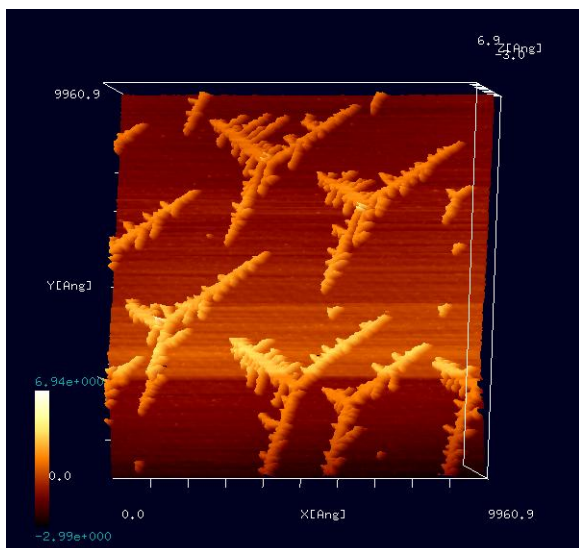


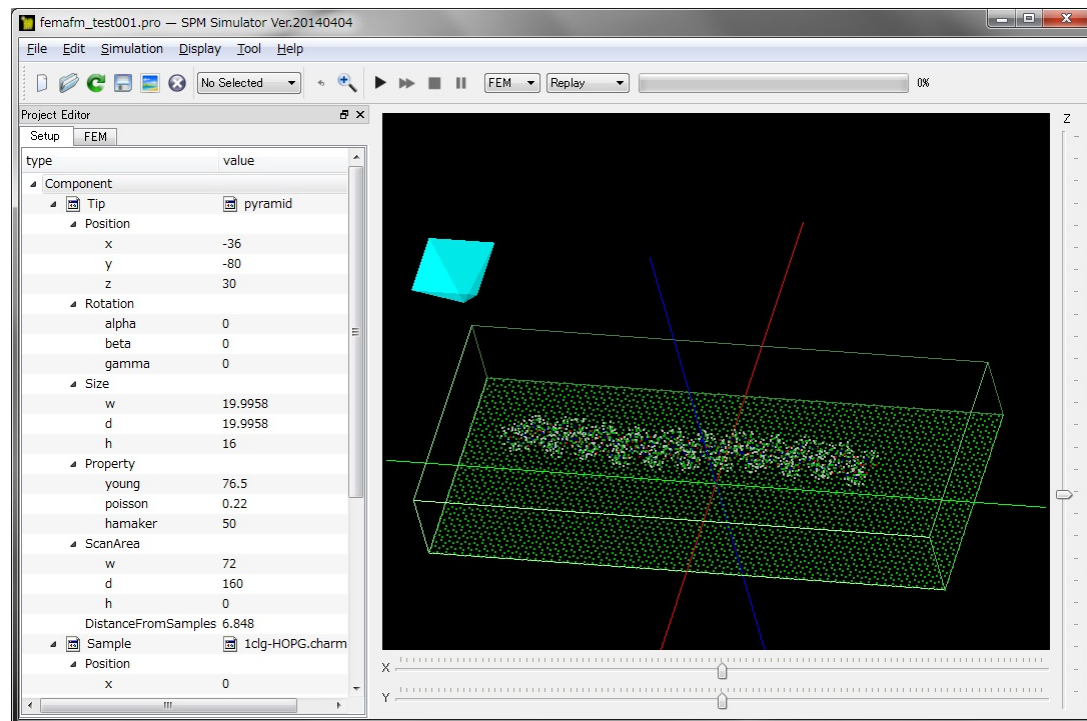
SPMシミュレータ 走査型プローブ顕微鏡実験画像シミュレータ



[東京大学生産技術研究所 福谷研究室提供

(Ir結晶表面上にAuを蒸着、アニーリングしてフラクタル島状構造を自己形成させたもの)

S. Ogura et al., Phys. Rev. B 73, 125442 (2006); S. Ogura and K. Fukutani, J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 474210.]



株式会社アドバンスアルゴリズム&システムズ
2017年8月7日

SPMシミュレータの特徴

(1) 実験画像とシミュレーション画像を直接、比較・検討できる

SPM実験装置から直接アウトプットされたデータ画像と、シミュレーションから得られた数値計算画像を、同一のウィンドウ上で、並行してデジタル処理できます

実験結果と計算結果の比較により、新たな知見が得られます

(2) 69種類の元素が量子力学的シミュレータで使用可能です

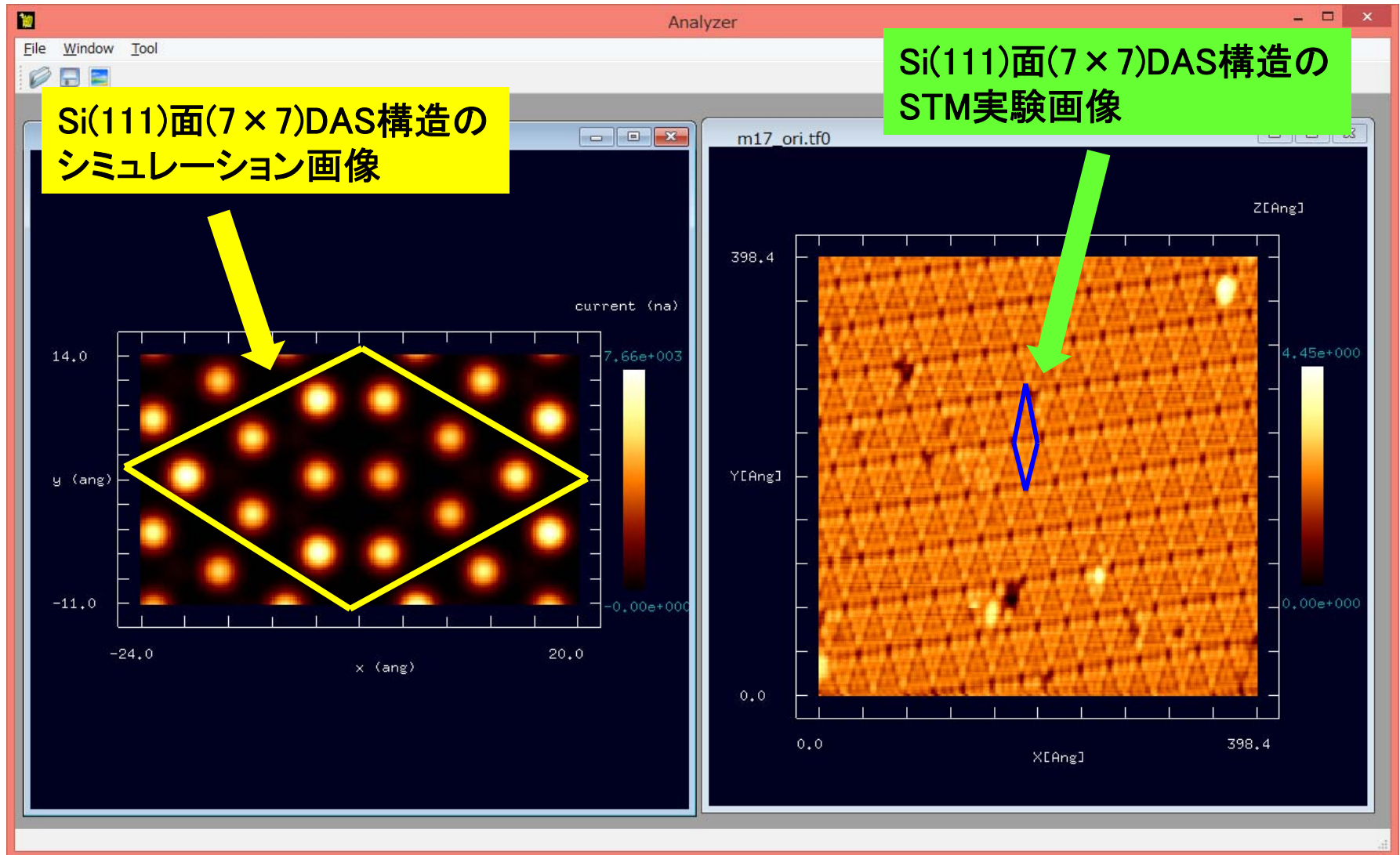
SPMシミュレータには、DFTB(密度汎関数強結合)法に基づく、量子力学の効果を検討したソルバが用意されています

69種類の元素から成る化合物の、STM, STS, AFM, KPFMシミュレーションが実行可能です。

事実上、あらゆる種類の無機・有機化合物のシミュレーションに対応しています。

シミュレーション画像と実験画像との比較

同一画面上で二つの画像をデジタル処理可能

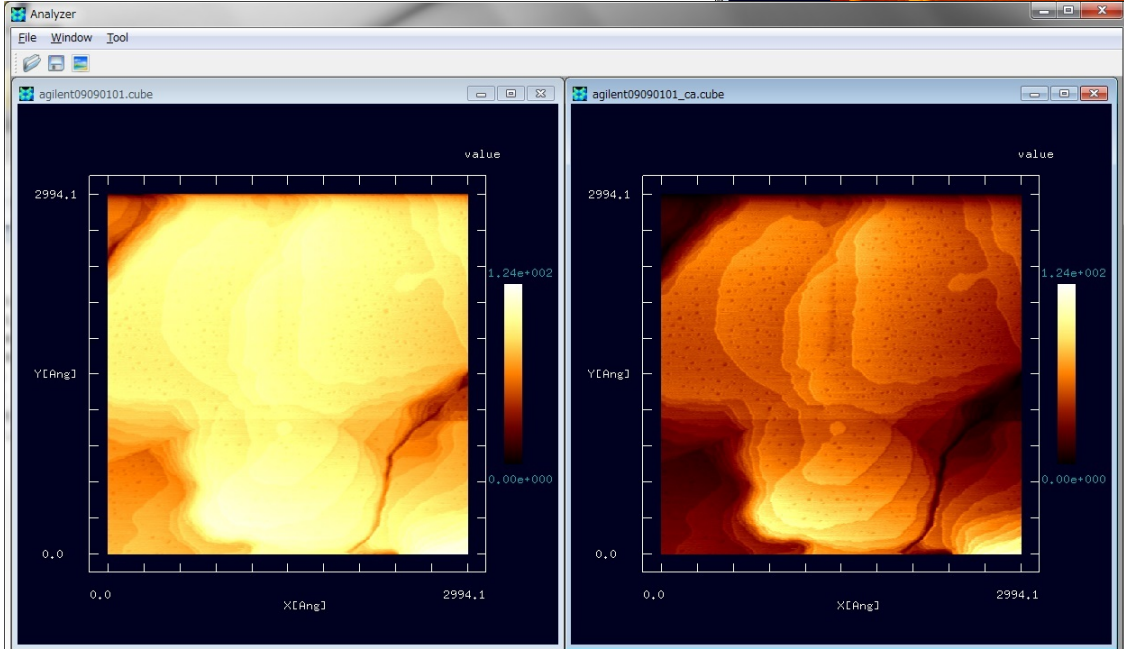
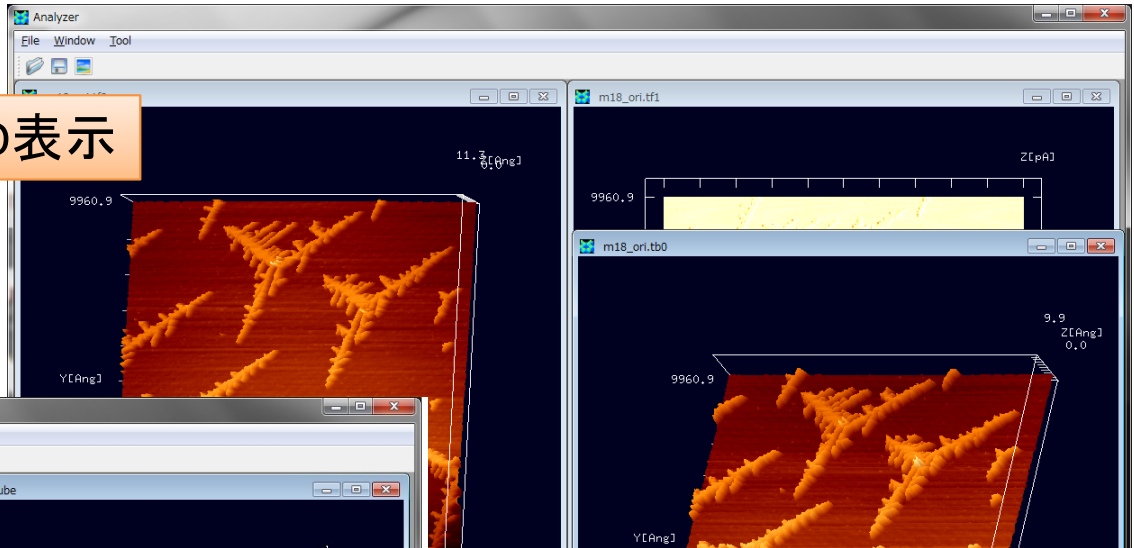


