

JST先端計測 事後評価ヒアリング SPM装置シミュレータの活用・普及促進

平成24年度採択

開発実施期間：平成24年10月～平成27年3月

株式会社アドバンスアルゴリズム & システムズ
チームリーダー 柿沼良輔
発表者 吾妻広夫

2015年11月4日(水)

TKP市ヶ谷カンファレンスセンター

活用・普及促進に関する目的

JST 研究成果展開事業 先端計測分析技術・機器開発プログラム

プロトタイプ実証・実用化タイプ

課題名:「走査型プローブ顕微鏡シミュレータの開発」

代表者名: 柿沼良輔 期間: 平成21年4月～平成24年3月



これによって開発された「SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ」の、**解放(共同利用)**を進めることが目的

走査型プローブ顕微鏡で、実験観察を行う場合、シミュレータを併用して、実験画像データの持つ**物理的な意味を確認する作業が必須**



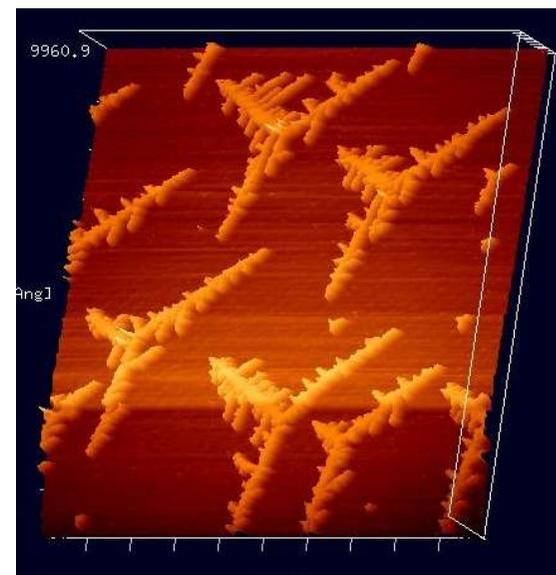
シミュレータは**キーコンポーネント**

- 実験系の研究者でも気軽に理論的シミュレーションが実行できる環境を提供する
- 国産の走査型トンネル顕微鏡シミュレータを作ること自体が重要

[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)

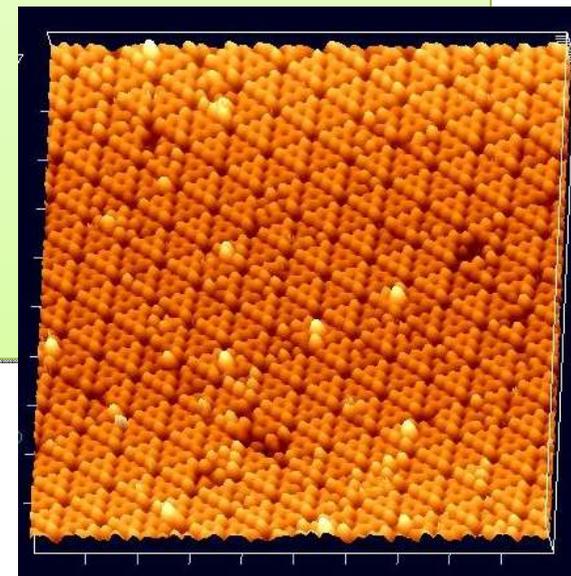
S. Ogura et al., Phys. Rev. B **73**, 125442 (2006); S. Ogura and K. Fukutani, J. Phys.: Condens. Matter **21** (2009) 474210.]



活用・普及促進の方策(情報発信)

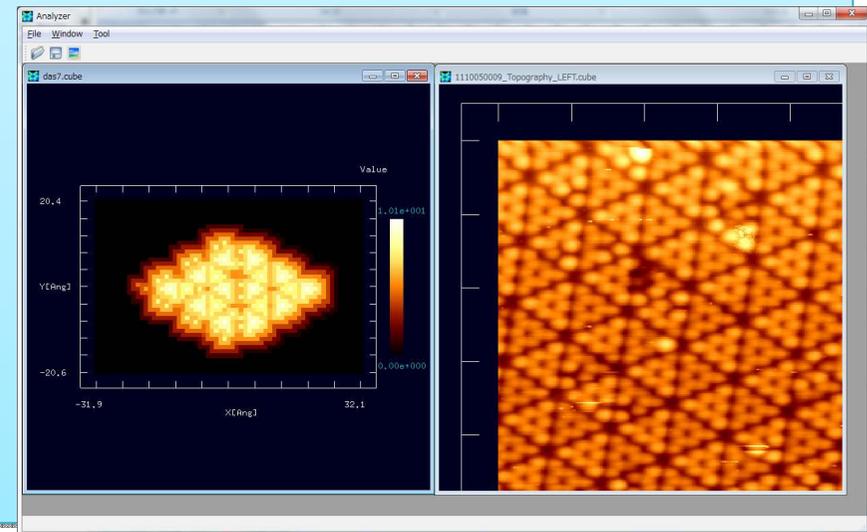
- SPMシミュレータの無償供与実施
国内:約300本 国外:24本
- 「SPM情報交換プラットフォーム」の構築
顧客情報データベース、メール発信システムの構築、Webサイトの開設
定期的に、SPMシミュレータ開発情報をメールで配布
- 「SPMユーザー会」の立ち上げ
ソフトウェア開発に必要な実験データの提供を受ける
シミュレータ機能追加に関する意見交換
- SPMシミュレーション技術全般について
まとめたガイドブックを発行して、Webで公開

