

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局(43) 国際公開日
2007 年 12 月 21 日 (21.12.2007)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 2007/145012 A1(51) 国際特許分類:
G01N 13/10 (2006.01)

1698050 東京都新宿区戸塚町 1 丁目 1 0 4 番地 Tokyo (JP).

(21) 国際出願番号: PCT/JP2007/057324

(72) 発明者; および

(22) 国際出願日: 2007 年 3 月 26 日 (26.03.2007)

(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 渡辺 尚貴 (WATANABE, Naoki) [JP/JP]; 〒1018443 東京都千代田区神田錦町二丁目 3 番地みずほ情報総研 株式会社 内 Tokyo (JP). 塚田 捷 (TSUKADA, Masaru) [JP/JP]; 〒1698555 東京都新宿区大久保 3-4-1 学校法人 早稲田大学 理工学部 内 Tokyo (JP).

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願2006-166587 2006 年 6 月 15 日 (15.06.2006) JP

(74) 代理人: 恩田博宣 (ONDA, Hironori); 〒5008731 岐阜県岐阜市大宮町 2 丁目 1 2 番地の 1 Gifu (JP).

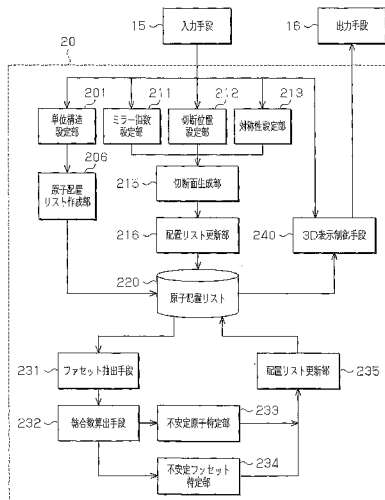
(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): みずほ情報総研 株式会社 (MIZUHO INFORMATION & RESEARCH INSTITUTE, INC.) [JP/JP]; 〒1018443 東京都千代田区神田錦町二丁目 3 番地 Tokyo (JP). 学校法人 早稲田大学 (WASEDA UNIVERSITY) [JP/JP]; 〒

(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PG,

[続葉有]

(54) Title: PROBE DESIGN SUPPORT SYSTEM, PROBE DESIGN SUPPORT METHOD AND PROBE DESIGN SUPPORT PROGRAM

(54) 発明の名称: 探針設計支援システム、探針設計支援方法及び探針設計支援プログラム



15 INPUT MEANS
16 OUTPUT MEANS
201 UNIT STRUCTURE SETTING SECTION
206 ATOM CONFIGURATION LIST MAKING SECTION
211 MIRROR INDEX SETTING SECTION
212 CUTTING POSITION SETTING SECTION
213 SYMMETRY SETTING SECTION
215 CUTTING FACE CREATING SECTION
216 CONFIGURATION LIST UPDATE SECTION
220 ATOM CONFIGURATION LIST
231 FACET EXTRACTION MEANS
232 NUMBER OF BONDS CALCULATION MEANS
233 UNSTABLE ATOM SPECIFYING SECTION
234 UNSTABLE FACET SPECIFYING SECTION
235 CONFIGURATION LIST UPDATE SECTION
240 3-D DISPLAY CONTROL SECTION

(57) Abstract: A control means (20) arranges virtual atoms in a crystal structure set in a virtual 3-D space, and stores the coordinate of each atom in an atom configuration list storage section (220). The control means (20) specifies an out-of-border virtual atom to be eliminated from the atom configuration list storage section (220) based on a mirror index acquired from a mirror index setting section (211) and boundary conditions dependent on the cutting position of a cut section face acquired from a cutting position setting section (212). The control means (20) counts the number of bonds of each virtual atom located on the surface of a probe after cutting, specifies an unstable virtual atom based on the number of bonds and alters display of the unstable virtual atom.

(57) 要約: 制御手段 (20) は、仮想 3D 空間に設定された結晶構造体の内部に仮想原子を配置して、各原子の座標を原子配置リスト記憶部 (220) に記憶する。制御手段 (20) は、ミラー指数設定部 (211) から取得したミラー指数と、切断位置設定部 (212) から取得した切断面の切断位置によって決まる境界条件に基づいて、原子配置リスト記憶部 (220) から削除すべき境界外仮想原子を特定する。制御手段 (20) は、切断後の探針の表面に位置する各仮想原子の結合数を計数し、この結合数に基づいて不安定な仮想原子を特定し、不安定な仮想原子の表示を変更する。



PH, PL, PT, RO, RS, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, SV, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

- (84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MT, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK,

添付公開書類:

— 国際調査報告書

2文字コード及び他の略語については、定期発行される各*PCT*ガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

明細書

探針設計支援システム、探針設計支援方法及び探針設計支援プログラム

5 技術分野

本発明は、走査プローブ顕微鏡の測定画像について数値シミュレーションを行なう際に用いる探針の原子構造の設計を支援する探針設計支援システム、探針設計支援方法及び探針設計支援プログラムに関するものである。

10 背景技術

試料表面の細かい形状や性質を測定するための顕微鏡の1つに、走査型プローブ顕微鏡（SPM；Scanning Probe Microscope）がある。走査型プローブ顕微鏡は、探針の鋭い先端を試料に近づけて、探針の先端と試料との間の発生する原子間引力や原子間斥力、電流（トンネル電流）などの物理的現象を測定して、試料表面の形状や性質を原子レベルで測定する。

探針の先端は走査型プローブ顕微鏡の分解能や安定性に関連する。探針の先端は原子レベルで鋭く、かつ先端にある原子が安定であることが要望されている（例えば、特許文献1参照。）。この要望に応じるために、特許文献1に記載の技術では、走査型プローブ顕微鏡で用いられる探針先端に、加熱した原料基板からの原子移動によって微結晶のナノピラー（先端突起）を成長させる。そして、加熱されることにより基板の原子同士の結合が切断されて、基板の原子は、基板よりも低温の探針の先端へ移動し、そこで再結晶化する。これにより、より安定した状態の原子からなる小さな突起が探針の先端に形成される。

また、安定な一つの原子が先端にある、非常に鋭く細い円錐状の探針を作成する技術が特許文献2に開示されている。この特許文献2に記載の技術においては、測定用探針を用いて、被加工探針の原子配置を観察する。観察の結果、被加工探針において、取り除くべき原子又は付加すべき原子又は動かす原子等を決定す

る。そして、両探針間に、適切な電圧と極性で、単パルス又は繰り返しパルスを印加して、決定した原子を除去、加工又は移動させて被加工探針の先端に安定な一つの原子を残し、鋭い先端の探針を作製する。

〔特許文献1〕特開2004-279349号公報

5 〔特許文献2〕特開平8-178935号公報

発明の開示

ところで、走査型プローブ顕微鏡で測定した画像を解析するため、試料表面と探針先端の原子スケールでの状態の数値計算によるシミュレーションが行なわれている。従来のシミュレーションでは、例えば図22に示すように、探針先端の原子構造をシンプルな形状にモデル化した探針構造が用いられていた。この探針構造では、原子は規則正しく並べられている。このような探針構造の原子配置（原子座標）を記述したデータファイルは、配置の規則性を利用して容易に作成できる。

10 しかし、現実の探針の先端形状は、このようなシンプルな形状とは限らない。例えば図23に示すように、多数の面で構成された複雑な形状をしている方が多い。探針の複雑な形状は、走査型プローブ顕微鏡による実際の測定画像にも影響を与える。複雑な形状の探針構造の原子配置を記述したデータファイルを作成するためには、手作業で試行錯誤の編集を繰り返す必要があった。従って、現実の

15 複雑な探針構造でシミュレーションを行なうことは難しい。

本発明は、上述の問題に鑑みてなされ、走査型プローブ顕微鏡による測定画像の数値シミュレーションのための探針先端構造を効率的に設計するための探針設計支援方法、探針設計支援システム及び探針設計支援プログラムを提供することにある。

25 上記問題点を解決するために、本発明の一態様は、データ入力手段と探針の先端部の画像を出力する出力手段とに接続された制御コンピュータを用いて、走査プローブ顕微鏡に用いる探針の設計を支援するシステムを提供する。そのシステ

ムは、前記制御コンピュータが、前記探針を構成する結晶構造体の内部に仮想原子を配置して、各仮想原子の座標を記憶し、結晶面方位と切断位置を、前記入力手段を介して取得し、前記結晶面方位と前記切断位置に基づいて決定される境界条件を用いて、前記結晶構造体から削除すべき境界外仮想原子を特定し、前記記憶した仮想原子の座標を用いて、前記境界外仮想原子を除く結晶構造体の画像を前記出力手段に表示し、前記結晶構造体の表面に位置する各仮想原子の結合数を計数し、計数した結合数に基づいて不安定な仮想原子を特定し、前記不安定な仮想原子の表示を変更するようにプログラムされていることを特徴とする。

5

10

一実施形態では、前記不安定な仮想原子の表示の変更は、前記不安定な仮想原子を除く結晶構造体を表示する。

一実施形態では、前記不安定な仮想原子の表示の変更は、すべての不安定な仮想原子が削除されるまで繰り返される。

15

一実施形態では、前記不安定な仮想原子の表示の変更は、前記記憶された仮想原子の座標に基づいて、前記結晶構造体に形成された凸胞のファセットを特定し、前記ファセットを構成する仮想原子の総数及び仮想原子の近隣原子との結合数を計数し、前記仮想原子の総数と前記結合数から前記ファセットを構成する仮想原子のダングリングボンドの総数を算出し、算出したダングリングボンドの総数を、前記ファセットを構成する仮想原子の数で除算して原子数割合を算出し、算出した原子数割合に基づいて、不安定なファセットを特定することを含む。

20

本発明の別の態様は、データ入力手段と探針の先端部の画像を出力する出力手段に接続された制御コンピュータを用いて、走査プローブ顕微鏡に用いる探針の設計を支援する方法を提供する。その方法は、前記制御コンピュータが、前記探針を構成する結晶構造体の内部に仮想原子を配置して、各仮想原子の座標を記憶し、結晶面方位と切断位置を、前記入力手段を介して取得し、前記結晶面方位と前記切断位置に基づいて決定される境界条件を用いて、前記結晶構造体から削除すべき境界外仮想原子を特定し、前記記憶した仮想原子の座標を用いて、前記境界外仮想原子を除く結晶構造体の画像を前記出力手段に表示し、前記結晶構造体

25

の表面に位置する各仮想原子の結合数を計数し、計数した結合数に基づいて不安定な仮想原子を特定し、前記不安定な仮想原子の表示を変更することを特徴とする。

5 本発明の更に別の態様は、データ入力手段と探針の先端部の画像を出力する出力手段に接続された制御コンピュータに、走査プローブ顕微鏡に用いる探針の設計を支援させるプログラムを提供する。そのプログラムは、前記制御コンピュータが、前記探針を構成する結晶構造体の内部に仮想原子を配置して、各仮想原子の座標を記憶し、結晶面方位と切断位置を、前記入力手段を介して取得し、前記結晶面方位と前記切断位置に基づいて決定される境界条件を用いて、前記結晶構造体から削除すべき境界外仮想原子を特定し、前記記憶した仮想原子の座標を用いて、前記境界外仮想原子を除く結晶構造体の画像を前記出力手段に表示し、前記結晶構造体の表面に位置する各仮想原子の結合数を計数し、計数した結合数に基づいて不安定な仮想原子を特定し、前記不安定な仮想原子の表示を変更するように構成されたプログラムコードを備えている。

10

15

図面の簡単な説明

図 1 は本発明の好ましい実施形態に従う探針設計支援システムのブロック図。

図 2 は好ましい実施形態に従う処理手順の概略説明図であり、(a) は切断面を示し、(b) は切断面で原子を除去した後の原子配置を示し、(c) は複数回の切断によって形成された凸胞のファセットを示す。

20

図 3 は原子配置リスト生成のフローチャート。

図 4 は結晶面切断のフローチャート。

図 5 は不安定原子削除のフローチャート。

図 6 は不安定ファセット削除のフローチャート。

25 図 7 は 1 回対称性を有する探針の先端部の模式的斜視図。

図 8 は 2 回対称性を有する探針の先端部の模式的斜視図。

図 9 は 4 回対称性を有する探針の先端部の模式的斜視図。

図 1 0 は初期の表示画面の一例。

図 1 1 は図 1 0 の表示画面の模式図。

図 1 2 は切断前の探針の先端部の斜視図。

図 1 3 は 1 段階目の切断処理後の探針の先端部の斜視図。

5 図 1 4 は 2 段階目の切断処理後の探針の先端部の斜視図。

図 1 5 は 4 段階目の切断処理後の探針の先端部の斜視図。

図 1 6 は形成された探針の先端部を表示した画面の一例。

図 1 7 は探針の先端部の仮想原子と結合を選択的に表示した画面。

図 1 8 は探針の先端部の切断面を選択的に表示した画面。

10 図 1 9 は探針の先端部の選択されたファセットを表示した画面。

図 2 0 は不安定原子のある探針の部分拡大図。

図 2 1 は不安定原子を削除した後の探針の部分拡大図。

図 2 2 は従来技術で取り扱う、簡単な先端形状を有する探針の模式図。

図 2 3 は複雑な先端形状を有する探針の模式図。

15

発明を実施するための最良の形態

以下、本発明の好ましい実施形態に従う探針設計支援システムを図 1 ～図 2 1 を参照して説明する。本実施形態の探針設計支援システムは、走査型プローブ顕微鏡（S P M ; Scanning Probe Microscope）の探針を、結晶構造体（例えばダイヤモンド構造の結晶）を切断して設計するのを支援する。