Si(111)面(7×7)DAS構造のシミュレーション画像

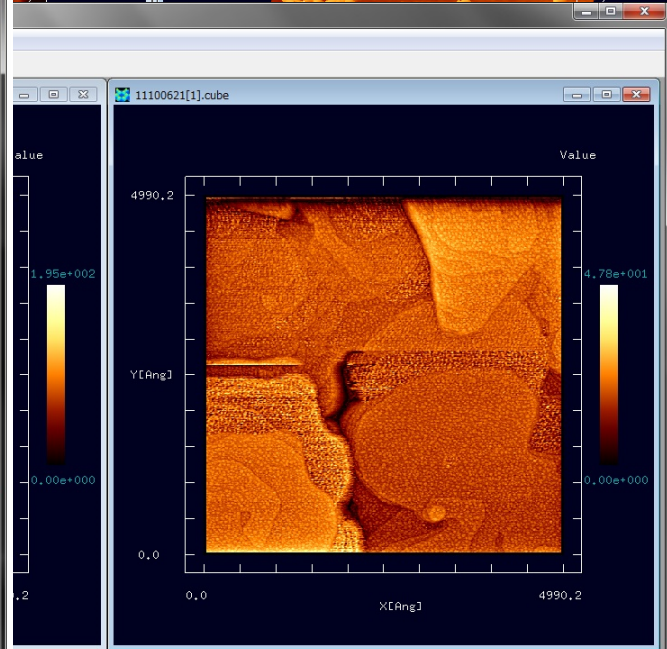
Si(111)面(7×7)DAS構造のSTM実験画像

様々なデジタル処理機能

3D表示



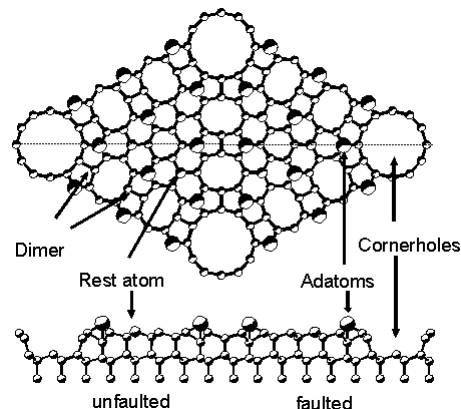
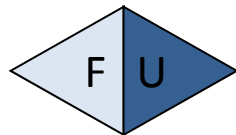
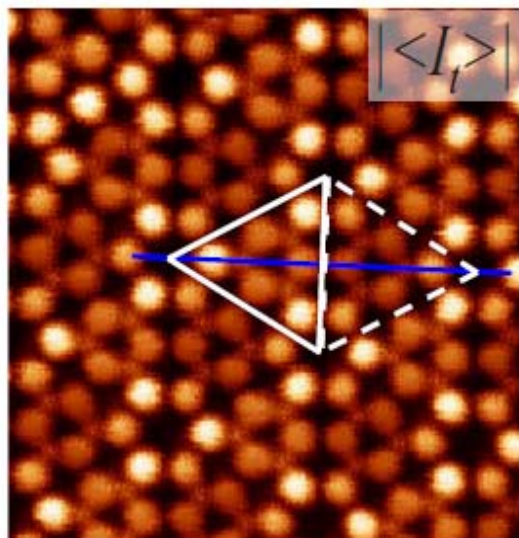
コントラスト調整



フーリエ画像処理

DFTB(密度汎関数)ソルバ

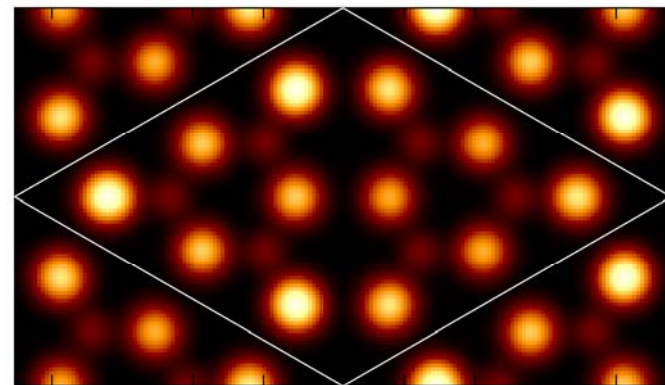
手軽に使えて信頼できる結果



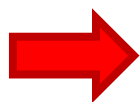
stacking-faultedとstacking-unfaultedの三角形領域部分で明るさに違い

Si(111)-7x7 DAS (dimer-adatom-stacking fault)構造のSTM実験画像
(大阪大学森田研究室提供、2009)

DFTBソルバは、明るさの違いを再現可能



DFTBソルバによるSi(111)-7x7 DAS構造のSTMシミュレーション画像



SPMシミュレータは実験画像の物理的解釈のヒントを与えてくれる

このような詳細な分析が、69種類の元素について可能

DFTB原子間作用パラメータ

DFTB計算 使用可能元素 (2015/12/25更新)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*1	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	*2	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	113	Fl	115	Lv	117	118

*1 ランタノイド	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
*2 アクチノイド	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

27元素 使用可能 (2015/09/26)

	12 H, C, N, O, Al, Si, P, Ti, Ru, W, Pt, Au
	15 Li, B, F, Na, Mg, S, Cl, Cu, Ga, Ge, As, Br, Ag, I, Bi

32元素 追加開発

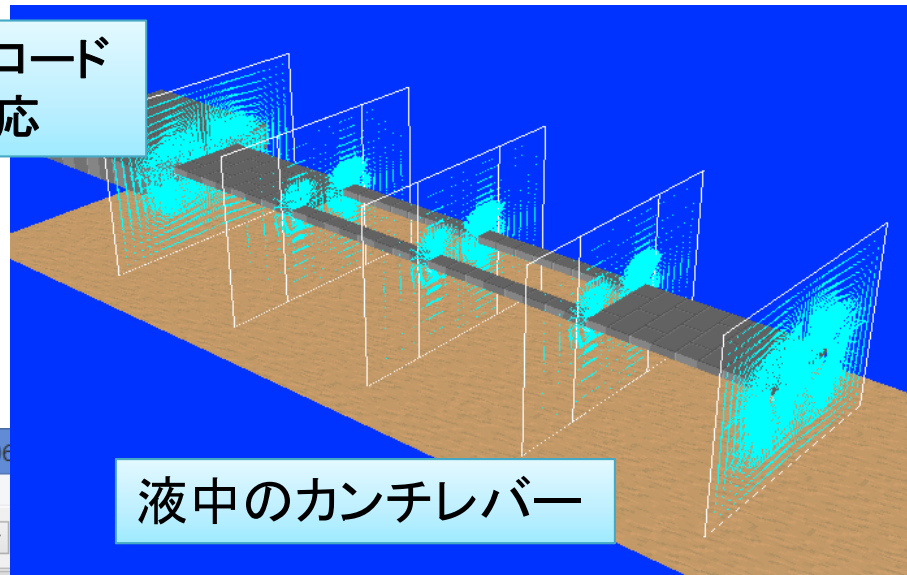
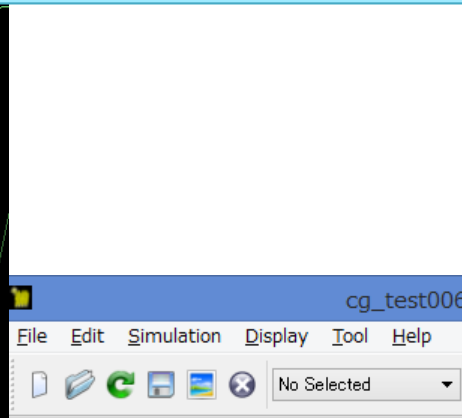
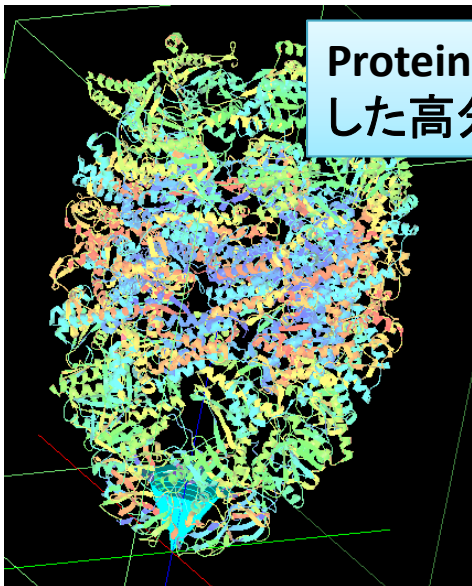
	17 Sc, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zn, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Rh, Pd, Re, Ir (遷移金属)
	8 La, Ce, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm (ランタノイド)
	4 Se, In, Sb, Te (半金属)
	3 K, Rb, Cs (アルカリ金属)

10元素追加

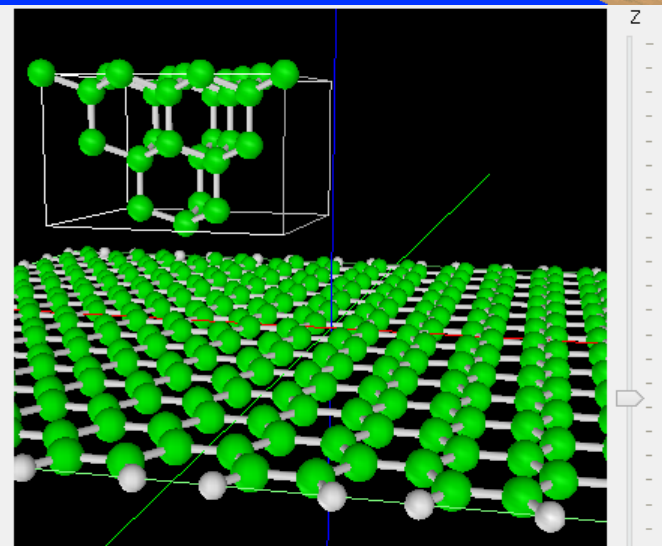
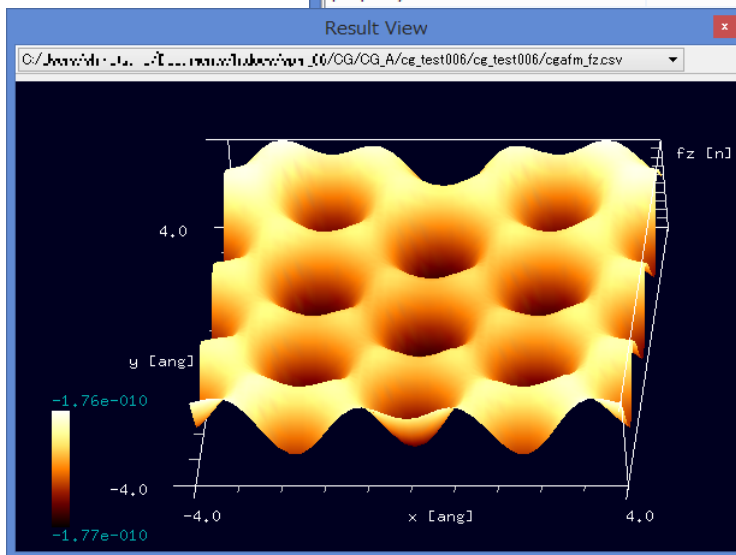
	10 Be, Ca, Sr, Ba, Cd, Sn, Hg, Pb, Yb, U
--	--

