

初めて SPM シミュレータを使われる方に向けての

ソルバ毎 SPM シミュレータ計算事例

「SPM シミュレータ用途別機能紹介資料[Part1: 高分子の単分子観察]」編

株式会社 Advanced Algorithm & Systems

2017. 11. 21

# 1・目次

[Part1: 高分子の単分子観察]が提示する**計算事例（1～14）**は、用途別市場において

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ApplicationField.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM\\_simulator\\_application\\_examples.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_simulator_application_examples.html)

研究テーマでは、バイオ・ソフトマテリアル

用途別市場では、食品 製薬 化粧品 バイオ 合成ゴム 医療用品

に固有の科学的知見、或は支配的条件に従う、代表的シミュレーション（アルゴリズム）に原理的に準拠しており、この用途別市場の産官学SPMユーザー様には、共通に使用される特性をもち、ユーザ所属先の事業形態・から部分を担当するか否か、の差異があるのみである。

還元すれば、これら計算事例は、用途別市場の産官学SPMユーザーに取り、原理的に共有され、ユーザ各位が共通に使用出来ることになる。

共通性に着目し、初めて SPM シミュレータを使われる方に向けての、ソルバ毎 SPM シミュレータ計算事例として用意しました。計算結果の解説も記載しています。SPM シミュレータを使う時の、モデル作成を含む、基本的なシミュレーション実行例を示しています。実行例のデータファイルをダウンロードして、シミュレーションを行うための工程を知っていただき、その後、必要な箇所だけパラメータを変更すれば、ご要望に合ったシミュレーション計算を実行することができます。ソルバ毎 SPM シミュレータ計算事例に用いる物質は、なるべく単純なものとし、モデル構築及び、ソルバ毎のシミュレーションパラメータ設定がどのように結果に反映するかが理解し易いよう解説します。**本編は「高分子の単分子観察」向けです。**

以下に参考事例モデルの各ソルバによる計算例のリストを示します。

## 1・目次（本ページ）

## 2・Analyzer(実験データ画像処理プロセッサ) ImageProcessing (実験データ読み込み機能)

- ・ 実測画像ファイル・・・P A R形式 **（計算事例1）**
  - ・ 基板面の傾き補正
- ・ 実測画像ファイル・・・S m 4 形式 **（計算事例2）**
  - ・ 基板面の傾き補正
- ・ 実測画像ファイル・・・i b w形式 **（計算事例3）**
  - ・ 基板面の傾き補正

## 3・Analyzer(実験データ画像処理プロセッサ) ImageProcessing (コントラスト調整)

- ・ 実測画像ファイル・・・cube 形式 **（計算事例4）**

- 4・Analyzer(実験データ画像処理プロセッサ) ImageProcessing (探針形状推定・探針影響除去機能)
  - ・実測画像ファイル・・・cube形式 (計算事例 5)
    - ・探針形状推定
    - ・推定探針形状立体表示
    - ・アーティファクト除去
    - ・オリジナルSPM実験画像とアーティファクト除去画像の3D-VIEWによる比較
- 5・GeoAFM(高速相互予測 AFM シミュレータ) CalcImage (GeoAFM 探針・試料から AFM 像計算)
  - ・シャペロニン分子の GeoAFM 像シミュレーション (計算事例 6)
    - ・参考：PDB 形式について
- 6・GeoAFM(高速相互予測 AFM シミュレータ) CalcImage (GeoAFM 探針・試料から AFM 像計算)
  - ・ミオシン V 分子の GeoAFM 像シミュレーション (計算事例 7)
- 7・GeoAFM(高速相互予測 AFM シミュレータ) CalcImage (GeoAFM 探針・試料から AFM 像計算)
  - ・タバコモザイクウイルス (TMV) の GeoAFM 像シミュレーション (計算事例 8)
    - ・生物学的単位 (biological unit) データでのシミュレーション
    - ・生物学的単位 (biological unit) データでのシミュレーション 2 (試料の回転と結果表示モードの応用) (計算事例 9)
    - ・モデル描画方法の設定
    - ・非対称単位 (asymmetric unit) データでのシミュレーション (計算事例 10)
- 8・FemAFM(連続弾性体 AFM シミュレータ) FreqShift (FemAFM )
  - ・コラーゲンの FemAFM 像シミュレーション 1 (計算事例 11)
    - ・Collagen(Collagen alpha-1(III) chain)の周波数シフト AFM 像シミュレーション
    - ・参考：周波数シフト像モード(femafm\_frequency\_shift)について
  - ・コラーゲンの FemAFM 像シミュレーション 2 (計算事例 12)
    - ・Collagen(COLLAGEN ALPHA 1)の周波数シフト AFM 像シミュレーション
- 9・FemAFM(連続弾性体 AFM シミュレータ) FreqShift (FemAFM 高さ一定モード、周波数シフト像モード)
  - ・double-tip を使った、HOPG 基板上の 1-clg の周波数シフト AFM 像シミュレーション (計算事例 13)
  - ・参考：探針・試料の形状データとしての画像ファイルについて
  - ・類例：計算事例 11 の応用 (計算事例 14)
- 10・本編でのSPMシミュレータにおけるソルバー一覧

## 2. Analyzer(実験データ画像処理プロセッサ) ImageProcessing (実験データ読み込み機能)

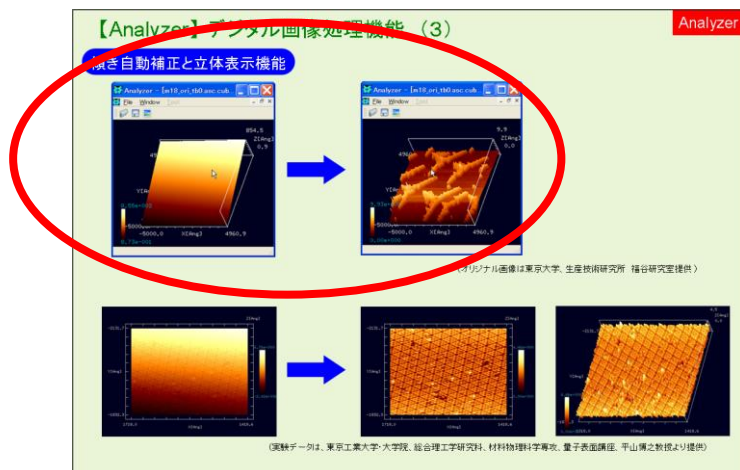
### ●実験データ読み込み機能：実測画像ファイル(実験生データ)(a) (zip形式、305.6 KB)・・・P A R形式 (Z I P圧縮解凍後) 計算事例①

計算モード識別番号：[Analyzer\_ImageProcessing\_009](a) m18\_ori.zip

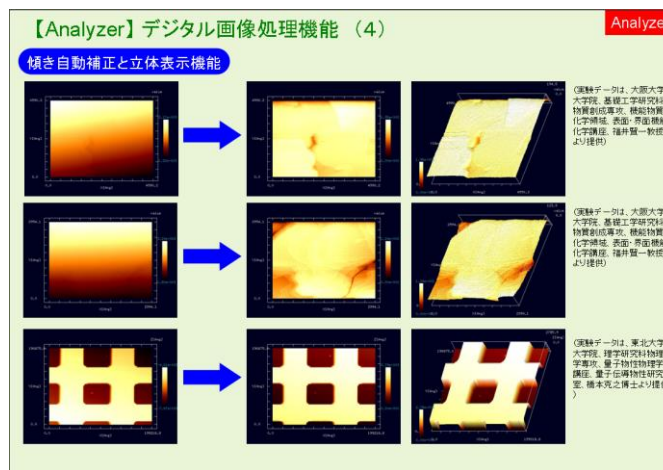
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/Analyzer/ImageProcessing/Analyzer\\_ImageProcessing.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/Analyzer/ImageProcessing/Analyzer_ImageProcessing.php)

分類：Analyzer (実験データ読み込み機能)、 $\mu$ mオーダー、高分子の単分子

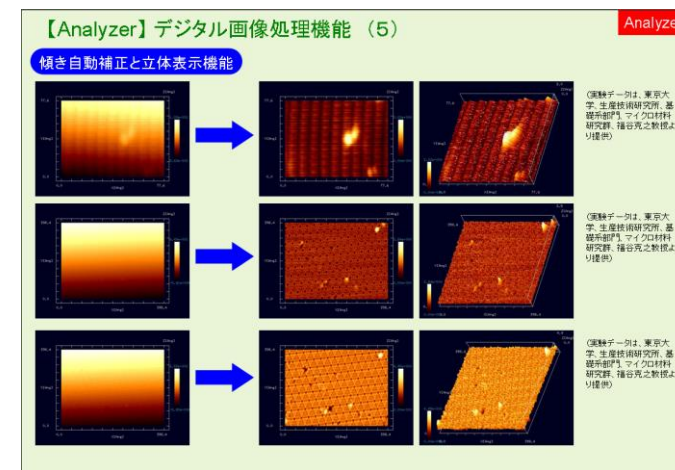
事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ 1



ページ 2



ページ 3

実験生データ(a)は、Z I P圧縮を行った「zip形式」となっており、Z I P圧縮の解凍後「P A R形式」のデータが、同名フォルダ内に出来ます。

メーカー名：Omicron

東京大学生産技術研究所 福谷研究室様 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.]

本事例は「基板面の傾き補正」の例を示しています。

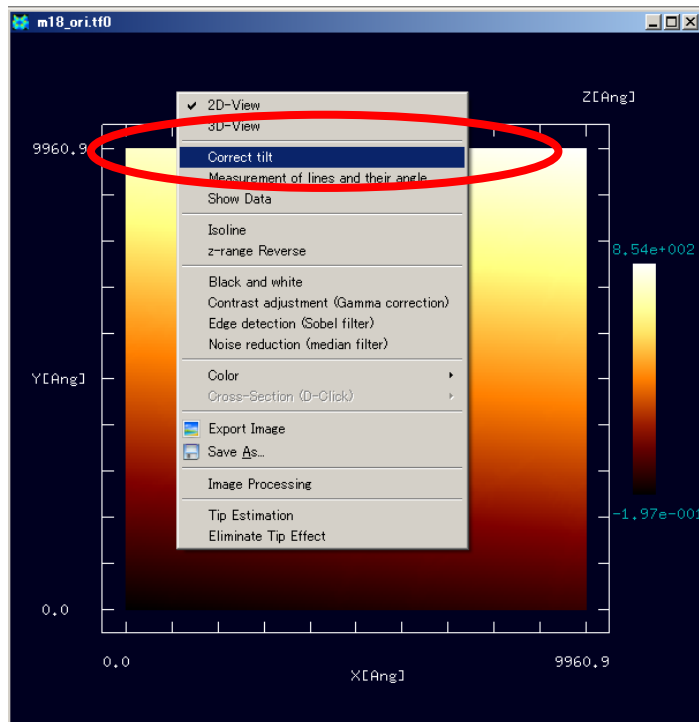
補正対象を表示した画面の上にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが現れるので、そこから[Correct tilt]を選んでクリックします。

以下に、実験生データ「m18\_ori.tf0」について、「基板面の傾き補正」と「2D-View」「3D-View」の表示例を示します。

傾き補正を行うことにより、傾いた試料面上の微細な構造が強調されます。

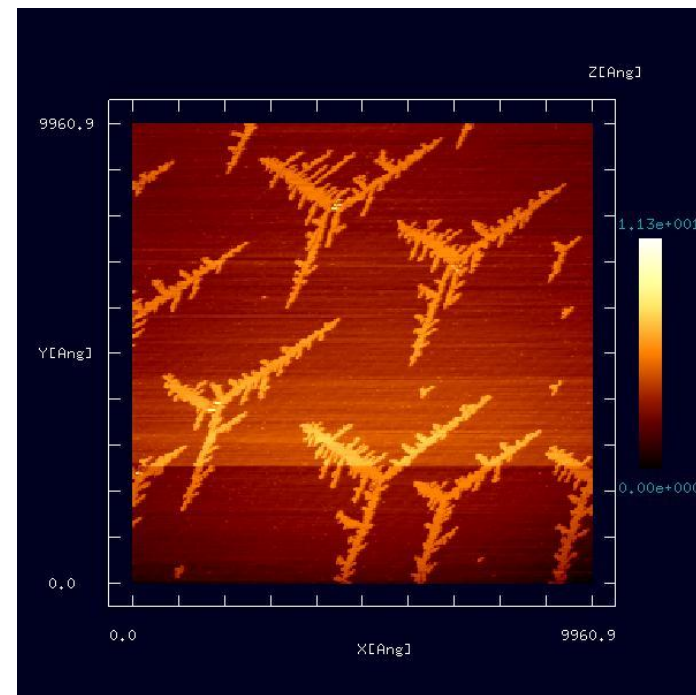
事例モデルの補正対象を表示した  
画面の上のコンテキストメニュー  
(右図)

[Correct tilt]を選択する。

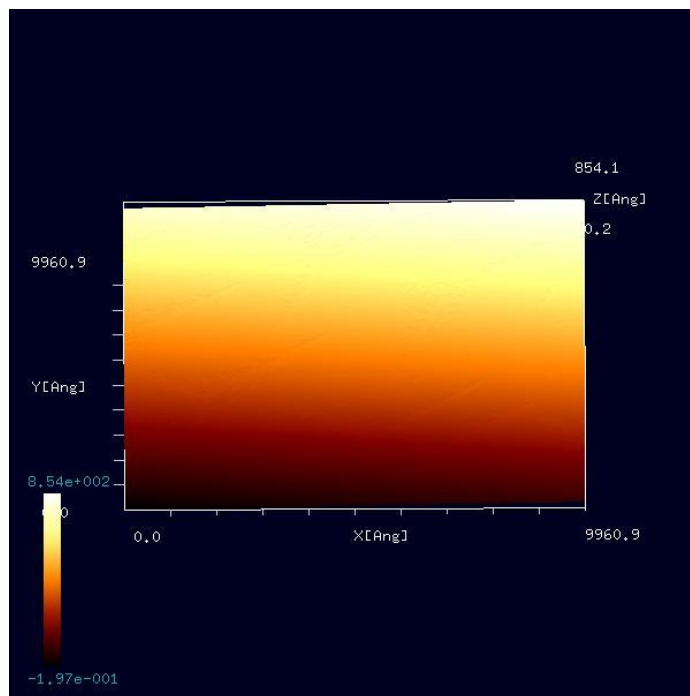


事例モデルの傾き補正後の  
2D画像  
(右図)

微細な構造が強調されます。

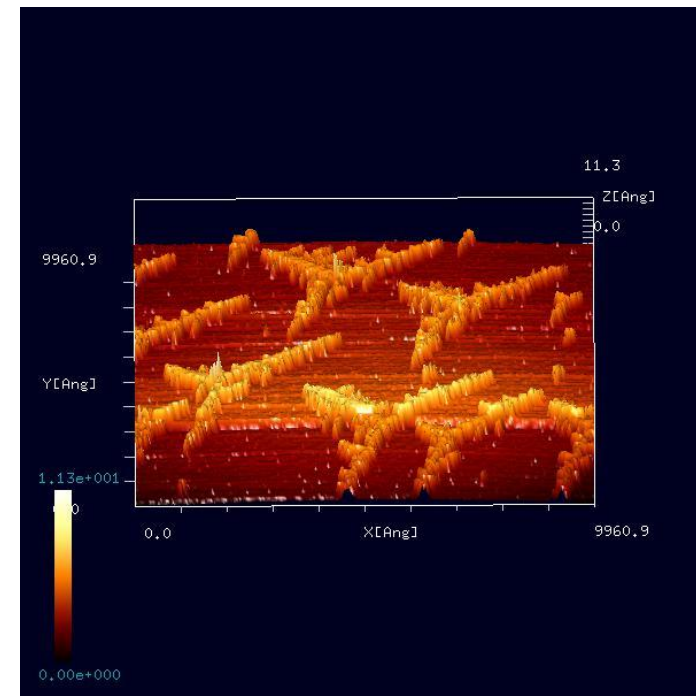


事例モデルの傾き補正前の  
3D画像  
(右図)



事例モデルの傾き補正後の  
3D画像  
(右図)

高さ方向の微細な構造が  
強調されます。





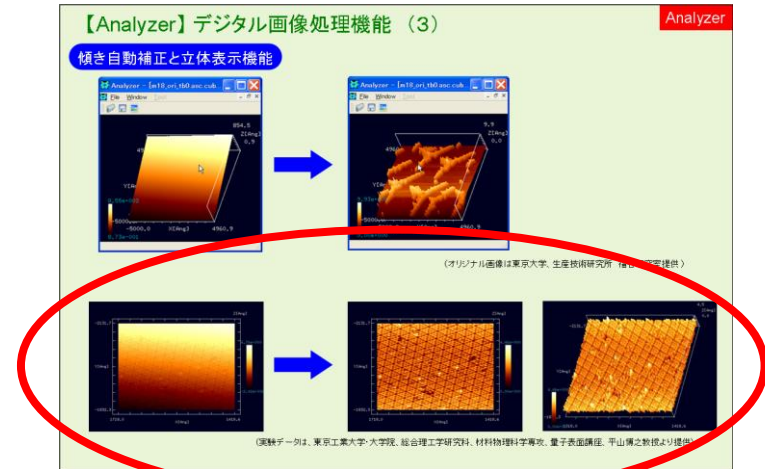
## ●実験データ読み込み機能：実測画像ファイル(実験生データ)(b) (SM4形式、4.3 MB)・・・SM4形式(圧縮解凍なし) 計算事例②

計算モード識別番号：[Analyzer\_ImageProcessing\_009](b) 1110050009.SM4

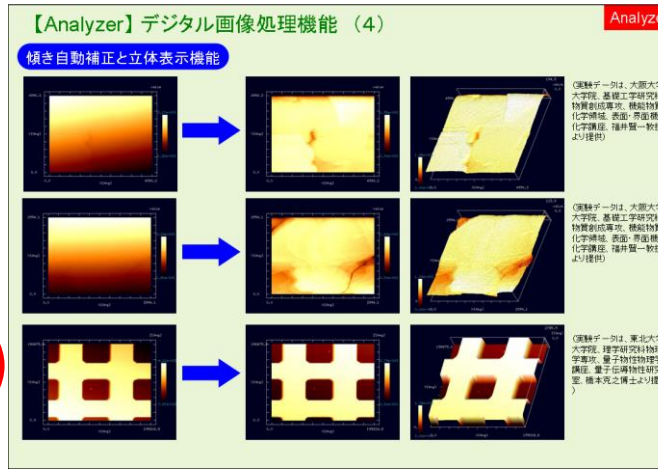
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/Analyzer/ImageProcessing/Analyzer\\_ImageProcessing.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/Analyzer/ImageProcessing/Analyzer_ImageProcessing.php)

分類：Analyzer (実験データ読み込み機能)、 $\mu\text{m}$ オーダー、高分子の単分子

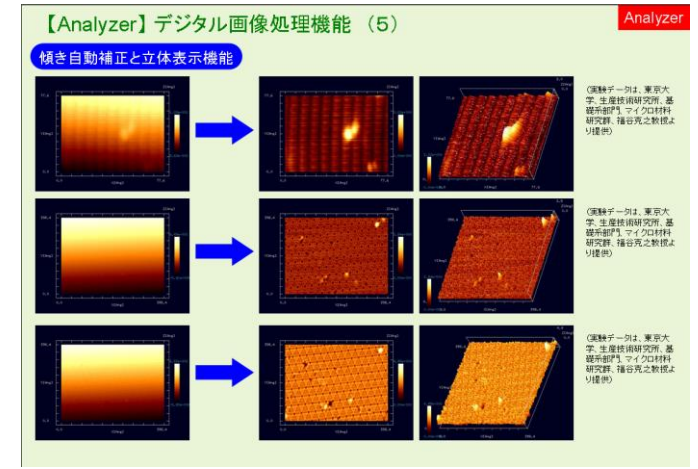
事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ P 1



P 2



P 3

実験生データ(b)は、「SM4形式」のデータを圧縮解凍なしに用います。

メーカー名：RHK Technology Inc.