20

図 1 に示すように、探針設計支援システムは、入力手段 1 5、出力手段 1 6 及び制御手段 2 0 から構成されている。

入力手段 1 5 は、制御手段 2 0 に各種データや指示を入力するために用いられ、例えば、グラフィカルユーザインターフェイス（G U I）を見ながら操作されるポインティングデバイスやキーボードを含む。好ましい実施形態では、入力手段 1 5 は、単位構造、ミラー指数、切断位置及び対称性を、制御手段 2 0 に供給する。

25

出力手段 16 は、制御手段 20 の処理結果を出力するために用いられる。出力手段 16 は、例えば 3 次元グラフィックスを表示する表示装置を含む。

5 制御手段 20 は、後述する処理（記憶段階、取得段階、削除表示段階及び表示変更段階等）を行なうためのプログラムコードを備えた探針設計支援プログラム
10 を実行する。探針設計支援プログラムは、メモ리카ード、フレキシブルディスク、光ディスク(CD-ROM,DVD-ROM,...), 光磁気ディスク(MO,MD,...)等のコンピュータ読み取り可能な記録媒体に格納されて、探針設計支援システムに提供される。記録媒体は、通信媒体を介してアップロード又はダウンロードされたプログラムを記録した媒体、ディスク装置、または、通信媒体を介して探針設計支援
15 システムが接続されるサーバ装置の記憶装置であってもよい。記録媒体は、コンピュータによって直接実行可能なプログラムコードを記録した記録媒体であってもよく、インストールすることによって実行可能な形式に変換されるプログラムコードを記録した記録媒体であってもよく、暗号化または圧縮されたプログラムコードを記録した記録媒体であってもよい。制御手段 20 は、記憶手段、取得手
20 段、削除表示手段及び表示変更手段等として機能する。

制御手段 20 は、単位構造設定部 201、原子配置リスト作成部 206、ミラー指数設定部 211、切断位置設定部 212、対称性設定部 213、切断面生成部 215、配置リスト更新部 216 及び原子配置リスト記憶部 220 を備えている。

20 単位構造設定部 201 は、探針を構成する結晶構造体の仮想原子の配置を特定するための単位構造データを設定する。この単位構造設定部 201 は、入力手段 15 を介して供給された単位構造データを記憶するメモリを含むことができる。単位構造データは、結晶構造の種別（結合数、結合角）と原子間隔（結合長）を特定するためのデータを含む。なお、結晶構造データは、予めメモリに記憶させておくことも可能である。
25

原子配置リスト作成部 206 は、単位構造設定部 201 に記録された単位構造データに基づいて、仮想 3 次元空間（3D 空間）における結晶構造体の仮想原子

の原子配置リストを生成する。この原子配置リスト作成部 206 は、結晶構造体を切断する前の各仮想原子の座標を含む原子配置リストを作成する。

ミラー指数設定部 211 は、結晶構造体を切断するための結晶面方位データを設定する。このミラー指数設定部 211 は、入力手段 15 を介して供給された、
5 結晶面方位データを記憶するメモリを含むことができる。本実施形態では、ミラー指数により結晶構造体を切断する切断面を特定する。ミラー指数は、 $(a_m \ b_m \ c_m)$ で表現される。 a_m , b_m , c_m は、それぞれ X 軸、Y 軸、Z 軸に対応する値である。

切断位置設定部 212 は、切断面の切断位置 d_m を設定する。この切断位置設定部 212 は、入力手段 15 を介して選択された、切断位置 d_m を記憶するメモリを含むことができる。切断位置記憶部 212 は、切断位置 d_m を、ミラー指数設定部 211 に記憶されたミラー指数と対応付けて記憶する。本実施形態では、切断位置は原点からの深さによって表すことができる。ミラー指数と切断位置により、切断面を定義する方程式を算出することができる。

15 対称性設定部 213 は、切断面の対称性を設定する。この対称性設定部 213 は、入力手段 15 を介して供給された、切断面の対称性の選択データを記憶するメモリを含むことができる。切断面の対称性の例は Z 軸回りの回転対称性であり、本実施形態では「1 回対称性 (C1)」、「2 回対称性 (C2)」、「3 回対称性 (C3)」、「4 回対称性 (C4)」、「6 回対称性 (C6)」から選択
20 することができる。「1 回対称性」が選択された場合、図 7 に示すように、指定された切断面のみで切断が行なわれる。「2 回対称性」が選択された場合、図 8 に示すように、ミラー指数設定部 211 及び切断位置設定部 212 に記憶されたデータによって指定された元の切断面を 180 度回転して、回転後切断面を生成し、元の切断面と回転後切断面の 2 つの切断面で切断が行なわれる。「3 回対称性」
25 が選択された場合、元の切断面を 120 度ずつ回転して、2 つの回転後切断面を生成し、元の切断面と 2 つの回転後切断面とからなる 3 つの切断面で切断が行なわれる。4 回対称性が選択された場合、図 9 に示すように、元の切断面を 90

度ずつ回転して、3つの回転後切断面を生成し、元の切断面と3つの回転後切断面とからなる4つの切断面で切断が行なわれる。6回対称性が選択された場合には、元の切断面を60度ずつ回転して、5つの回転後切断面を生成し、元の切断面と5つの回転後切断面とからなる6つの切断面で切断が行なわれる。

- 5 本実施形態では、当初の結晶構造体のモデルとして直方体が設定されている。プログラムの起動時の初期値として、ミラー指数設定部211にはミラー指数（001）及び（010）が記憶されており、切断位置設定部212には所定値が記憶されており、対称性設定部213には4回対称性が記憶されている。これらのミラー指数、切断位置、対称性を用いることにより、3D空間に当初の結晶構造体のモデルとしての直方体を生成することができる。

- 10 切断面生成部215は、ミラー指数設定部211、切断位置設定部212及び対称性設定部213に記憶されたデータに基づいて、結晶構造体の結晶面に平行な切断面を定義する方程式を生成する。具体的には、ミラー指数設定部211において記憶されたミラー指数と、切断位置設定部212において記憶された切断位置とに基づいて切断面を定義する方程式を算出する。対称性設定部213にk回対称性（ $k > 1$ ）が記憶されている場合には、ミラー指数を「 $360/k$ 」度ずつ回転させた切断面を定義する方程式を算出する。

- 15 配置リスト更新部216は、結晶構造体を結晶面に平行な切断面で切断した後に残った結晶構造体の仮想原子の原子配置リストを生成する。具体的には、原子配置リスト記憶部220に記録された座標に対して、切断面生成部215が生成した判断式 $= 0$ を境界条件として、切断によって除去される仮想原子を特定して、除去される仮想原子の座標を削除する。

- 20 原子配置リスト記憶部220は、3D空間に配置された仮想原子の座標を表す原子配置リストを記憶する。この原子配置リストは、原子配置リスト作成部206によって作成され、配置リスト更新部216、235によって更新される。原子配置リスト記憶部220は、原子同士の結合を表す結合データも記憶する。

制御手段20は、ファセット抽出手段231、結合数算出手段232、不安定

原子特定部 2 3 3、不安定ファセット特定部 2 3 4、配置リスト更新部 2 3 5 及び 3 D 表示制御手段 2 4 0 を備えている。

5 ファセット抽出手段 2 3 1 は、原子配置リスト記憶部 2 2 0 に記憶された原子配置リストに基づいて配置された仮想原子によって構成される凸胞 (cell) を特定し、この凸胞表面に形成された小面 (ファセット) を抽出する。

結合数算出手段 2 3 2 は、ファセットを構成する各仮想原子の結合数を算出する。

10 不安定原子特定部 2 3 3 は、後述するように、個々の仮想原子の結合数に基づいて不安定原子を特定する。不安定原子特定部 2 3 3 は、不安定原子であるかどうかを判断するための基準結合数を保持する。本実施形態の基準結合数は「1」である。

不安定ファセット特定部 2 3 4 は、後述するように、ファセットを構成する各仮想原子の結合数に基づいて不安定ファセットを特定する。

15 配置リスト更新部 2 3 5 は、不安定原子特定部 2 3 3 により特定された不安定原子や、不安定ファセット特定部 2 3 4 により特定された不安定ファセットを削除して仮想原子の原子配置リストを更新する。

20 3 D 表示制御手段 2 4 0 は、逐次、原子配置リスト記憶部 2 2 0 に記憶されている原子配置リストを取得し、この原子配置リストに基づいて 3 D 空間に形成された探針の形状を表示するためのデータを生成する。本実施形態では、3 D 表示制御手段 2 4 0 は、図 1 0、図 1 1、図 1 6 に示す表示画面 1 0 0 を出力手段 1 6 に表示させることができる。3 D 表示制御手段 2 4 0 は、G U I によって選択された視座や表示形式を表すデータに応じて 3 D モデル画像データを生成する。

次に、探針の設計支援の一例を、図 2 ～図 2 1 を参照して説明する。

25 まず、本実施形態の探針設計支援システムは、3 D 空間に結晶構造体を生成する原子配置リスト生成処理と、この結晶構造体を結晶面と平行な切断面で切断する結晶面切断処理とを行い、更に、不安定原子削除処理又は不安定ファセット削除処理を行なう。これらの処理の概略について図 2 を用いて説明する。

(1) 探針設計支援システムは、探針の先端部（結晶構造体）の原子と面を 3 D 表示する。

(2) 図 2 (a) の例では、結晶構造体は柱状である。探針設計支援システムは、柱状の結晶構造体を切断する切断面を計算する。

5 (3) 図 2 (b) に示すように、探針設計支援システムは、切断後に残る仮想原子を含む結晶構造体を 3 D 表示する。切断後の結晶構造体の断面を再構成して 3 D 表示する。

10 (4) 図 2 (c) に示すように、探針設計支援システムは、切断後の結晶構造体の仮想原子のうち表面に露出した原子によって構成される多数の小面（ファセット）を検出して 3 D 表示する。

以下、具体的な処理を詳述する。

（原子配置リスト生成処理）

図 3 を参照して、仮想原子の原子配置リストの生成を説明する。ステップ S 1
ー 1 において、制御手段 2 0 の単位構造設定部 2 0 1 は、結晶構造体（探針）の
15 単位構造（例えば、体心立方格子構造やダイヤモンド構造など）を特定するた
めの単位構造データを、入力手段 1 5 を介して取得し、メモリに記憶し、原子配置
リスト作成部 2 0 6 に供給する。

原子配置リスト作成部 2 0 6 は、結晶構造における仮想原子の原子配置リスト
を生成する（ステップ S 1 ー 2）。具体的には、原子配置リスト作成部 2 0 6 は
20 、単位構造データと結晶構造（結合数、結合角、結合長）に従って、3 D 空間に
仮想原子を配置する。原子配置リスト作成部 2 0 6 は、設定された原点に対する
各仮想原子の X, Y, Z 座標を算出する。原子配置リスト作成部 2 0 6 は、すべ
ての仮想原子の座標を含む初期原子配置リストを生成する。

原子配置リスト作成部 2 0 6 は、生成した初期原子配置リストを原子配置リス
25 ト記憶部 2 2 0 に記録させる（ステップ S 1 ー 3）。初期原子配置リストの座標
を用いて、3 D 空間に 3 次元モデルを生成することができる。

（初期値による結晶面切断処理）

次に、図 4、図 1 2～図 2 1 を用いて、結晶面切断処理について詳述する。

制御手段 2 0 は、切断面を表すミラー指数 (a_m b_m c_m) と、切断面の高さを表す切断位置 d_m を取得する (ステップ S 2-1)。具体的には、制御手段 2 0 の切断面生成部 2 1 5 は、ミラー指数設定部 2 1 1、切断位置設定部 2 1 2、
5 対称性設定部 2 1 3 から、ミラー指数、切断位置、対称性をそれぞれ取得する。上述のように、プログラムの起動時には、初期値として、ミラー指数設定部 2 1 1 にはミラー指数 (0 0 1) 及び (0 1 0)、切断位置設定部 2 1 2 には所定値、対称性設定部 2 1 3 には 4 回対称性を表すデータが記憶されている。

次に、ミラー指数設定部 2 1 1、切断位置設定部 2 1 2、対称性設定部 2 1 3
10 によって設定された結晶面によって結晶構造体が切断される。

切断面生成部 2 1 5 は、ミラー指数設定部 2 1 1、切断位置設定部 2 1 2 から取得した数値を用いて、以下の判断式を生成する。

$$f(x, y, z) = [a_m] * [x] + [b_m] * [y] + [c_m] * [z] + [d_m]$$

15 更に、切断面生成部 2 1 5 は、対称性設定部 2 1 3 から取得した対称性に基づいて、 k 回対称性の判断式を算出する。具体的には、切断面生成部 2 1 5 は、結晶面の回転に対応させてミラー指数を変更した判断式を生成する。そして、切断面生成部 2 1 5 は、これらの判断式を一時的に記憶する。

ステップ S 2-2 において、配置リスト更新部 2 1 6 は、原子配置リスト記憶
20 部 2 2 0 に記録された各仮想原子の座標 (x_n , y_n , z_n) を取得し、判断式 $f(x, y, z)$ に代入する。

算出結果 $f(x_n, y_n, z_n)$ が 0 よりも大きい場合 (ステップ S 2-3 において「NO」の場合)、配置リスト更新部 2 1 6 は、原子配置リスト記憶部 2 2 0 から、この座標 (x_n , y_n , z_n) を表すデータを削除する (ステップ S 2-4)。
25

