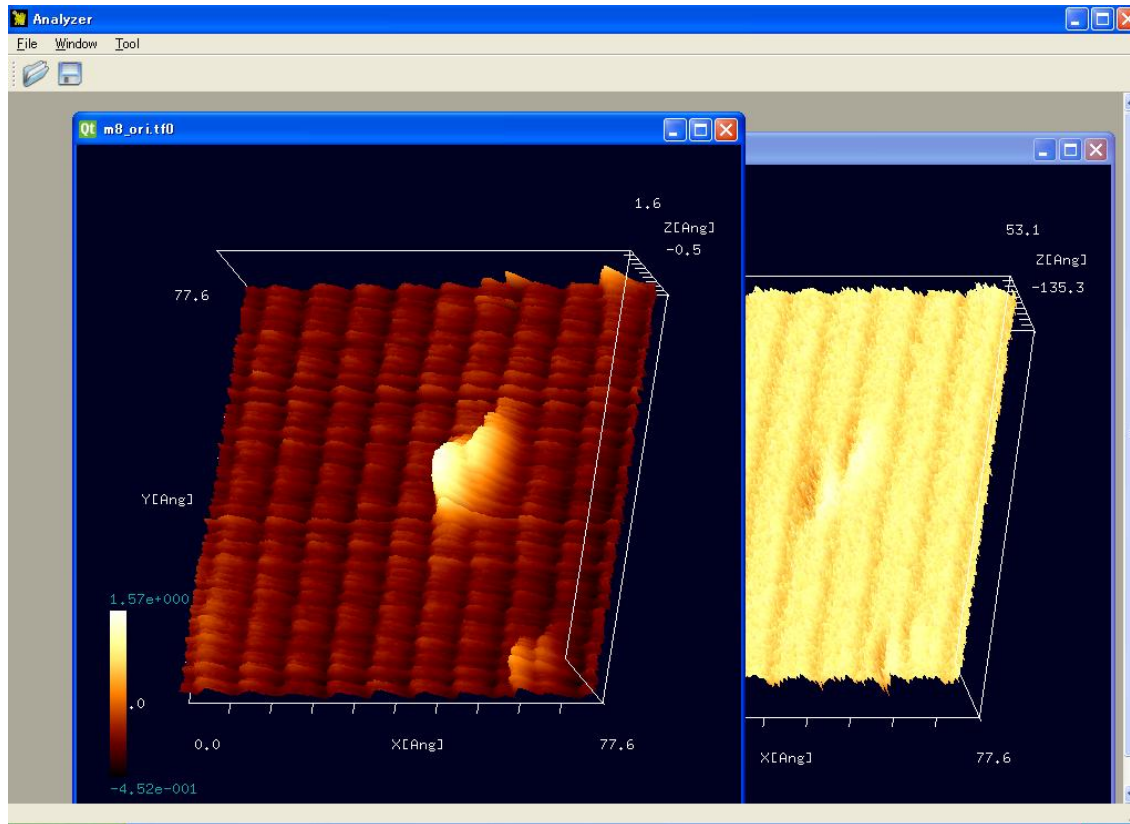


SPM実測-計算比較型シミュレータの開発経過報告

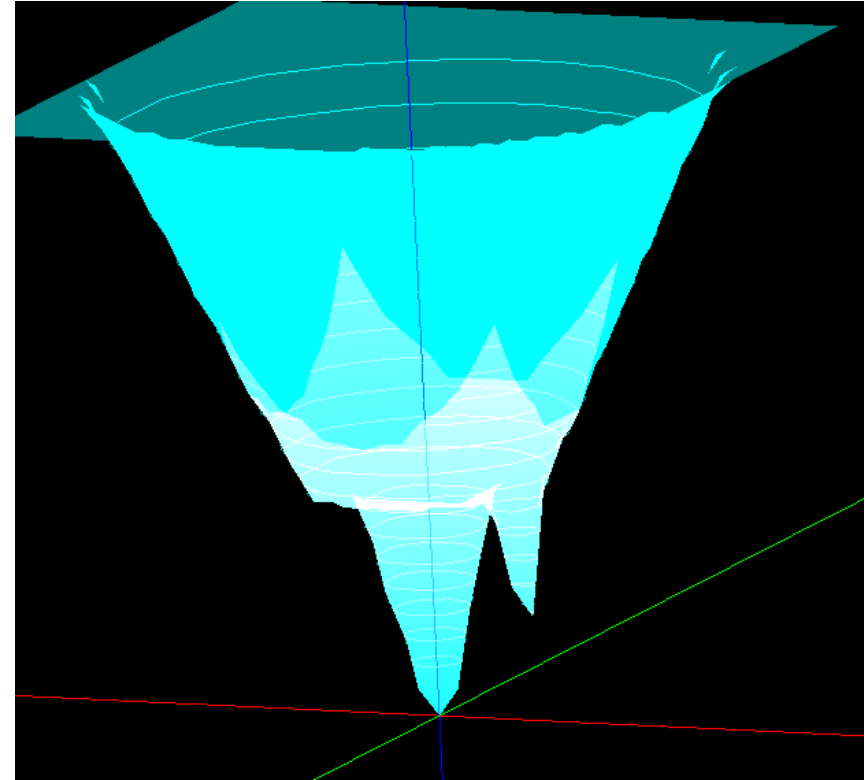
新機能: 実験データ読み込み、および、探針形状推定モジュールについて



吾妻広夫 (株)Advanced Algorithm & Systems
第3回走査プローブ顕微鏡シミュレータ開発セミナー
場所: 国立オリンピック記念青少年総合センター
日時: 2011年11月11日

新機能: SPM実測-計算比較型シミュレータ (2012年3月末、実装・無料配布予定)

1. SPM実験装置からの出力データ読み込み機能
2. 実験画像出力データからの探針形状推定機能
3. 実験データと数値シミュレーション結果との比較による、物理パラメータ推定機能



[本セミナーでは、開発・実装作業が進んでいる機能1, 2を取り上げる。
機能3については、今後、開発の進行状況に合わせて発表の予定。]