東京工業大学・大学院総合理工学研究科、材料物理科学専攻、量子表面講座、平山博之教授様 提供

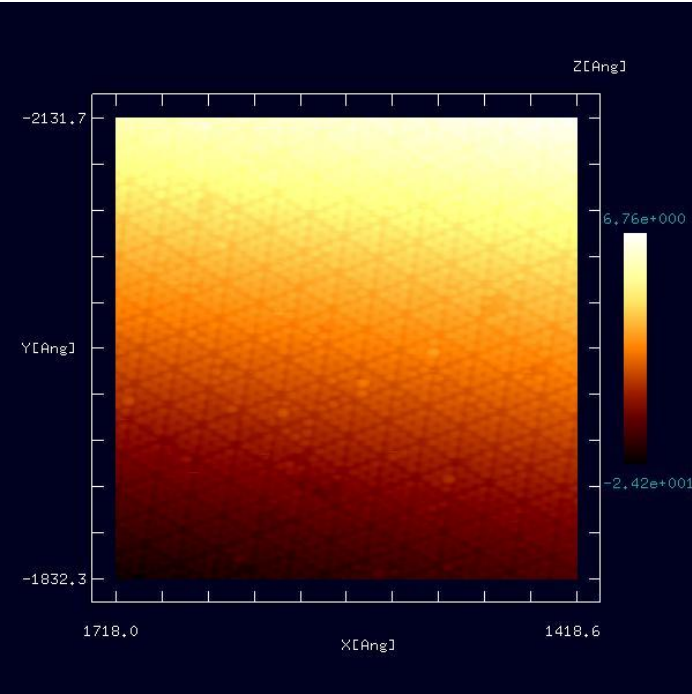
本事例は「基板面の傾き補正」の例を示しています。

補正対象を表示した画面の上にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが現れるので、そこから[Correct tilt]を選んでクリックします。

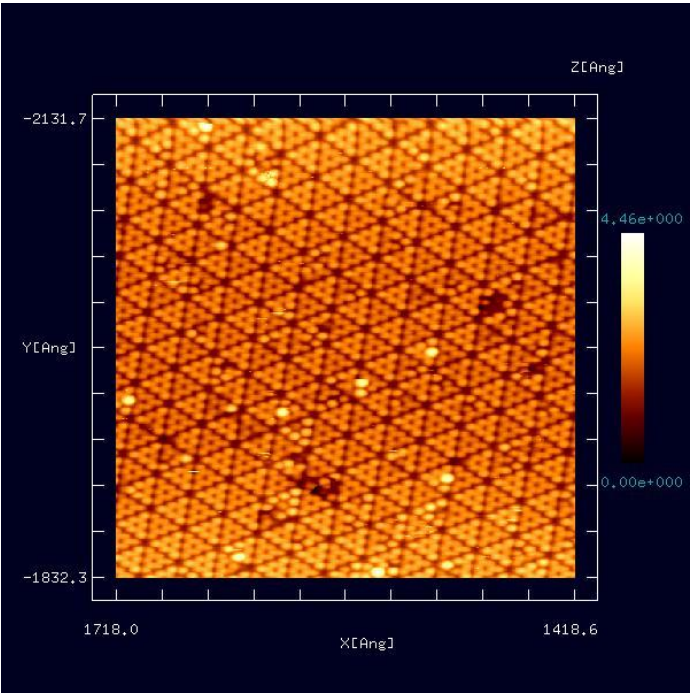
以下に、「1110050009\_Topography (LEFT)」について、「基板面の傾き補正」と「2D-View」「3D-View」の表示例を示します。

傾き補正を行うことにより、傾いた試料面上の微細な構造が強調されます。

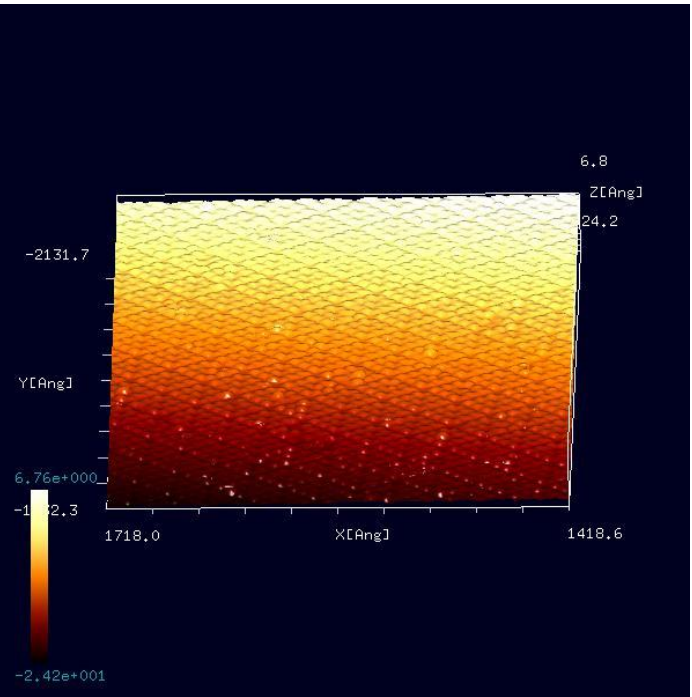
事例モデルの傾き補正前の  
2D画像  
(右図)



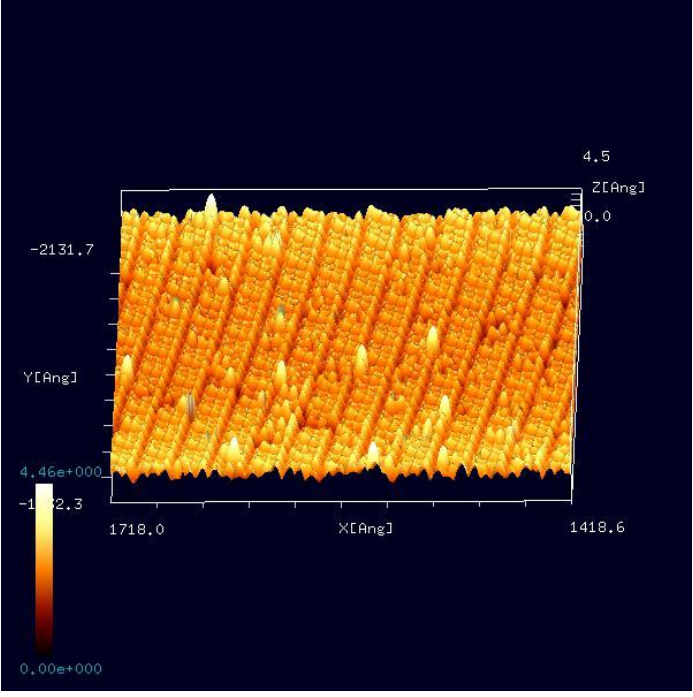
事例モデルの傾き補正後の  
2D画像  
(右図)  
微細な構造が強調されます。



事例モデルの傾き補正前の  
3D画像  
(右図)



事例モデルの傾き補正後の  
3D画像  
(右図)  
高さ方向の微細な構造が  
強調されます。



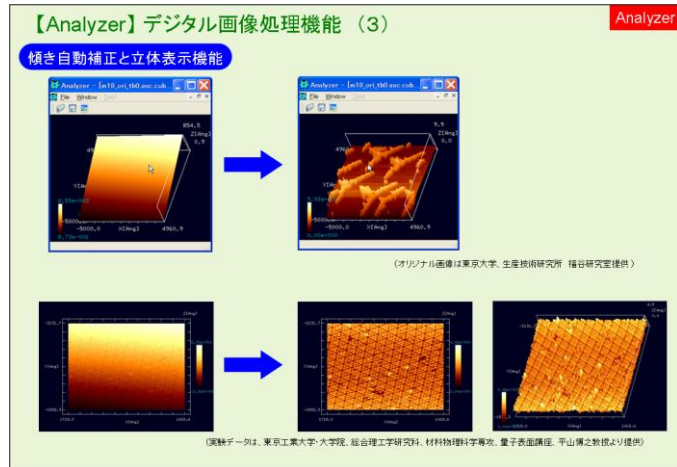
# ●実験データ読み込み機能：実測画像ファイル(実験生データ)(e) (i b w形式、336.2 KB)・・・i b w形式(圧縮解凍なし) 計算事例③

計算モード識別番号：[Analyzer\_ImageProcessing\_009](e) second2.ibw

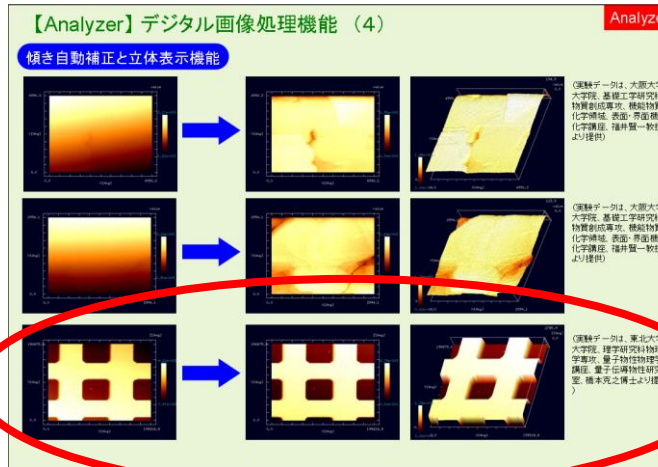
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/Analyzer/ImageProcessing/Analyzer\\_ImageProcessing.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/Analyzer/ImageProcessing/Analyzer_ImageProcessing.php)

分類：Analyzer (実験データ読み込み機能)、 $\mu$ mオーダー、高分子の単分子

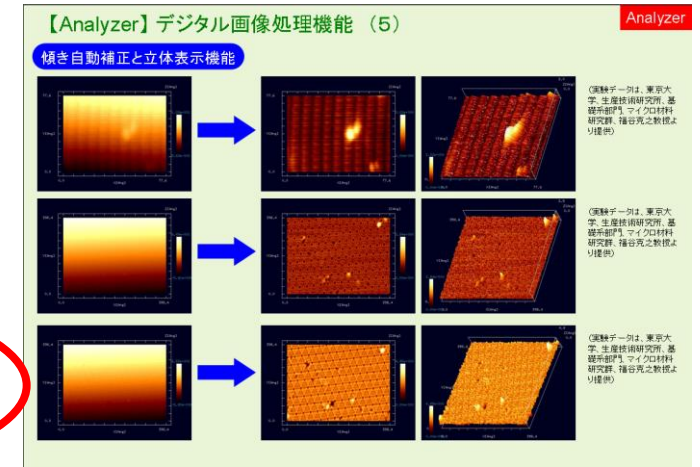
事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページP 1、



P 2、



P 3

実験生データ(e)は、「i b w形式」のデータを圧縮解凍なしに用います。

メーカー名：Asylum Research

東北大学大学院理学研究科物理学専攻、量子物性物理学講座、量子伝導物性研究室、橋本克之博士様 提供

本事例は「基板面の傾き補正」の例を示しています。

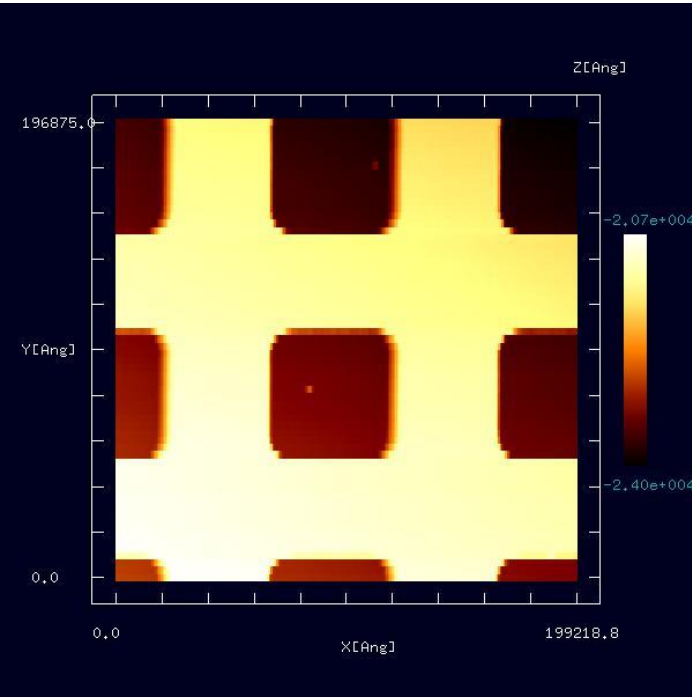
補正対象を表示した画面の上にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが現れるので、そこから[Correct tilt]を選んでクリックします。

以下に、「second2\_HeightRetrace」について、「基板面の傾き補正」と「2D-View」「3D-View」の表示例を示します。

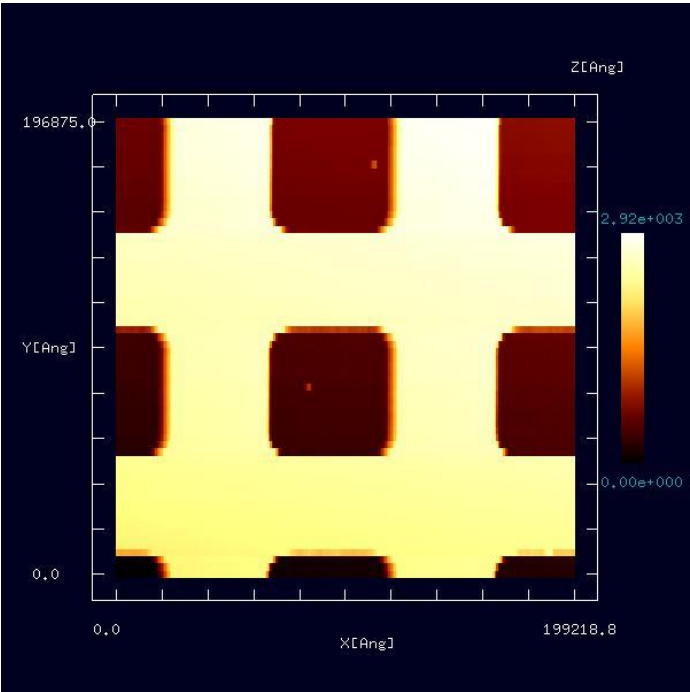
傾き補正を行うことにより、傾いた試料面上の構造が強調されます。



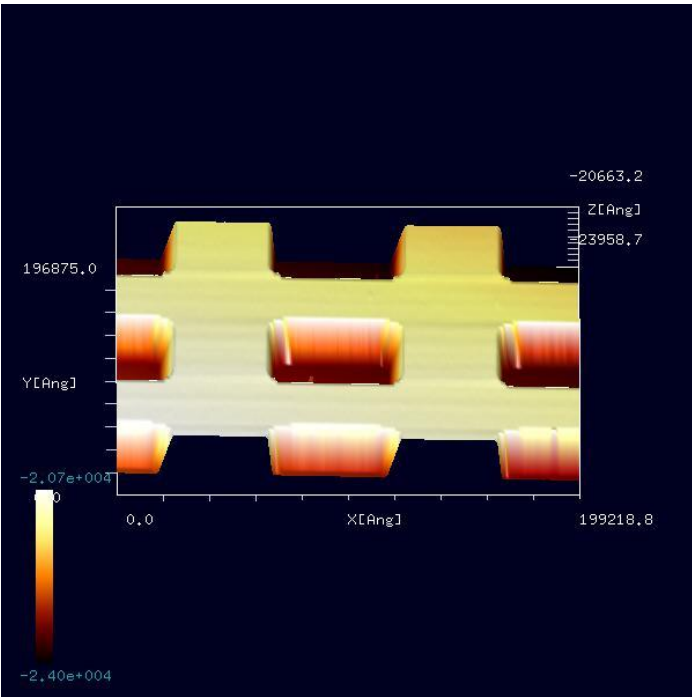
事例モデルの傾き補正前の  
2D画像  
(右図)



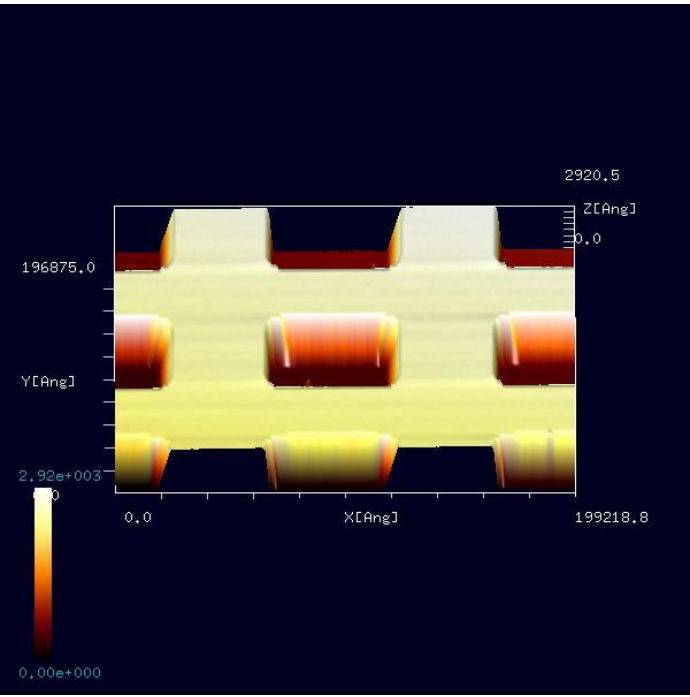
事例モデルの傾き補正後の  
2D画像  
(右図)  
微細な構造はないことが  
分かります。



事例モデルの傾き補正前の  
3D画像  
(右図)



事例モデルの傾き補正後の  
3D画像  
(右図)  
高さ方向の構造が若干  
強調されます。



### 3. Analyzer(実験データ画像処理プロセッサ) ImageProcessing (コントラスト調整機能)

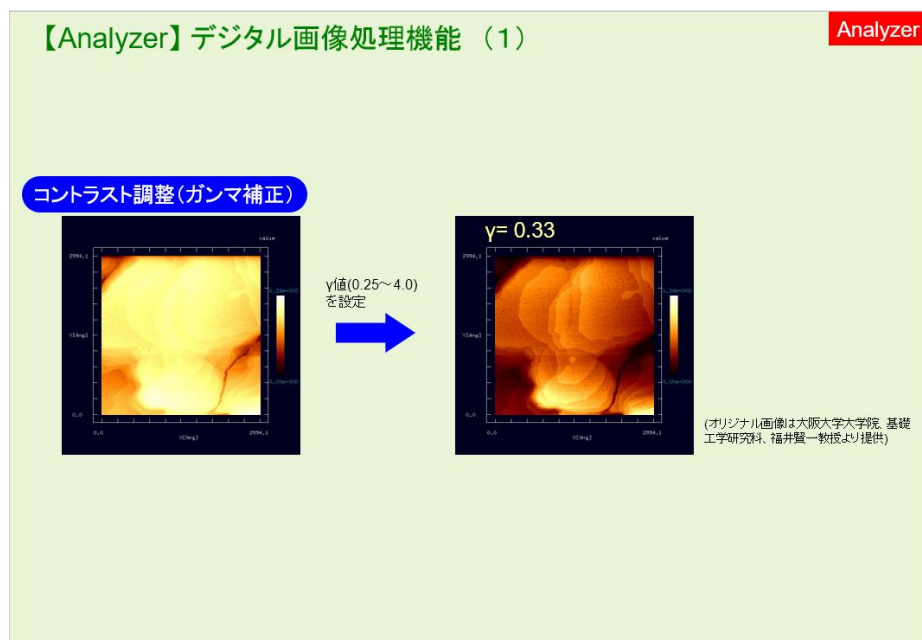
#### ●コントラスト調整機能：実測画像ファイル (cube形式、6.0 MB) 計算事例④

計算モード識別番号：[Analyzer\_ImageProcessing\_006]

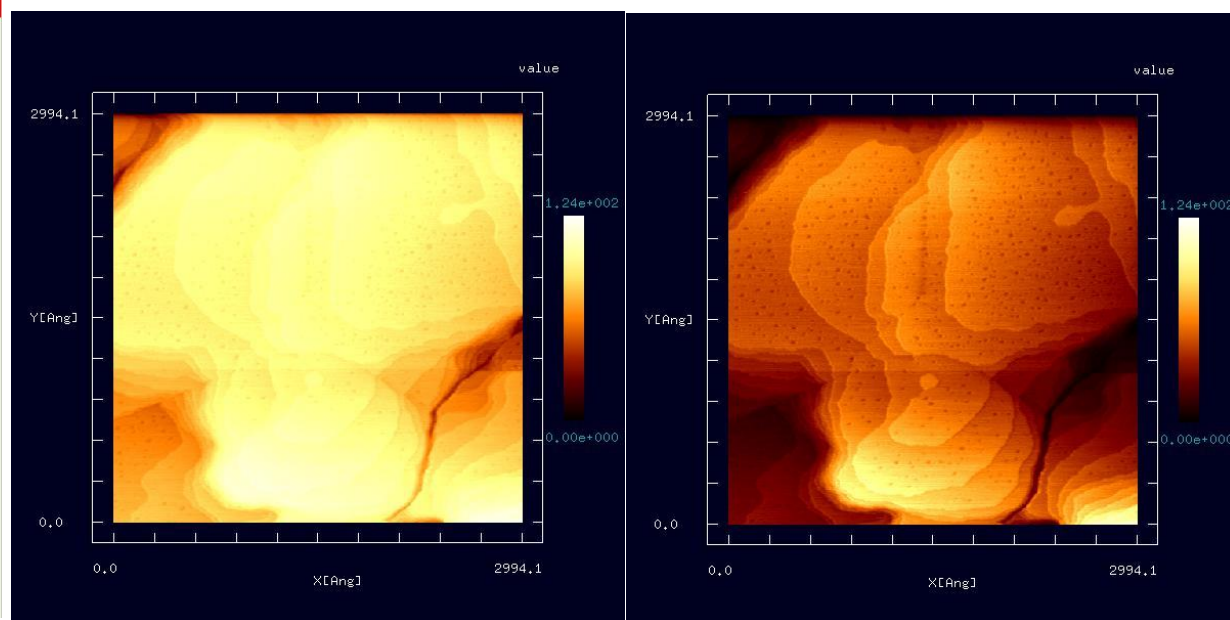
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/Analyzer/ImageProcessing/Analyzer\\_ImageProcessing.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/Analyzer/ImageProcessing/Analyzer_ImageProcessing.php)

分類：Analyzer (コントラスト調整機能)、 $\mu$ mオーダー、高分子の単分子

事例紹介ページを下に示します。



事例紹介ページ



$\gamma$  値 1.00 (オリジナル画像)