一方、算出結果 $f(x_n, y_n, z_n)$ が 0 以下の場合 (ステップ S 2-3 において「YES」の場合)、ステップ S 2-4 をスキップする。この結果、この座

標 (x_n , y_n , z_n) の仮想原子は、原子配置リスト記憶部 220 に記憶された原子配置リストに残る。原子配置リスト記憶部 220 に記憶されているすべての原子配置について、ステップ S2-2 ~ S2-4 を繰り返す。

すべての原子配置についてステップ S2-2 ~ S2-4 の切断処理を完了した場合
5 場合には、制御手段 20 は、他に切断面があるかどうかを確認する（ステップ S2-5）。例えば、4 回対称性が設定されている初期値の場合、ミラー指数 (0 1 0) に対して、4 個の判断式が生成されている。そこで、他に切断処理を行っていない判断式が残っている場合（ステップ S2-5 において「NO」の場合）
10 には、残りの各判断式を用いてステップ S2-1 ~ S2-4 を繰り返し行なう。

すべての判断式を用いて切断処理が終了した場合（ステップ S2-5 において「YES」の場合）には、結晶面切断処理を終了する。

制御手段 20 の 3D 表示制御手段 240 は、逐次、原子配置リスト記憶部 220 に記憶された原子配置リストに基づいて表示データを生成し、出力手段 16 に
15 その表示データを供給して、切断処理中及び処理後の探針の先端部の 3D モデル画像を表示することができる。

（表示画面）

次に、出力手段 16 に表示される画面を説明する。3D 表示制御手段 240 は、原子配置リスト記憶部 220 に記憶された原子配置リストを取得し、このリス
20 トに基づいて、設計者によって選択された視座からの 3D モデル画像データを生成する。そして、3D 表示制御手段 240 は、探針の先端部の 3D モデル画像を、出力手段 16 に表示させる。

原子配置は、図 10 に示すように、表示画面 100 の表示パネル部 110 に表示される。の表示パネル部 110 は、原子配置リスト記憶部 220 に記録された
25 原子配置の 3D モデル画像が表示される。表示パネル部 110 に出力された 3D モデル画像の向きや位置は、ポインティングデバイスの操作により視座を変えることで、変更することができる。

次に、図 11 を参照して、表示画面 100 について説明する。

表示画面 100 は、表示パネル部 110 及び制御パネル部 120 を含む。制御
パネル部 120 は、表示形式を選択するためのチェックボックス 121, 122
, 123、切断面の対称性を選択するためのリストボックス 125 を含む GUI
5 として機能する。表示形式を選択するチェックボックスには、「v(vertex)」チ
ェックボックス 121、「s(surface)」チェックボックス 122、「f(facet)」
チェックボックス 123 がある。「v」チェックボックス 121 は、原子位置を
表す「点」と結合を表す「線」とを表示したいときに選択される。「s」チ
ェックボックス 122 は、切断面を含む結晶構造体の外表面を表示したいときに選択
10 される。「f」チェックボックス 123 は、表面に露出した原子によって構成さ
れる小面（ファセット）を表示したいときに選択される。

更に、制御パネル部 120 には、切断面を選択するためのチェックボックスと
、各切断面の切断位置を調整するときに操作されるスライダとを含む。チェック
ボックスは、対応する切断面を示すミラー指数 (a_m b_m c_m) を設定するた
15 めに用いられる。スライダは、各切断面の切断位置 d_m を調整するために用いら
れる。なお、チェックボックスによって選択された切断面に対応するスライダの
みが操作可能となる。また、本実施形態では、スライダの位置が左側にある程、
切断位置 d_m が小さく、結晶構造体が深く切り取られる。

更に、制御パネル部 120 には、不安定原子を除去したいときに選択される不
20 安定原子除去チェックボックス 130、不安定ファセットを除去したいときに選
択される不安定ファセット除去チェックボックス（図示しない）がある。これに
より、不安定原子又は不安定ファセットの一方を自動的に除去することができる
。また、制御パネル部 120 には、原子の配置が乱数による擾乱を受けた後の構
造最適化計算を行なうときに操作される実行ボタン 140 が含まれる。

25 (入力操作による結晶面切断処理)

ミラー指数のチェックボックスとスライダとを利用した、切断面の設定を説明
する。まず、制御手段 20 は、原子配置リスト記憶部 220 に記録された原子配

置リストをリセットして初期原子配置リストを生成し、その後、図4の結晶面切断処理と同様な処理を実行する。

制御手段20は、切断面を表すミラー指数 (a_m b_m c_m) と切断位置 d_m を取得する (ステップS2-1)。ミラー指数設定部211は、表示画面100の制御パネル部120において選択されたミラー指数を特定し、切断位置設定部212はそのミラー指数に対応する切断位置を取得する。対称性設定部213は対称性を取得する。各設定部 (211, 212, 213) は、制御パネル部120において選択されているミラー指数、切断位置、対称性を、各メモリに記憶する。

次に、切断面生成部215は、ミラー指数設定部211、切断位置設定部212、対称性設定部213から、ミラー指数、切断位置、及び対称性をそれぞれ取得する。制御手段20は、すべての原子配置に対して、ミラー指数、切断位置、及び対称性によって切断面を決定し、その切断面を用いて切断処理を行なう。具体的には、切断面生成部215は判断式を生成する。配置リスト更新部216は、各仮想原子の座標を判断式 $f(x, y, z)$ に代入する (ステップS2-2)。算出結果 $f(x_n, y_n, z_n)$ が0よりも大きい場合 (ステップS2-3において「NO」の場合)、配置リスト更新部216は、原子配置リスト記憶部220から、この座標 (x_n, y_n, z_n) を削除する (ステップS2-4)。そして、原子配置リスト記憶部220に記憶されているすべての原子について、ステップS2-2~S2-4が繰り返して行なわれる。

すべての原子配置についてステップS2-2~S2-4を完了した場合には、制御手段20は、他に切断面があるかどうかを確認する (ステップS2-5)。他に切断処理を行っていない判断式がある場合 (ステップS2-5において「NO」の場合) には、この判断式を用いてステップS2-1~S2-4が繰り返して行なわれる。

すべての判断式について切断処理が終了している場合 (ステップS2-5において「YES」の場合) には、結晶面切断処理を終了する。なお、3D表示制御

手段 240 は、逐次、原子配置リスト記憶部 220 に記憶された原子配置リストに基づいて表示データを生成し、出力手段 16 に表示データを供給して、処理中及び処理後の探針の先端部の 3D モデル画像を表示することができる。

このように、制御手段 20 は、制御パネル部 120 に設定された 1 つのミラー指数毎に、このミラー指数に基づいて、上述した結晶面切断処理を行なう。例えば、図 16 の制御パネル部 120 に示すように、「4 回対称性」が選択されており、初期値のミラー指数 (001), (010) 以外に、ミラー指数 (011)、(111)、(013)、(113) が設定されている場合、制御手段 20 はミラー指数の次数が小さい切断面から順に切断処理を行なう。具体的には、図 12 に示す最初の形状 (001、010) から、図 13 に示すように、まず、ミラー指数 (011) の 4 回対称性の切断面により 1 段階目の切断が行なわれる。次に、図 14 に示すように、ミラー指数 (111) の 4 回対称性の切断面により 2 段階目の切断が行なわれる。更に、図 15 に示すように、ミラー指数 (013)、(113) の 4 回対称性の切断面により、それぞれ 3 段階目、4 段階目の切断が行なわれる。

制御パネル部 120 に設定されたすべてのミラー指数の切断面で切断を行なう。切断後の探針の 3D モデル画像が図 16 に示すように表示パネル部 110 に表示される。「v」チェックボックス 121 がチェックされている場合、図 17 に示す仮想原子を表す点と結合を表す線が表示される。「s」チェックボックス 122 がチェックされている場合、図 18 に示す外表面が表示される。「f」チェックボックス 123 がチェックされている場合、図 19 に示すファセットが表示される。図 16 は、図 17、18、19 の表示を合成した探針構造の 3D モデル画像である。

(不安定原子削除処理)

次に、図 5 に示す不安定原子削除処理について説明する。この処理は、前述のように、不安定原子除去チェックボックス 130 が選択されている場合に実行される。

まず、制御手段 20 のファセット抽出手段 231 が、原子配置リスト記憶部 220 に記憶されている仮想原子の座標に基づいて、配置原子が構成する凸胞表面の小面（ファセット）を特定し、このファセットを構成する原子を抽出する（ステップ S3-1）。なお、この凸胞は公知の幾何学的計算を用いて算出することができる。

次に、制御手段 20 は、近隣原子との結合数の算出を行なう（ステップ S3-2）。具体的には、制御手段 20 の結合数算出手段 232 は、各ファセット上の各仮想原子について、各仮想原子が結合している隣接した仮想原子（近隣原子）の数をカウントする。一例では、結合数算出手段 232 は、原子配置リスト記憶部 220 に記録された表面原子毎に、座標を用いて、原子の結合長の位置に存在する仮想原子数をカウントする。

制御手段 20 の不安定原子特定部 233 は、各仮想原子の結合数と基準結合数を比較する（ステップ S3-3）。結合数が基準結合数以下の仮想原子が見つかった場合（ステップ S3-3 において「YES」の場合）には、この仮想原子は不安定であると判断される。そこで、不安定原子特定部 233 は、この不安定原子の座標データを原子配置リストから削除する（ステップ S3-4）。本実施形態では、基準結合数が「1」であるため、不安定原子特定部 233 は、仮想原子が結合する近隣原子の数が「1」以下の仮想原子を、不安定原子であると特定する。そして、制御手段 20 の配置リスト更新部 235 は、特定した不安定原子を原子配置リスト記憶部 220 に記憶されている原子配置リストから削除する。

ステップ S3-2～S3-4 の処理を、すべてのファセットを構成する仮想原子、すなわち結晶構造体の表面に位置する仮想原子について行なう。

なお、この処理においても、3D 表示制御手段 240 は、原子配置リスト記憶部 220 に記憶されている仮想原子に基づいて 3D データを生成し、この 3D データを出力手段 16 に供給し、出力手段 16 において表示する。図 20 は不安定原子を削除する前のファセットを示し、図 21 は不安定原子を削除した後のファセットを示す。

制御手段 20 は、すべての表面原子が安定であるか否かを判定する（ステップ S 3-5）。具体的には、原子配置リスト記憶部 220 に記録された各表面原子について、結合数と基準結合数とを比較して、安定性を評価する。ここで、不安定原子を削除した場合、新たなファセットが形成されるので、新たなファセット

5 についても上述したステップ S 3-1 ~ S 3-4 の処理を繰り返す。

すべての表面原子が安定と判断された場合（ステップ S 3-5 において「YES」）、制御手段 20 は、不安定原子削除処理を終了する。以上のように、不安定の仮想原子を削除することにより、表面の全ての仮想原子が安定している探針を設計することができる。

10 （不安定ファセット削除処理）

不安定ファセット除去チェックボックスが選択されている場合には、制御手段 20 は、図 6 に示す不安定ファセット削除処理を行なう。具体的には、ファセット抽出手段 231 は、原子配置リスト記憶部 220 に記憶された原子配置リストの仮想原子が構成する凸胞の表面のファセットを抽出する（ステップ S 4-1）

15 。

次に、ファセット毎にファセットの安定性を評価する。

まず、制御手段 20 は、ファセット表面の仮想原子の総数 A_S を算出する（ステップ S 4-2）。次に、制御手段 20 は、ファセット表面の仮想原子のダングリングボンドの総数 D を算出する（ステップ S 4-3）。具体的には、結合数算

20 出手段 232 が、仮想原子の近隣原子との結合数を算出する。そして、制御手段 20 は、表面原子の総数と結合数とを乗算して、ファセットの表面にある仮想原子の全結合数を算出する。更に、制御手段 20 は、全結合数から、表面の全仮想原子の結合数を減算する。これにより、ファセットにおける表面原子のダングリングボンドの総数 D が算出される。

25 次に、制御手段 20 は、原子数割合を算出する（ステップ S 4-4）。具体的には、不安定ファセット特定部 234 は、ダングリングボンドの総数 D を、ファセット表面の仮想原子の総数 A_S で除算することにより原子数割合を算出し、算

出した原子数割合と基準値とを比較する。

算出した原子数割合が基準値よりも大きいファセットが見つかった場合（ステップS 4－5において「YES」の場合）には、不安定ファセット特定部234は、このファセットは不安定であると判断し、このファセットを削除する（ステップS 4－6）。具体的には、不安定ファセット特定部234は、この不安定ファセットを構成する仮想原子の座標を、原子配置リスト記憶部220から削除する。これにより、制御手段20は、不安定ファセットを削除して、新たなファセットを生成する。

この場合にも、3D表示制御手段240は、逐次、表示データを生成して出力手段16に供給し、出力手段16の表示画面100の表示パネル部110に表示する。3D表示制御手段240は、安定であると判定されたファセットを目立たせた（例えば青色表示で強調した）表示データを生成してもよい。一方、直前に不安定ファセットを削除して新たに出現したファセットを目立たせた（例えば黄色表示で強調した）表示データを生成してもよい。

そして、制御手段20は、すべてのファセットが安定しているか否かを確認する（ステップS 4－7）。この場合、ステップS 4－6において不安定ファセットを削除したことにより新たに生成されたファセットを含めて、安定性の評価を行なう。すべてのファセットについて安定と判断された場合（ステップS 4－7において「YES」の場合）、制御手段20は、不安定ファセット削除処理を終了する。以上のように、不安定のファセットを削除することにより、表面の全ての仮想原子が安定している探針を設計することができる。