バイオ・ソフトマテリアル・有機化合物系の研究者に適したシミュレータを用意

Protein Data Bankからダウンロードした高分子形状データにも対応



液中のカンチレバー



分子動力学法によるグラフェンシートのAFMシミュレーション

SPMシミュレータのコンセプト

主な対象となるユーザ:SPM実験研究者全般
一部の理論研究者(分子動力学法、DFTB法)

近似的なシミュレーション結果を実験研究者に短時間で提供することを目的としている

計算時間が長くかかる厳密なシミュレーション結果を算出することを目的としていない

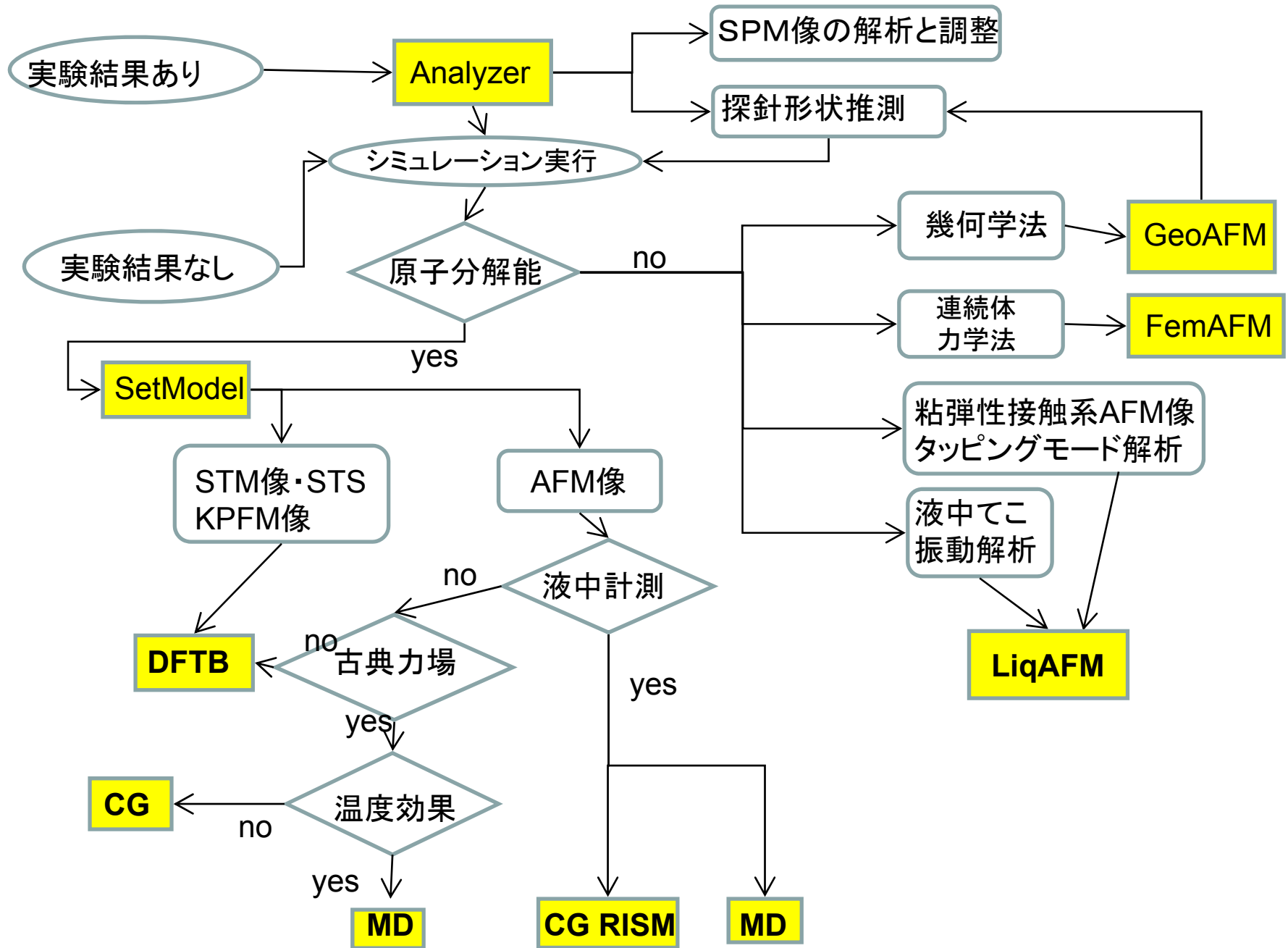
実験研究者が手軽に使えるツールを目指す

高分子の粘弾性接触力学解析機能などを用意し、ソフトマテリアル・バイオ関連分野の研究者にも利用して頂けるソフトを目指している

長期的な目標

世界標準化により、SPMの利用が産業界へ浸透
「ものづくり」の現場における、SPMの検査装置としての利用
ナノ構造デバイス作成における、SPMの製造装置としての利用

ソルバー選択のフローチャート



SPMシミュレータは9個のソルバから成り立っています

Analyzer

実験画像データデジタル処理ツール

SetModel

探針・試料モデル作成ツール

結晶構造を作成

GeoAFM

高速相互予測AFMシミュレータ

FemAFM

連続弾性体AFMシミュレータ

有限要素法

LiqAFM

液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ

流体力学

macroKPFM

マクロスケールKPFMシミュレータ

古典電磁気学

CG

構造最適化AFM像シミュレータ

古典論的な力場を仮定

MD

分子動力学AFM像シミュレータ

原子の連立Newton運動方程式

DFTB

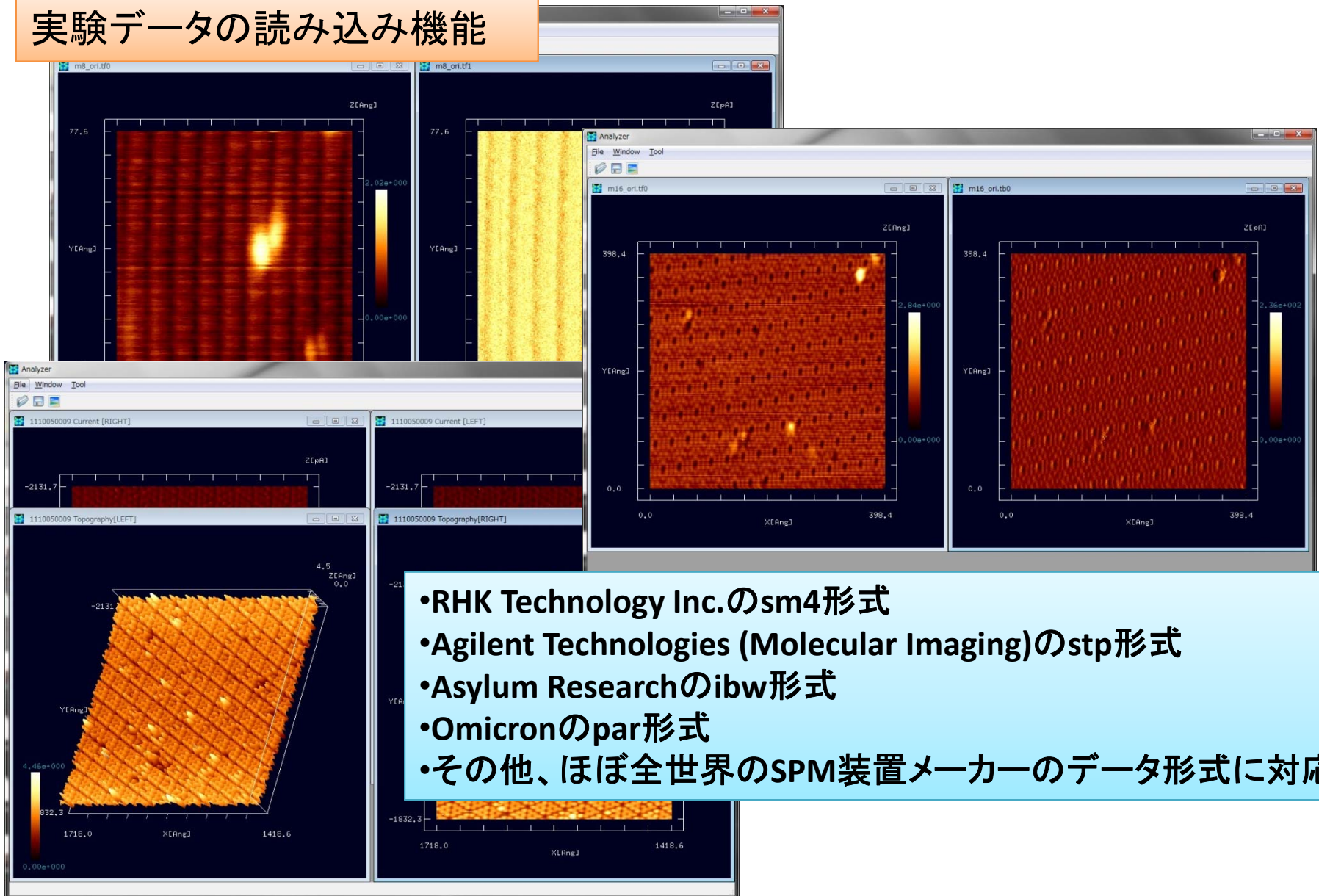
量子論的SPM像シミュレータ(密度汎関数法)



バンド構造計算機能追加

Analyzer(実験画像データデジタル処理ツール)の具体例

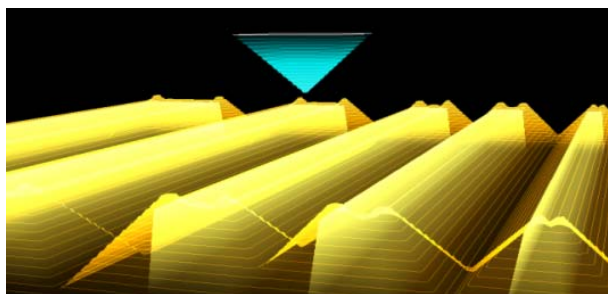
実験データの読み込み機能



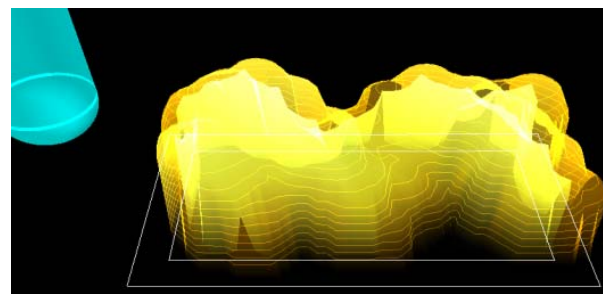
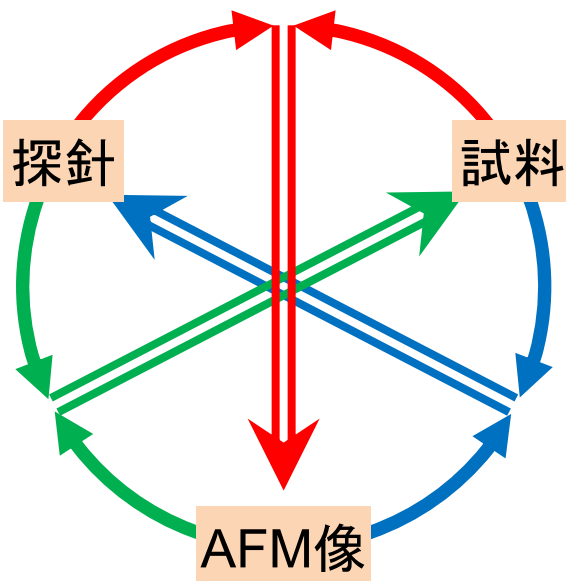
- RHK Technology Inc.のsm4形式
- Agilent Technologies (Molecular Imaging)のstp形式
- Asylum Researchのibw形式
- Omicronのpar形式
- その他、ほぼ全世界のSPM装置メーカーのデータ形式に対応