このSi結晶表面実験データは、SPMユーザー会を通じて、東京工業大学・大学院総合理工学研究科、材料物理学専攻、量子表面講座、平山博之教授より提供されたものである。



当初設定した活用・普及促進の目標に関する実施の達成状況

- SPMシミュレータを利用した研究成果の学会・論文発表
学会発表:25件 論文発表:8件
[サイエンス誌にも成果発表:T. Uchihashi, R. Iino, T. Ando, and H. Noji, “High-speed atomic force microscopy reveals rotary catalysis of rotorless F1-ATPase”, Science 333, pp. 755-758 (2011).]
- SPMユーザーの意見を反映した、SPMシミュレータの高機能化
実験データ画像とシミュレーション画像の比較機能追加
実験データ画像のデジタル処理機能の強化
粘弾性材料との接触を解析する機能の追加
量子力学的シミュレーション計算で使用する原子間相互作用パラメータの充実(Pt, Au等の27種類の元素を準備)
計算ソルバーのOpenMPによる並列化の完成



Si(111)-(7×7)DASの、GeoAFMによるシミュレーション画像と、AFM実測画像の比較を、ウィンドウ画面内で行っている様子

活用・普及促進におけるニーズの把握とソフトの高度化

- CG-RISM(原子スケール液中AFM像シミュレータ)の実装
分子の構造最適化を行うAFM像シミュレータについて、**液体中でのシミュレーションを可能としたソルバー**を開発
- NVIDIA社製GPU(Graphics Processing Unit)を搭載したパソコンに対応した、**GPU並列化ソルバ**の完成[DFTB(量子力学的計算シミュレータ)に対して]
- FemAFM(連続弾性体AFMシミュレータ)に、**周波数シフトAFM像シミュレーション機能追加**
- DFTB(量子力学的計算シミュレータ)で**使用可能な元素の種類を増やして欲しいとのニーズ**が高まっている

使用可能な元素(基本:12種類)	H, C, N, O, Al, Si, P, Ti, Ru, W, Pt, Au
使用可能な元素(応用:15種類)	Li, B, F, Na, Mg, S, Cl, Cu, Ga, Ge, As, Br, Ag, I, Bi
今後追加予定の元素(32種類)	遷移金属、ランタノイド、半金属、アルカリ金属 (Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zn, ...)

活用・普及促進において得られた成果(1)

- SPM(走査型トンネル顕微鏡)ユーザーの強い人的ネットワークを構築

これにより、SPM実験生データの収集等の**情報集めが、格段に容易**となった

➡ 世界中の主要SPMメーカーのバイナリ実験生データをシミュレータに

➡ 入力することが可能となった

➡ 実験家ユーザーの**要望を取りまとめし易くなった**(探針高さ一定モードではなく、トンネル電流値一定モードの方が好まれる、等)

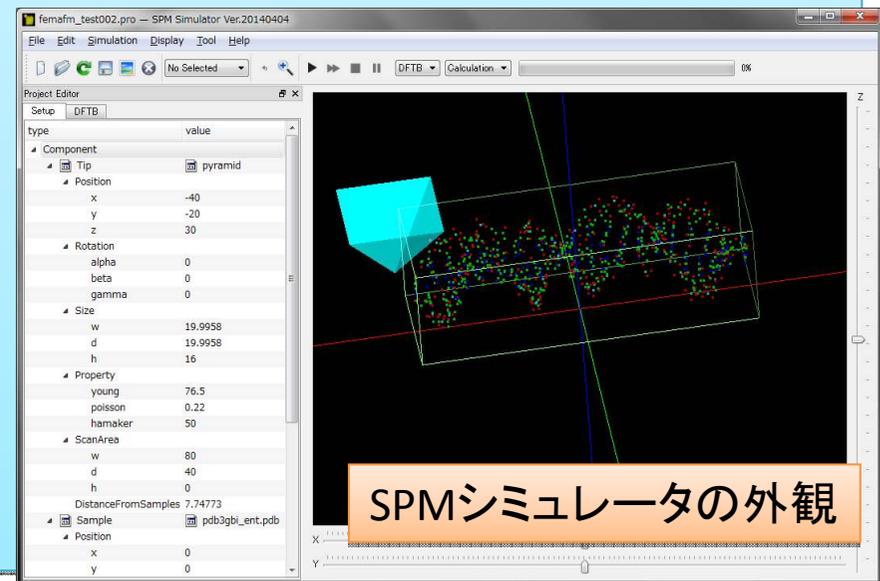
- 営業手法の**高度化**

顧客に対して、まず、**お試しシミュレーション**として無料で計算を行い、その結果をレポートとして送付

(顧客が興味を持っている材料について調査)