（安定性検証処理）

上述の処理を通じて探針構造の設計を完了した後、制御パネル部120の実行ボタン140が選択された場合、制御手段20は、設計された探針の先端部の最表面近傍の仮想原子についての構造最適化計算を行なう。ここでは、先端部の最表面から数層にある仮想原子が、乱数による擾乱を受けた後に仮想原子が取り得る位置を構造最適化計算を行なってシミュレートする。この構造最適化計算は、

公知の Stillinger-Weber の古典力場ポテンシャルでの全エネルギー値の共役勾配法による最小化を用いることができる。

そして、制御手段 20 は、構造最適化計算によって算出した仮想原子が取り得る位置（座標）を記憶する。次に、3D 表示制御手段 240 は、記憶した各仮想
5 原子の座標から 3D 表示データを生成して出力手段 16 に供給して、表示パネル部 110 に、不安定となる仮想原子、又はこの仮想原子を含むファセットを識別できるように表示する。

好ましい実施形態の探針設計支援システムによれば、以下のような効果を得ることができる。

10 好ましい実施形態では、原子レベルの形状が測定に影響を与える走査型プローブ顕微鏡に用いる探針の設計支援を行なう。具体的には、当初の結晶構造体から、結晶面に沿って切削を行なう。ここで、制御手段 20 は、ミラー指数 (a_m b_m c_m) と切断位置 d_m を取得し（ステップ S 2-1）、切断処理の判断式を生成し、各仮想原子の座標を判断式 $f(x, y, z)$ に代入する（ステップ S 2-2）。そして、配置リスト更新部 216 は、判断式を用いた切断処理により除
15 かれた仮想原子の座標 (x_n , y_n , z_n) を原子配置リスト記憶部 220 から削除する（ステップ S 2-4）。この切断処理は、原子配置リスト記憶部 220 に記憶されているすべての原子について繰り返して行なわれる。これにより、原子レベルの構造を有する探針において、切断面を用いて、効率的に構造体を形成
20 することができる。更に、この探針の先端構造を用いて、走査型プローブ顕微鏡による測定画像の数値シミュレーションにおいて、よりの確な計算を行ない、精度を向上させることができる。

好ましい実施形態では、幾何学的計算から算出された探針のファセットを表示パネル部 110 に表示する。結晶面で切断された実際の探針のファセットを表示
25 できるので、設計者は結晶構造の特性を活かした探針の形状を視覚的に把握することができる。

好ましい実施形態では、不安定原子削除処理において、制御手段 20 は、凸胞

表面のファセットを構成する原子を抽出する（ステップS 3-1）。制御手段20は、結合数が少ない不安定原子をリストから削除する（ステップS 3-4）。また、不安定ファセット削除処理において、ファセット抽出手段231は、切断により残された配置原子が構成する凸胞の表面のファセットを抽出する（ステップS 4-1）。そして、制御手段20は、ファセット毎に安定性を評価する。具体的には、ファセット表面の仮想原子の総数及び仮想原子のダングリングボンドの総数を計数し、原子数割合を算出する。この原子数割合が基準値よりも大きい場合には、このファセットは不安定であると判断して、このファセットを削除する（ステップS 4-6）。このように、不安定な仮想原子や不安定なファセットを取り除いて探針構造を安定にするので、実際の表面現象を考慮した探針を構成することができる。

好ましい実施形態では、不安定原子削除処理においては、不安定原子を削除することにより新たな表面原子が生じた場合には、制御手段20は、全仮想原子が安定するまで、再度、ステップS 3-1～S 3-4を繰り返す（ステップS 3-5において「NO」）。また、不安定ファセット削除処理においては、制御手段20は、不安定ファセットを削除することにより新たなファセットが生成された場合には、全ファセットが安定するまで、ステップS 4-1以降の処理を繰り返す（ステップS 4-7において「NO」）。これにより、不安定な仮想原子や不安定なファセットを連鎖的に取り除いて探針構造を安定にするので、実際の表面現象を考慮した探針を構成することができる。

好ましい実施形態では、制御手段20は、設計された探針の先端部の最表面近傍の数層にある仮想原子が、乱数による擾乱を受けたときの状態（位置）を構造最適化計算でシミュレートする。これにより、擾乱により不安定となる仮想原子やファセットを検出することができ、探針構造体の安定性を評価することができる。

好ましい実施形態では、3D表示制御手段240は、探針の先端部の3D画像を表示画面100に表示する。制御パネル部120には、ミラー指数に対応する

チェックボックスが含まれている。設計者は、制御パネル部 120 のミラー指数を特定することにより、切断面を指定することができる。従って、設計者は、効率的に探針の形状を指定できる。

5 更に、制御パネル部 120 には、切断面の切断位置 d_m を設定するためのスライダが含まれている。このため、切断位置を GUI により効率的に調整することができるので、探針構造の設計変更を容易に行なうことができる。

10 好ましい実施形態では、制御パネル部 120 には、表示形式を選択するチェックボックスが含まれている。これら表示形式には、仮想原子の点と結合線との表示する表示形式（「v」チェックボックス）、切断面を含む結晶構造体の外表面を表示する表示形式（「s」チェックボックス）及び表面原子により構成されるファセットを表示する表示形式（「f」チェックボックス）がある。設計者はチェックボックスを選択的にチェックすることにより、探針内の仮想原子を表す点、仮想原子同士の結合を示す線、切断により形成される探針の面、切断後に残った仮想原子により形成されるファセットの形状などを選択的に表示させることができる。

15 好ましい実施形態は、以下のように変更してもよい。

好ましい実施形態では、不安定原子削除処理及び不安定ファセット削除処理は、凸胞表面のファセットを構成する仮想原子が安定か否かにより判定した。これに限定されるものではなく、切断面の形状から、仮想原子が安定か不安定であるかを判定してもよい。

20 好ましい実施形態では、単位構造設定部 201 が探針の単位構造についてのデータを取得した（ステップ S1-1）。この場合、結晶構造体の単位構造（例えば、体心立方格子構造やダイヤモンド構造など）を特定するデータを入力手段 15 を介して取得する。単位構造についてのデータの取得は、この方法に限定されるものではなく、結晶構造体の単位構造を特定するデータとして、例えば、材料種別に対して特定される単位構造データを用いてもよい。この場合、制御手段 20 に、材料種別に応じて単位構造を特定する単位構造テーブルを記憶させておく

。そして、入力手段 15 を用いて材料種別が指定されると、単位構造設定部 201 は、指定された材料種別に対応付けられた単位構造を単位構造テーブルから取得する。これにより、材料毎の物性定数を入力することなく、多様な材料から構成された探針を効率的に設計することができる。

- 5 好ましい実施形態の不安定ファセット削除処理では、ダングリングボンドの総数を表面原子の総数で除算した原子数割合に基づいて、不安定ファセットを判定した。不安定ファセットの判定は、この方法に限定されるものではない。例えば、近隣原子との結合総数を表面原子の総数で除算した割合が、一定以下の場合には不安定ファセットであると判定してもよい。
- 10 好ましい実施形態では、探針構造の設計を完了した後、仮想原子が取り得る位置についての構造最適化計算を行なった。これに限らず、探針構造の設計を完了した後に、探針の先端部の最表面近傍の数層の仮想原子が、乱数による擾乱を受けた後の不安定状態について追加計算を行なってもよい。この場合、制御手段 20 は、追加計算により不安定となる仮想原子の座標データを特定して記憶する。
- 15 例えば、制御手段 20 は、不安定となる仮想原子の座標に対して、アラーム（例えば赤色）を表示させるためのフラグを記録する。また、この仮想原子を含むファセット全体にアラームを記録するようにしてもよい。更に、制御手段 20 は、3D 表示データを生成して出力手段 16 に供給して、表示画面 100 の表示パネル部 110 に、不安定となる仮想原子、又はこの仮想原子を含むファセットを識別
- 20 別できるように表示してもよい。

請求の範囲

1. データ入力手段と探針の先端部の画像を出力する出力手段とに接続された制御コンピュータを用いて、走査プローブ顕微鏡に用いる探針の設計を支援するシステムであって、
- 5 前記制御コンピュータが、
- 前記探針を構成する結晶構造体の内部に仮想原子を配置して、各仮想原子の座標を記憶し、
- 結晶面方位と切断位置を、前記入力手段を介して取得し、
- 10 前記結晶面方位と前記切断位置に基づいて決定される境界条件を用いて、前記結晶構造体から削除すべき境界外仮想原子を特定し、
- 前記記憶した仮想原子の座標を用いて、前記境界外仮想原子を除く結晶構造体の画像を前記出力手段に表示し、
- 前記結晶構造体の表面に位置する各仮想原子の結合数を計数し、
- 15 計数した結合数に基づいて不安定な仮想原子を特定し、
- 前記不安定な仮想原子の表示を変更するようにプログラムされていることを特徴とする探針設計支援システム。
2. 前記不安定な仮想原子の表示の変更は、前記不安定な仮想原子を除く結晶構造体を表示することを特徴とする請求項1に記載の探針設計支援システム。
- 20 3. 前記不安定な仮想原子の表示の変更は、すべての不安定な仮想原子が削除されるまで繰り返されることを特徴とする請求項1又は2に記載の探針設計支援システム。
- 25 4. 前記不安定な仮想原子の表示の変更は、
- 前記記憶された仮想原子の座標に基づいて、前記結晶構造体に形成された凸胞

