

無償配布後SPMシミュレータの高度化計画

1) 実測 - 計算比較機能の高度化

現在、世界で販売されている既存SPM 関連ソフトは、シミュレーションに特化したソフトと計測データの画像処理に特化したソフトのどちらかに分類され、実測データ画像とシミュレーションデータの両方を、同一プラットフォーム上においてリアルタイムで比較・操作できるソフトウェアは存在していない。これに対し、これまで別々に取り扱われてきた実験データと理論シミュレーションデータを統一的に扱うことのできる、実測-計算比較機能を持つシミュレータがあれば、研究業務の質の向上、ユーザーの労力削減につながる事が期待できる。さらに、SPM 実験家ユーザーが実測-計算比較機能を活用することによって、実験とシミュレーションが相互的に補完し合うサイクルを確立することが可能となり、SPM 実験の今後の発展に大きく寄与することが期待される。

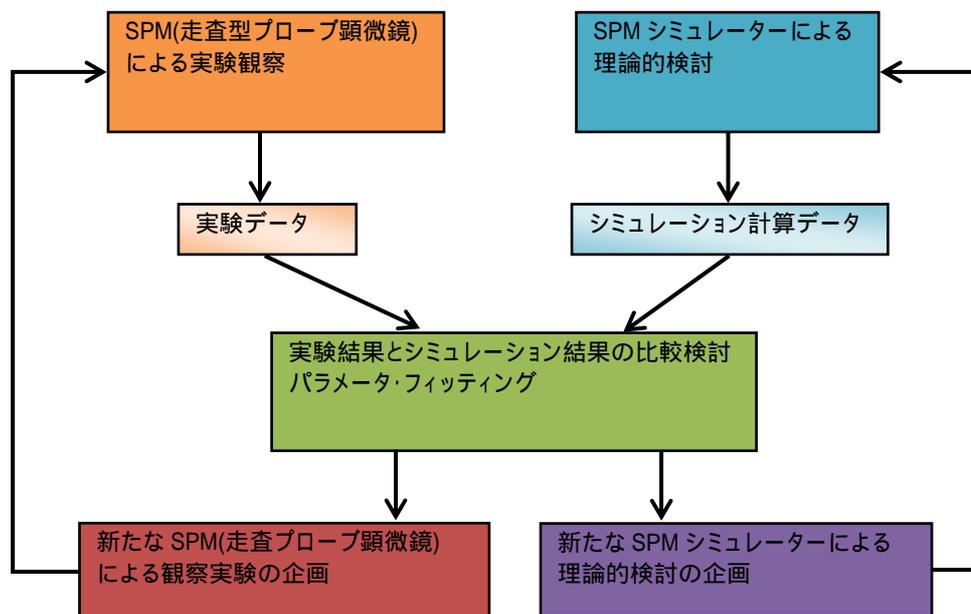


図 実験とシミュレーションの相互的補完サイクル

このような観点から、試供版として提供したシミュレータでは、以下のような実測-計算比較機能を開発した。まず、世界中で使用されている主要なSPM 実験装置の出力データや、海外製SPM 実験データ処理ソフトウェアのデータファイルを直接的に読み込む機能を実装した。また入力データの平面に傾斜がある場合、これを検知し自動的に補正する自動傾斜補正機能、および周波数解析(フーリエ変換)を利用した任意の強度での画像鮮明化を行う画像鮮明化機能を実装した。これらに加え、現在使用可能な探針形状評価機能(ブラインド探針再構成法)を利用し、任意の表面形状試料のデータを基にした、探針形状を統計的に推測する機能も実装した。

これらの機能の実装に引き続き、次のような機能を追加実装することで、実測 - 計算比較機能のさらなる高度化を図る。まず実験・数値シミュレーションのデータ比較機能をさらに強化するために、両者の統計的な相関関係を調べる機能を実現する。試供版では、SPM 実験出力データによる画像と、理論的シミュレーション結果から得られた画像を、単に並列されたウィンドウ上において同時に表示する機能のみしかなく、これに加えてGUIやポップアップなどの簡単な操作で両者の統計的な相関関係を表示できるようにする。次に、パラメータ・フィッティング機能を追加する。これは、SPM 実験出力データに応じて、理論的シミュレーションのパラメータを調節・フィッティングする機能である。ユーザーは実データを自由に取り込んでパラメータとし、それを基にシミュレーションを行うことができるようになる。どのような統計指標や出力データに関心を持つかは、ユーザによって大き

く異なることが予想される。これについてはヒアリングを繰り返すことで要望の多いものから実現する。

シミュレータの利用者は、これらの結果を参照することで、新たな実験デザインやシミュレーションの発想を得ることができる。試供版で実現した機能に加えて、これらの高度な機能を実現させることによって、SPM実験によって得られた画像データと、理論的シミュレーションによって得られた計算結果データを、直接的に比較・検討することができる世界初の本格的なソフトウェアとしての完成を目指す。