実験データ 読み込み機能

ほぼ全てのメーカー製SPM実験データを、SPIP, WSxM, Gwyddionを通して、間接的に読み込み可能

各メーカー製
実験装置

Nanonis

SII Nano Technology

Oxford Instruments

→ : binary data

→ : text data

データ処理
専用ソフト

SPIP

WSxM

Gwyddion

直接読み込み可能なメーカー

Omicron社製実験装置

Unisoku社製実験装置

asc

par

dat

txt

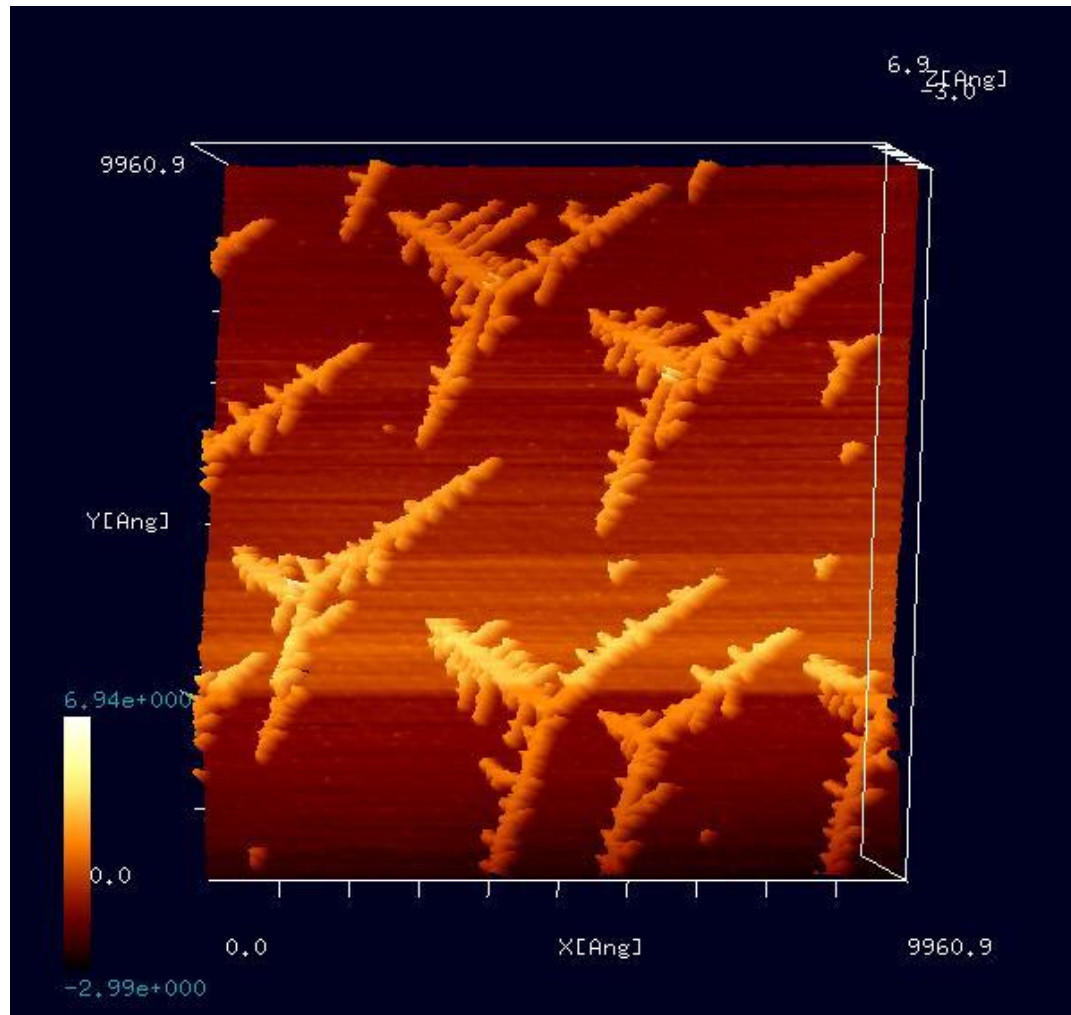