のファセットを特定し、

前記ファセットを構成する仮想原子の総数及び仮想原子の近隣原子との結合数を計数し、

前記仮想原子の総数と前記結合数から前記ファセットを構成する仮想原子のダ

5 ングリングボンドの総数を算出し、

算出したダングリングボンドの総数を、前記ファセットを構成する仮想原子の数で除算して原子数割合を算出し、

算出した原子数割合に基づいて、不安定なファセットを特定することを含む請求項 1 ～ 3 のいずれか 1 項に記載の探針設計支援システム。

10

5. データ入力手段と探針の先端部の画像を出力する出力手段に接続された制御コンピュータを用いて、走査プローブ顕微鏡に用いる探針の設計を支援する方法であって、

前記制御コンピュータが、

15 前記探針を構成する結晶構造体の内部に仮想原子を配置して、各仮想原子の座標を記憶し、

結晶面方位と切断位置を、前記入力手段を介して取得し、

前記結晶面方位と前記切断位置に基づいて決定される境界条件を用いて、前記結晶構造体から削除すべき境界外仮想原子を特定し、

20 前記記憶した仮想原子の座標を用いて、前記境界外仮想原子を除く結晶構造体の画像を前記出力手段に表示し、

前記結晶構造体の表面に位置する各仮想原子の結合数を計数し、

計数した結合数に基づいて不安定な仮想原子を特定し、

前記不安定な仮想原子の表示を変更することを特徴とする探針設計支援方法。

25

6. データ入力手段と探針の先端部の画像を出力する出力手段に接続された制御コンピュータに、走査プローブ顕微鏡に用いる探針の設計を支援させるプロ