2)接触力学の高度化(AFM 粘弾性解析)

[目的]

原子間力顕微鏡(Atomic Force Microscope, AFM)で粘弾性を持つ試料表面を観察する際の、カンチレバー振る舞い、特に、探針 - 試料間で作用する力の時間変化(フォース ディスタンスカーブ)を、数値計算シミュレーションによって算出・予測するソフトウェアを開発する。

さらに、ナノバイオ関連分野の研究者がAFMで生体試料を観察する際、測定によって得られる試料表面画像データを、物理的にどのように解釈すべきかの判断をサポートするナレッジ・ナビゲータ機能を備えた、高度なデータ処理ソフトウェアを開発する。

[背景]

AFM は、元々は、半導体結晶等の固体表面の構造を、原子レベルの分解能で観察することを目的として開発された。しかし、AFM は、ファンデルワールス力等の原子間力を測定することにより試料表面の画像データを構成するという方法を採用しているため、他の走査プローブ顕微鏡(Scanning Probe Microscope, SPM)に比べて、極めて高い自由度を備えている。具体的には、AFM は、絶縁性試料の表面形状も測定可能なこと、大気中や水中での試料観察が可能であること、等が挙げられる。

このような AFM の特徴、さらには、装置が比較的 low コストで操作も容易という簡便性から、AFM は様々な研究分野において利用が広がりつつある。特に、軟らかい材質のカンチレバーを備えた AFM を使えば、タンパク質等の生体試料を水中または大気中で、試料を傷つけることなく、長時間継続的に観察可能なことは、近年、バイオ関連の研究者の注目を集めており、ナノバイオ分野での AFM の使用は標準的な測定方法として確立しつつある。

しかし、バイオ関連分野の研究者が AFM を使いこなすのは、容易なことではないというのも事実である。例えば、水中環境下での粘弾性試料の AFM 測定は、試料の性質だけでなく、カンチレバー周囲の水の流体力学的な性質も反映されており、測定結果の物理的解釈は非常に難しいものとなる。実験で得られた AFM 画像データが、実際には何を測定したものなのか良く分からない、といった事態も十分に起こり得るのである。

本プロジェクトの、AFM 粘弾性解析シミュレータの開発は、上記の AFM 測定特有の問題に対処するソフトウェアを提供することを目標としている。

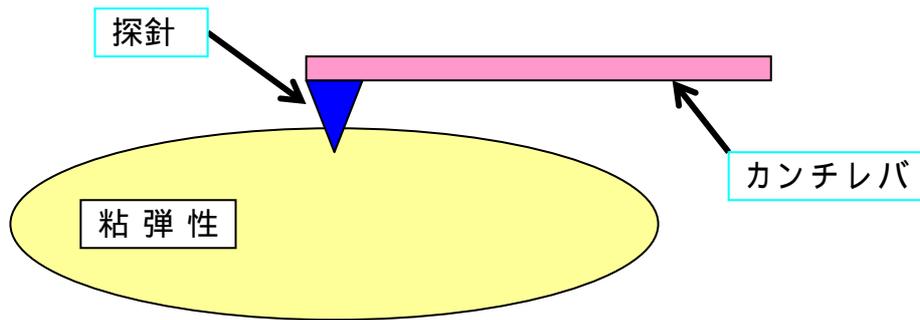


図 a. 粘弾性体と探針の接触

[シミュレーション手法]

実験試料が、ゴムのような粘性係数の小さな弾性体の場合、Hamaker 分子間力と Johnson-Kendall-Roberts (JKR)理論を組み合わせた考え方に基づく数値計算シミュレーションが有効であることが知られている。すなわち、探針が試料と接触していない場合は、Hamaker 分子間力が作用すると考え、探針と試料が接触した場合は、JKR 理論で記述される相互作用が働くと考えるのである。

Hamaker 分子間力とは、原子 2 個の相互作用エネルギーを London-van der Waals 型ポテンシャル(原子間距離の 6 乗に反比例するポテンシャル)と仮定して、これを巨視的な固体の体積について積分して得られる引力である。一方、JKR 理論とは、弾性体であると仮定された球と、粘弾性を持つ固体表面との接触の様子を記述する理論である。固体表面の粘弾性は、表面張力の形で表される点に特徴がある。

このように、探針と試料の接触・凝着を JKR 理論で記述した場合、探針が試料表面から内部へ押し込まれる過程や、探針を試料表面から引き剥がすときに、試料の表面の一部が探針と凝着して上へ引き伸ばされる過程が再現可能となる。従って、これらの観点から考えると、Hamaker 分子間力と JKR 理論を組み合わせた数値計算シミュレーション方法は、弾性体試料に対する AFM 測定で得られるフォース ディスタンスカーブを求めるのに、非常に適していると考えられる。