$\gamma$  値 0.33

画像データ「agilent09090101.cube」は、Cube 形式となっており、SPM シミュレータ独自の形式です。  
大阪大学・大学院基礎工学研究科、物質創成専攻、機能物質化学領域、表面・界面機能化学講座、福井賢一教授様 提供

本事例は「コントラスト調整」の例を示しています。

調整対象を表示した画面の上にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが現れるので、そこから[Contrast adjustment (Gammacorrection)]を選んでクリックします。次に[Gamma]を要求するウィンドウが現れるので、所望のパラメータ値を代入します。

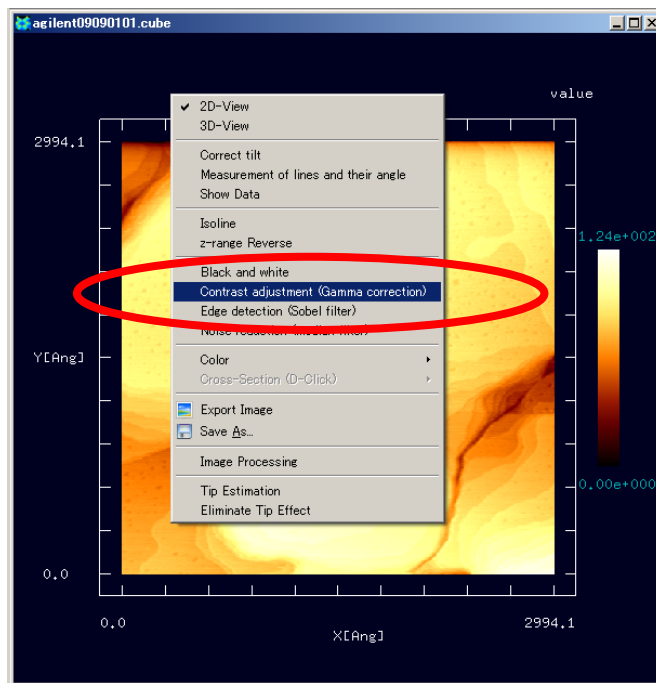
以下に、「agilent09090101.cube」について、「コントラスト調整」の表示例を示します。

コントラスト調整を行うことにより、対象物の細かな高低差の構造の見え方に違いが出ることが判ります。

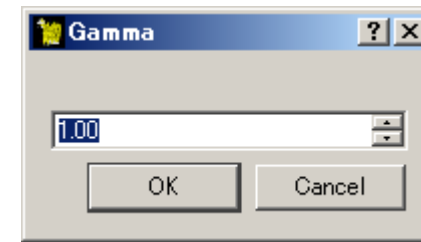
$\gamma$  値を「1.00」とすると、オリジナル画像と同じとなります。

事例モデルの調整対象を表示した画面の上のコンテキストメニュー（右図）

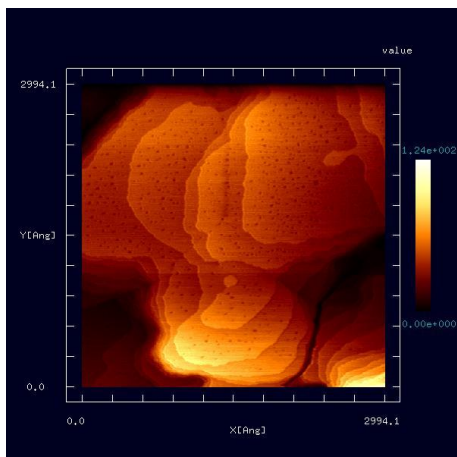
[Contrast adjustment (Gamma correction)]を選択する。



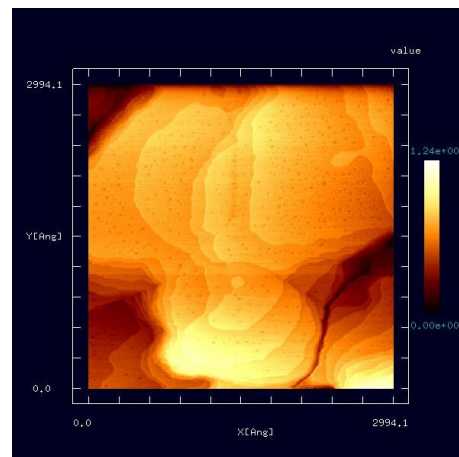
[Gamma]を要求するウィンドウ（右図）



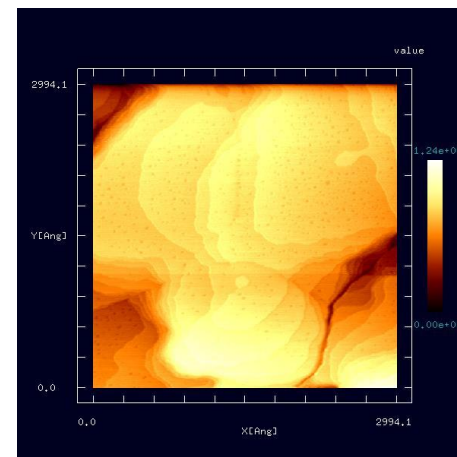
入力可能な $\gamma$ 値パラメータ値の範囲は、 $0.25 \leq \gamma \leq 4$ に設定されており、デフォルト値は 1.0 となっています。



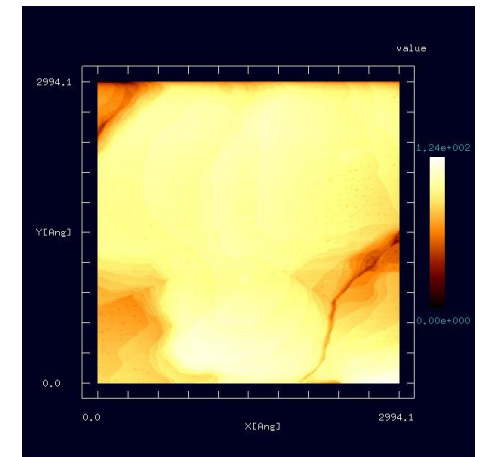
$\gamma$  値 0.25



$\gamma$  値 0.50



$\gamma$  値 0.75



$\gamma$  値 1.25

## 4. Analyzer(実験データ画像処理プロセッサ) ImageProcessing (探針形状推定・探針影響除去機能)

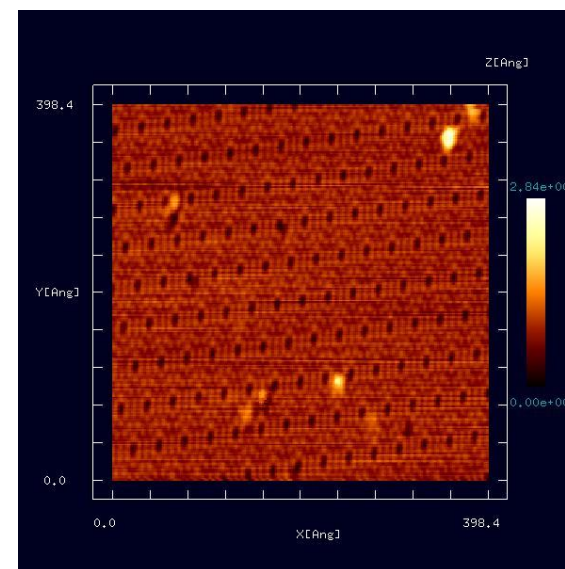
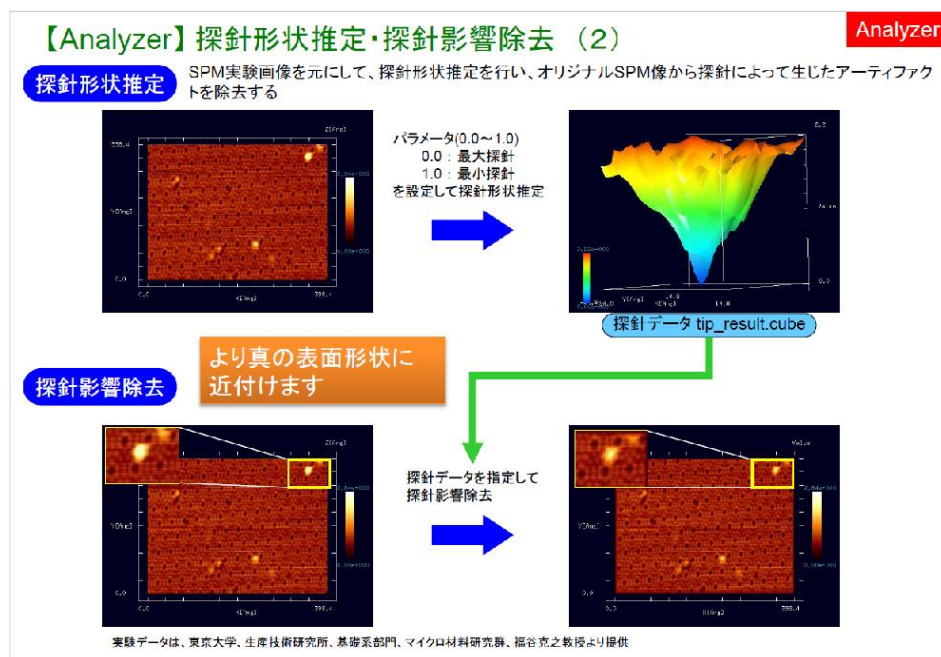
### ●探針形状推定・探針影響除去機能：(Cube形式)・・・計算事例⑤

計算モード識別番号：[Analyzer\_TipEstimation\_002]

ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/Analyzer/TipEstimation/Analyzer\\_TipEstimation.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/Analyzer/TipEstimation/Analyzer_TipEstimation.php)

分類：Analyzer (探針形状推定・探針影響除去)、 $\mu\text{m}$ オーダー、高分子の単分子

事例紹介ページを下に示します。



オリジナル画像

画像データ「[m16\_ori.cube]」は、Cube形式となっており、SPMシミュレータ独自の形式です。

東京大学、生産技術研究所、基礎系部門、マイクロ材料研究群、福谷克之教授様 提供

本事例は「探針形状推定・探針影響除去」の例を示しています。

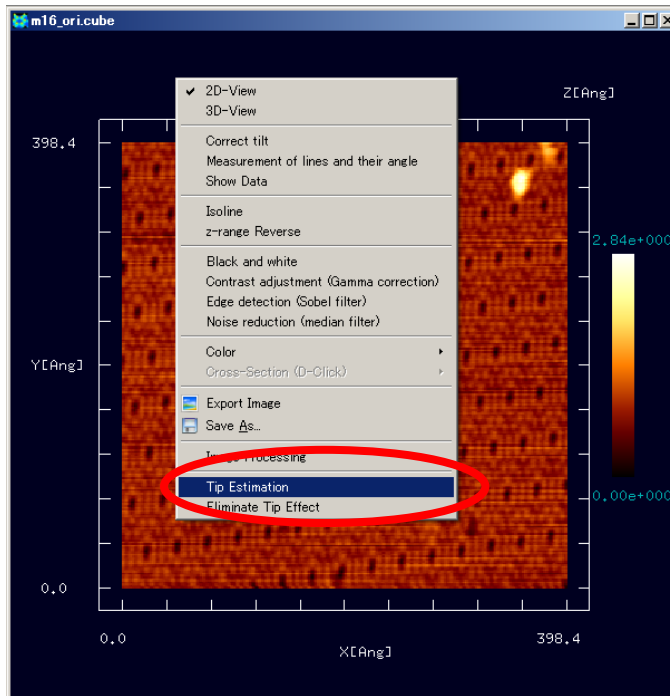
推定対象を表示した画面の上にカーソルを置いてマウスを右クリックすると、コンテキストメニューが現れるので、そこから[Tip Estimation]を選んでクリックします。次に推定探針形状のx方向、y方向の画素数および[Parameter]を要求するウィンドウが現れるので、それぞれ"20" "20" "0.0"を代入します。すると、推定された探針形状が、「tip\_result.cube」というタイトルの画像として表示されます。



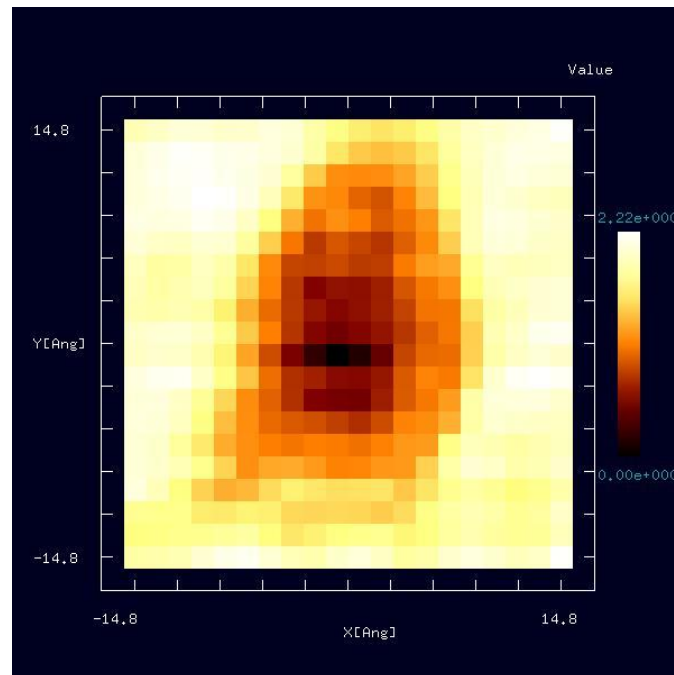
- ・ 探針形状を推定する。

オリジナル画像画面の上の  
コンテキストメニュー  
(右図)

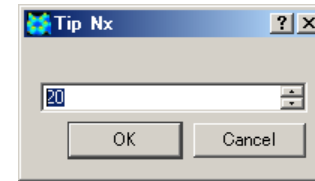
[Tip Estimation]を選択する。



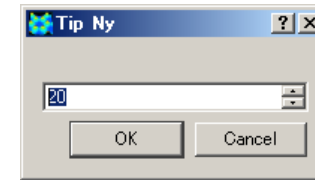
推定された探針形状  
「tip\_result.cube」  
(右図)



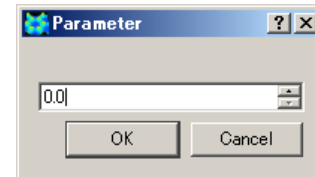
推定探針形状の x 方向の画素数[20] (下図)



推定探針形状のx方向の画素数[20] (下図)

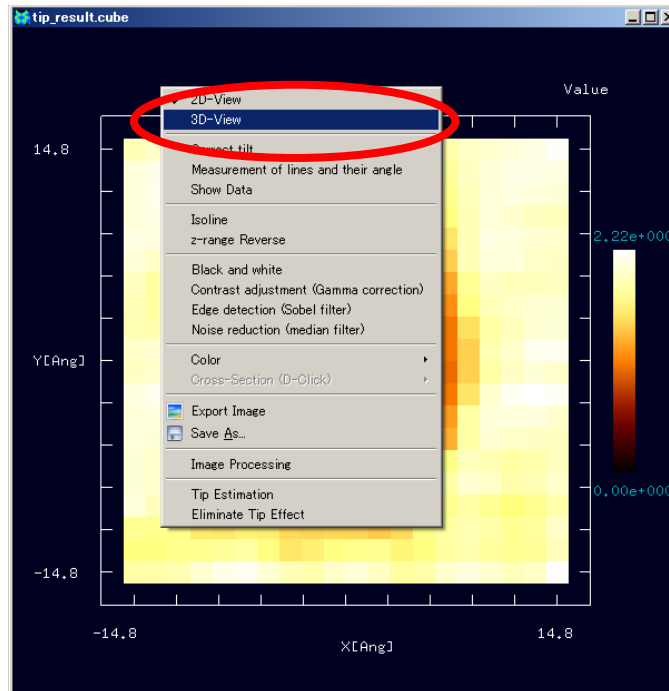


Parameter[0.0] (下図)

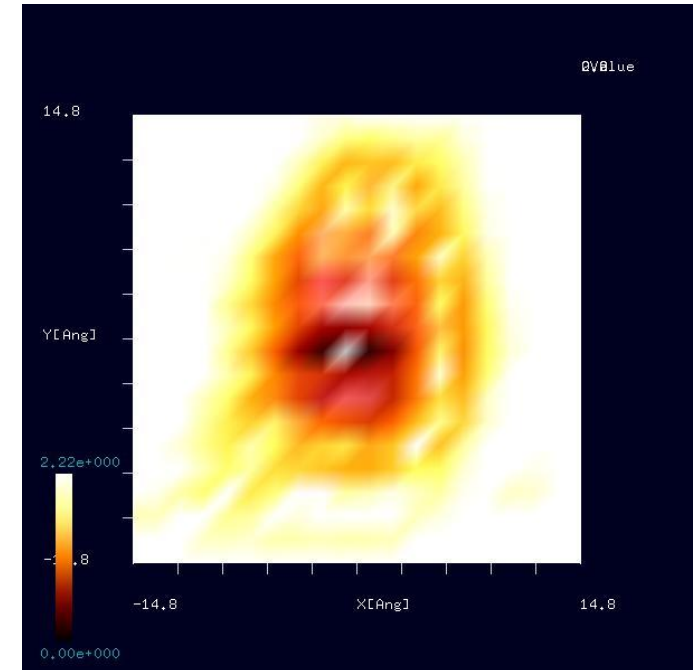


- 推定探針形状を立体表示する。

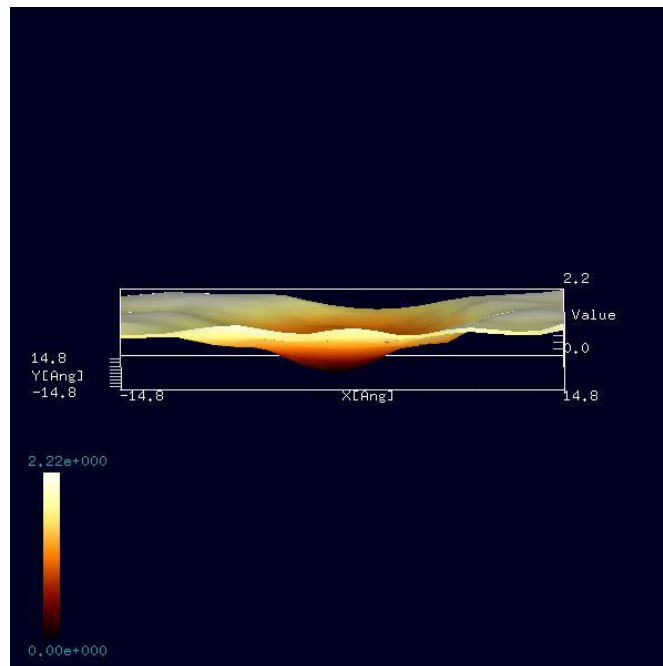
推定探針画面の上の  
コンテキストメニュー  
(右図)  
[3D-View]を選択する。



推定探針画面の3D画像  
(右図)

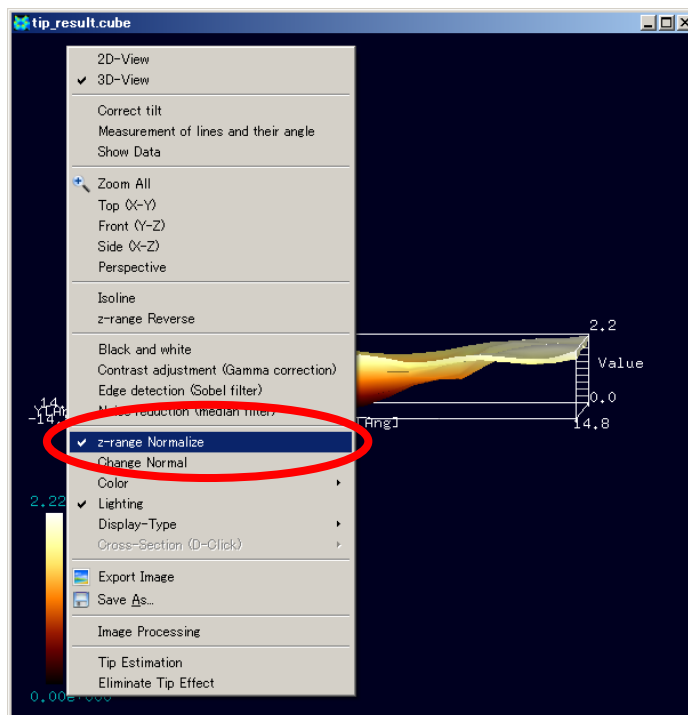


推定探針画面の3D画像  
SIDEや上方より見た  
状態。  
(右図)

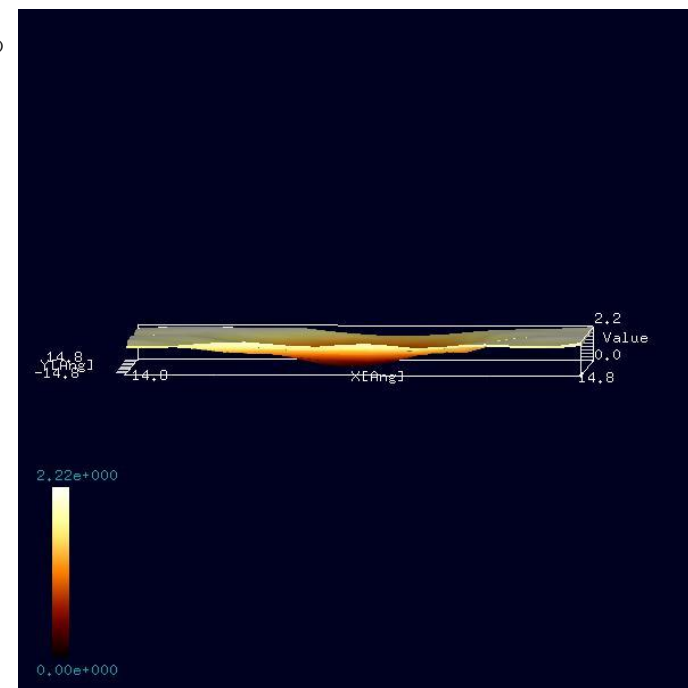


推定探針 3D 画面の上  
コンテキストメニュー  
(右図)