txt

SPMシミュレータ

この他にも、JPEG, BitMap等、ほぼ全ての種類の画像データが読み込み可能

(例1) Omicron社製実験装置データ出力の読み込み

出力データファイルの拡張子は.par



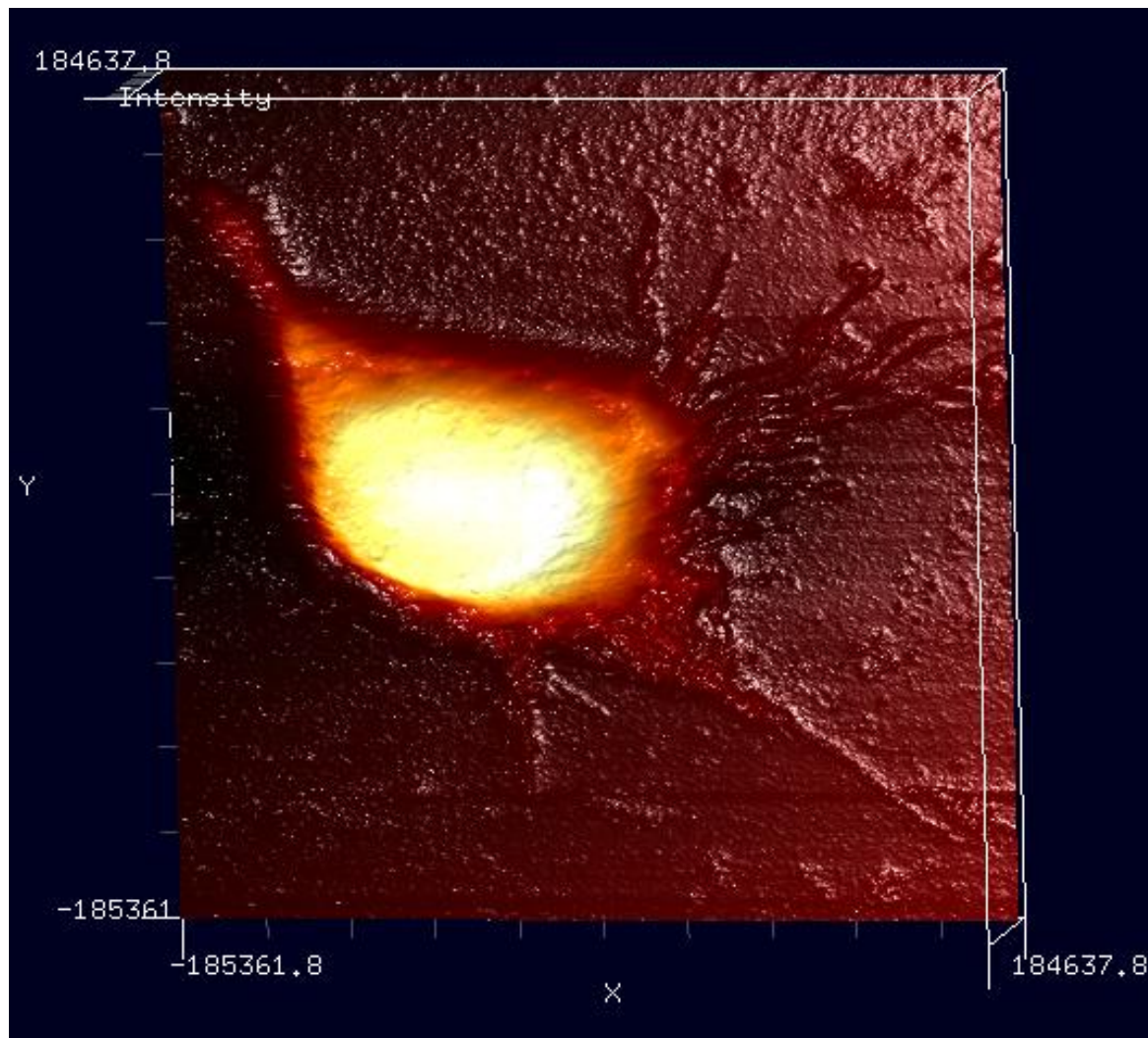
Ir結晶表面上にAuを蒸着し、温度を変化させることで、Au原子の集まりが、フラクタルな形状の島構造を成す様子

[東京大学生産技術研究所
福谷研究室提供
S. Ogura et al., Phys. Rev. B **73**, 125442 (2006);