しかし、測定試料が、タンパク質等から成る生体物質の場合、その粘弾性の性質より、JKR 理論を適用するのが難しいことが知られている。数値計算シミュレーションが上手く行かない理由は、以下の様々な要因が複雑に絡み合っていると予想される。第一に、生体試料は材質として非常に軟らかく、試料を傷付けないようにするには軟らかいカンチレバーを選択しなければならず、そのため、カンチレバーや探針の動きに関して、パネ弾性的なフックの法則が成り立たなくなり、数値計算が適用し難いという点が挙げられる。第二に、タンパク質等のバイオ試料は粘性の影響が強く、一度接触した探針を引き剥がすのが非常に難しく、また、このような状況を数値計算で再現することも容易ではない点が挙げられる。第三に、軟らかいタンパク質生体試料に探針を押し込んだ場合、試料表面付近に塑性変形のような非可逆な過程が生じ、このようなプロセスを理論的に正しく記述するのが難しい点が挙げられる。

上記の困難を克服する方法として、試料表面の亀裂を考慮した Dugdale モデル、さらには、JKR 理論に分子相互作用距離というミクロの効果を入れて拡張した Maugis モデルの適用が考えられる。本プロジェクトでは、これらの新しい数値計算手法を試み、その有効性を判断しながら、ソフトウェア実装に取り組む考えである。

[産業界への影響]

以上に述べた、AFM 粘弾性解析シミュレータが開発された場合、ナノバイオサイエンス分野の

AFM ユーザーに対して、極めて利便性の高い、実用的なシミュレーション・ツールを提供することが可能となり、その産業上の効果は極めて高いと言える。

3)計算パラメータ作成システム構築とそれを活用しての計算パラメータ準備

本開発では、各種の計算パラメータ作成のためのシステム構築と、それを利用した典型的試料構成元素についてのパラメータ作成を行う。本システムが完成すると、研究現場の進捗に対応した新規ユーザーニーズへの即時対応が可能となる。DFTBソルバーを使うためには特別な計算パラメータを用意する必要があるが、DFTB計算パラメータは、探針や試料を構成する全ての元素に関して対として用意されなければならない。現在、s軌道、p軌道、d軌道に対応した計算パラメータ作成ツールがある(図b.参照)。それを用いて、それぞれの計算パラメータにあった入力パラメータをインプットすることで作成する。入力パラメータはそれぞれ違うが、性質が似ており、共通した部分があるものを、以下のように順序立てて分類することにする。(表a)

客先計算対象元素	主な結晶構造	入力パラメータの特徴	計算パラメータ
シリコン系(Si,C)	ダイヤモンド型	計算させる価電子の電子配置を s2, p2()とする。以下同様。	h-c-si
タングステン系(W)	体心立方格子型	電子配置はs2, d4。(これ以降はd軌道に対応している。)	h-o-w
複合系(Si,W)	複合系	s2, p2 と s2, d4の組み合わせ。	h-si-w
チタン系(Ti)	最密六方格子型	s2, d2	si-ti-o, w-ti-o
貴金属系(Au)	面心立方格子型	s1, d10	h-c-au

電子配置でs軌道2つ、p軌道2つをs2, p2のように記述する。d軌道に関しても同様。

表a.計算パラメータ作成の分類

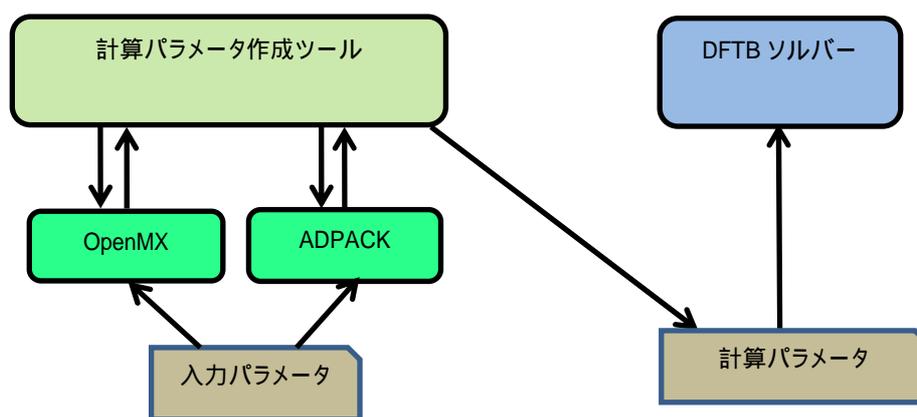


図 b. 計算パラメータ作成システム

これらの元素での作成が完了すると、一般的なユーザーニーズに対して即座に対応できるだけのリソースが整うと考えている。新奇物質へ興味を持つ研究者の新しいパラメータセットの要求に対しては、本計画で構築したシステムが有効に働く。すなわち、ユーザーから新規に要求された系に含まれる元素対について当社で計算処理し、作成した計算パラメータをユーザーへ提供することでデータの充実化を図ることができる。