項目[z-range Normalize]の  
チェックを外す。

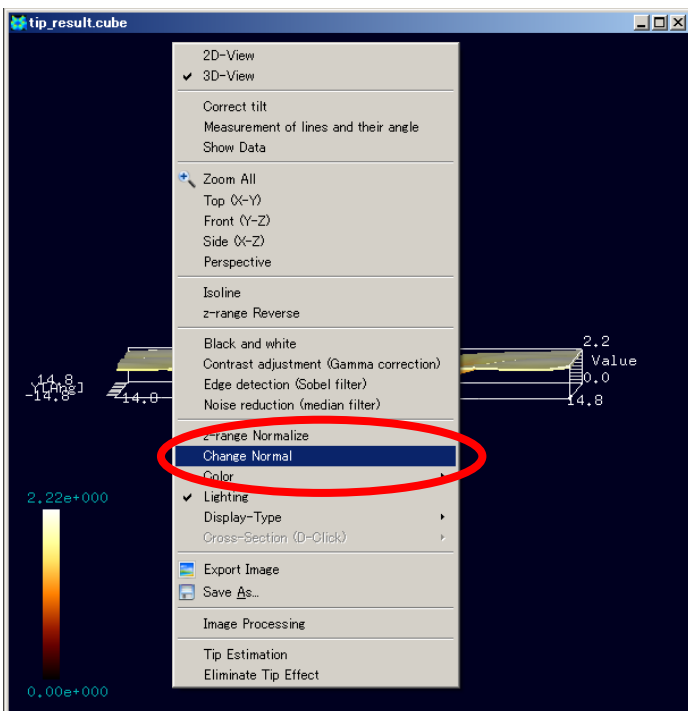


項目[z-range Normalize]の  
チェックを外した結果画像  
(右図)



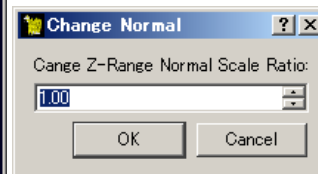
推定探針 3D画面の上の  
コンテキストメニュー  
(右図)

項目[Change Normal]を  
選択する。

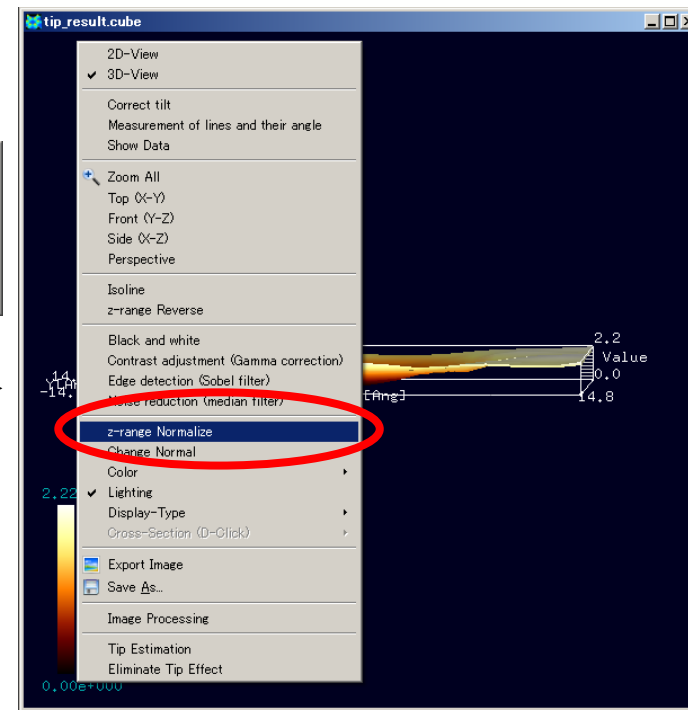


“Change Z-Range Normal  
Scale Ratio:”

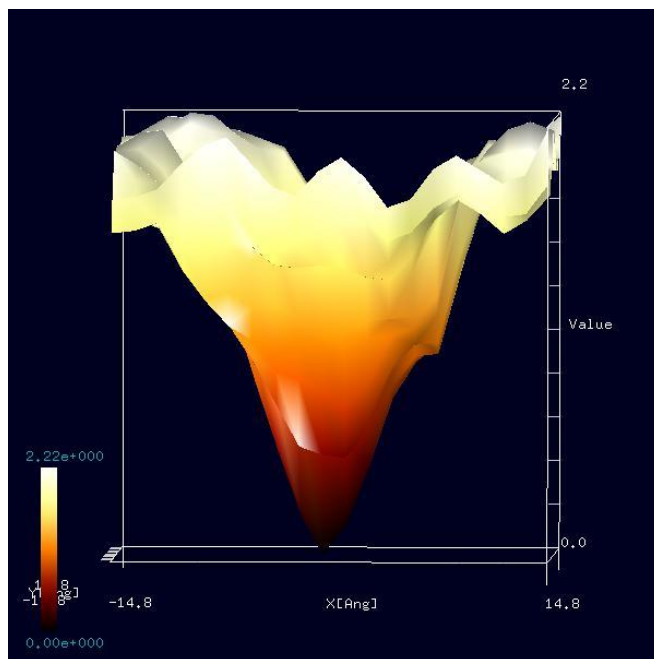
を“1.0”に設定する。(下図)



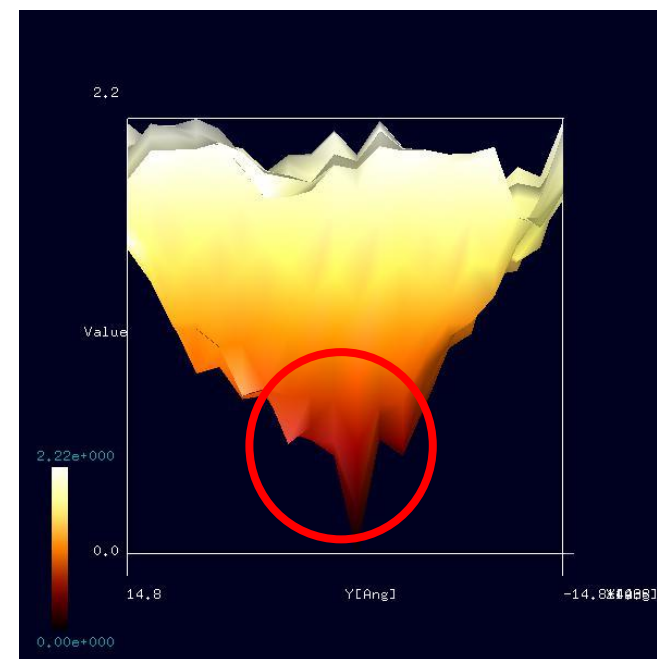
項目[z-range Normalize]を  
選択する。(右図)



項目[z-range Normalize]を  
選択した結果の推定探針 3 D像。  
FRONT像（右図）  
高さ方向にスケーリングされ  
形状が明確になります。

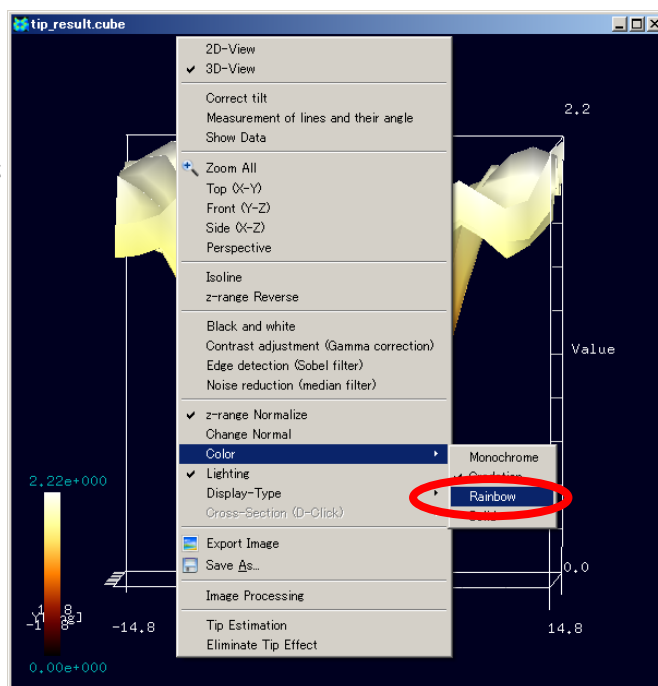


推定探針 3 D像SIDE像（右図）。

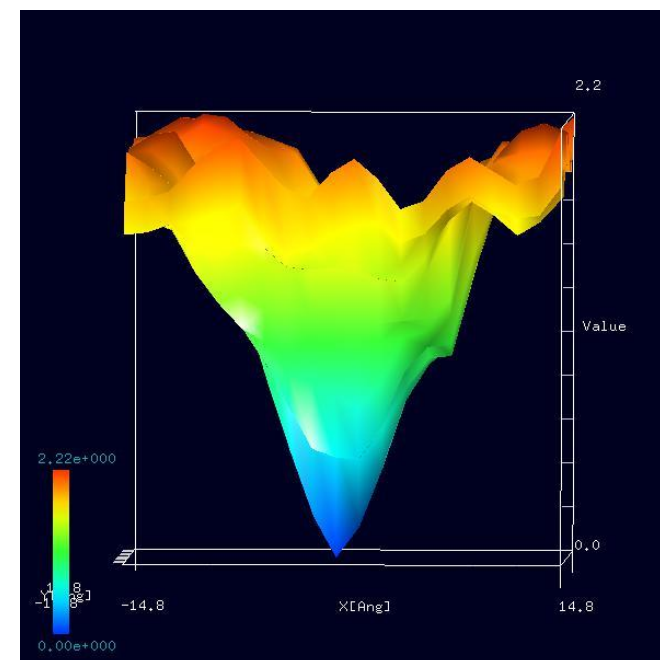


推定された探針は先端部  
形状に幾つかの突起が  
あると思われます。

推定探針 3 D画像画面、  
コンテキストメニュー内の項目  
[Color]→[Rainbow]を指定する  
と、立体形状が見易くなる場合が  
あります。  
（右図）



推定探針 3 D画像を[Rainbow]  
表示にした図。（右図）

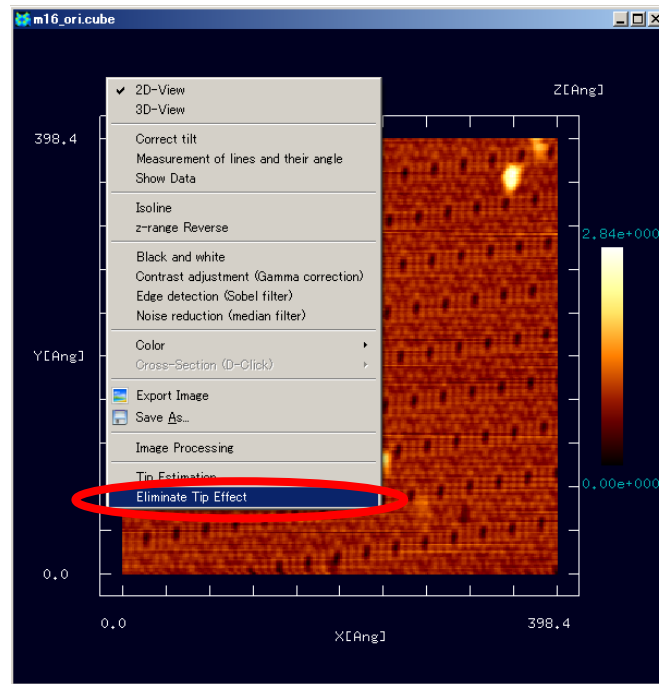




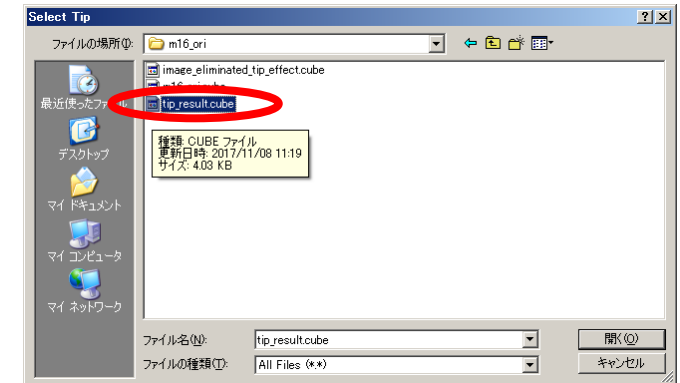
- SPM実験画像から、探針によって生じたアーティファクトを除去

オリジナル画像のコンテキストメニューで、[Eliminate Tip Effect]を選択し、"Select Tip"という画面が現れたら、推定探針形状データファイル "tip\_result.cube"を選択すると、アーティファクトを除去した SPM 画像である"image\_eliminated\_tip\_effect.cube"という画像が表示されます。

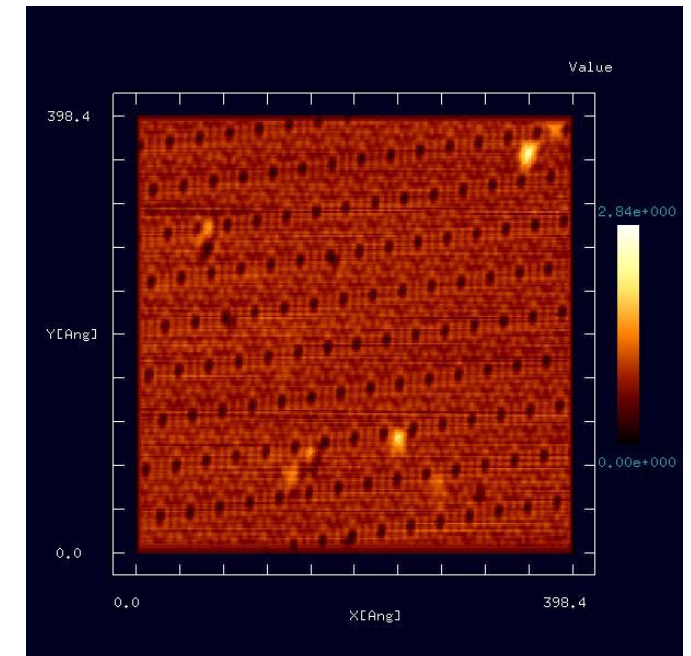
オリジナル画像のコンテキストメニュー  
で、[Eliminate Tip Effect]を選択します。  
(右図)



"Select Tip"画面で  
推定探針形状データファイル  
"tip\_result.cube"を選択する。  
(右図)

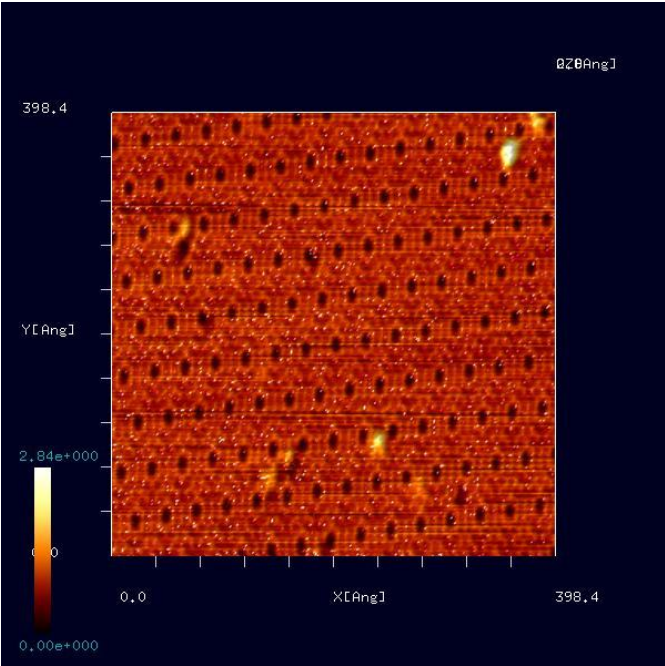


アーティファクトを除去した  
SPM画像である  
"image\_eliminated  
\_tip\_effect.cube"画像  
(右図)