S. Ogura and K. Fukutani, J. Phys.: Condens. Matter **21** (2009) 474210.]

(例2) WSxM出力データの読み込み

出力データファイルの拡張子は.txt

3D-View,
lighting等、表
現力豊かに画像
表示



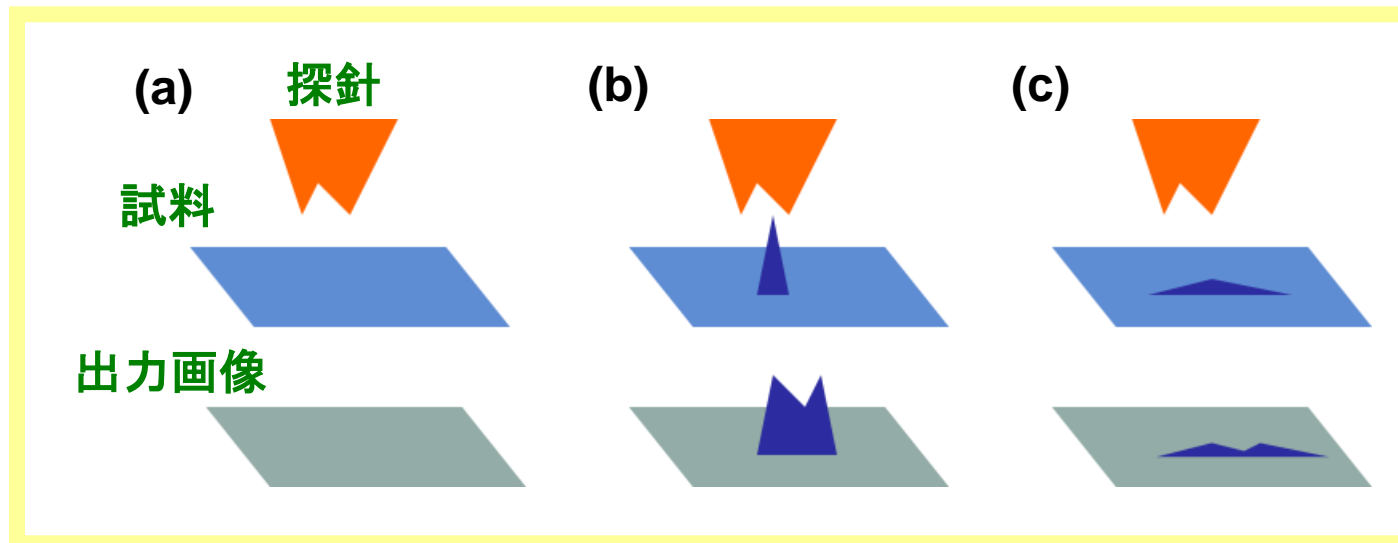
SPM画像データ解析ソフトWSxM(フリー)から、テキストファイルとして出力された画像データを、SPMシミュレータで読み込み・表示した図
[細胞(Cell)のAFMによる観察例]