グラムであって、

前記制御コンピュータが、

前記探針を構成する結晶構造体の内部に仮想原子を配置して、各仮想原子の座標を記憶し、

5 結晶面方位と切断位置を、前記入力手段を介して取得し、

前記結晶面方位と前記切断位置に基づいて決定される境界条件を用いて、前記結晶構造体から削除すべき境界外仮想原子を特定し、

前記記憶した仮想原子の座標を用いて、前記境界外仮想原子を除く結晶構造体の画像を前記出力手段に表示し、

10 前記結晶構造体の表面に位置する各仮想原子の結合数を計数し、

計数した結合数に基づいて不安定な仮想原子を特定し、

前記不安定な仮想原子の表示を変更するように構成されたプログラムコードを備えていることを特徴とする探針設計支援プログラム。

図1

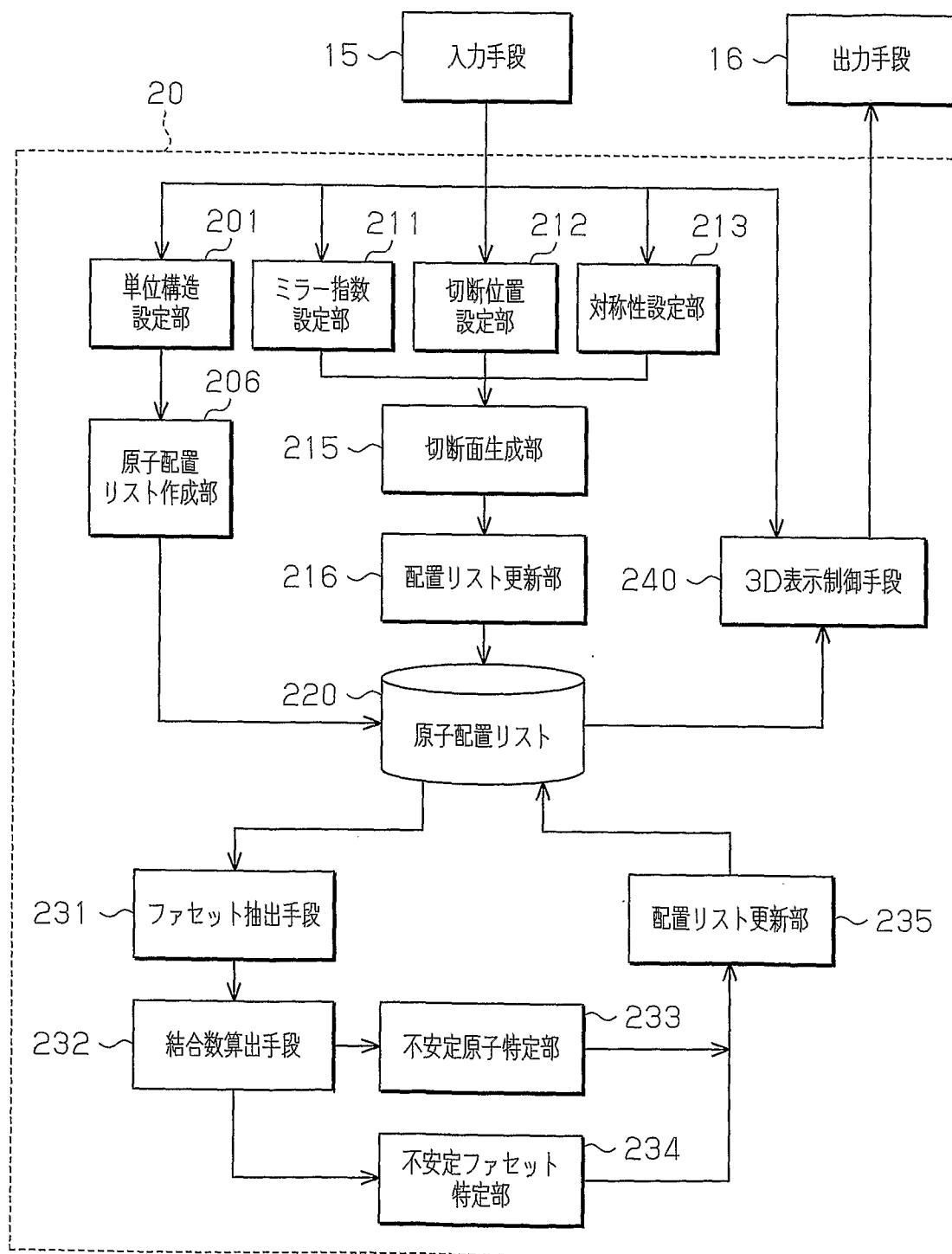


図2

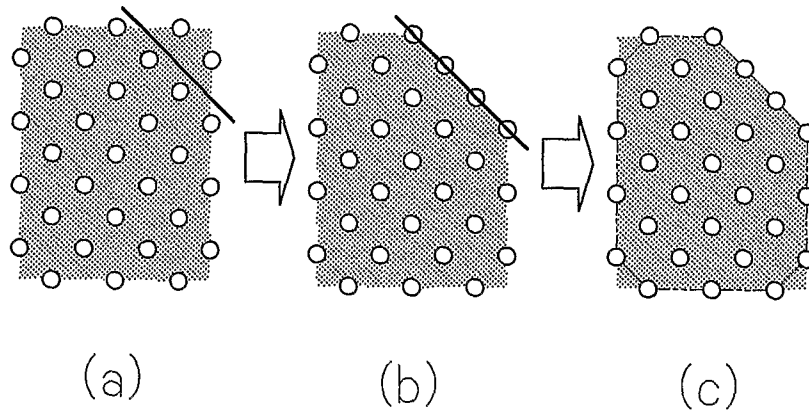


図3

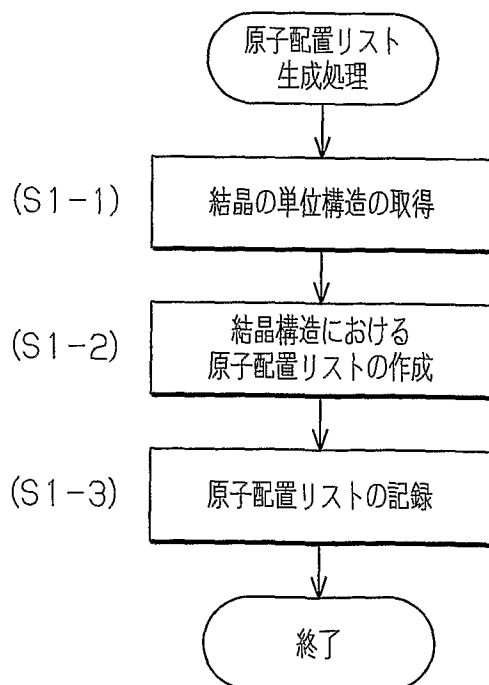


図4

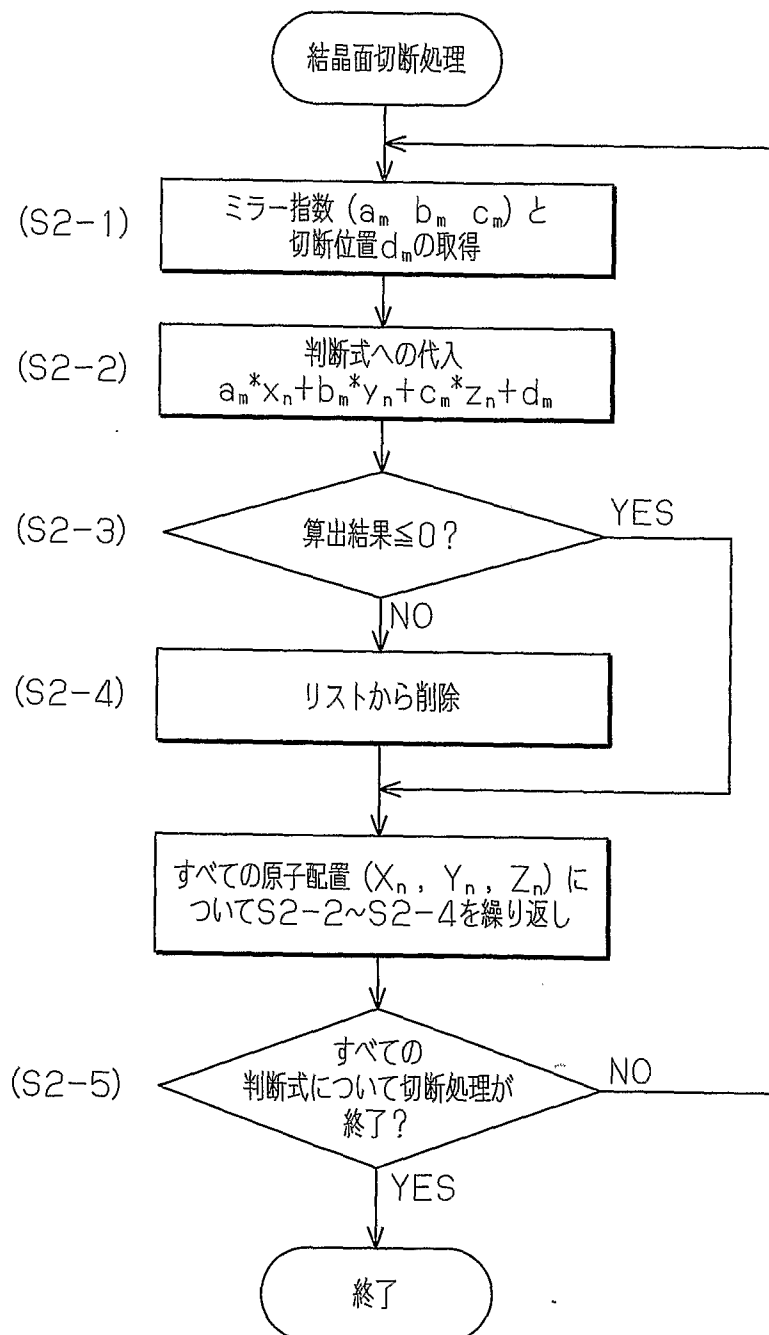


図5

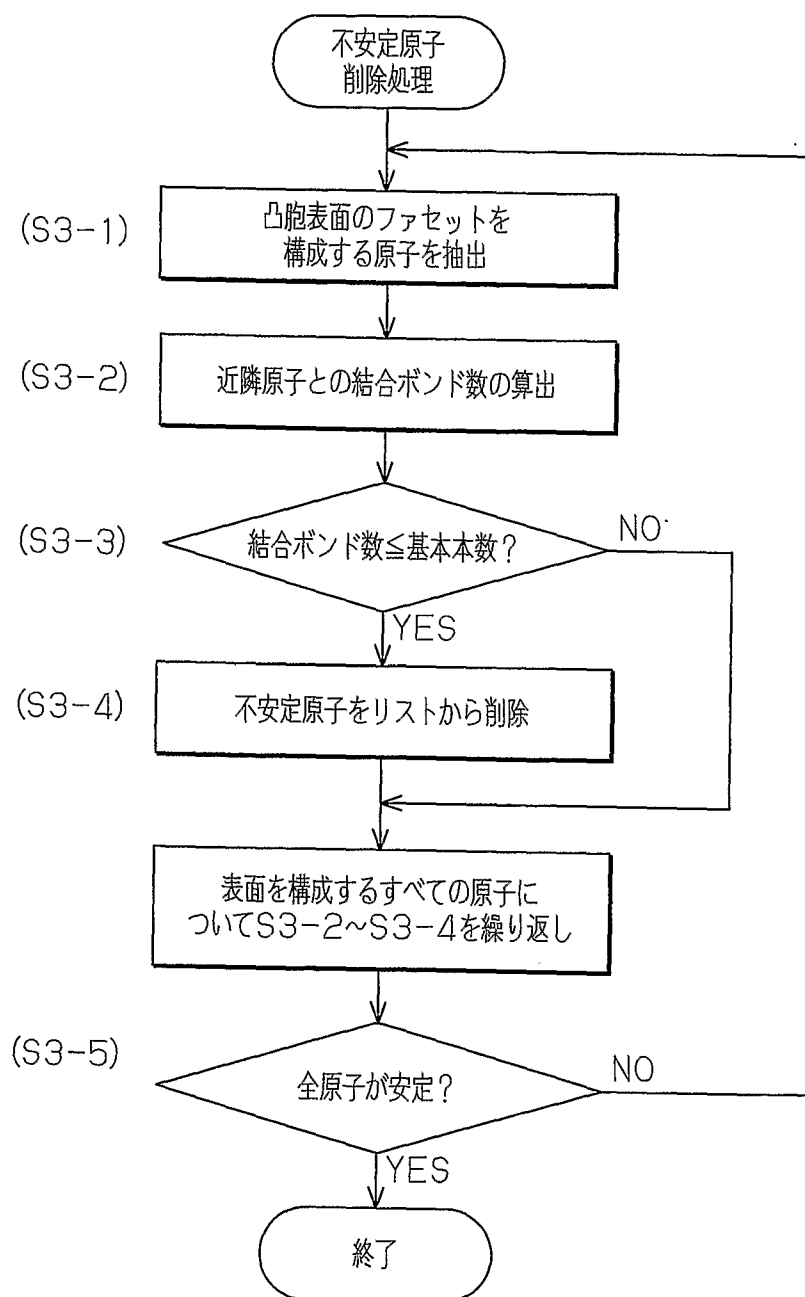
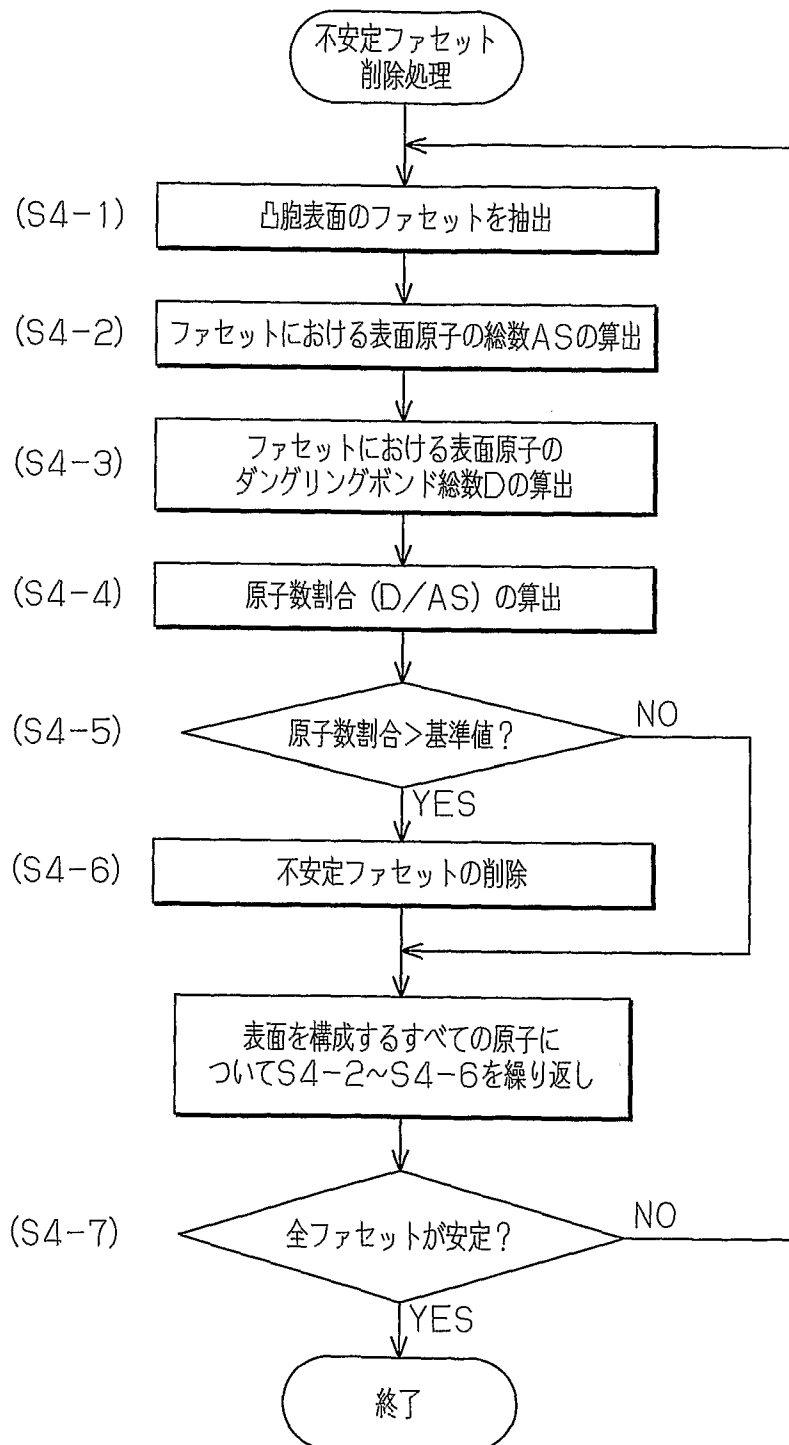
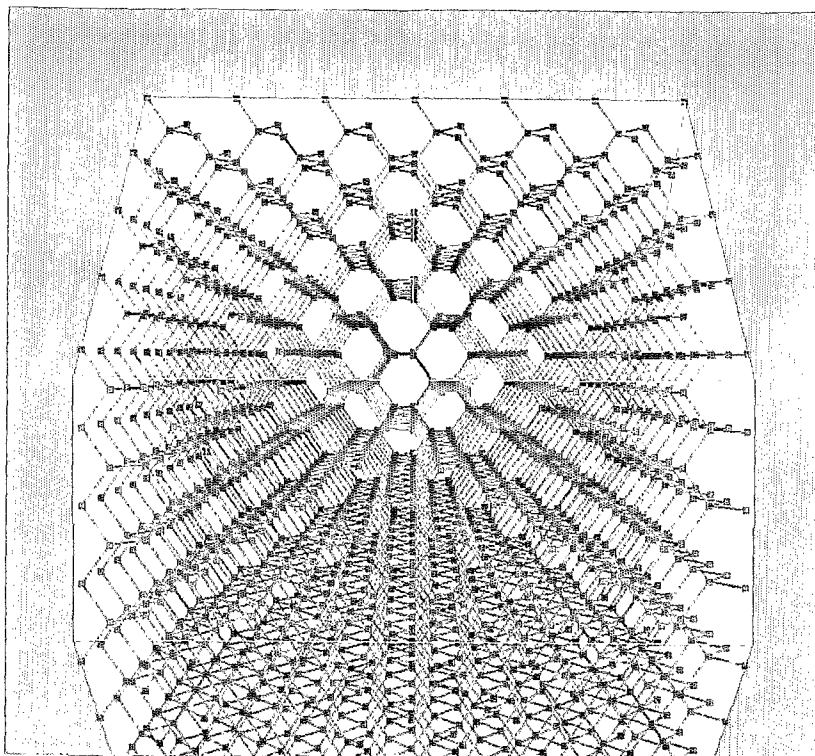