GeoAFM: 高速相互予測AFMシミュレータ

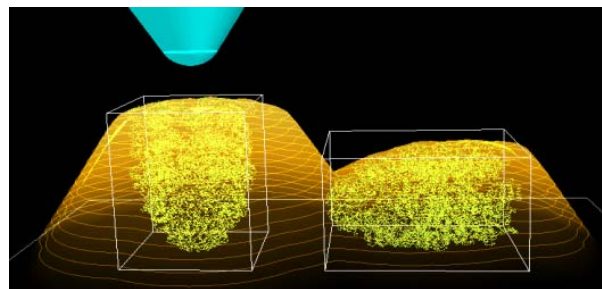
「高速相互予測AFMシミュレータ」は、探針の立体的な形状データ、試料表面の凹凸を表現した形状データ、測定AFM像データの、三種類のデータのうち、二種類のデータから、残り一種類のデータを高速に予測します
探針-試料間の相互作用は考慮せず、純粋に幾何学的な計算のみ行います



試料とAFM像から探針形状を予測



AFM像と探針から試料形状を予測

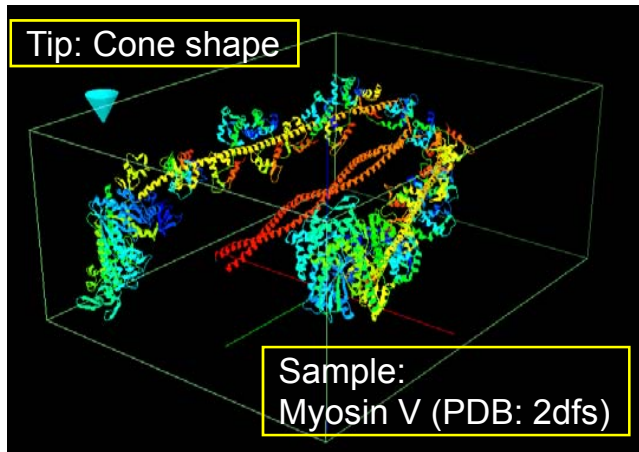


探針と試料からAFM像を予測

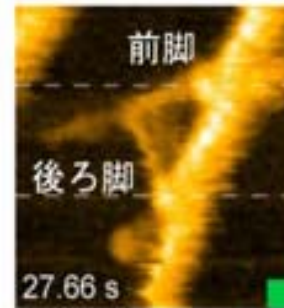
GeoAFM (高速相互予測AFMシミュレータ)の具体例

生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション

Simulation

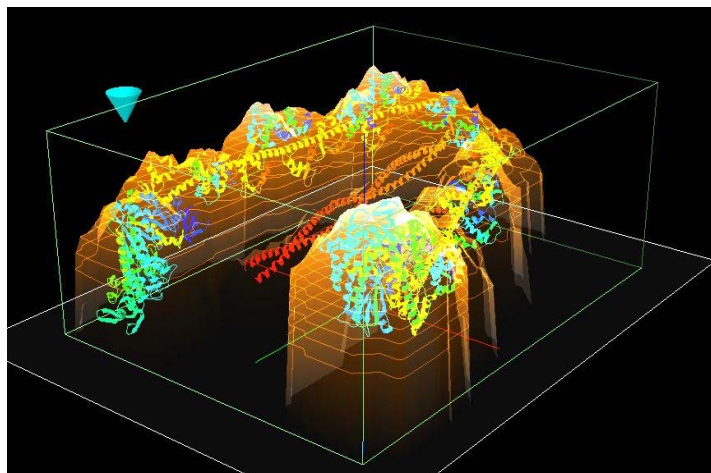


Experiment

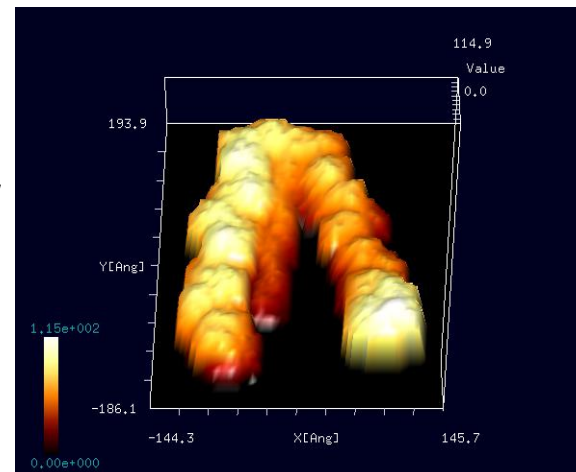


金沢大学 理工研究域数物科学系の安藤敏夫教授と古寺哲幸助教らの研究グループは、世界最高性能の高速原子間力顕微鏡を開発し、アクチンフィラメントに沿って動くミオシンV分子の振舞いを直接高解像撮影することに世界で初めて成功した

GeoAFM 1秒以下の計算時間



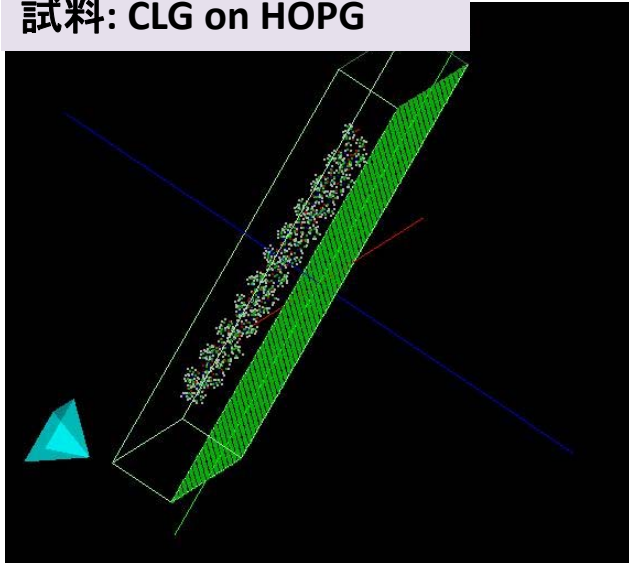
Analyzer



FemAFM(連続弾性体AFMシミュレータ)の具体例(1)

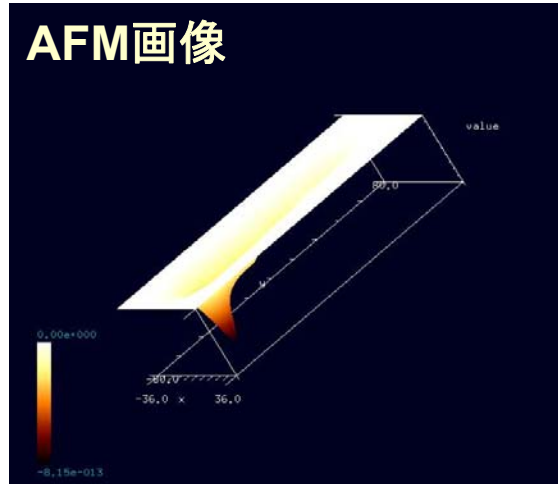
ラクトン系高分子ポリマーの
AFMシミュレーション

探針: ピラミッド型の SiO_2
試料: CLG on HOPG



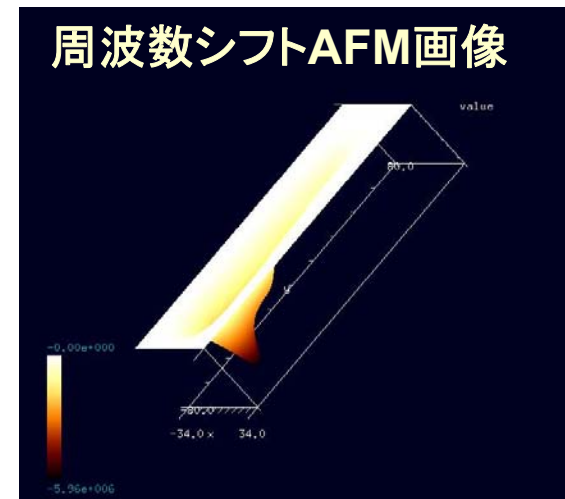
HOPG: 高配向熱分解黒鉛
(Highly Oriented
Pyrolytic Graphite)
CLG:ラクトン系高分子量ポ
リマー(CLG:εカプロラク
トン・(L)ラクチド・グリコリド共
重合体)

Constant height
(static) mode



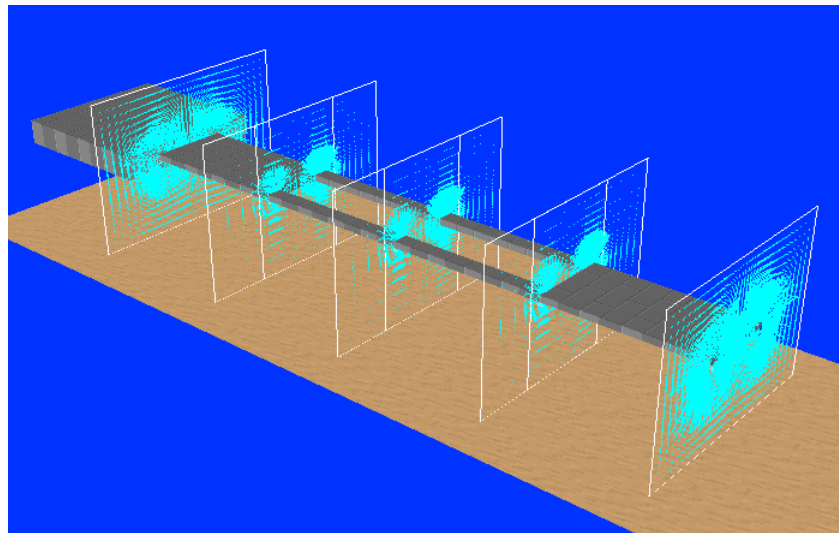
探針が試料に接近している部分では、逆6乗法則に
従ってファンデルワールス力が急激に増大

Frequency
Shift mode

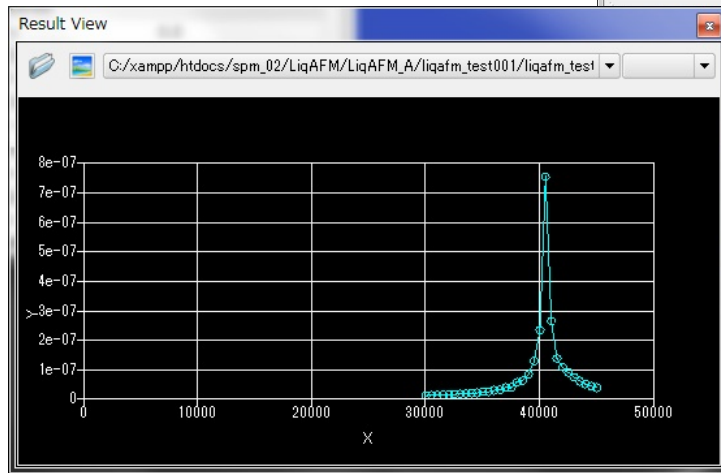
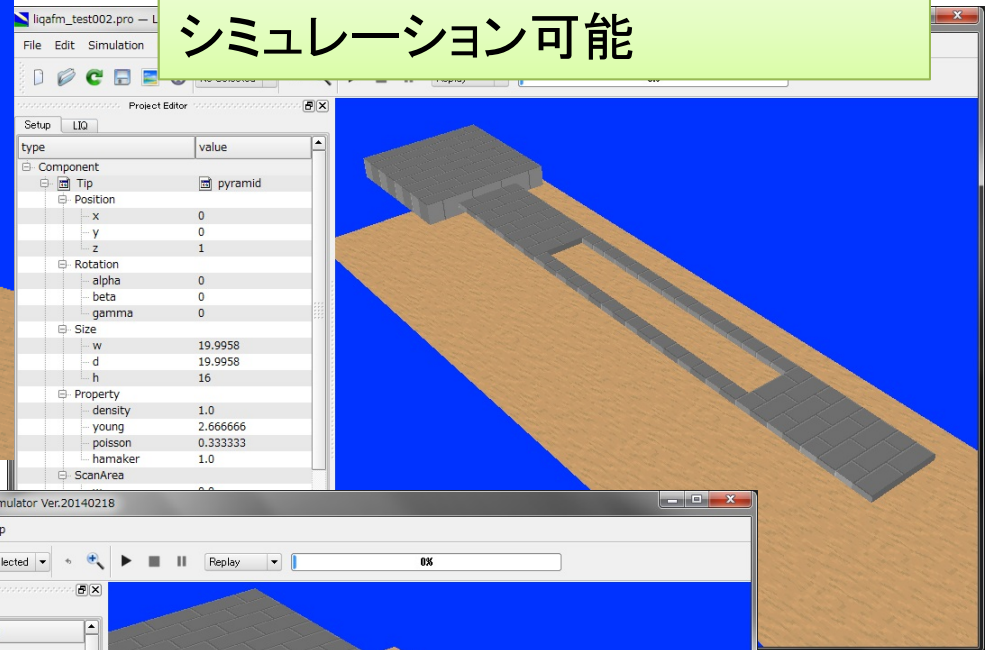