SPIP, Gwyddionに関しても、同様にデータ読み込み可能

探針形状推定機能

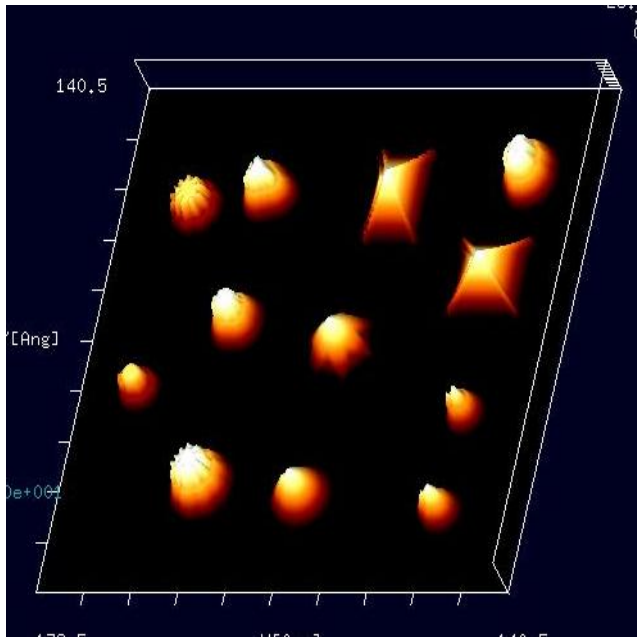
Blind Reconstruction Method

(基本的な考え方) 鋭く尖った形状の試料をAFM観察した場合、探針先端の形状が出力画像に反映される

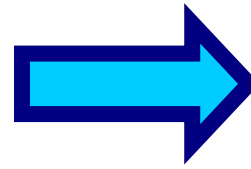


AFM画像の局所的に尖った部分のintersectionを取る

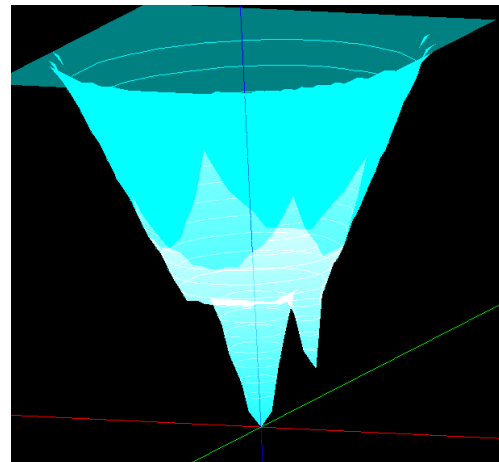
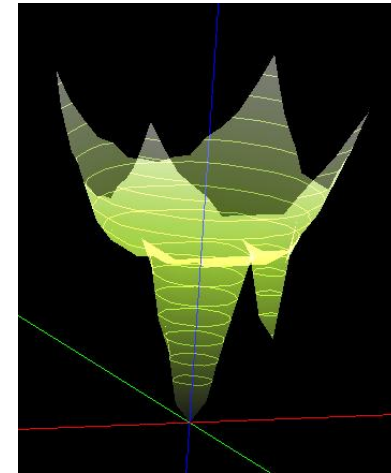
Blind Reconstruction Methodの具体例