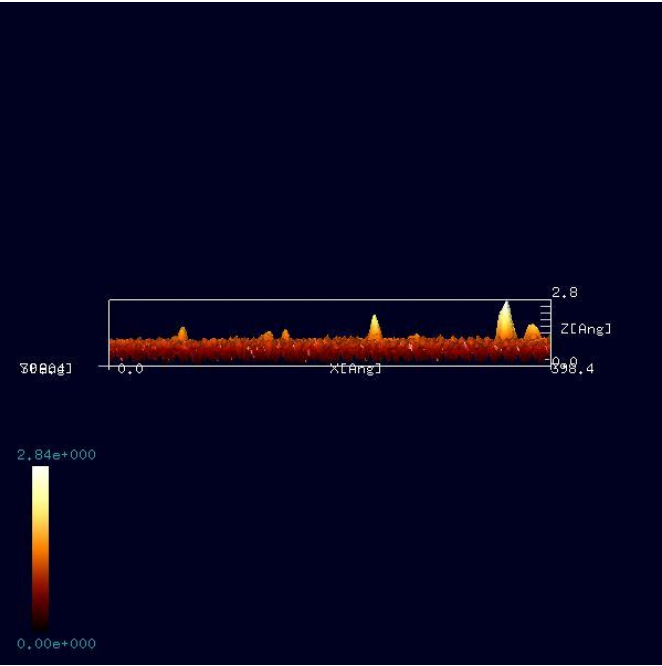


オリジナルSPM実験画像とアーティファクト除去された画像の3D-VIEWによる比較を行いました。左よりTOP、FRONT、SIDEとなります。

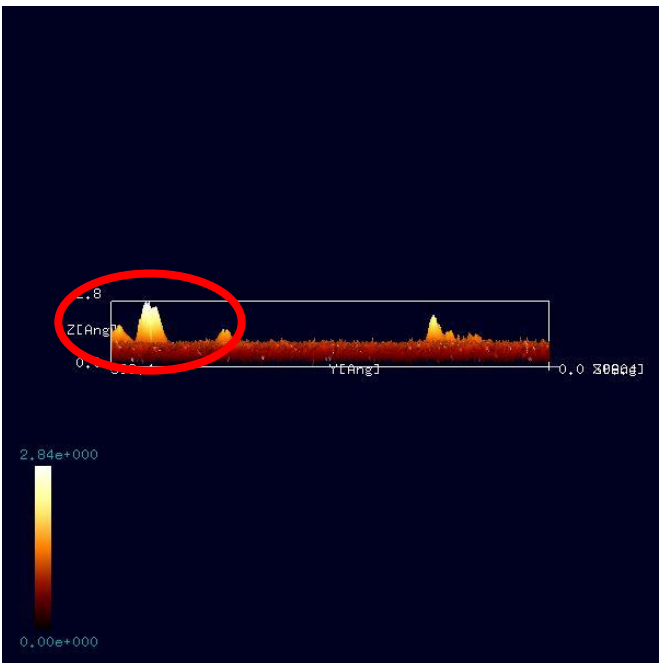
オリジナルSPM実験画像「m16\_ori.cube」 TOP



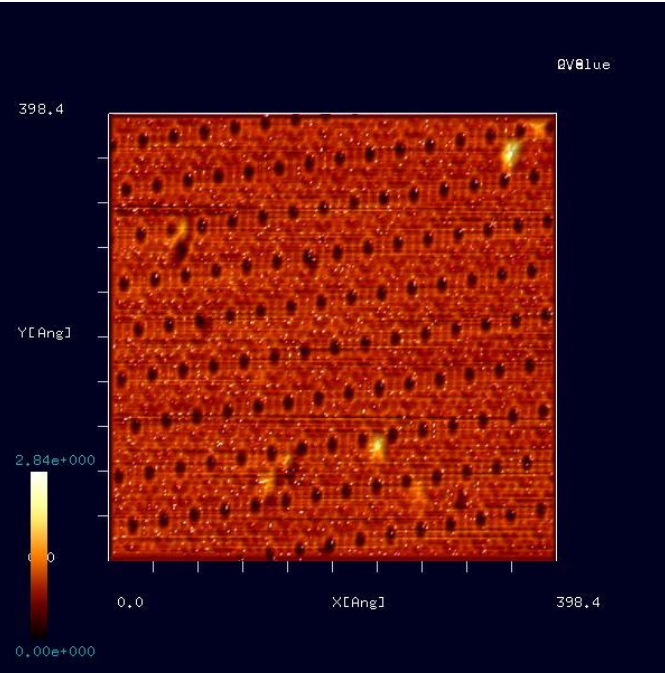
FRONT



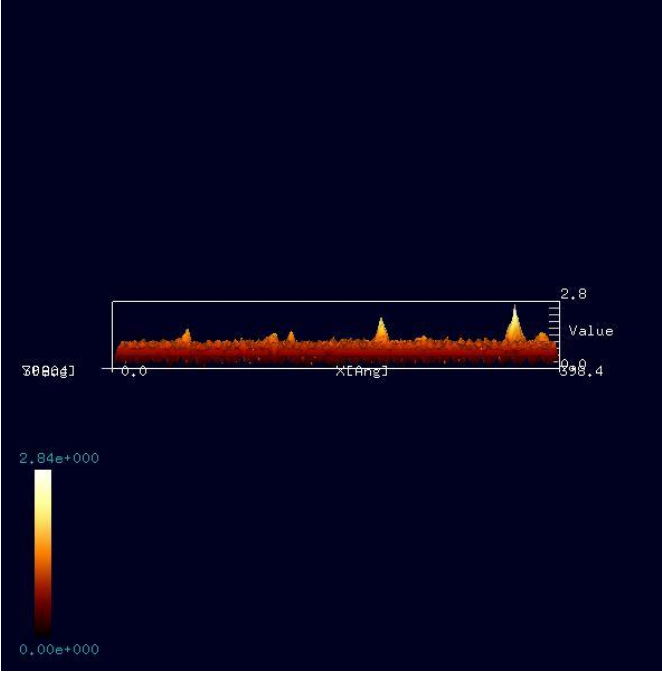
SIDE



アーティファクト除去画像「image\_eliminated\_tip\_effect.cube」 TOP



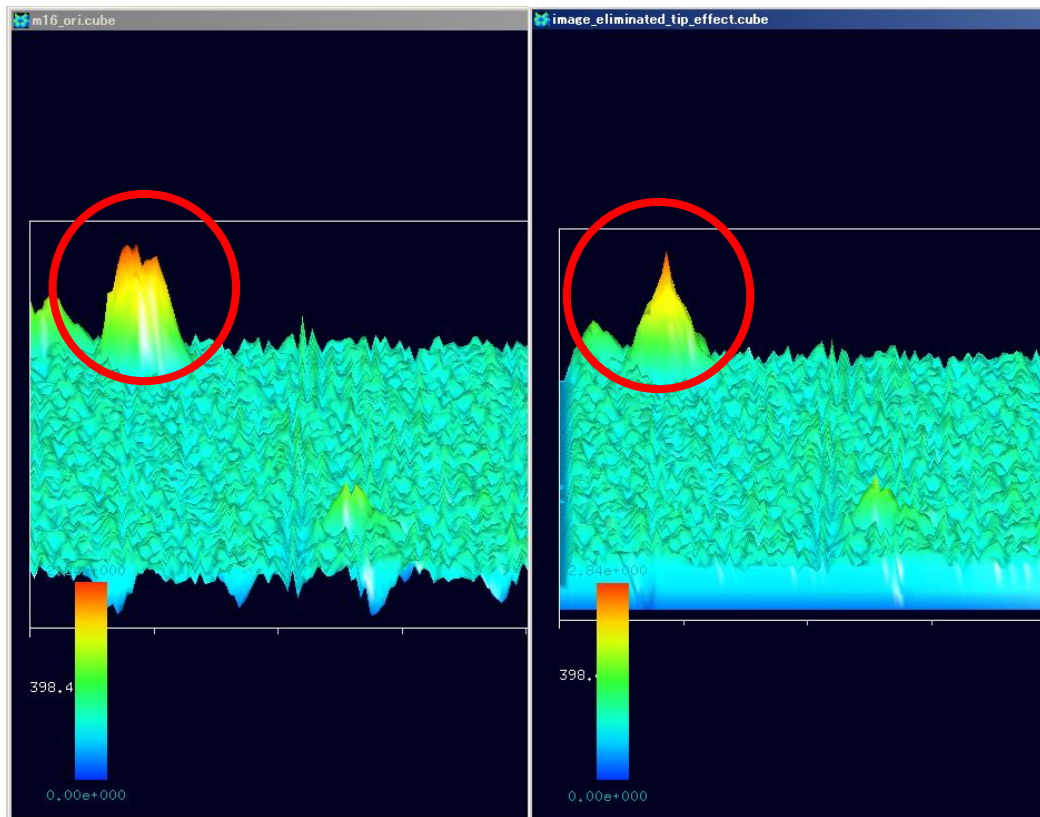
FRONT



SIDE



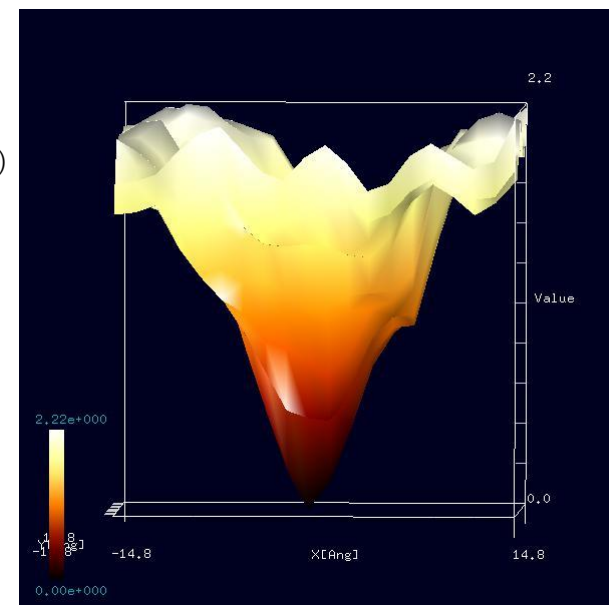
オリジナルSPM実験画像「m16\_ori.cube」(下左図の左)とアーティファクト除去された画像「image\_eliminated\_tip\_effect.cube」(下左図の右)の部分拡大比較を行いました。オリジナルSPM実験画像(下左図の左)では、赤丸内のピークの頂上が複数に分裂しているのに対して、アーティファクト除去された画像(下左図の右)では、鋭い1つの頂上となっており、アーティファクト除去が出来ていることがわかります。



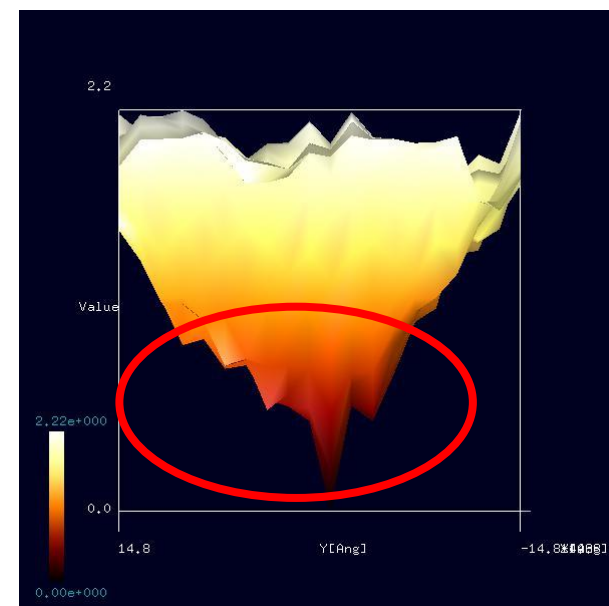
オリジナルSPM実験画像(左)とアーティファクト除去された画像(右)

推定された探針形状  
"tip\_result.cube"  
を3D-Viewで見た場合の  
Front(右上)、SIDE(右下)  
に示すとおり、オリジナル  
実験画像の探針先端部形状  
に幾つかの突起がある  
と思われます。  
このため、オリジナルSPM  
実験画像「m16\_ori.cube」  
(左図の左)の試料では、  
鋭い突起が並んでいます。

推定された探針形状Front



推定された探針形状SIDE



## 5. GeoAFM(高速相互予測AFMシミュレータ) CalcImage (GeoAFM 探針・試料からAFM像計算) 計算事例⑥

### ●GeoAFM: シャペロニン分子 (PDB ID: 2c7c) のGeoAFM像シミュレーション

計算モード識別番号: [GeoAFM\_CalcImage\_Polymer\_003]

ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM\\_CalcImage.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM_CalcImage.php)

分類: GeoAFM (探針・試料から AFM 像計算)、 $\mu\text{m}$ オーダー、高分子の単分子

事例紹介ページを下に示します。赤丸の事例について解説します。(プロジェクト名: project\_file\_GeoAFM\_CalcImage\_Polymer\_003a)

探針と試料の形状位置関係のみで計算されます。

スキャンエリアの設定は無効です (wまたはdが0の場合は無効となります)。

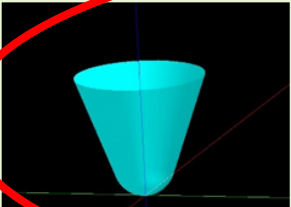
周期境界は考慮されません。

GeoAFMは、他ソルバ選択中でも、マウス右クリックによるサブメニュー選択で起動できます (下右図)。

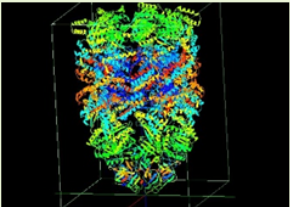
**【GeoAFM】高速相互予測AFMシミュレータ** GeoAFM

探針と試料からAFM像を予測

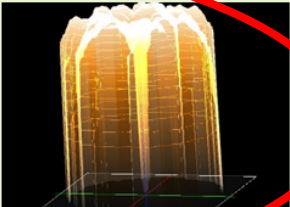
探針



試料



AFM像

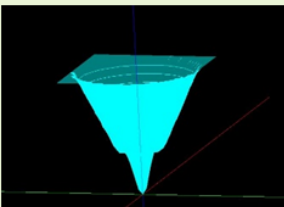


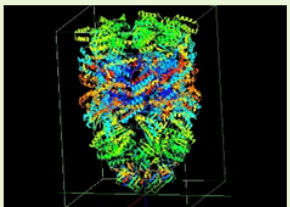
→

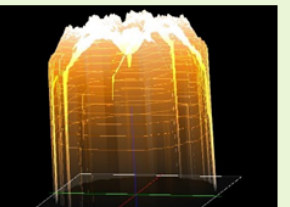
→

→

Cone型探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)





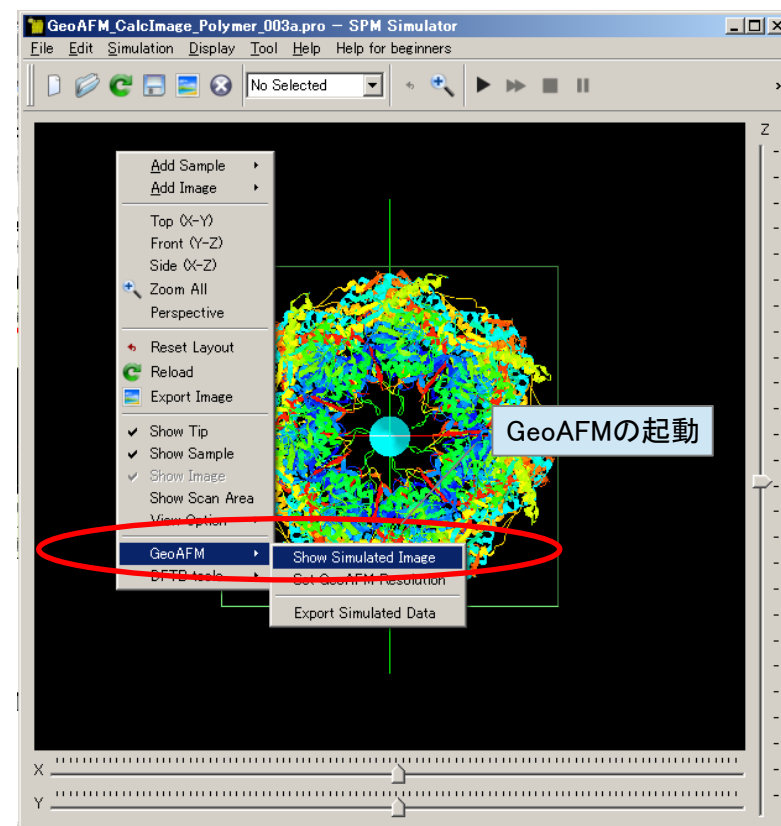


→

→

先端が二股になっている不完全な探針を使って、GroEL(シャペロニン)のAFM像をシミュレーションによって求めたものです。(シャペロニンは、縦140[Å]、横140[Å]、高さ200[Å]の籠のような形をした高分子です。AFM画像によって、籠の上部の穴を再現します。)

事例紹介ページ

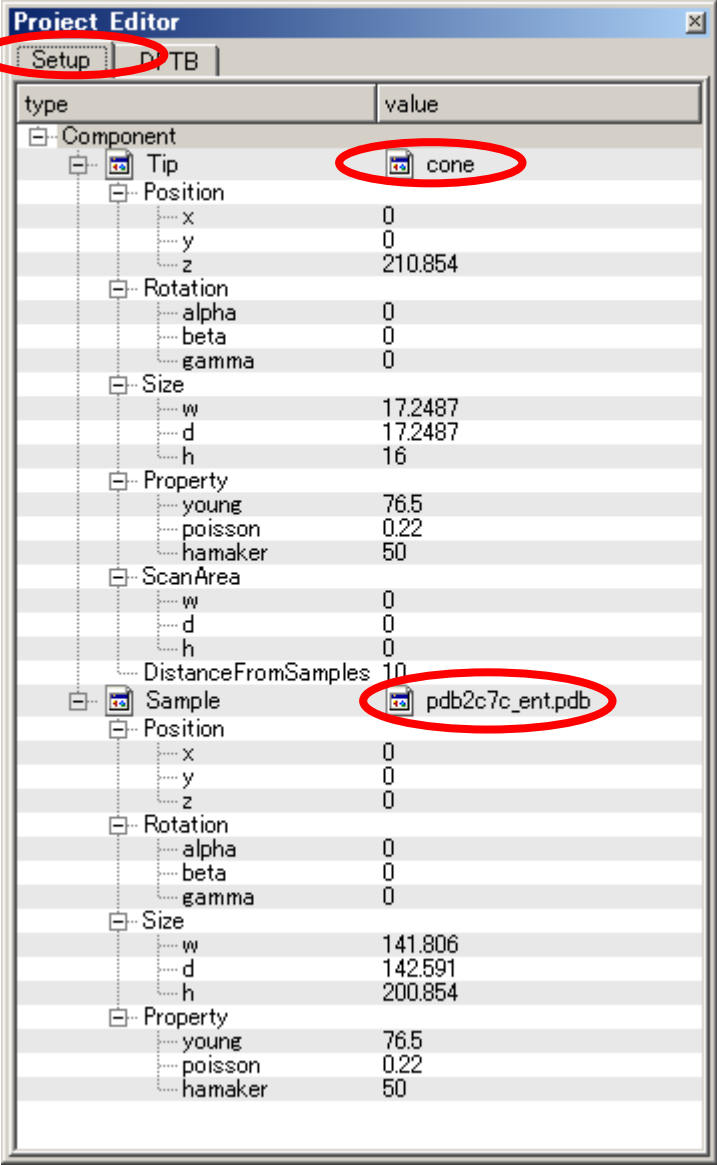


事例データ読み込み直後 TOP 画面での GeoAFM の起動操作

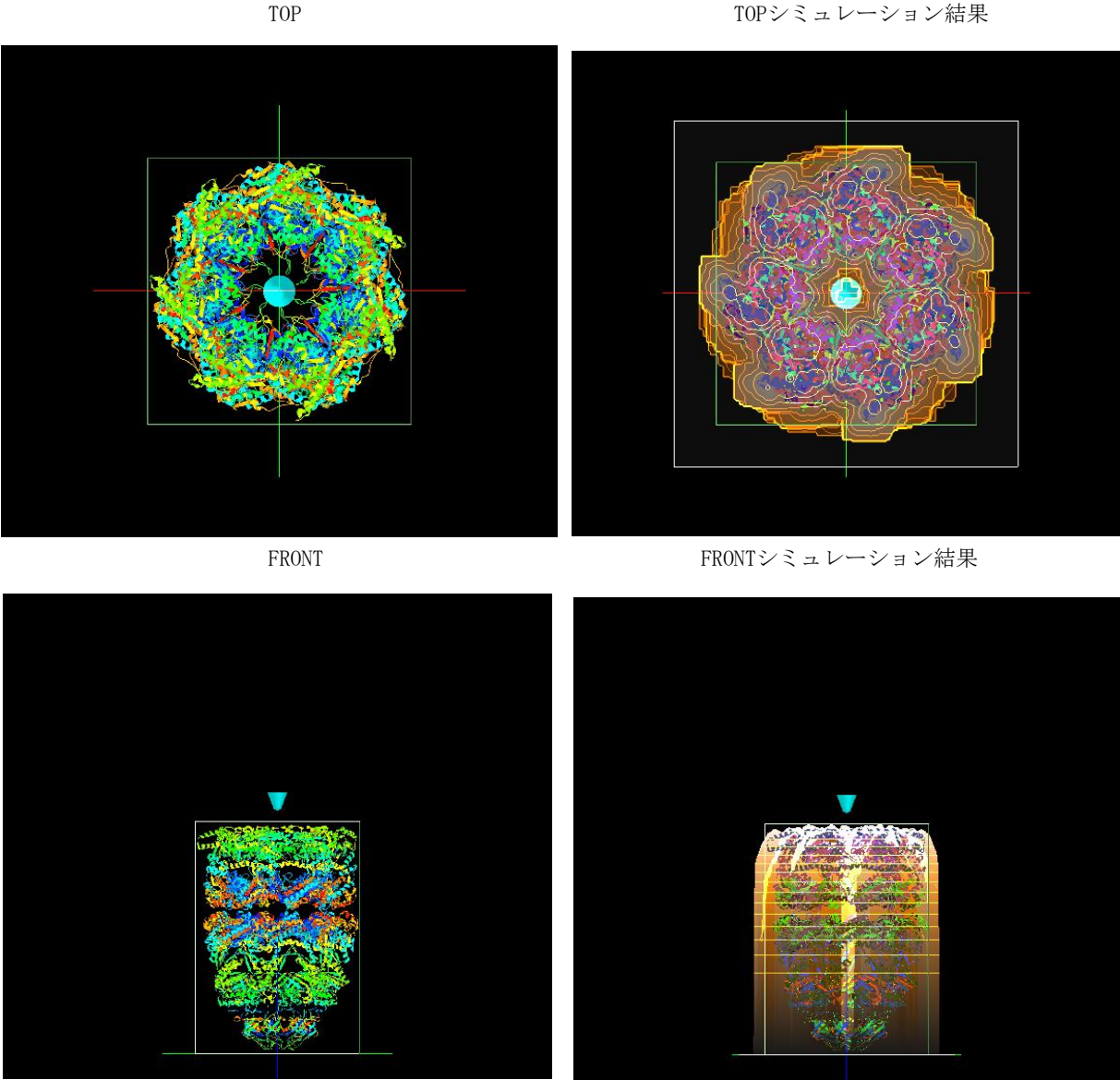
[Show Simulated Image]を選択する。



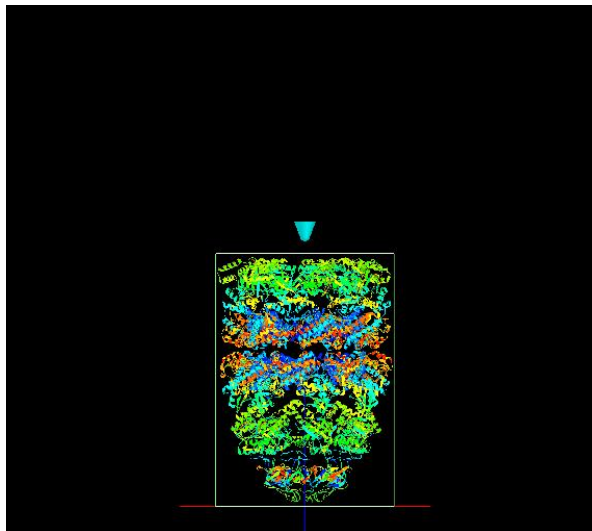
探針は登録済みデータ「**cone**」（先端：半径 4.0 Å、角度 20.0 度）を用います。resolution = 10 Åとしました。  
以下に、紹介事例のセットアップ条件（下左図）とオリジナル画像とシミュレーション結果画像を TOP、FRONT、SIDE、俯瞰として示します。