カンチレバーを周波数500[MHz]で励振させていて、
周波数のずれは最大で5.96[MHz]

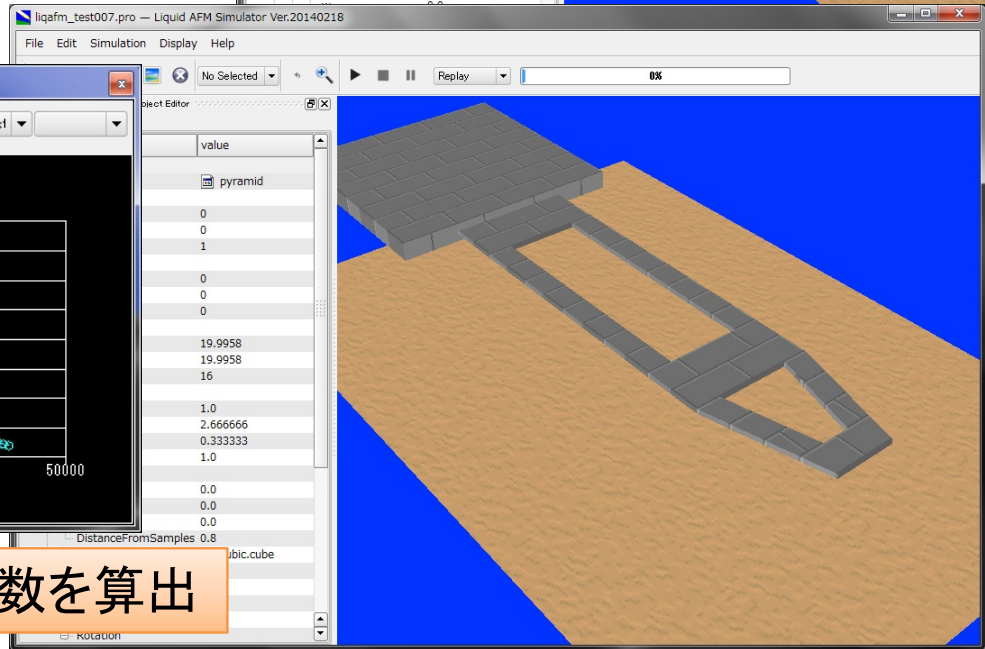
LiqAFM(液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ)計算例(1)



さまざまな形状のカンチレバーをシミュレーション可能

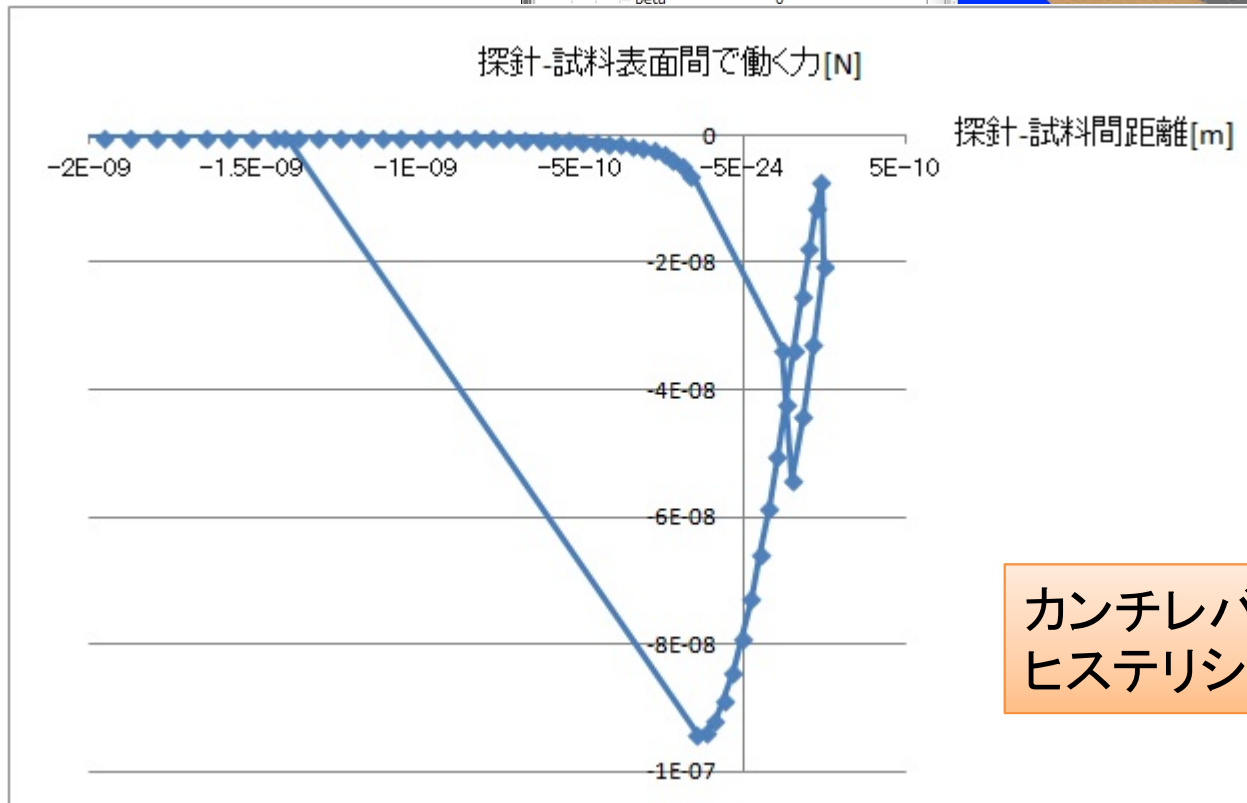
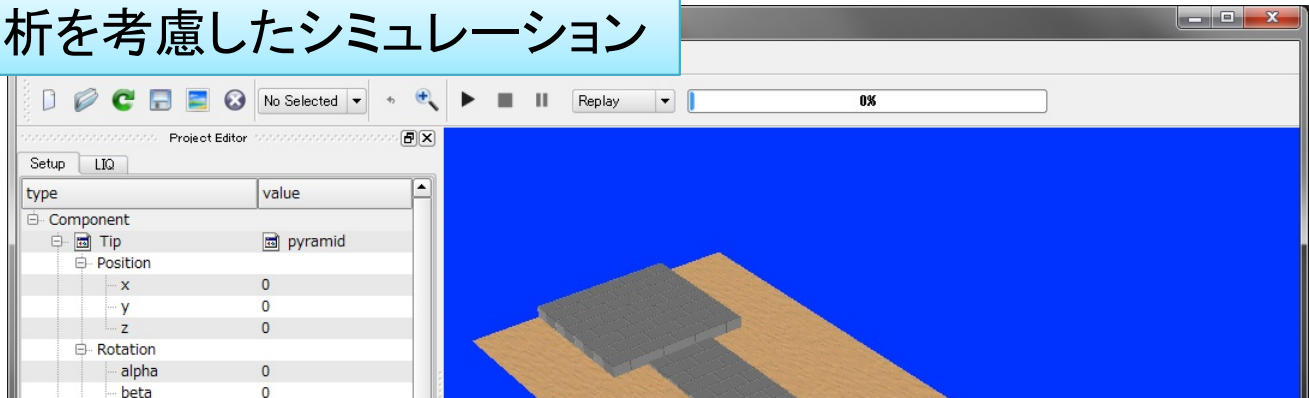


カンチレバーの共鳴周波数を算出



LiqAFM(液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ)計算例(2)

液体中での粘弾性解析を考慮したシミュレーション

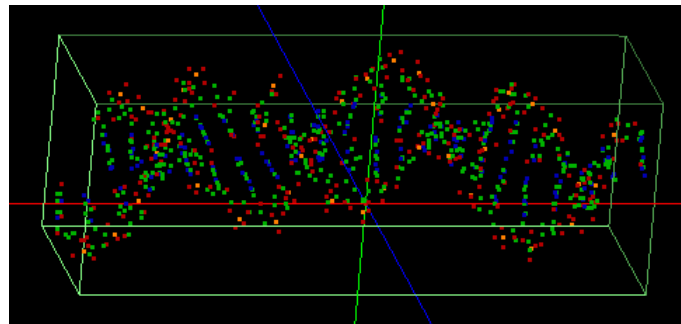
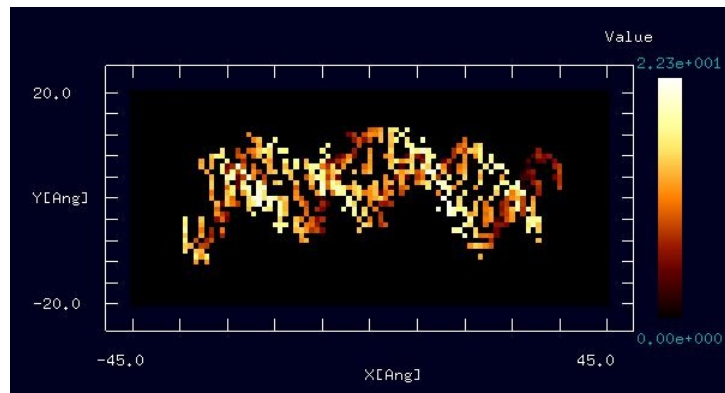


カンチレバーのフォースカーブのヒステリシスを再現

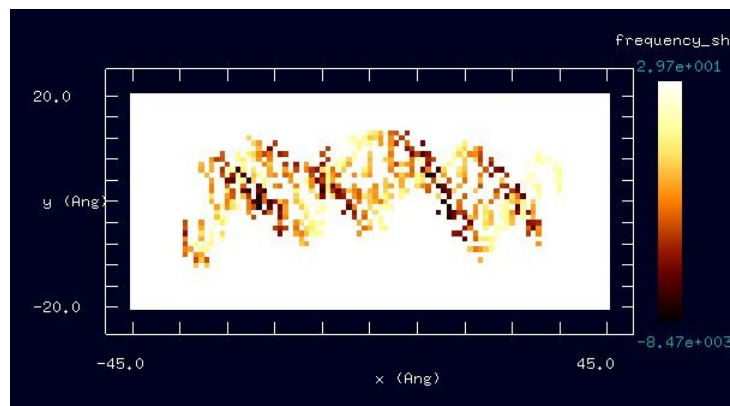
LiqAFMタッピング機能計算例(3)