仮想的に作成した、尖った形状の多い試料のAFM像



BRM法の適用



実際に使用したdouble tipと、blind reconstruction methodで作成した推定探針を重ね合わせた図

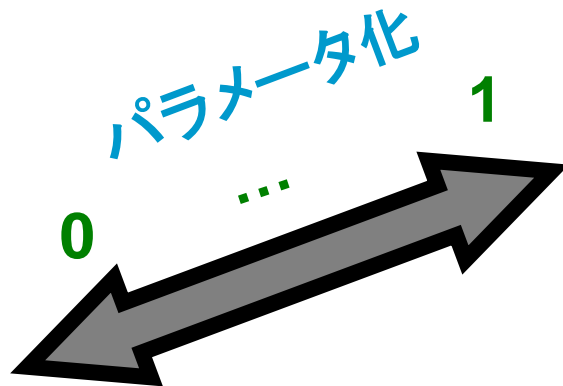
両者は非常に良く一致している

Blind Reconstruction Method

互いに**正反対の極限**を考えることが可能

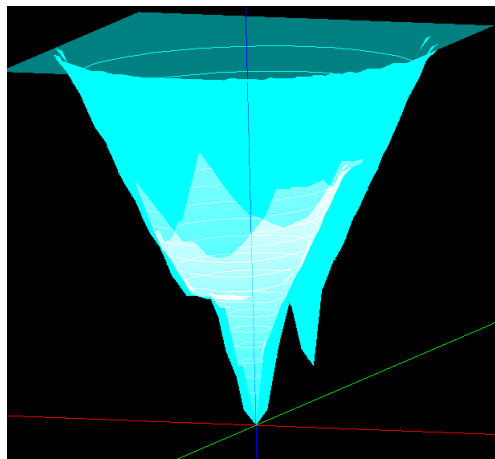
探針の形状が、ほとんど、画像データに**反映されていない**と仮定

探針の形状が、非常に良く、画像データに**反映されている**と仮定



探針形状は非常に尖っているのに対して、試料表面は比較的なだらかだと考える

パラメータを1に取った場合:
もともと想定していたdouble tipより、ずっと尖った探針形状が得られてしまうが、このような細い尖ったtipであっても、幾何学的な計算の上では、正しくAFM画像を再現する



AFM出力画像の、**あらゆる局所近傍**を重ね合わせて、**intersection**を取る

一般に、与えられた**一つのAFM出力画像**を再現する探針形状は、**複数存在する!** → 逆問題特有の事情

今後の展開： ユーザーの目的に応じた探針形状推定

原子・分子・ナノ材料AFM像シミュレータ

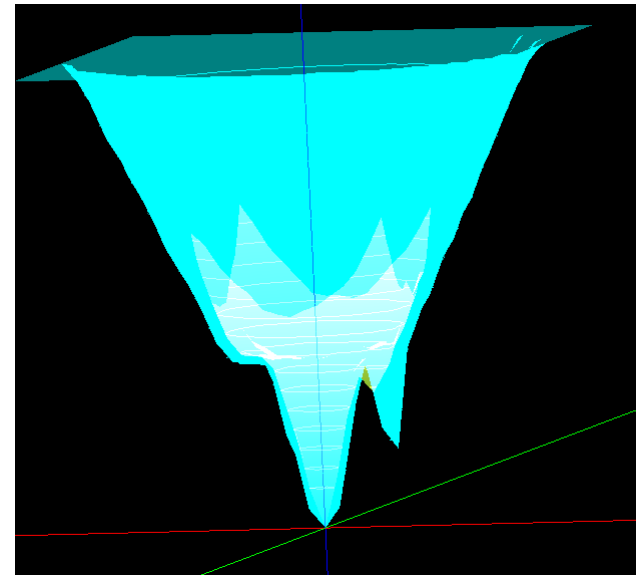
量子論的SPM像シミュレータ

...