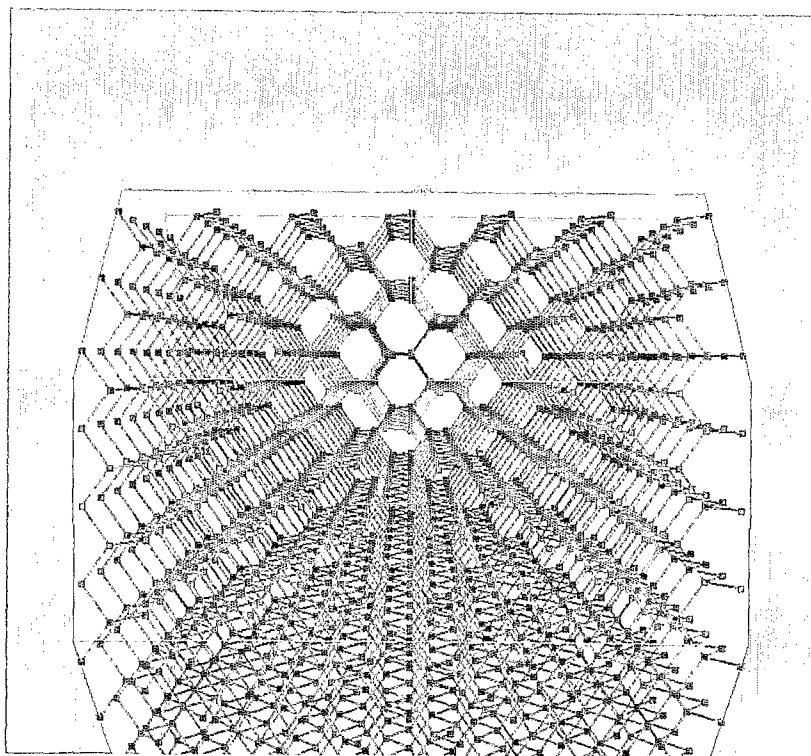
図6



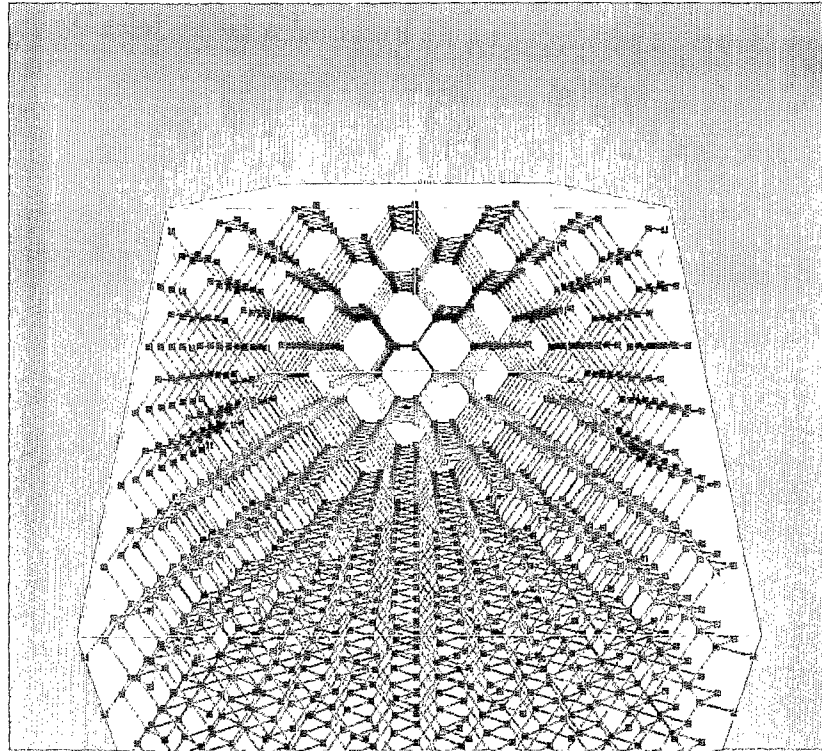
7



8



9



10

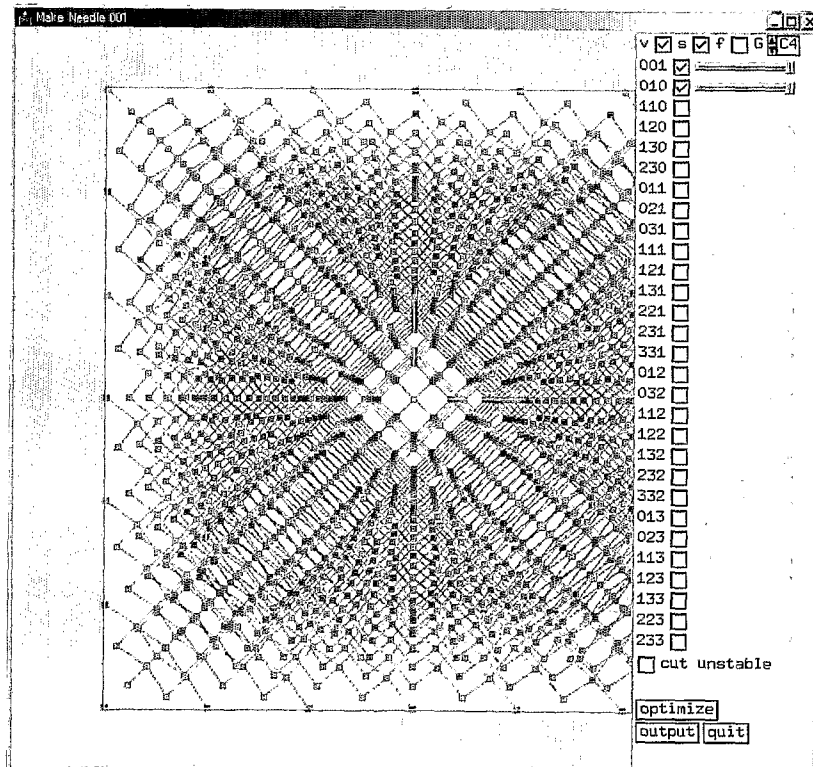


図 11

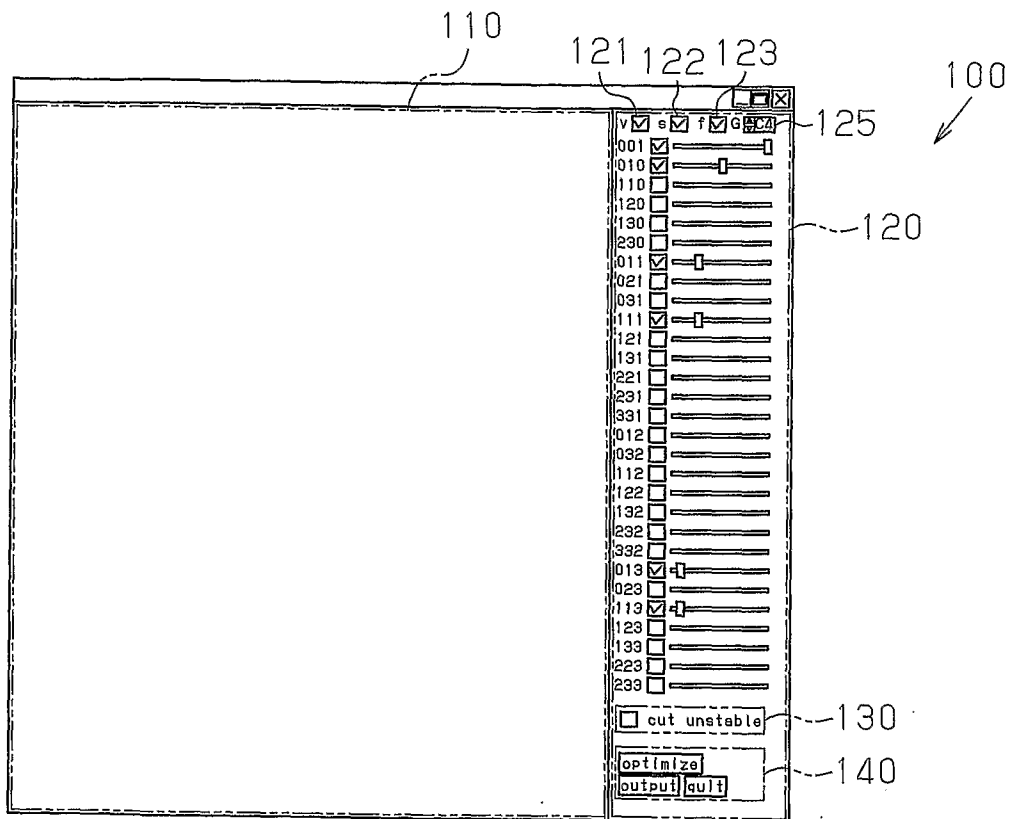


図12

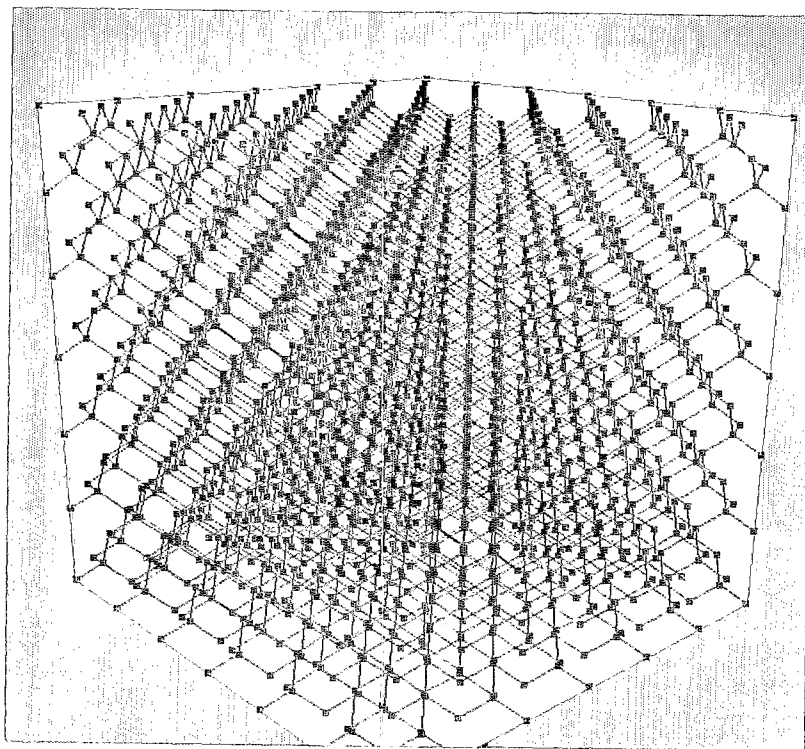


図13

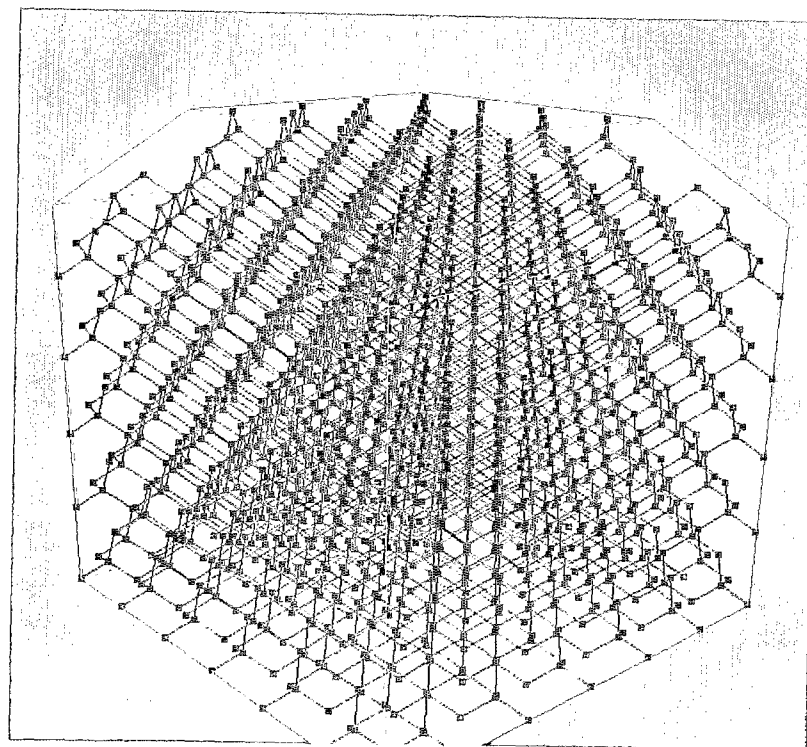


図14

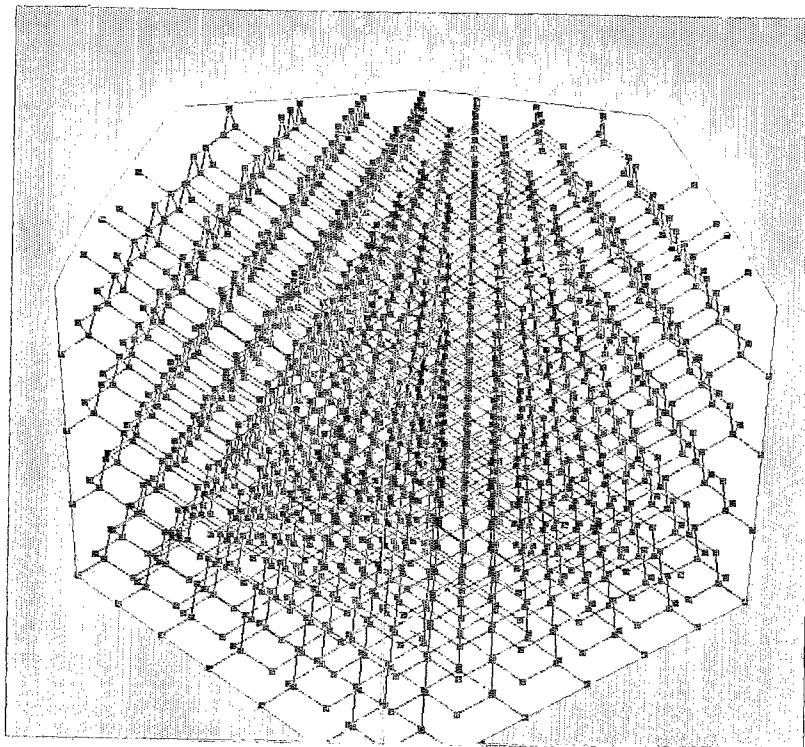
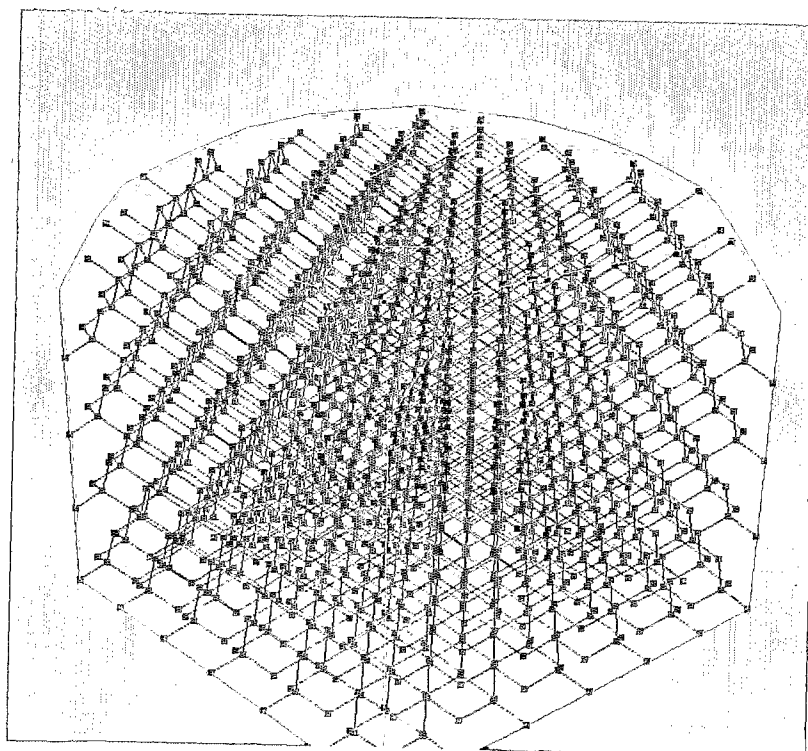
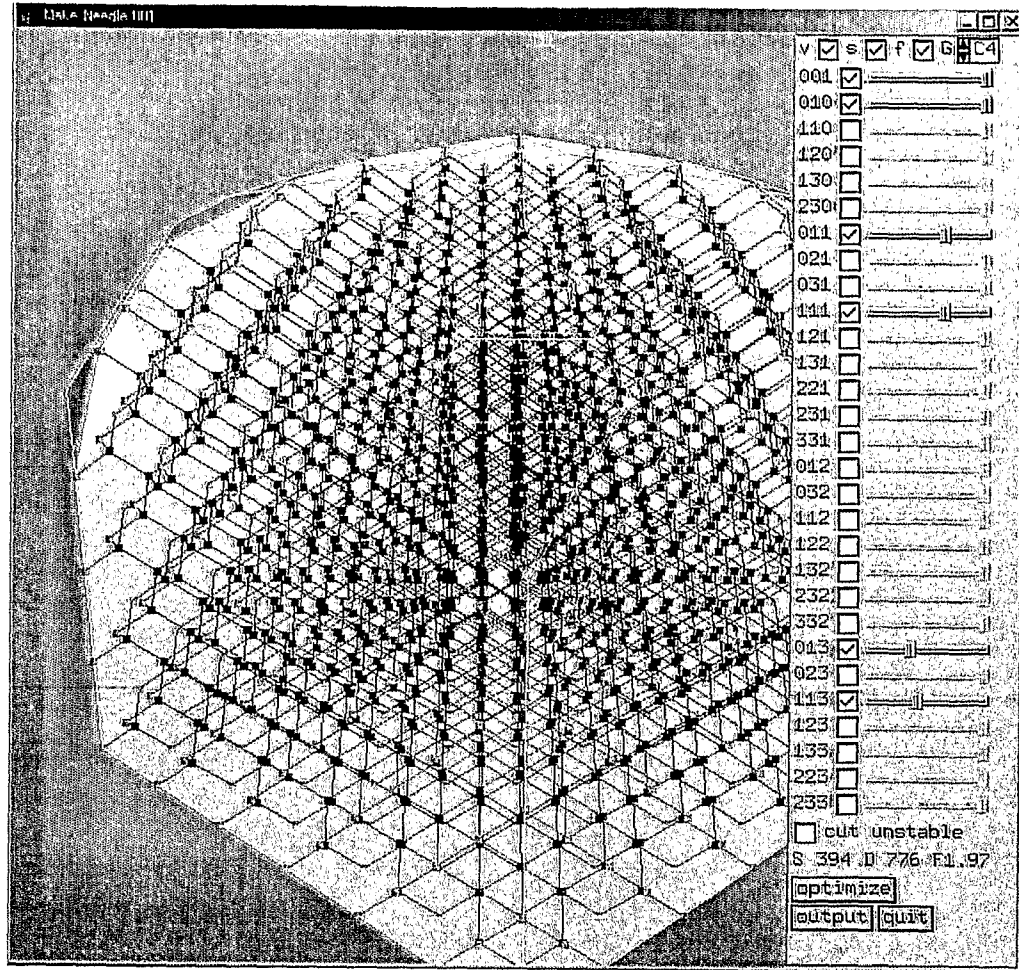