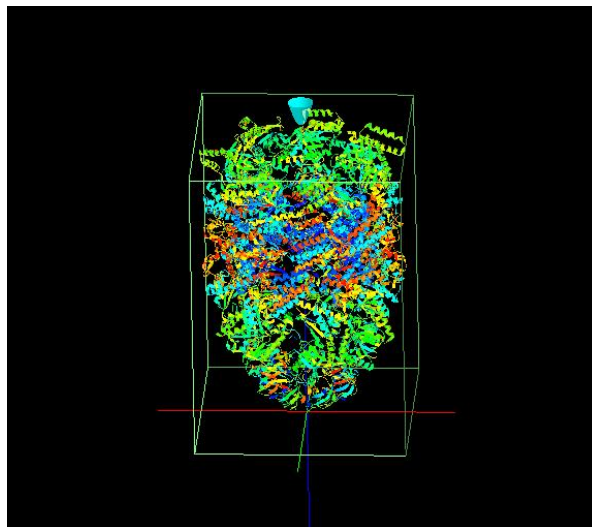
紹介事例のセットアップ条件



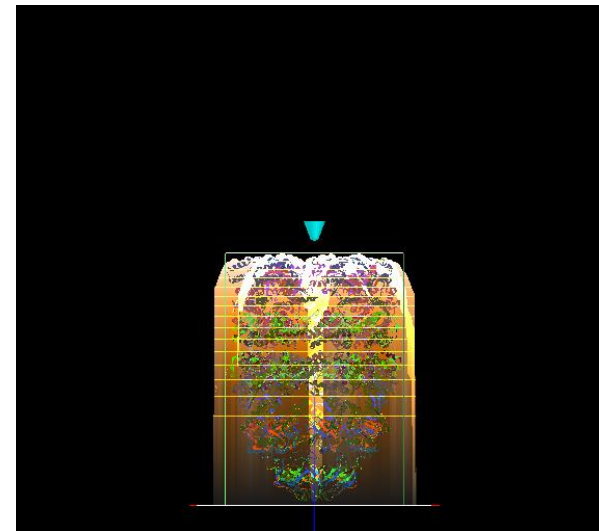
SIDE



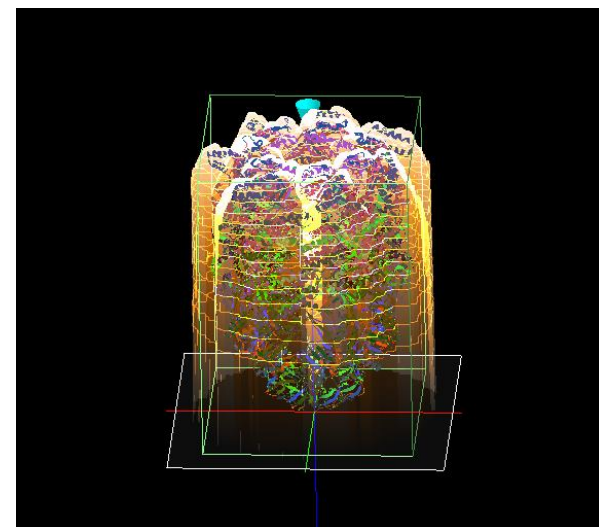
俯瞰



SIDE シミュレーション結果



俯瞰シミュレーション結果



- ・ 参考

PDB形式はタンパク質の形状データです。

様々なタンパク質の形状データが、pdb形式と呼ばれるファイルで、

日本蛋白質構造データバンク (PDBj: Protein Data Bank Japan) <https://pdbj.org/>

Protein Data Bank <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

から提供されています。

計算したいタンパク質のPDBファイルをダウンロードしてください。

参照：SPMシミュレータで使用する探針・試料データのフォーマット

[https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM\\_Simulator\\_file\\_formats.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_file_formats.htm)

生物学的集合体 (biological assembly) としてシミュレーションする場合は、生物学的単位 (biological unit) データを用います。

必要最小限の大きさでシミュレーションする場合は、「非対称単位」 (asymmetric unit) データを用います。





探針は登録済みデータ「**cone**」（先端：半径 1.0 Å、角度 30.0 度）を用います。 resolution = 10 Å としました。  
以下に、紹介事例のセットアップ条件（下左図）とオリジナル画像とシミュレーション結果画像を TOP、FRONT、SIDE、俯瞰として示します。

Project Editor

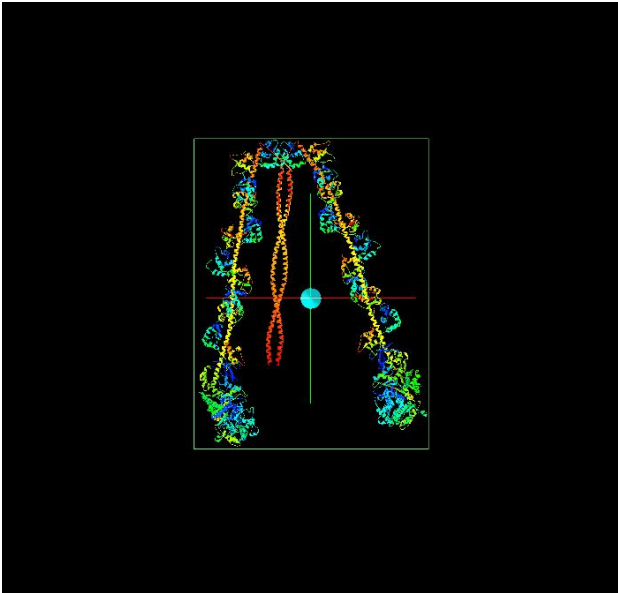
Setup

DFTB

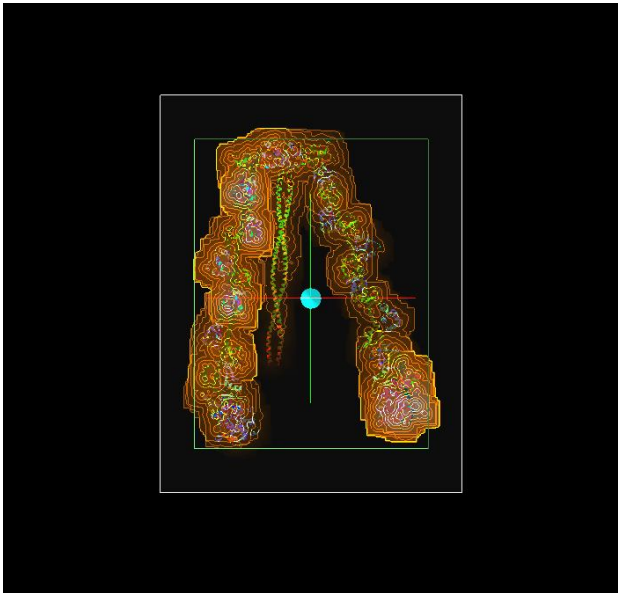
type	value
Component	
Tip	cone
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	19.6299
d	19.6299
h	16
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
ScanArea	
w	0
d	0
h	0
DistanceFromSamples	-114.872
Sample	myosinV_2dfs.pdb
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	-10
beta	-20
gamma	180
Size	
w	223.583163659512
d	296.819276514363
h	114.871846192622
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50

紹介事例のセットアップ条件

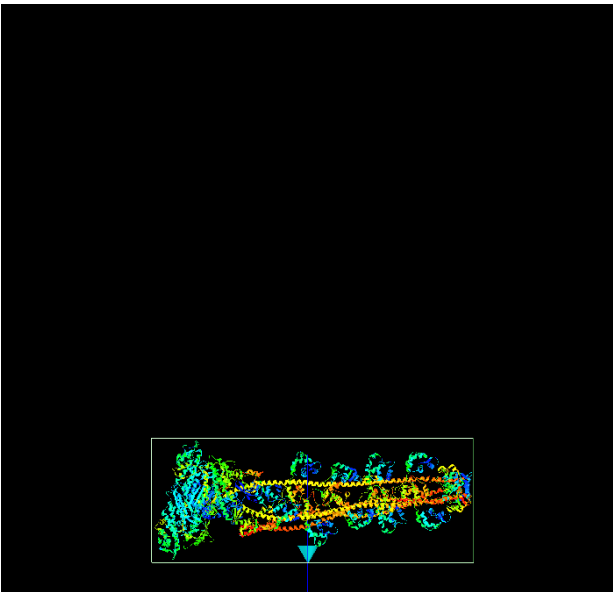
TOP



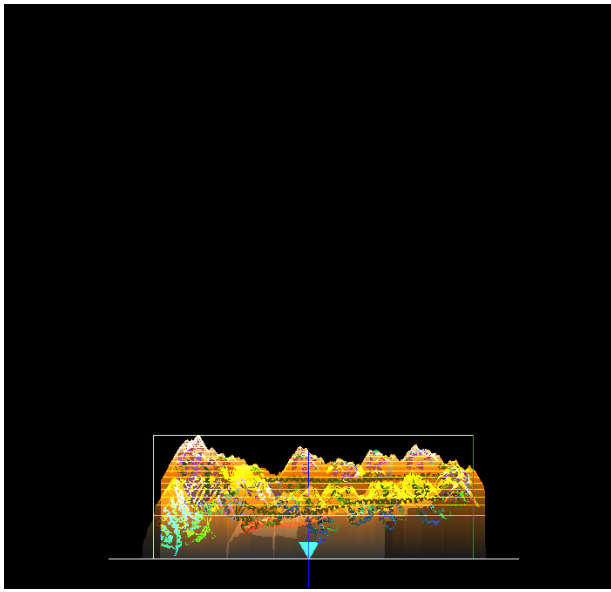
TOPシミュレーション結果



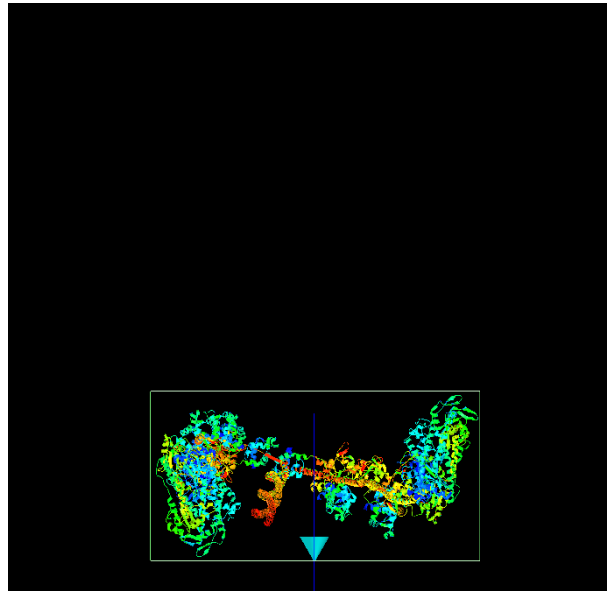
FRONT



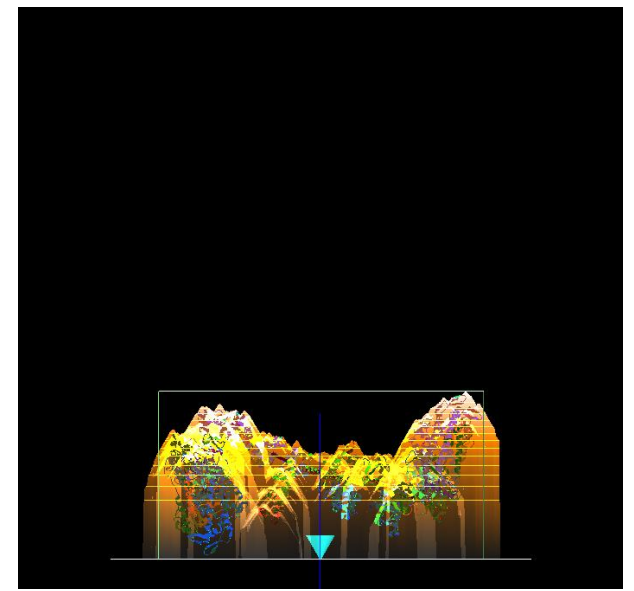
FRONTシミュレーション結果



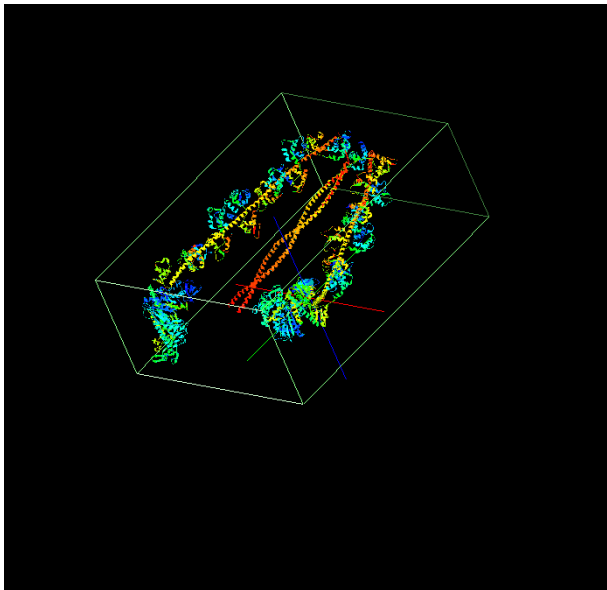
SIDE



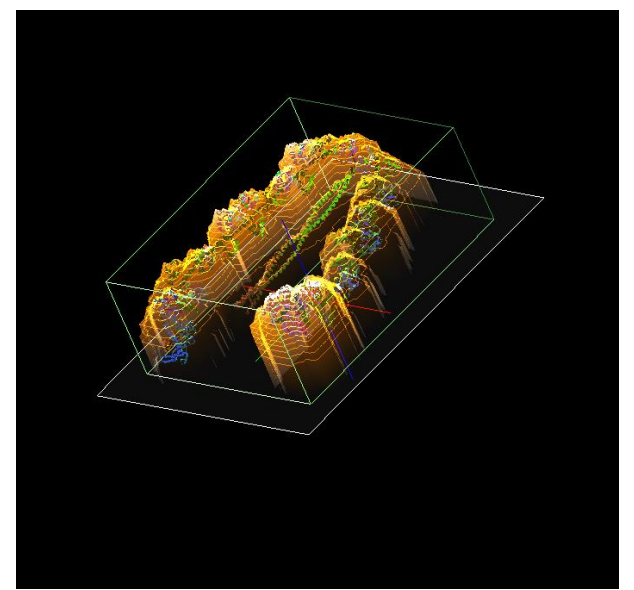
SIDEシミュレーション結果



俯瞰



俯瞰シミュレーション結果



## 7. GeoAFM(高速相互予測AFMシミュレータ) CalcImage (GeoAFM 探針・試料からAFM像計算) 計算事例⑧

### ●GeoAFM: タバコモザイクウイルス (TMV) のAFM像シミュレーション

計算モード識別番号: [GeoAFM\_CalcImage\_Polymer\_015]

ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM\\_CalcImage.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM_CalcImage.php)

分類: GeoAFM (探針・試料から AFM 像計算)、 $\mu\text{m}$ オーダー、高分子の単分子

事例紹介ページを下に示します。

探針と試料の形状位置関係のみで計算されます。

スキャンエリアの設定は無効です (wまたはdが0の場合は無効となります)。周期境界は考慮されません。

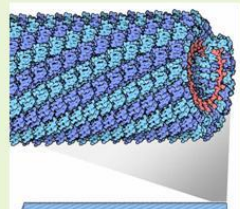
生物学的単位 (Biological Assembly: PDB形式) 「2tmv.pdb1」のファイル拡張子を「2tmv.pdb」と修正して用いています。

GeoAFMは、他ソルバ選択中でも、マウス右クリックによるサブメニュー選択で起動できます (下右図)。

### 【GeoAFM】タバコモザイクウイルス(TMV)のAFM像

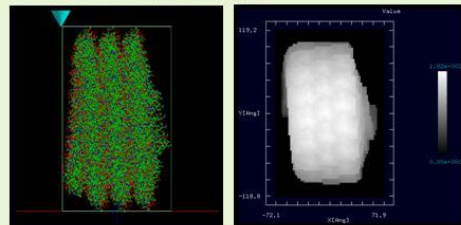
GeoAFM

- タバコモザイクウイルスは、タバコなどの葉にモザイク状の斑点ができ葉の成長が悪くなるタバコモザイク病の原因である。
- その構造は螺旋状に積み重なり円筒形の形をしたタンパク質の覆いとそれに包まれた1本のRNAからなる。



タバコモザイクウイルスの模式図 [1]

#### シミュレーション結果

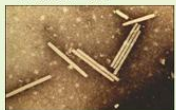


シミュレーションに用いたモデル

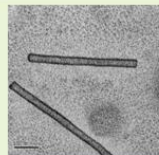
Tobacco mosaic virusのGeoAFMでのシミュレーション画像

EMやTEM、SEMではタンパク質のサブユニットを見ることは難しいが、AFMならばこのくらいはっきりと輪郭を捉えられる可能性がある。

#### 実測画像



Electron Microscopeでの実測画像 [2]



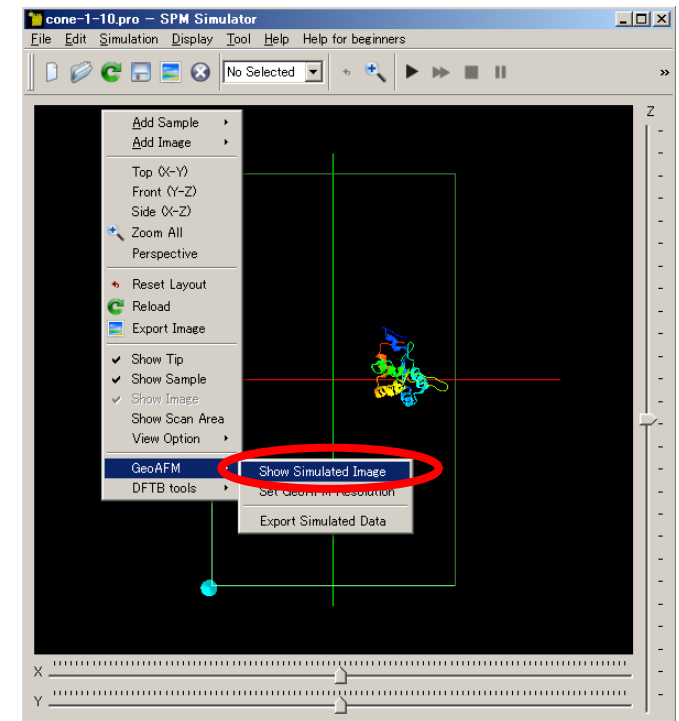
Transmission Electron Microscopyでの実測画像 [3]



Scanning Electron Microscopeでの実測画像 [4]

[1]: <http://pdbj.org/mom/109>  
[2]: [http://erec.ifas.ufl.edu/plant\\_pathology\\_guidelines/module\\_02.shtml](http://erec.ifas.ufl.edu/plant_pathology_guidelines/module_02.shtml)  
[3]: [http://www.smern.uni-bayreuth.de/en/samples\\_gallery/Transmission-Electron-Microscopy\\_-\\_TEM\\_/Biological-Samples/virus/index.html](http://www.smern.uni-bayreuth.de/en/samples_gallery/Transmission-Electron-Microscopy_-_TEM_/Biological-Samples/virus/index.html)  
[4]: <http://www.lv-em.com/sem-tobacco-mosaic-virus>

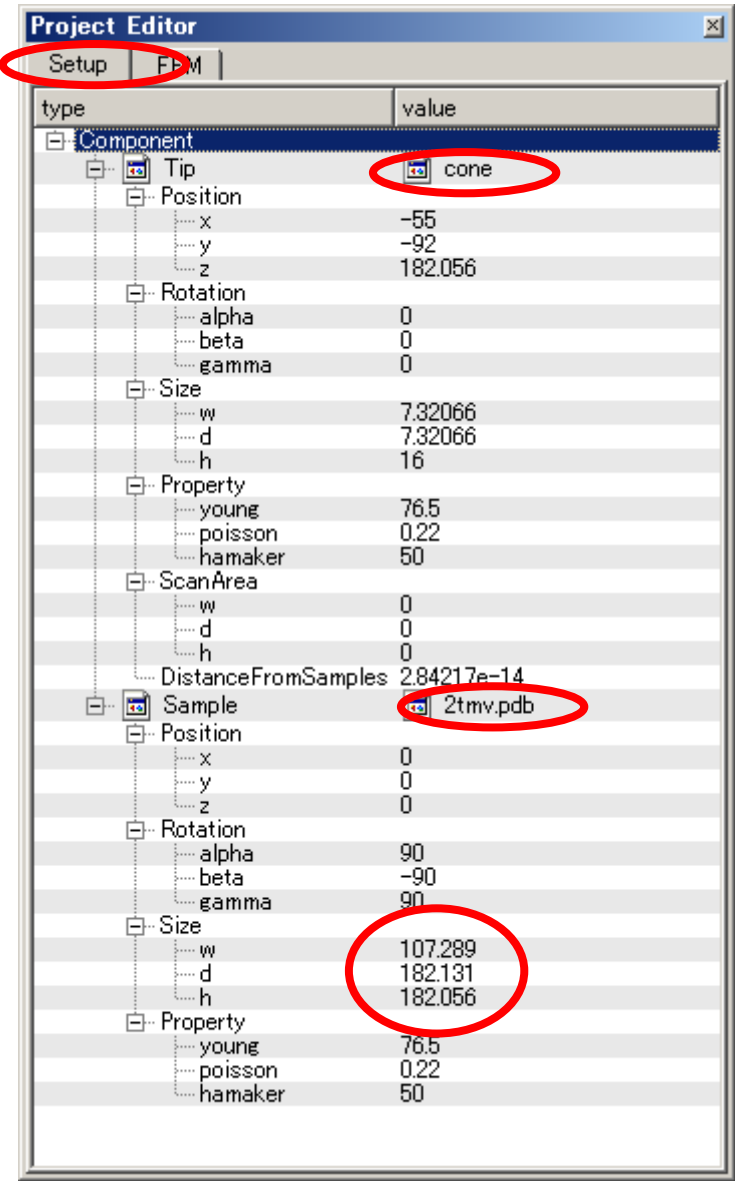
事例紹介ページ



事例データ読み込み直後 TOP 画面での GeoAFM の起動操作

[Show Simulated Image]を選択する。

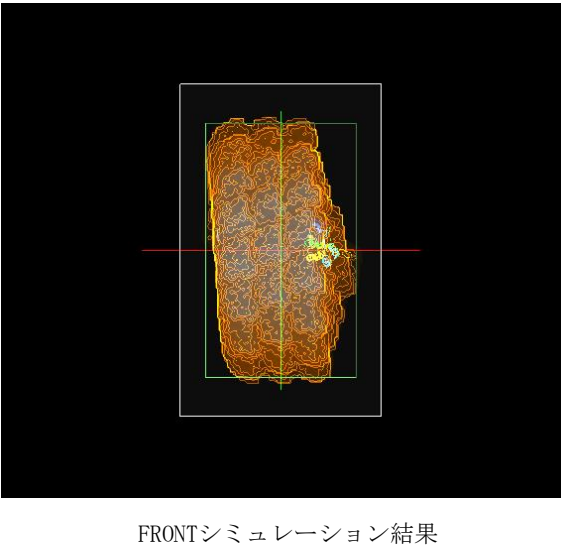
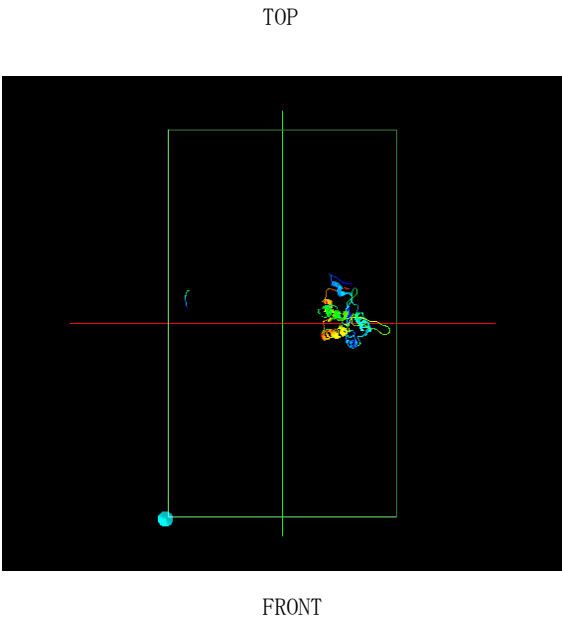
生物学的集合体 (biological assembly) として生物学的単位 (biological unit) データでのシミュレーションとなります (紹介事例)。