DNA分子

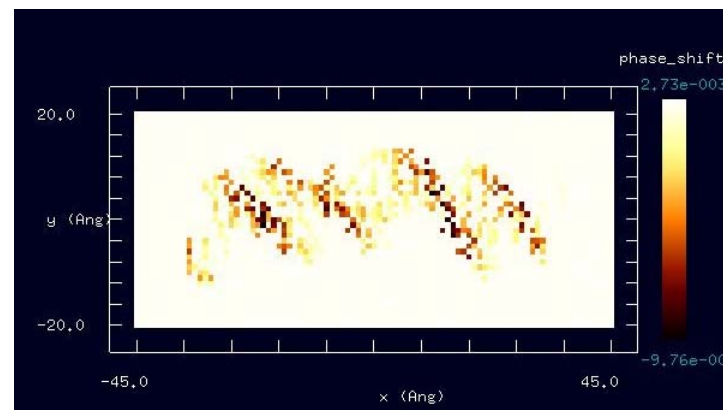
液中環境下でのシミュレーション



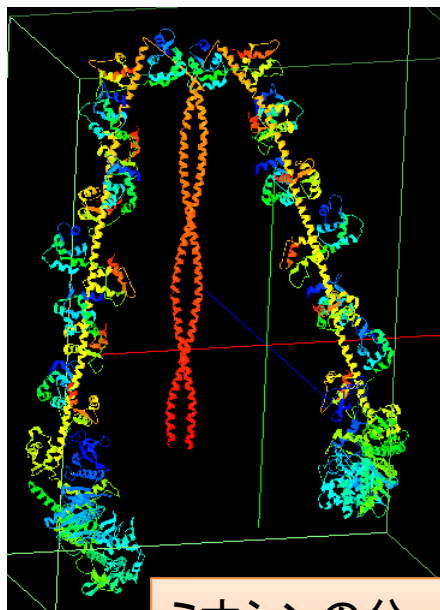
周波数シフト像



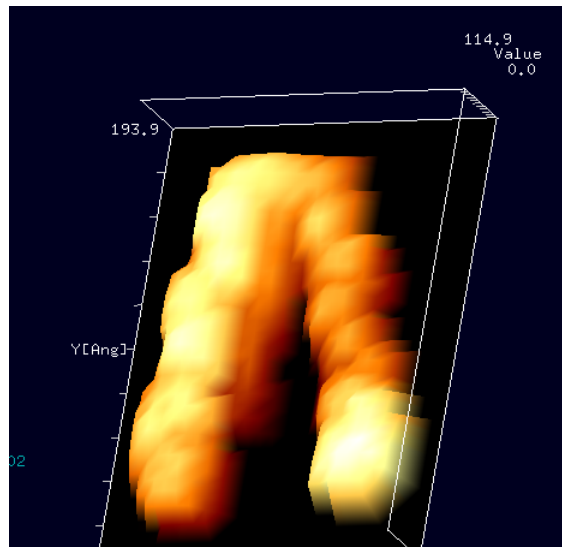
位相シフト像



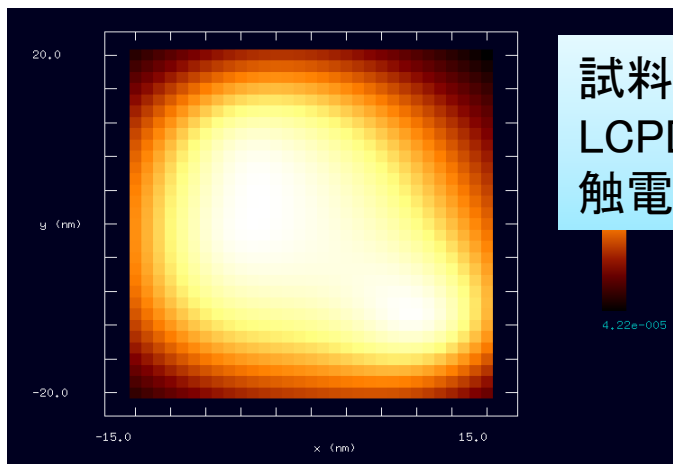
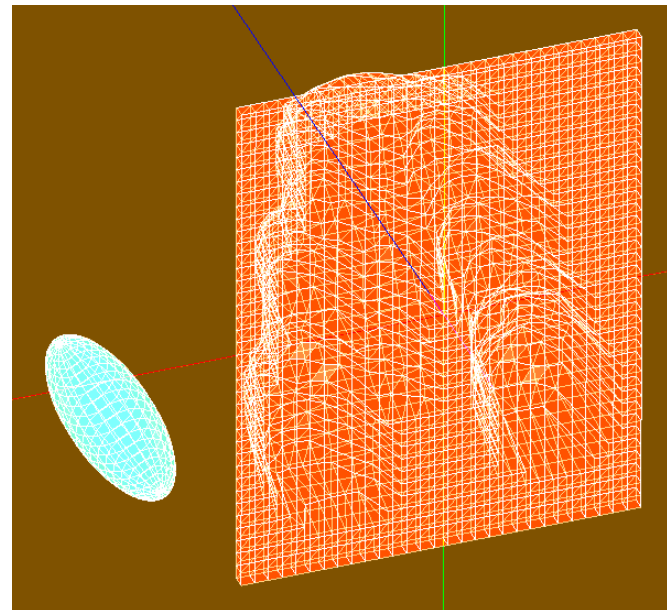
周波数シフト、位相シフトから物性値(ヤング率、表面張力)を逆算する機能の実装(逆問題にも対応)



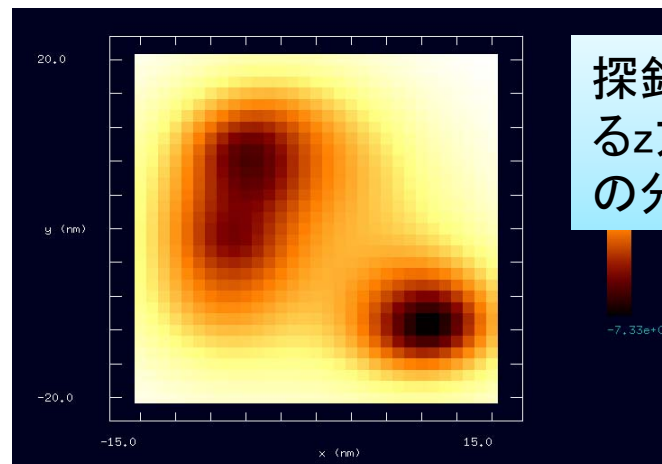
ミオシンの分子構造図



ミオシン分子に対して、
1.0[nm]の分解能で得られたAFM像



試料の
LCPD(局所接触電位差)像

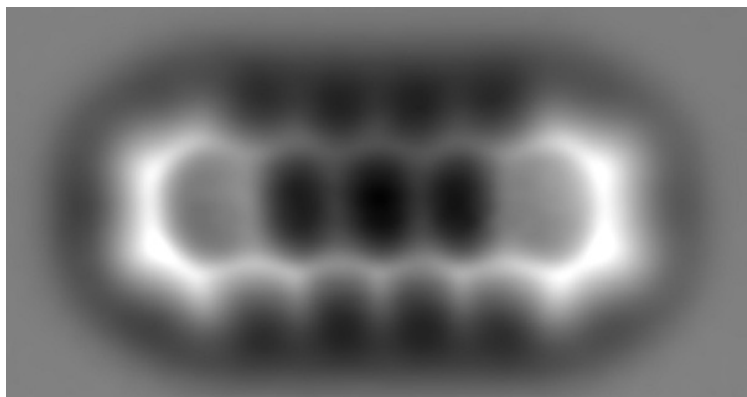


探針の感じるz方向の力の分布

CG(構造最適化AFM像シミュレータ)の具体例

ペンタセンのAFM(周波数シフト像)観察とシミュレーション

周波数シフト像の実験結果



L. Gross *et al.*, Science 325, 1110-1114 (2009)

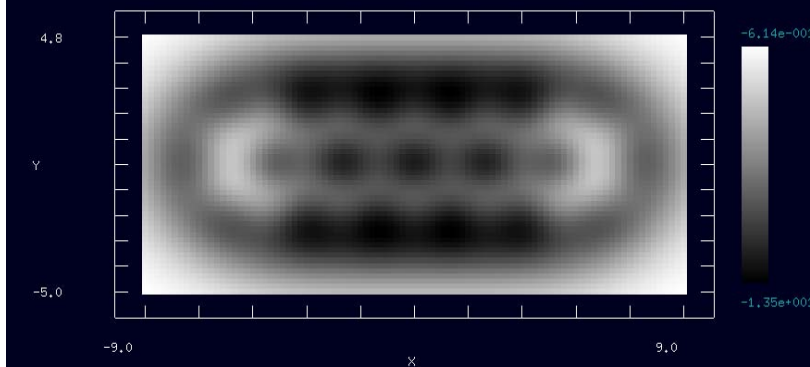
良い一致



周波数シフト像のシミュレーション

真空中: $\Delta f < 0$

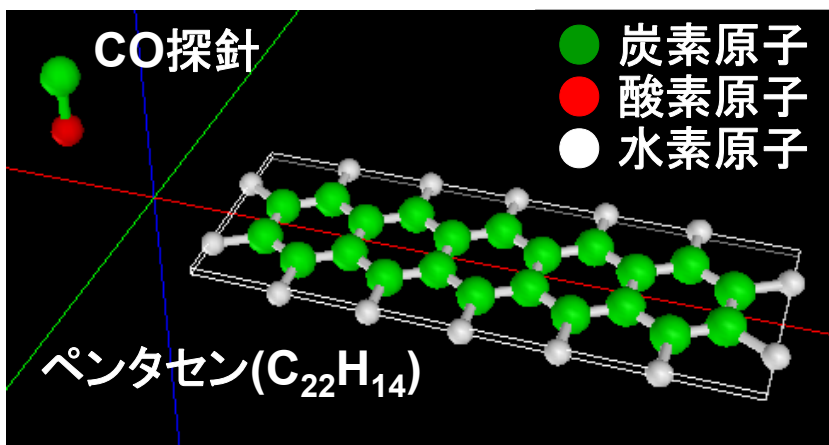
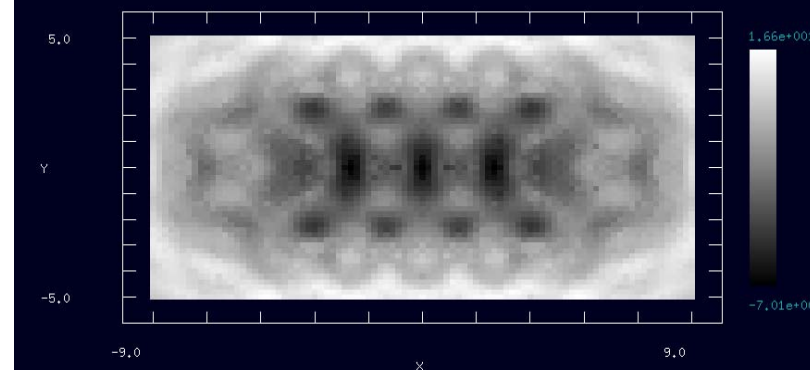
CG



水中のシミュレートも可能

水中: $\Delta f \geq 0$

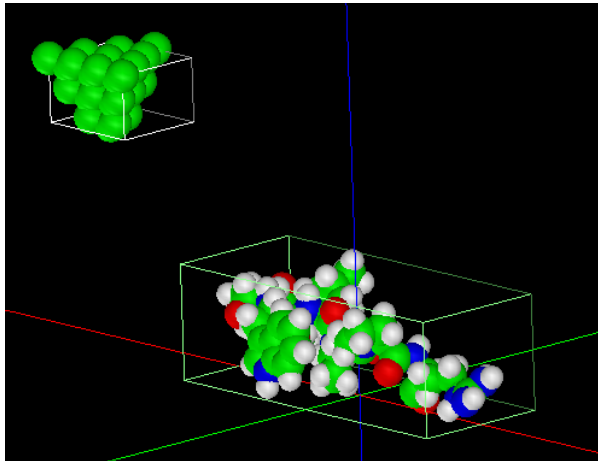
CG-RISM



MD(分子動力学AFM像シミュレータ)の具体例

抗血管新生ペプチドのAFM像シミュレーション

シミュレーション・モデル



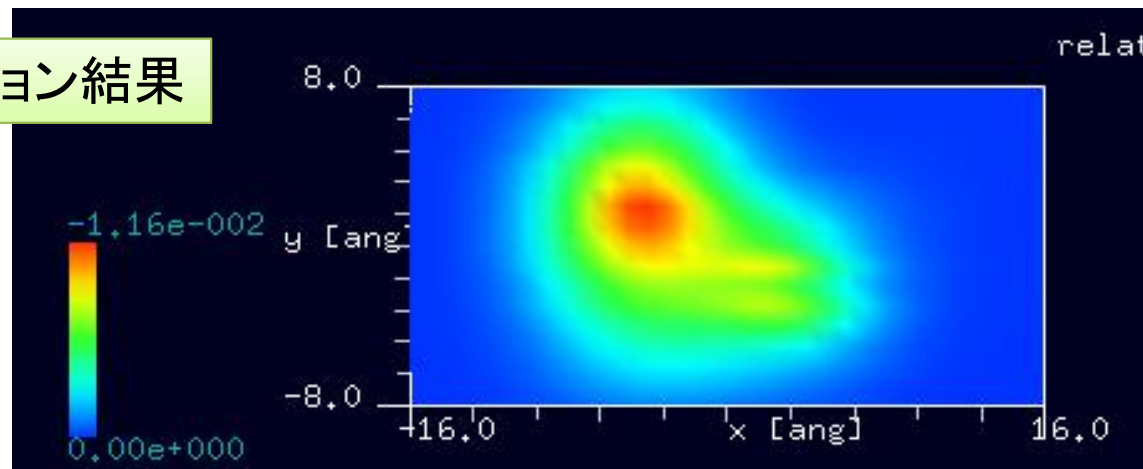
探針: ダイヤモンド探針

試料: ペプチドATWLPPR(PDB: 2jp5)