図15



16



17

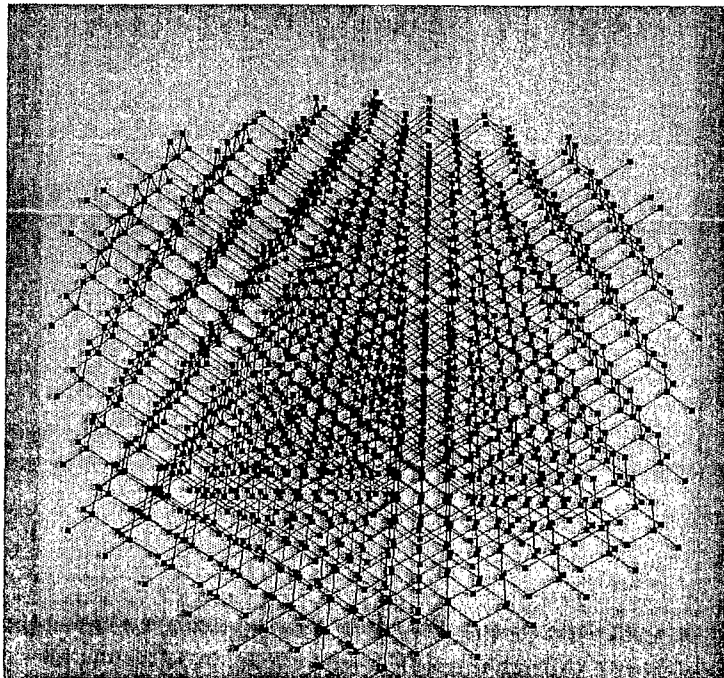


図18

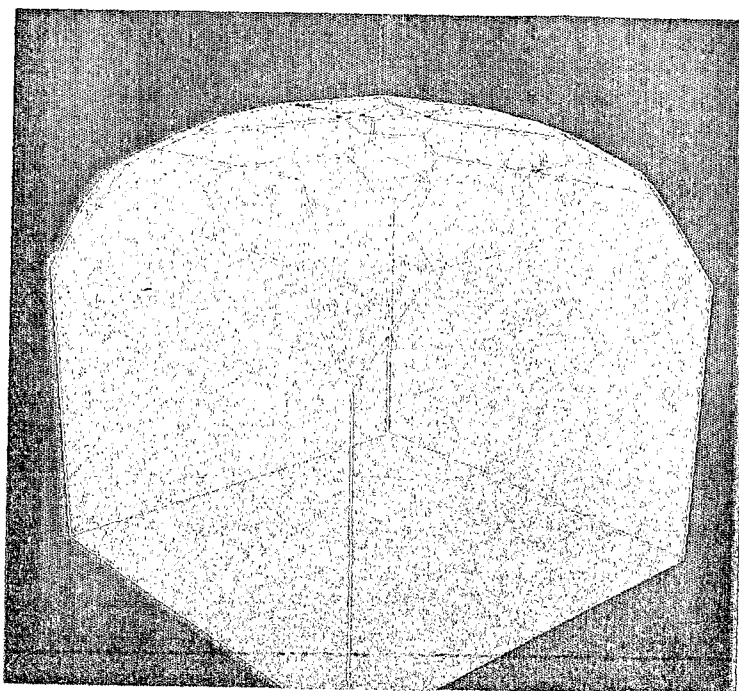
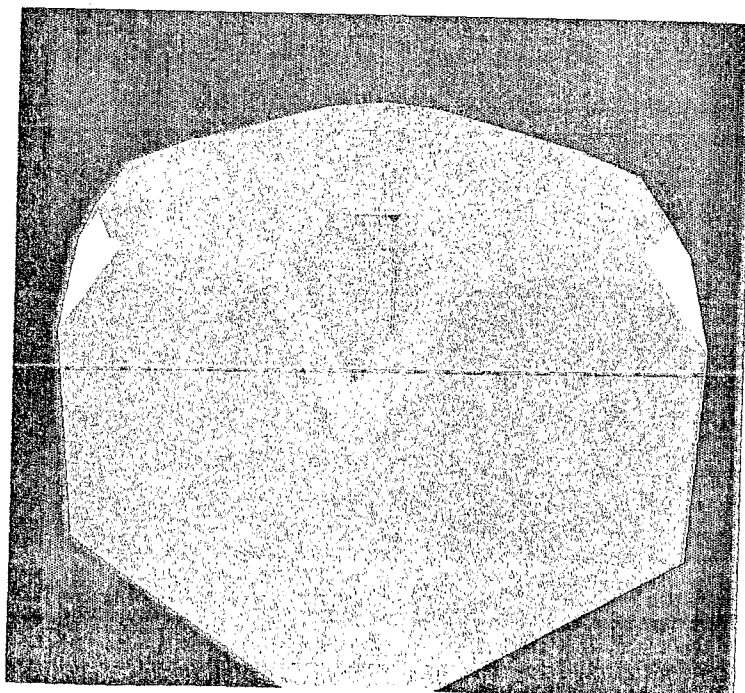
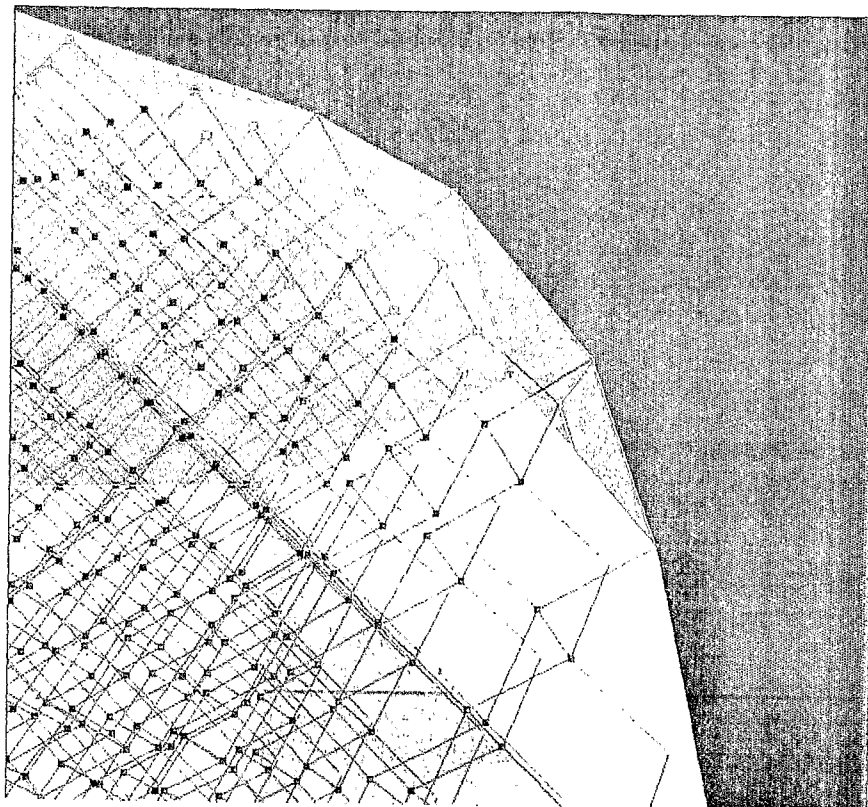


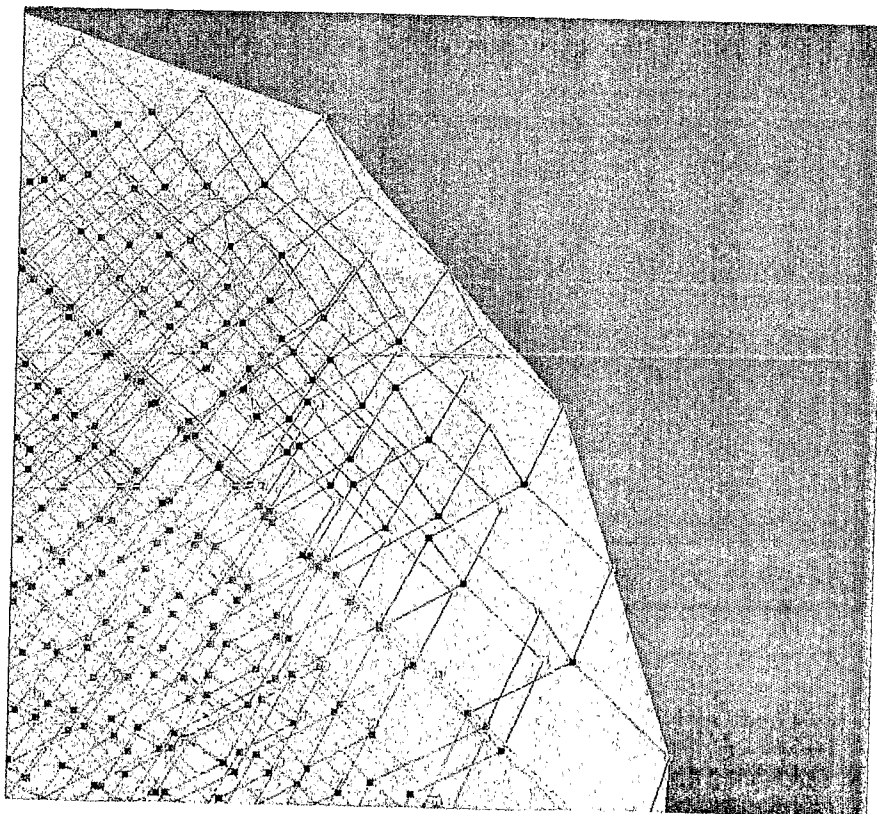
図19



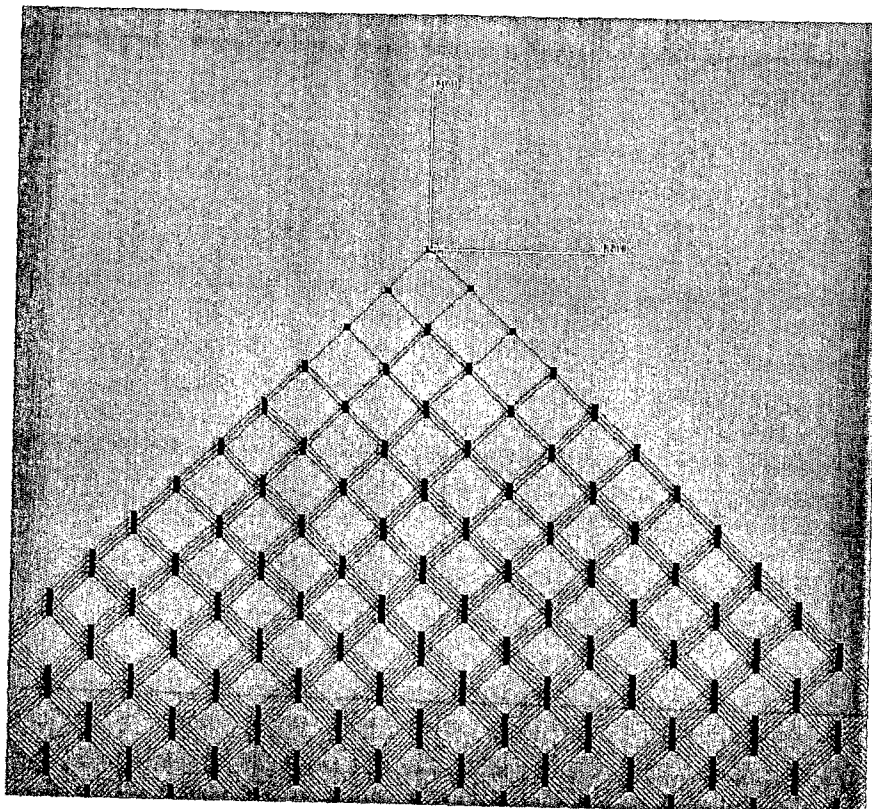
20



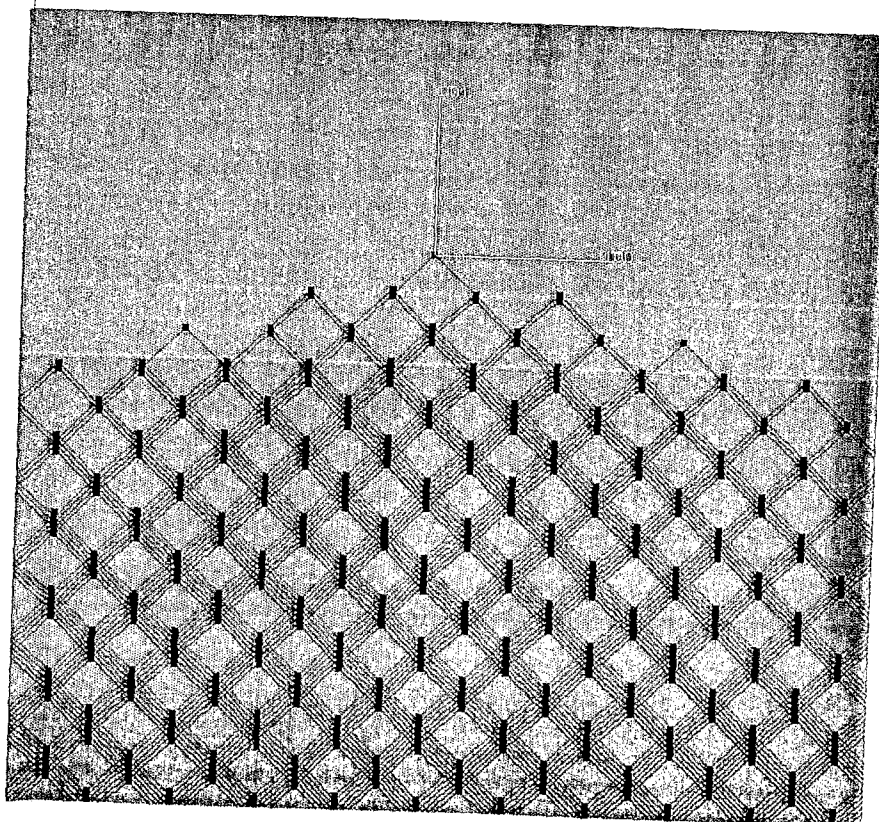
21



22



23



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2007/057324

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G01N13/10(2006.01) i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G01N13/10-13/24, G06F17/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2007
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2007	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2007

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

JSTPlus (JDream2)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	Satoshi Watanabe, et al., First Principles Study of the Effect of Tip Shape on Scanning Tunneling Microscopy Images, Japanese Journal of Applied Physics, 1993, Vol. 32, Part 1, No. 6B, pp.2911-2913	1-6
A	Nariaki Miura and Masaru Tsukada, Theoretical Analysis of Tip Effect on Noncontact Atomic Force Microscopy Image of Si(100) 2 X 1: H Surface, Japanese Journal of Applied Physics, 2002, Vol.41, Part 1, No. 1, pp. 306-308	1-6
A	Masaru TSUKADA, "Hisesshoku Genshikanryoku Kenbikyō no Rironteki Kiso to Simulation", Dai 50 Kai Oyo Butsurigaku Kankei Rengo Koenkai Koen Yokoshu, 27 March, 2003 (27.03.03), separate Vol.0, page 131	1-6

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
13 April, 2007 (13.04.07)

Date of mailing of the international search report
24 April, 2007 (24.04.07)

Name and mailing address of the ISA/
Japanese Patent Office

Authorized officer

Facsimile No.

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2007/057324

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 7-174769 A (Advantest Corp.), 14 July, 1995 (14.07.95), Full text; all drawings (Family: none)	1-6
A	JP 8-178935 A (Yuzo MORI), 12 July, 1996 (12.07.96), Full text; all drawings & US 5898176 A & EP 801310 A1 & WO 1996/20406 A1	1-6

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (I P C))

Int.Cl. G01N13/10(2006.01)i

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (I P C))

Int.Cl. G01N13/10-13/24, G06F17/00

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2007年
日本国実用新案登録公報	1996-2007年
日本国登録実用新案公報	1994-2007年

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

JSTPlus(JDream2)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
A	Satoshi Watanabe, et al., First Principles Study of the Effect of Tip Shape on Scanning Tunneling Microscopy Images, Japanese Journal of Applied Physics, 1993, Vol. 32, Part 1, No. 6B, pp. 2911-2913	1-6
A	Nariaki Miura and Masaru Tsukada, Theoretical Analysis of Tip Effect on Noncontact Atomic Force Microscopy Image of Si(100) 2 X 1: H Surface, Japanese Journal of Applied Physics, 2002, Vol. 41, Part 1, No. 1, pp. 306-308	1-6

☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)
「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

13.04.2007

国際調査報告の発送日

24.04.2007

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (I S A / J P)
郵便番号100-8915
東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

野田 洋平

2 J

3 2 1 0

電話番号 03-3581-1101 内線 3252

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
A	塚田捷, 非接触原子間力顕微鏡の理論的基礎とシミュレーション, 第 5 0 回応用物理学関係連合講演会講演予稿集, 2003. 03. 27, 第 0 分冊、第 1 3 1 頁	1-6
A	JP 7-174769 A (株式会社アドバンテスト) 1 9 9 5 . 0 7 . 1 4 , 全文、全図 (ファミリーなし)	1-6
A	JP 8-178935 A (森 勇藏) 1 9 9 6 . 0 7 . 1 2 , 全文、全図 & US 5898176 A & EP 801310 A1 & WO 1996/20406 A1	1-6