異なる用途に応じて、適切なパラメータで、
探針形状推定

画像処理・最適化技術

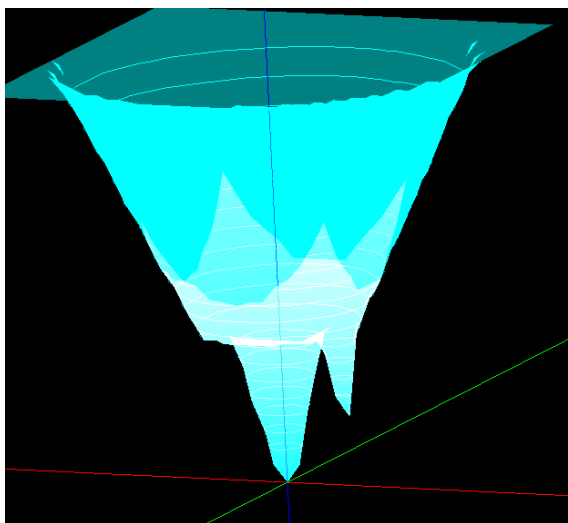
実験データと数値シミュレーション結果との比較による、
物理パラメータ推定機能



パラメータを0.7としたとき
の推定探針形状
(ユーザーは、好みに応じ
てパラメータを調節可能)

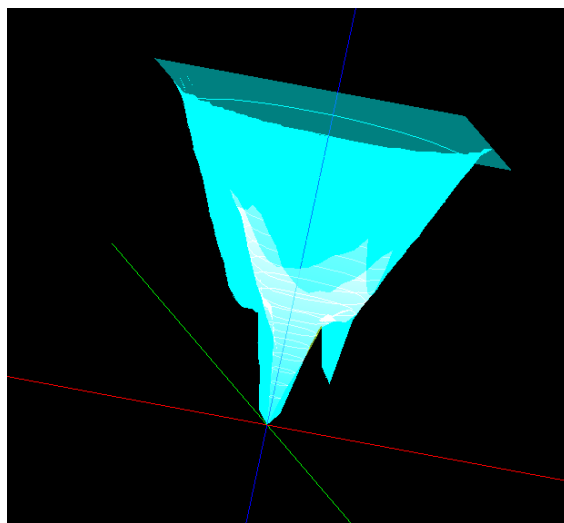
探針形状推定機能(Blind Reconstruction Method): 各ソフトウェア比較