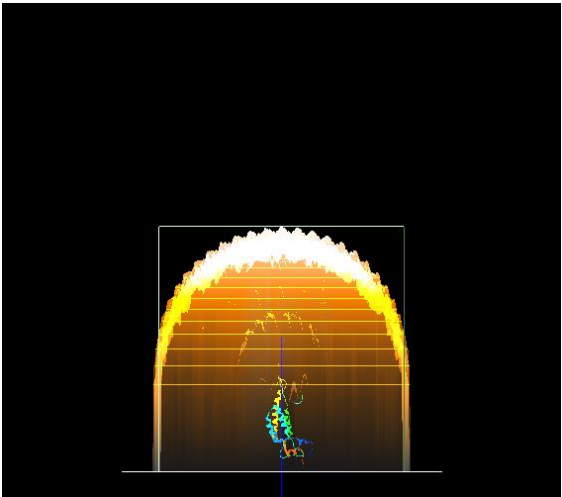
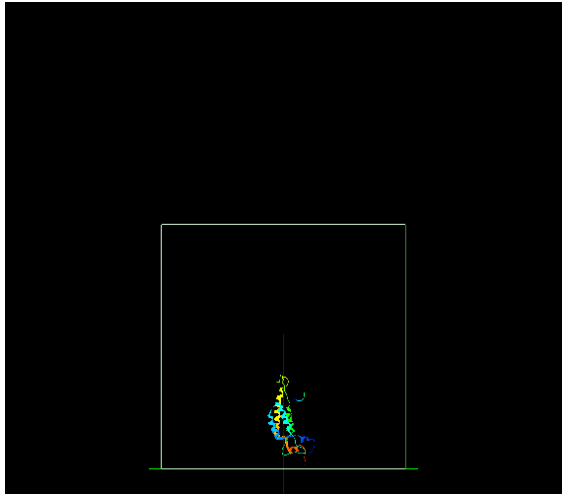
紹介事例のセットアップ条件

基本単位に比べて、生物学的集合体の解析サンプルのサイズは、概ね大きくなります。

【描画方法の設定】で、分子の描画方法を切り替えかえることで、モデルの全体像が表示できます。コンテキストメニューから “View Option” を選択し、“Auto”または “Cartoon”以外を選択します。

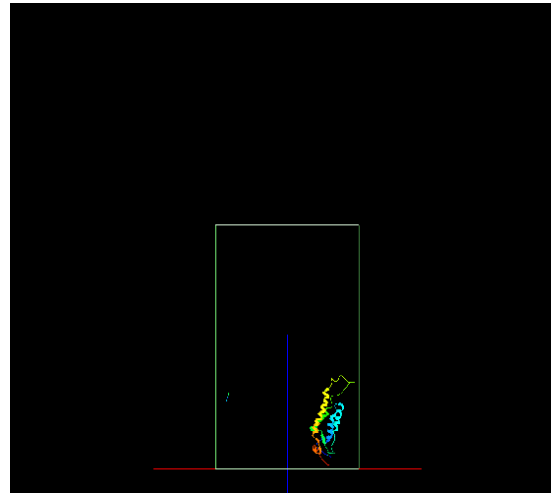


FRONTシミュレーション結果

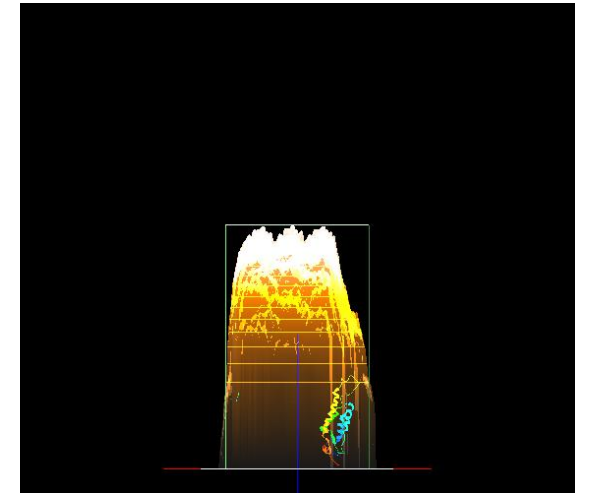




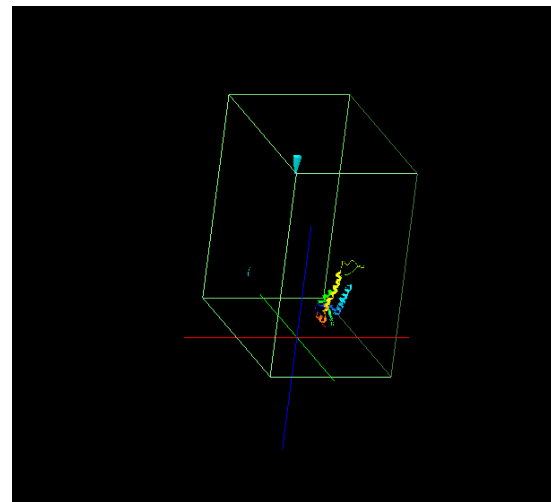
SIDE



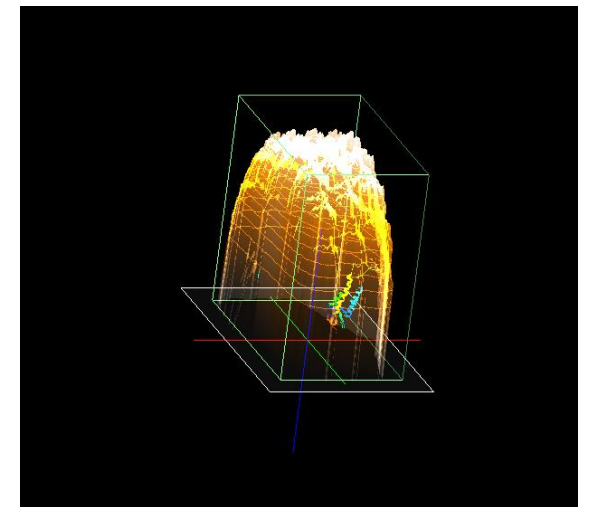
SIDEシミュレーション結果



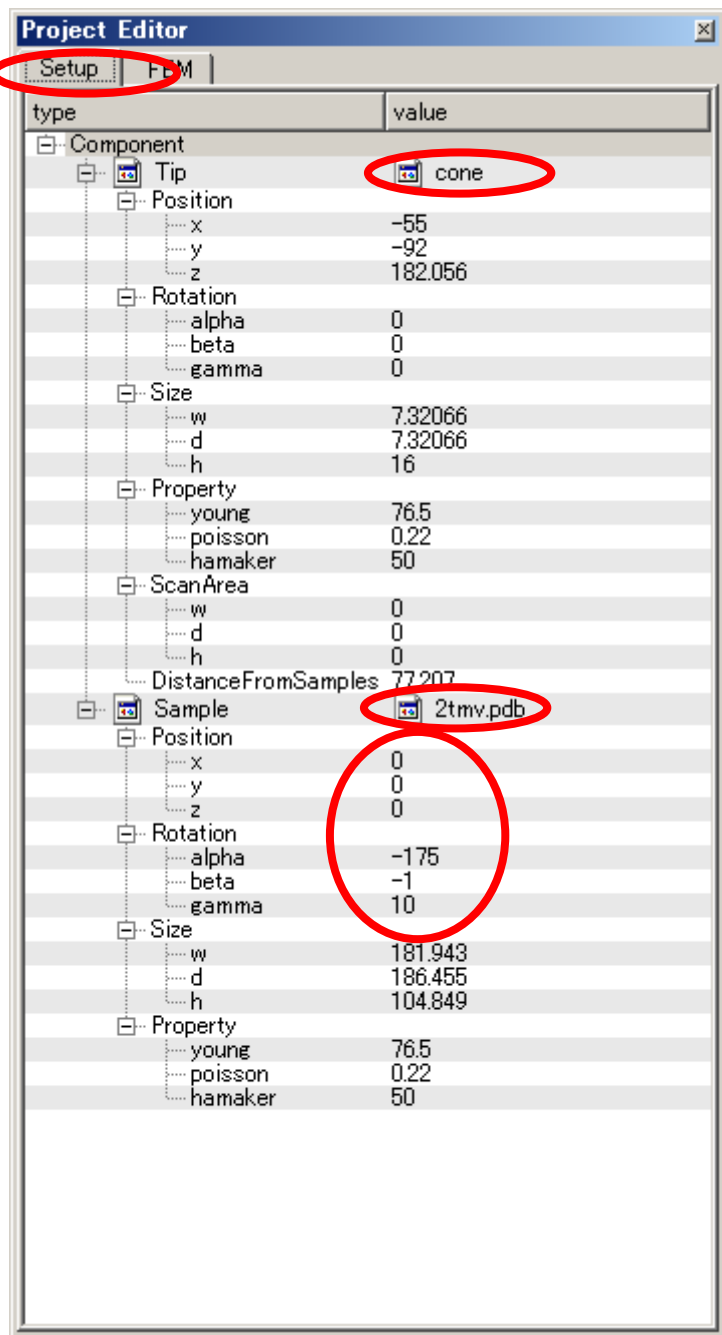
俯瞰



俯瞰シミュレーション結果



・ 生物学的単位 (biological unit) データでのシミュレーション その2 (試料の回転と結果表示モードの応用) (計算事例⑨)



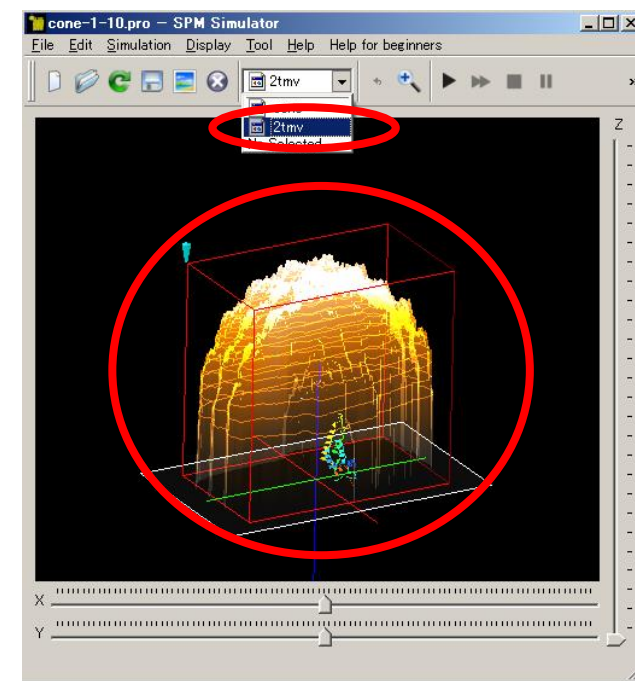
紹介事例のセットアップ条件

試料の位置を回転させ、高さZ方向スキャン領域を変えると、初期位置と異なったシミュレーション結果の確認ができます。初期位置での試料の傾き (Rotation) は  $\alpha = 90$ ,  $\beta = -90$ ,  $\gamma = 90$  となっています。この位置では、円筒形状の「タバコモザイクウイルス」を、その中心軸に対して垂直方向にスキャンする事になるため、死角の部分が発生します。試料の傾き (Rotation) を  $\alpha = -175$ ,  $\beta = -1$ ,  $\gamma = 10$  等と変更することで、その中心軸に対して平行にスキャンする事になり死角が少なくなります。試料の位置の回転は、3D表示の回転とは異なり、シミュレーション結果に反映します。試料の傾き (Rotation) は、マウス操作によるモデルの回転でも可能です。[Show Simulated Image]を選択している場合は、モデルの回転に合わせて、シミュレーション結果も変化していきます。解析方向が決まっている場合は、「Setup」で、直接  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  を入力します。

#### メニュー・リストボックス

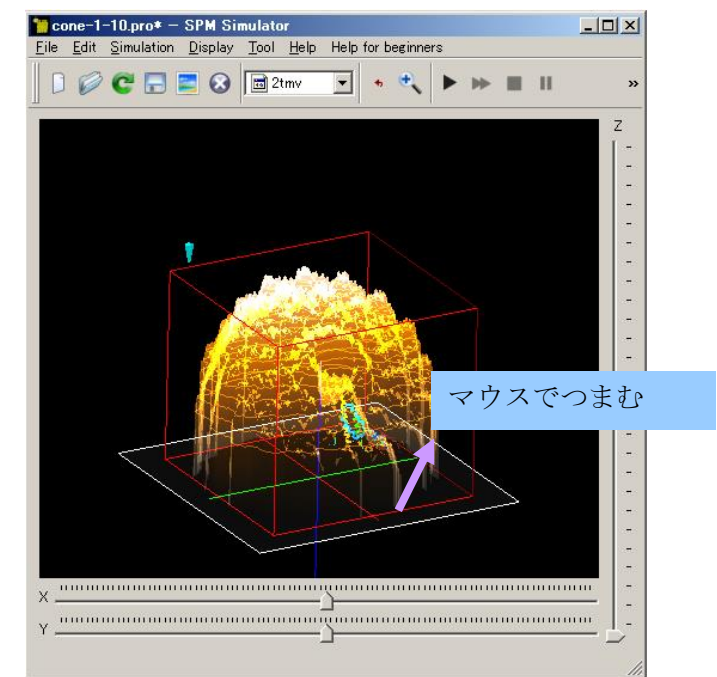
(右図) より試料モデルを選択するとモデルを囲む立方体が赤線表示されます。赤線表示は、試料モデルを表示するモード[Show Sample]が[ON]の時、有効です。

3D表示の回転と同様に、モデル周辺をマウスでつまむことでモデルの方向が変わります。シミュレーション結果を見ながら、最も良い方向を探す事が可能です。

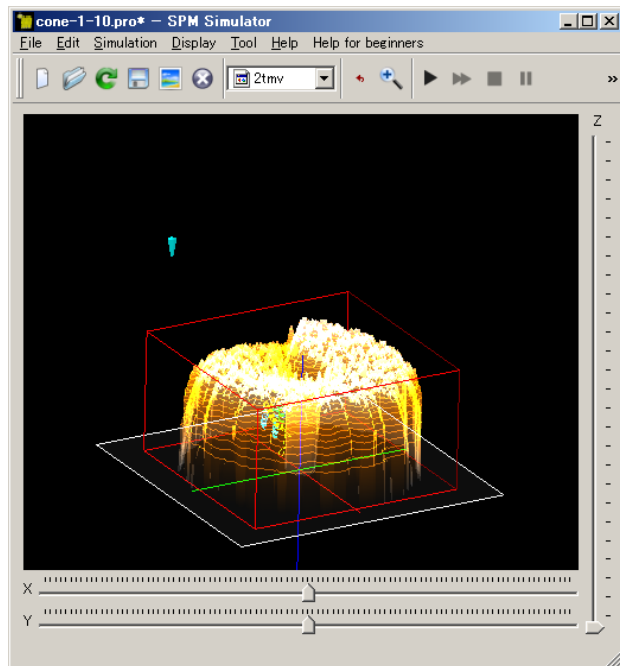


リストボックスより試料モデルを選択するとモデルを囲む立方体が赤線で表示

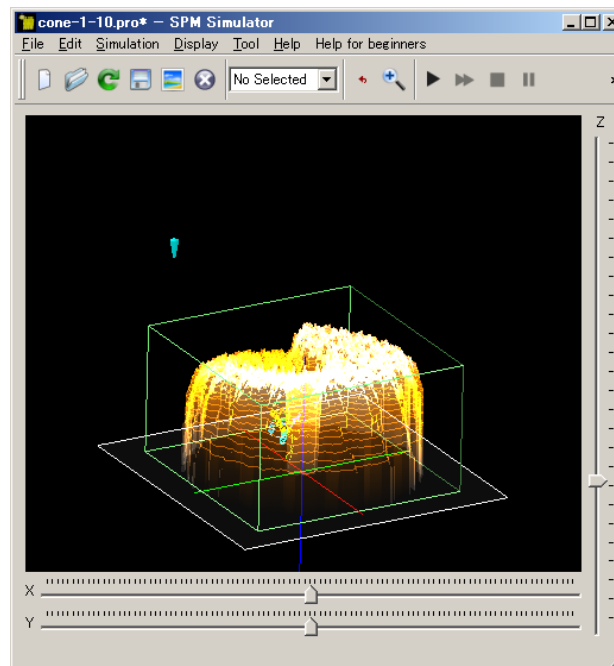
円筒形状の「タバコモザイクウイルス」を、試料の傾き（Rotation） $\alpha = -175$ ,  $\beta = -1$ ,  $\gamma = 10$ とし、その中心軸に対して平行にスキャンすることで、死角が少なくなったシミュレーション結果をみると、円筒形状の「タバコモザイクウイルス」の特徴が明らかになっていきます。解析している生物学的単位（biological unit）データは、らせん状の構造をしており、中心部に空洞があることがわかります。試料モデルの傾き変更後は、メニュー・リストボックスを「No Selected」に設定してください。モデルを囲む立方体の色が、元の緑色に戻ります。選択状態が続くと、不用意に設定数値が変わる場合があります。モデルが選択対象でなければ、3D表示の回転機能により、解析結果の3D観察が可能です。