顧客に、計算結果のレポートを見て頂き、**ソフトウェアの性能に関して納得して頂いた上で、本格的な商談を開始**

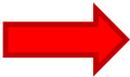
ソフトウェアを、売る人と、買う人の間で、**信頼関係を築く**



活用・普及促進において得られた成果(2)

顧客の購入動機の把握

SPMシミュレータの売り上げは、2015年7月の時点で、累計5本と振るわなかった

 **理由:** 量子力学的計算ソルバで取り扱える原子の種類が少なかったため (Si, C, H等の基本的な元素のみの対応だった)

 **お客様の声:** 取り扱える原子の種類が増えれば、購入を検討する

これらのお客様の声に応えるべく、原子間相互作用パラメータの計算作業を進め、2015年9月までに、27種類の元素に対応した

このような地道な作業の結果、以下の4社の販売代理店と業務提携できた

- 東洋テクニカ様 SPMシミュレータ・販売販促業務支援
- ビジュアルテクノロジー様 高速マシンにSPMシミュレータを搭載して販売
- ペガサス様 SPMシミュレータ・販売委託・コンサルテーション委託
- シエンタ・オミクロン様 海外販売委託

さらには、SPM装置メーカー様において、実験装置販売の際、SPMシミュレータをバンドル出荷の予定

 **強固な販売体制の確立**

特許関連状況・知的財産の形成

- 【特許の名称】シミュレーション装置、シミュレーション方法及びシミュレーションプログラム
【出願番号・出願日】特願2006-256169、2006年9月21日
【出願人】みずほ情報総研株式会社、学校法人早稲田大学
【発明者】渡辺尚貴、塚田捷、田上勝規
特許第4866695号
- 【特許の名称】カンチレバー評価システム、カンチレバー評価方法及びカンチレバー評価プログラム
【出願番号・出願日】特願2007-279315、2007年10月26日
【出願人】みずほ情報総研株式会社、学校法人早稲田大学
【発明者】渡辺尚貴、塚田捷
特許第5148969号

保有する特許等の知的財産は、原則として、他の企業等にはライセンスしない方針

他の企業の知的財産を尊重する。また、それと同時に、我々自身の知的財産を他の企業に尊重してもらうことを求める方針でいる。

今後の展開について(今後の高度化・実用化の見通し)

- **スピン偏極STM/STSシミュレータ機能の追加**

磁性探針を用いて磁性体試料をSTM/STS観察

探針と試料のスピンの

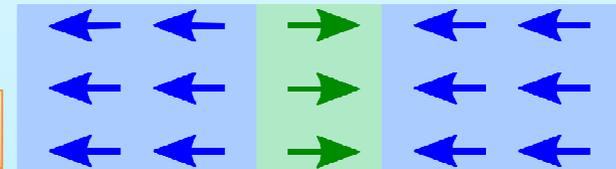
→ 互いに平行なら、トンネル電流は小さくなる
互いに反平行なら、トンネル電流は大きくなる

スピントロニクス分野のユーザが見込まれる

スピン偏極STMの概念図



磁性探針



磁化が領域ごとに分布した試料

- **ソフトマテリアル・バイオ関連研究者向けの高機能化**

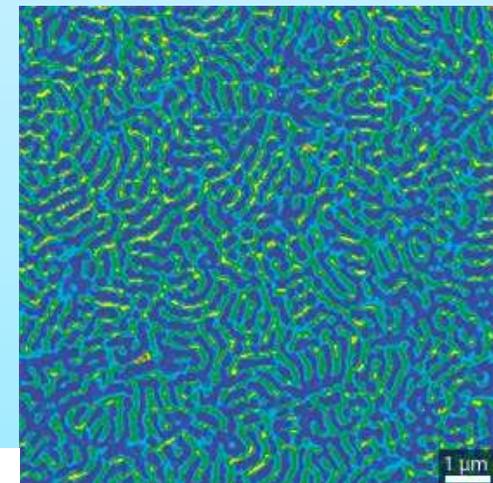
粘弾性を持つ試料表面のシミュレーション機能強化

液体中でのAFMシミュレーション機能の強化

ソフトマテリアル表面の物性値予測機能の追加

今だかつて世界に存在しない、バイオ・高分子系
ユーザーのためのAFMシミュレータ開発

→ 細胞・たんぱく質等へのアプローチ



高分子薄膜をAFM観察し、粘弾性を可視化した図[D. Wang et al., Macromolecules 44, 8693-8697 (2011).]