分子の変形を考慮に入れた、周波数シフト
AFM像シミュレーション

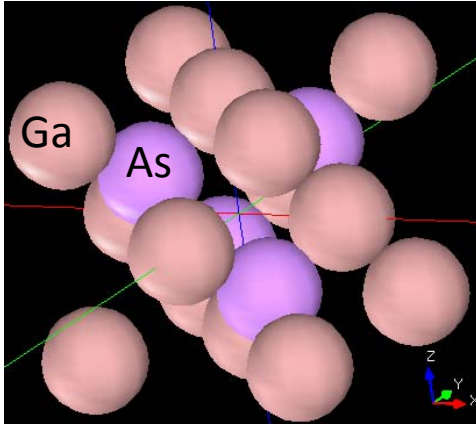
N端側のA, T残基を固定
他は変形可

シミュレーション結果

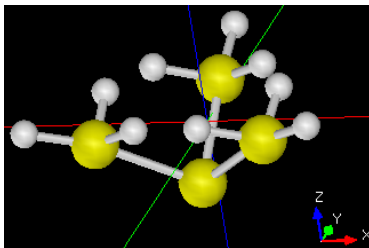


DFTB(量子論的SPM像シミュレータ[密度汎関数法])の具体例

GaAs(100)表面のSTMシミュレーション

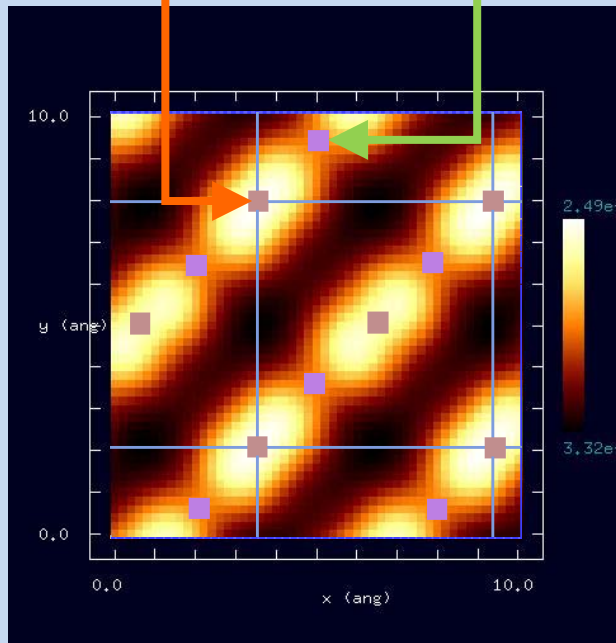


試料:GaAs(100)の単位格子



探針:Si₄H₉

Ga (1st layer) As (2nd layer)



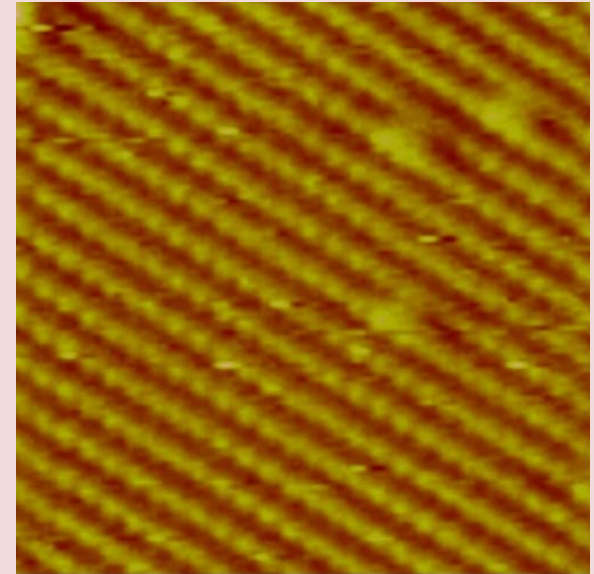
シミュレーション結果

探針-試料間の距離:3.0[Å]

探針バイアス: +2.0[V]

高さ一定STM計算

実験結果



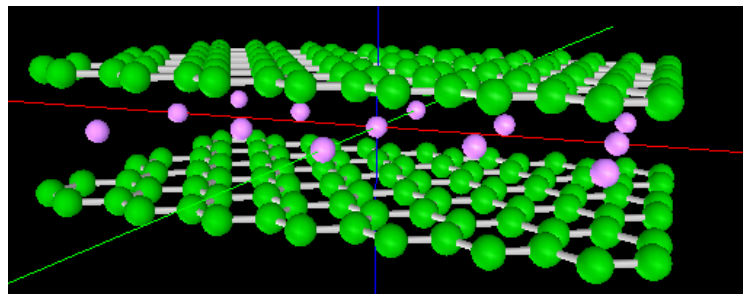
GaAs (100) surface
cleaved in UHV
(7.2 nm x 7.2 nm) (STM)