4) ウィザードによる使い勝手向上

SPM シミュレータを使いこなすには、ある程度使い込んでその使用方法に習熟する必要がある、初心者にとって敷居が高いところがあった。このようなユーザーの負担を軽減する工夫は、使いやすさの向上にとって重要である。

このような取り組みとして、既に試供版においても「試料モデリングツール」を提供している。これによって、計算前段階で複雑な結晶構造や分子構造を作成する負担を大いに軽減させることができた。これに続く工夫として、初心者でも指示に従って進めるだけで、自動的に SPM シミュレータを使いこなすことができるようなツールがあれば、システムを使う際のハードルが下がり、システムの普及にも効果があると期待される。この問題を解決するために、対話的に質問に解答を繰り返すことでシミュレータ選択からパラメータの設定までを半自動化するツール(以下ウィザードと呼ぶ。)を開発する。

具体的には、まずシミュレーションによって調べたい物性(例として、SPM 像、試料の形状・硬さ、探針の形状・硬さ、カンチレバーの振動解析、電気特性など)、および、試料の特徴(例として、まず巨視スケール系なのか原子スケール系なのか)を選択させ、次に巨視スケールなら試料の変形はあるか否か、原子スケールなら対象は金属か半導体か有機高分子か無機高分子かなど、階層を追って順に質問を与える。これらの質問に対してユーザーが対話的に選択肢を選ぶ。それによってシミュレータが選択され、スキャンエリアや解像度等パラメータがある程度まで設定されることを想定している。また選択された解答に対して異常な値の代入時には警告を発する機能も持たせる。

ウィザードの開発においては、最初からあらゆる目的に対応できるものを開発することは大きなコストが掛かり、現実的ではない。従って、ニーズの多い事例をまず集中的に開発し、徐々に適用範囲を広げることで完成度を上げてゆくことを考える。具体的には、関心に依じて分類した典型的ユーザー群をいくつか想定して、各群にそれぞれ適した質問 解答データを揃える。例えば半導体に関心を持つユーザー群、同じく金属、有機高分子、無機高分子に関心を持つユーザー群などいくつかの対象を想定し、ニーズの多い順に開発を進める。

図 c.にこれらの概念図を示す。

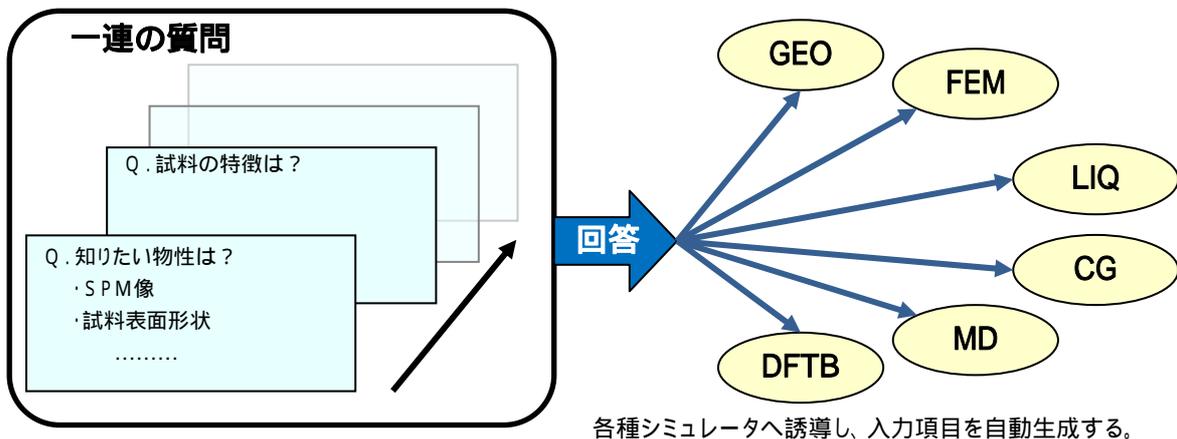


図 c. ウィザードのイメージ

5) トンネル電流計算の精度向上

表面状態計算において、表面構造の周期性をより正確に反映させるプログラムを作る方針で進めている。(技術的には、表面状態の波数ベクトルが非零の場合も考慮する案と言える。)

6) ソルバーの高速化

OpenMP による並列化とコードの調整による計算の効率化により、単一計算機での高速化を実現させるという方針です。

7)外部研究者の評価をフィードバックする方法

外部研究者にユーザー会やコンソーシアムに参加してもらい、その中で評価・意見を吸い上げ、弊社の各分野の担当者がそれに応えて改良・開発を行うことで、フィードバックしていく方法を取