試料が非常に細く尖った形状をしていて、探針形状がAFM画像に良く反映されていると仮定して、各ソフトウェア間で比べてみる



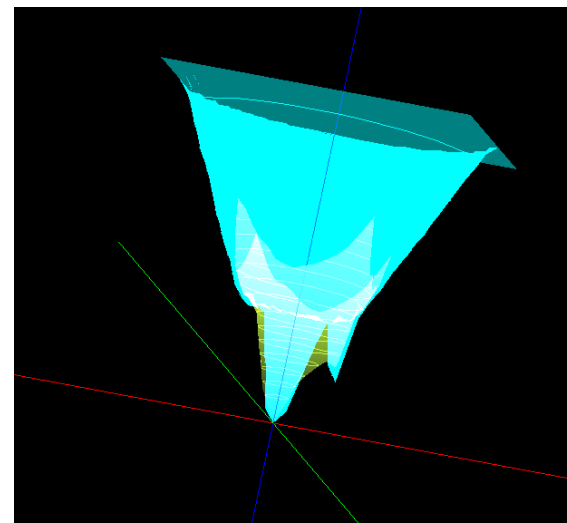
SPMシミュレータ

過不足無くチップ先端形状を再現



Gwyddion

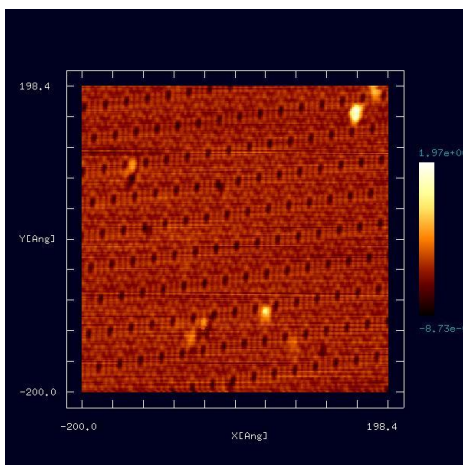
やや細めになっており、double tipであることを検出できていない



SPIP

やや太めになっており、double tipの構造がぼやけている

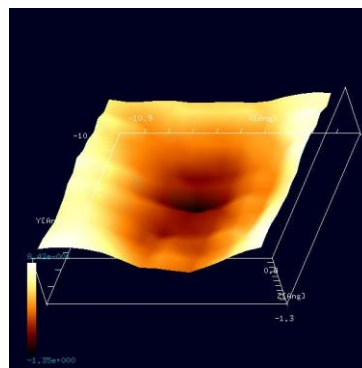
探針形状推定の実例(Blind Reconstruction Methodが適切でない場合)



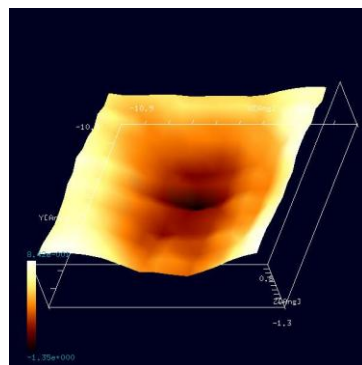
Si結晶表面AFM画像
(東京大学生産技術研究所
福谷研究室提供)

試料表面はなだらかで、探針先端部が比較的尖っている場合、BRMは適当でなく、パラメータ1.0付近の探針形状推定が有効となる

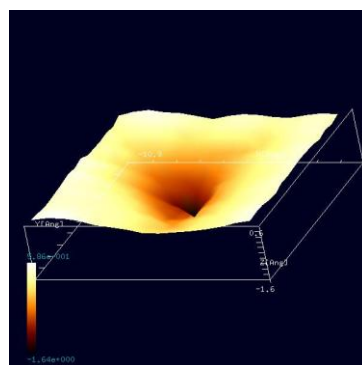
Parameter
0.0
(BRM)



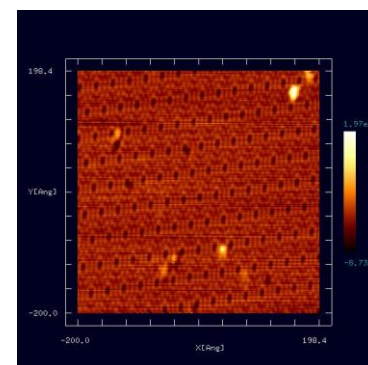
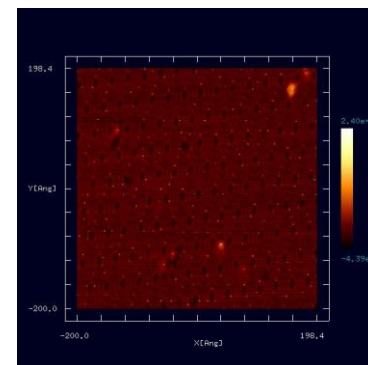
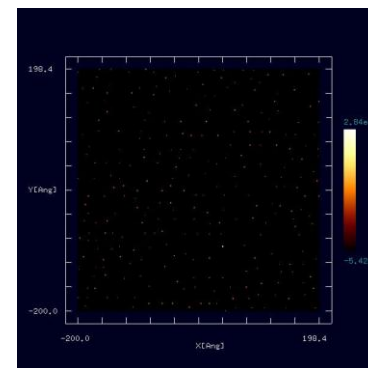
0.5



1.0



推定探針
形状



推定試料
表面形状