<http://info.ifpan.edu.pl/~wawro/subframes/Surfaces.htm>

第2層目のAsの影響で電流値の高い領域が斜めになった

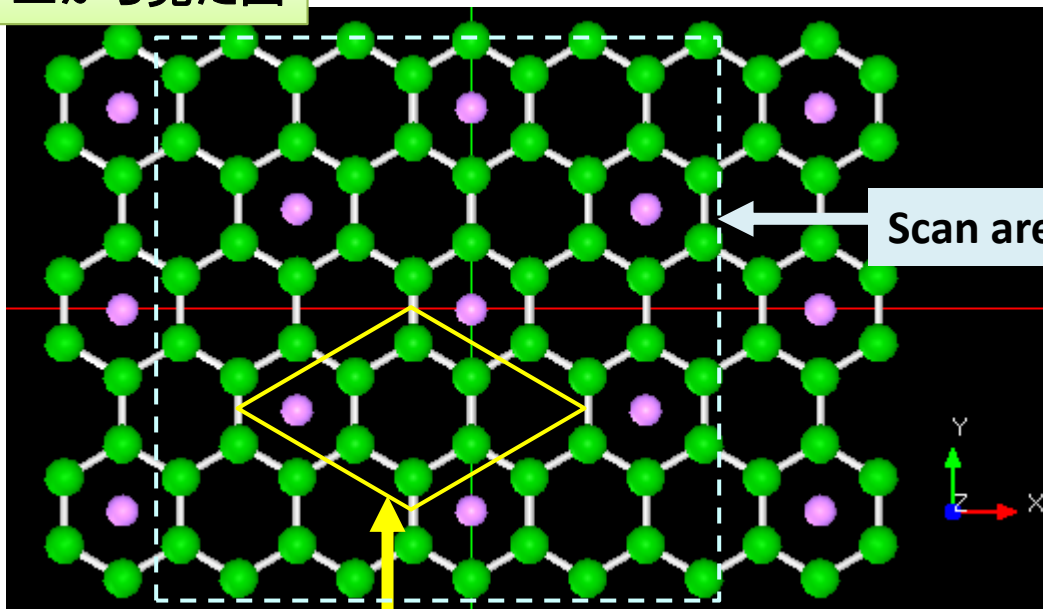
DFTB(2-a): Li-GICのSTM像シミュレーション

Li-GIC: Liイオンのグラファイト層間化合物



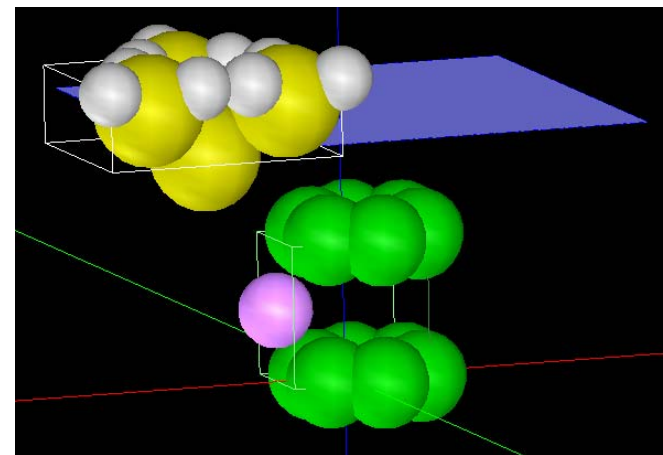
2層のグラフェンシート内にLi原子を配置
層間距離: 3.70Å

上から見た図



Unit cell

シミュレーションモデル



探針: Si_4H_9

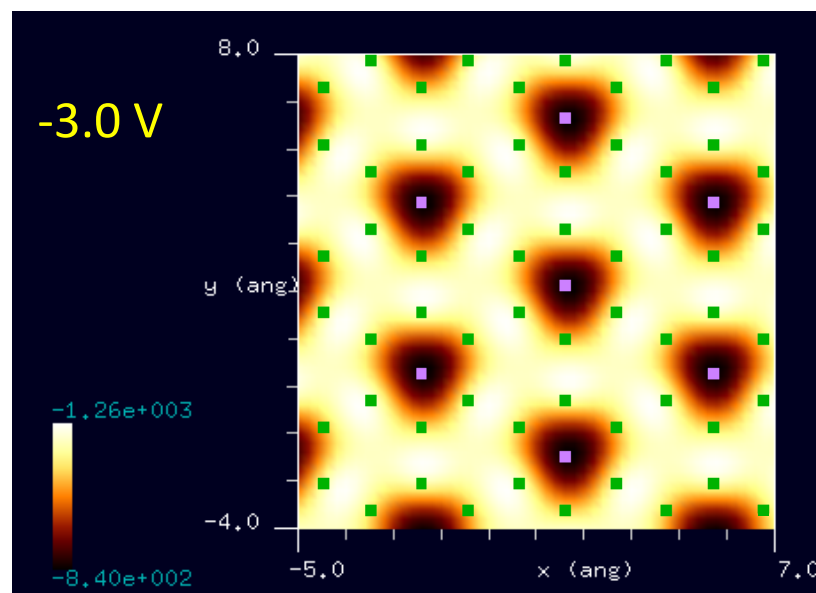
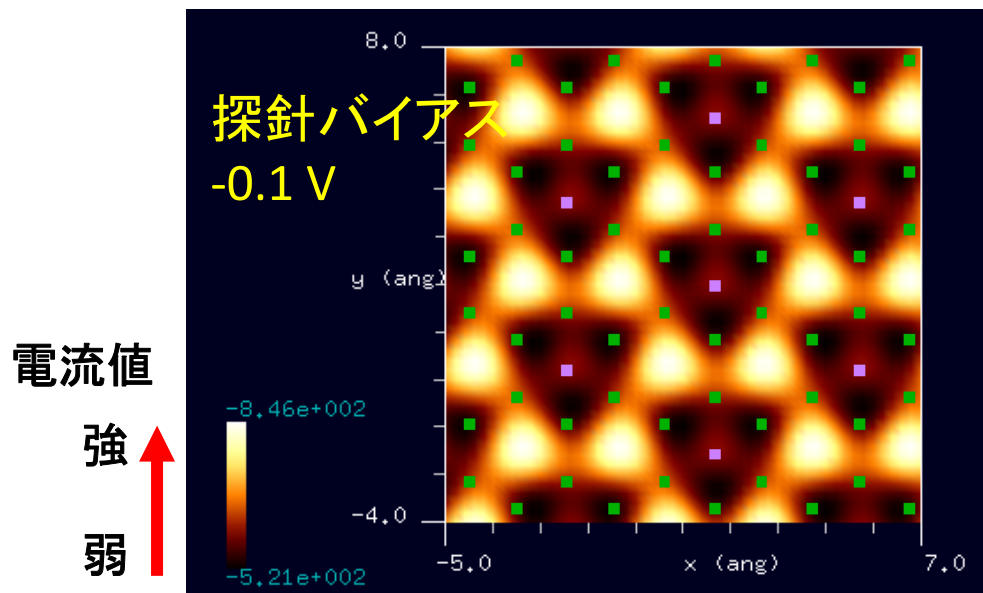
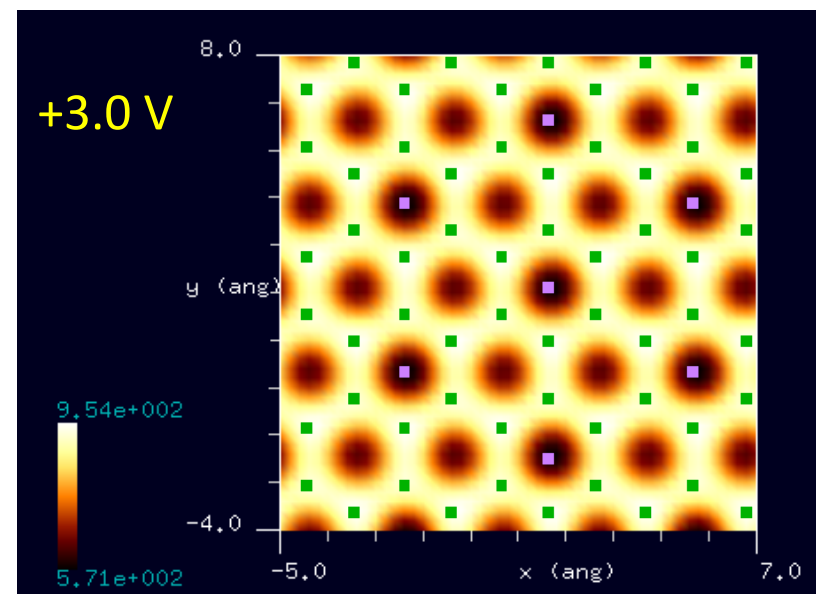
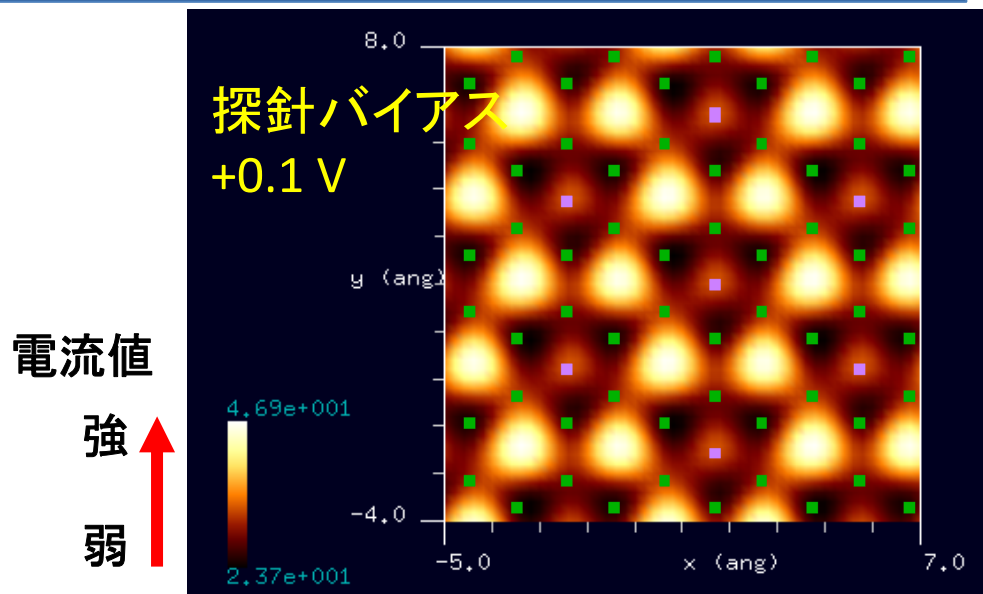
試料: Li-GIC

探針高さ: 3.0 Å

スキャンエリア: 12 Å x 12 Å

探針のバイアスを変えて、
高さ一定STM像をシミュレート

DFTB(2-b): Li-GICのSTM像シミュレーション



表面から2層目にあるLi原子の位置を敏感に反映したSTM像となっている

今後の問題

SPMシミュレータとPHASE/0の連携について

PHASE/0: 第一原理電子状態計算シミュレータ

物質・材料研究機構が中心になって開発

あらゆる材料の、バンド構造等の物性的性質をシミュレート

高性能だが、その分リソースが必要

→高性能のワークステーション、長時間の計算

現在は、商用ソフトとして一般に販売されている(株式会社アスムス)

企業の開発者において、第一原理計算に興味を持つ研究者もいるはず
SPMシミュレータでPHASE/0の計算作業を支援・補助

SPMシミュレータDFTBソルバとPHASE/0を連携するには、二つの方法が考えられる

(方法1)DFTBソルバにバンド構造計算機能を付与して販売

(方法2)DFTBソルバで、PHASE/0の入力データを作成

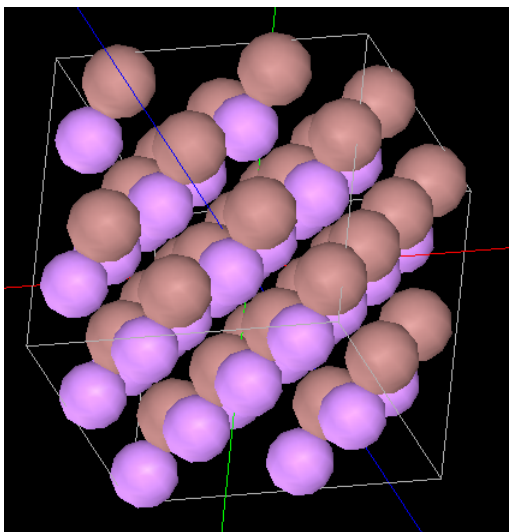
方法1 → SPMシミュレータとPHASE/0は独立して運用

方法2 → SPMシミュレータはPHASE/0のプリプロセッサとして運用

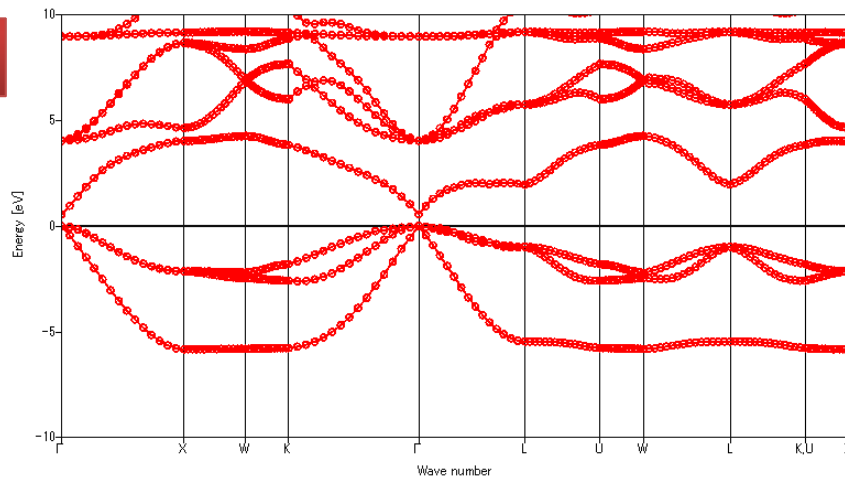
(方法1)DFTBソルバにバンド構造計算機能を追加完了

ユーザは、PHASE/Oでの本格的な計算に先立って、SPMシミュレータDFTBソルバで、あらかじめ予備的なバンド構造計算を行う

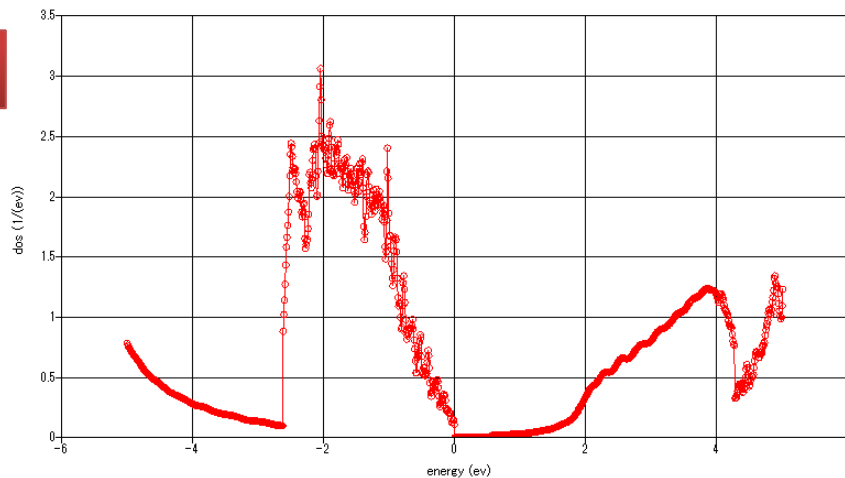
InAs



バンド構造



状態密度



(方法2)DFTBソルバで、PHASE/0の入力データを作成

PHASE/0の入力データのうち、次の二つにデータを、DFTBソルバで計算してしまう

- initial_wavefunctions(初期波動関数)
- initial_charge_density(初期電荷密度)

長所

- PHASE/0の繰り返し計算の回数を減らし、収束する速度を上げることが可能
- 結果として、PHASE/0の計算時間を短縮できる

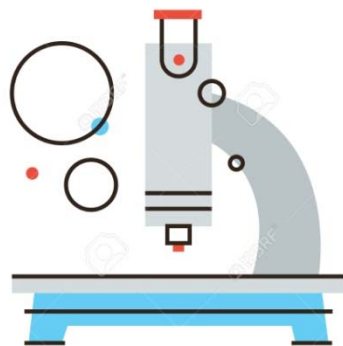
短所

initial_wavefunctions(初期波動関数)はファイルF_ZAJ、initial_charge_density(初期電荷密度)はファイルF_CHGTで与えられる
これらのファイルはバイナリ形式で、その書式は公開されていない
書式を知るためには、書式を公開してもらるか、PHASE/0のソースコードを知る必要がある

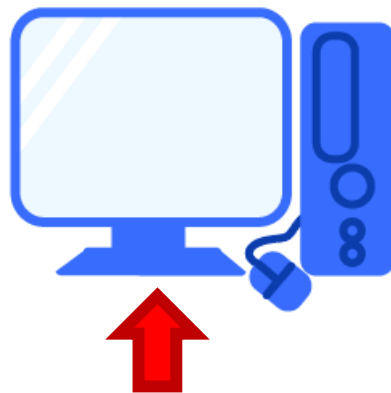
SPMシミュレータのバンドル販売方法について

- SPM実験装置をお買い上げの顧客に、SPMシミュレータの実行ファイルを収めたDVD-ROMを同時提供します
- SPM実験装置ユーザーは、すぐに、お手元のWindowsパソコンにSPMシミュレータをインストールして使用できます
- ライセンスもインターネットで簡単に登録できます

- SPMシミュレータを使えば、SPM実験装置で得られた生データを、お手元のWindowsパソコン上でデジタル処理できます
- シミュレーション計算もWindowsパソコン上で簡単操作できます



SPM実験装置



GPUにも対応しています

SPM実験装置のすぐそばのPCにSPMシミュレータをインストール