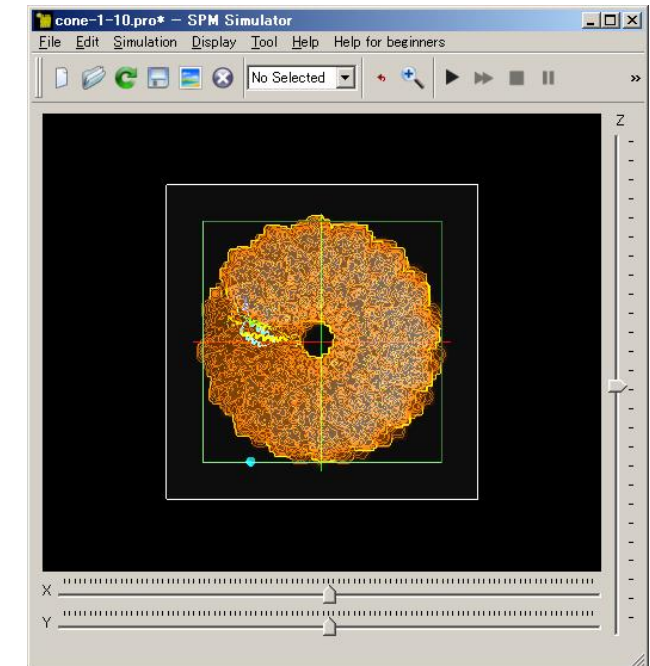
モデル周辺をマウスでつまむことでモデルの方向が変わる。（上図）



最も良い方向を探す事が可能（上図）



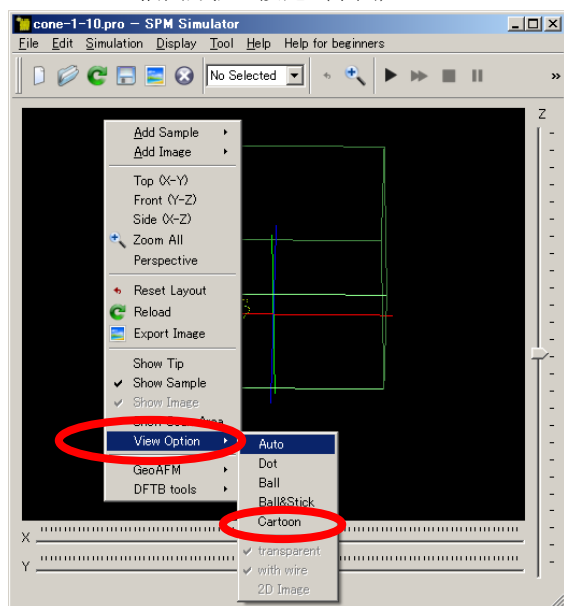
リストボックスより「No Selected」を選択（上図）



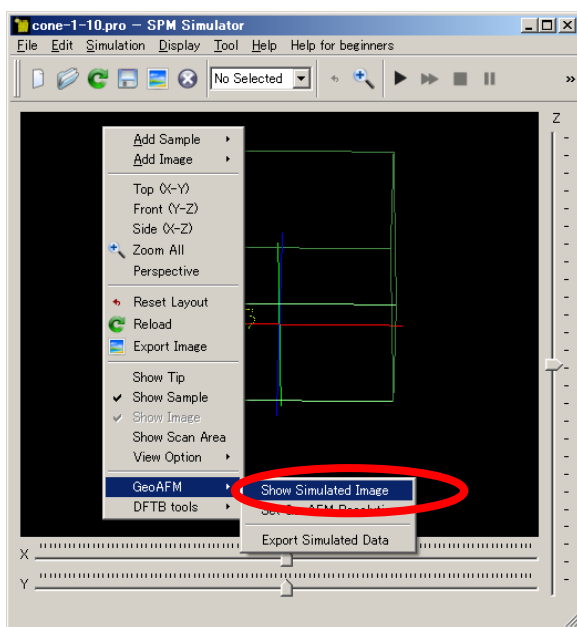
新たなシミュレーション結果TOP画面（上図）

・【モデル描画方法の設定】 分子の描画方法を切り替えます。コンテキストメニューから“View Option”を選択し、“Auto”, “Dot”, “Ball”, “Ball&Stick”, “Cartoon” のいずれかを選択します。“Auto” はモデルの データから適切な描画法を自動判定します。なお、これらの表示はファイル形式によって 表示できないものがあります。“Ball&Stick” は原子間結合情報が必要で、**“Cartoon” は PDB ファイルのみに対応しています。**(SPMシミュレータ・チュートリアルP171 より)

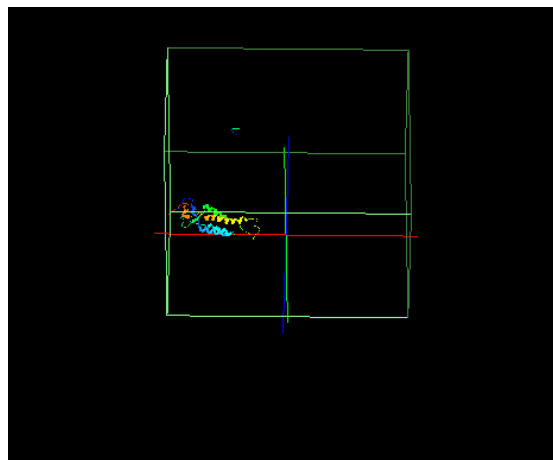
描画方法の設定 (下図)



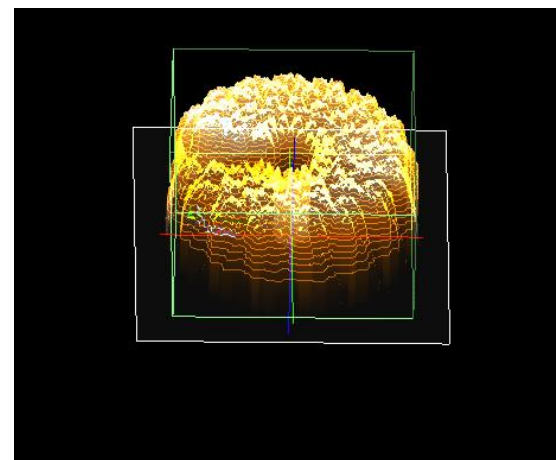
GeoAFMの起動操作 (下図)



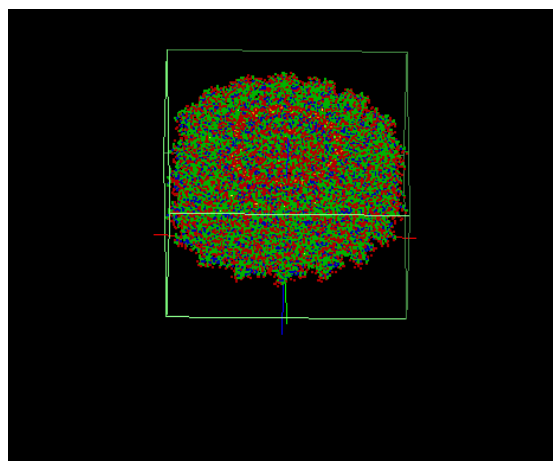
“Cartoon”(本件Auto)



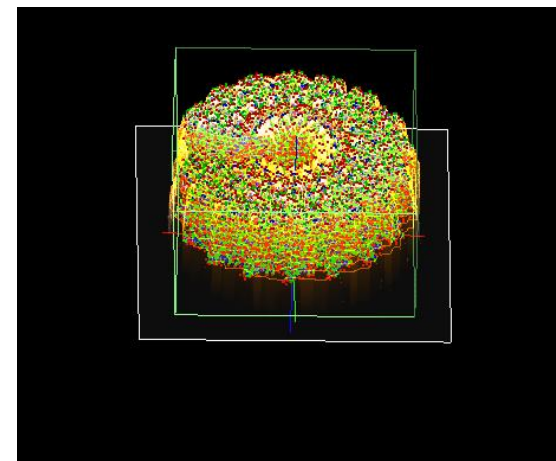
シミュレーション結果 “Cartoon” (本件Auto)



“Dot”,

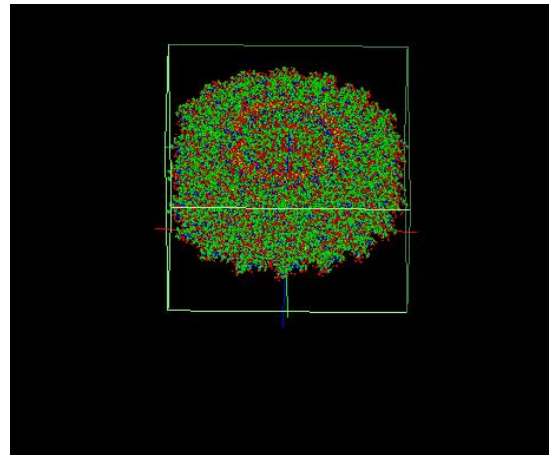


シミュレーション結果“Dot”

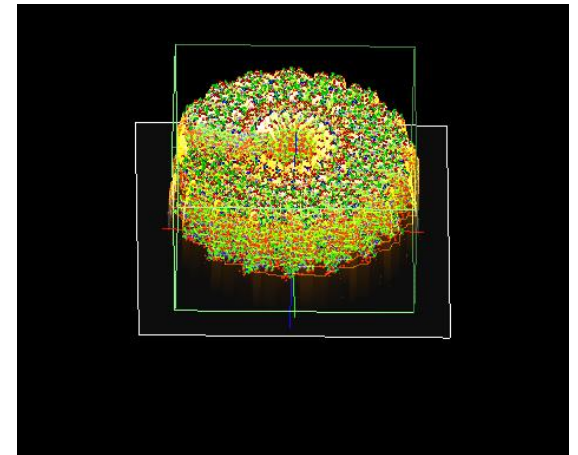




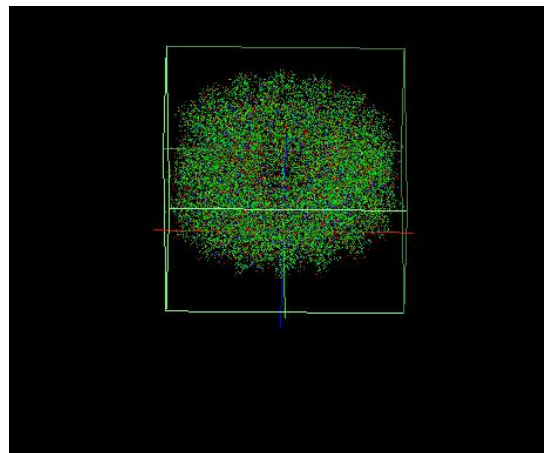
“Ball”,



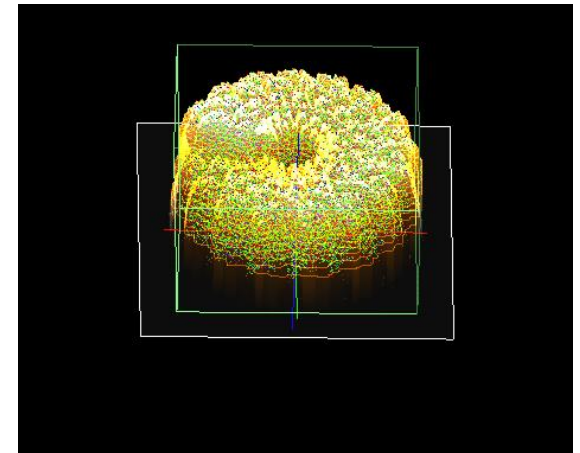
シミュレーション結果“Ball”



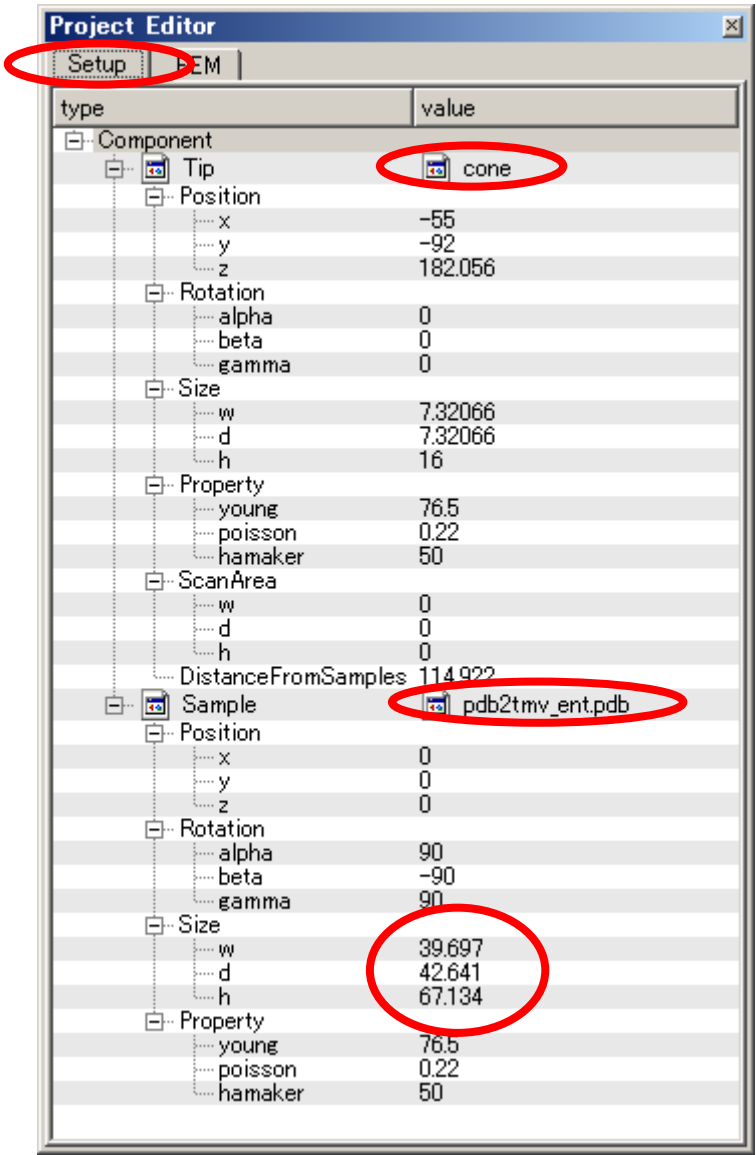
“Ball&Stick”



シミュレーション結果“Ball&Stick”

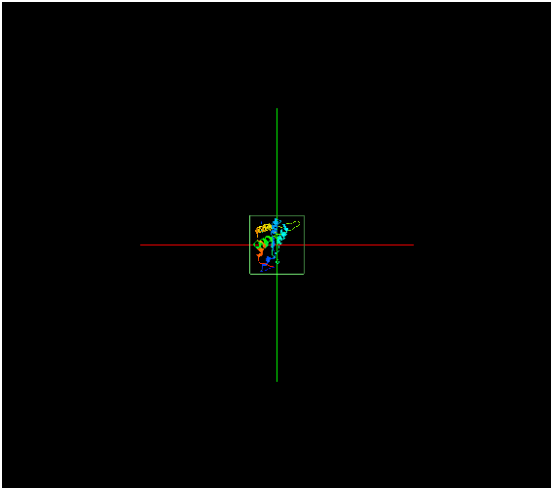


・必要最小限の「非対称単位」(asymmetric unit) データでのシミュレーションとなります。**(計算事例⑩)**  
試料サンプルを「2tmv.pdb」より「pdb2tmv\_ent.pdb」に変更します(生物学的単位より非対称単位へ変更)。

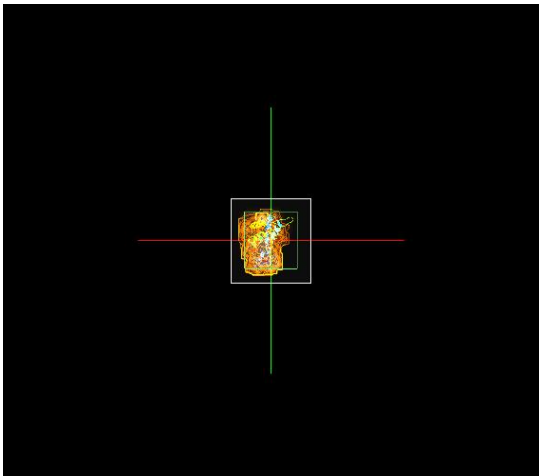


参考事例のセットアップ条件

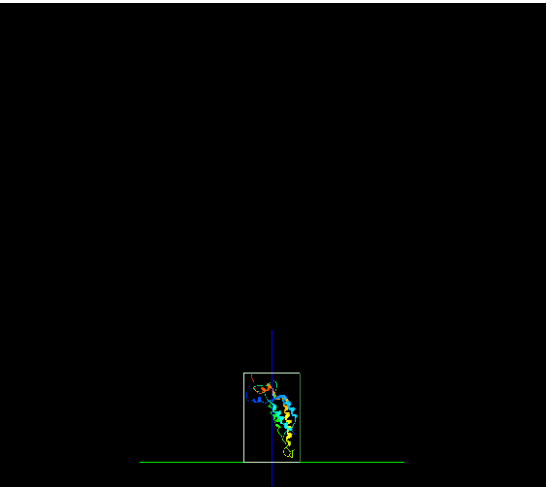
TOP



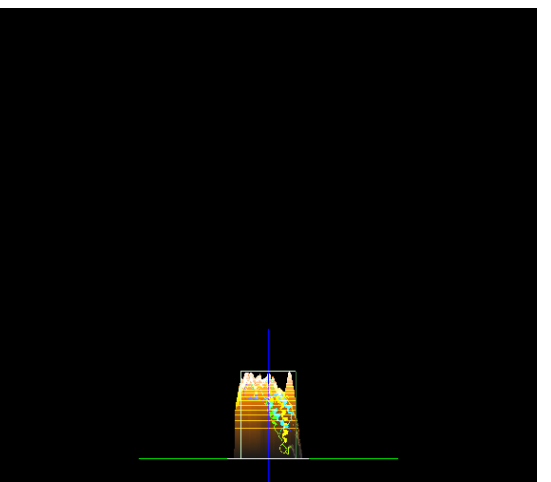
TOPシミュレーション結果



FRONT

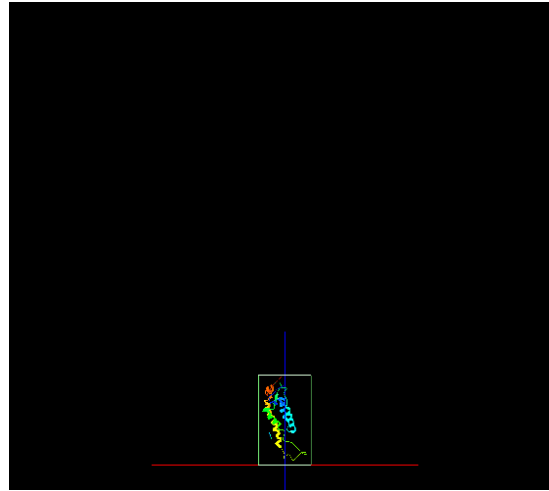


FRONTシミュレーション結果

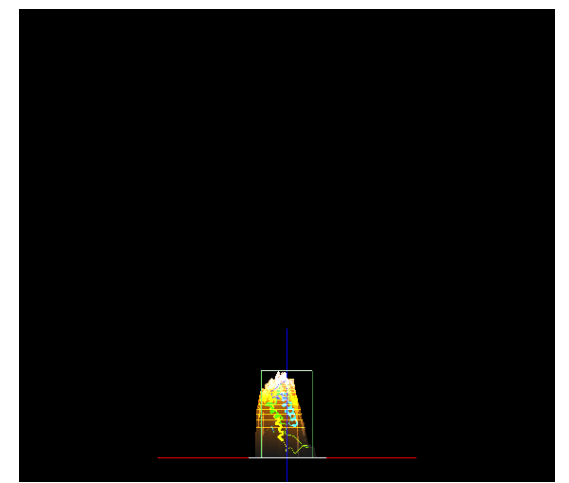


基本単位に比べて、必要最小限の「非対称単位」の解析サンプルのサイズは、概ね同程度となります。

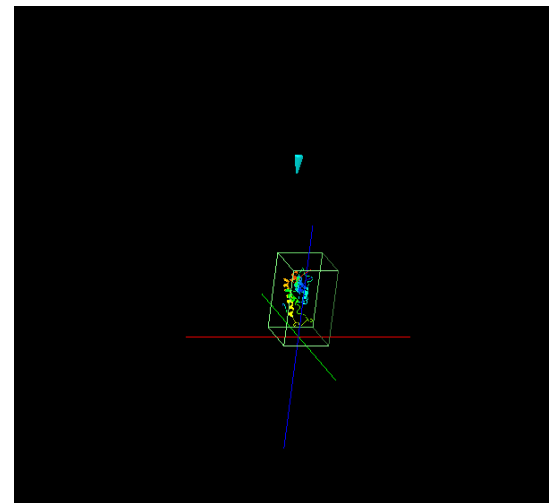
SIDE



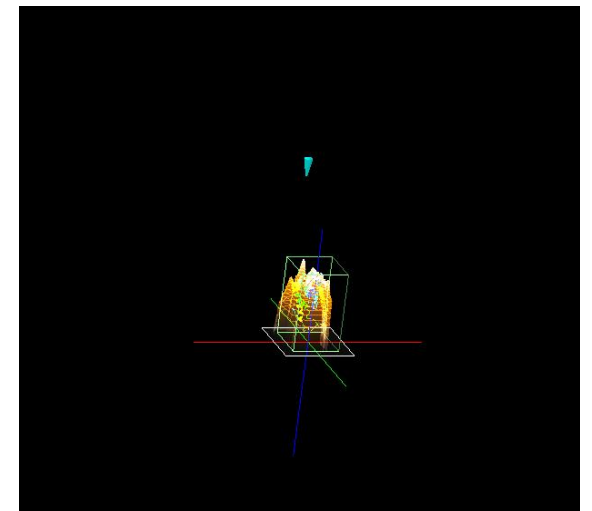
SIDEシミュレーション結果



俯瞰



俯瞰シミュレーション結果



## 8・FemAFM(連続弾性体 AFM シミュレータ) FreqShift

### ●FemAFM：コラーゲン(Collagen alpha-1(III) chain)の周波数シフト AFM 像シミュレーション 計算事例⑪

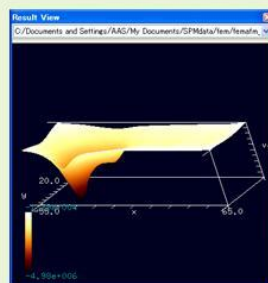
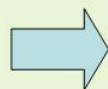
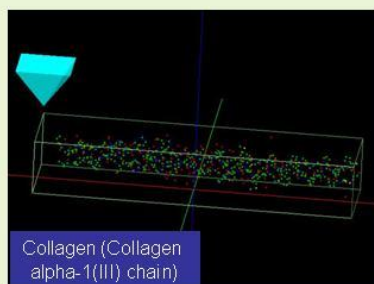
計算モード識別番号：[FemAFM\_FreqShift\_Polymer\_002]

ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/FemAFM/FreqShift/FemAFM\\_FreqShift.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/FemAFM/FreqShift/FemAFM_FreqShift.php)

分類：FemAFM 周波数シフトAFM像、 $\mu\text{m}$ オーダー、高分子の単分子

#### 【FemAFM】周波数シフト像モード

カンチレバーを外力によって一定の周波数で振動させながら、非接触で試料表面に近付け、探針-試料間の相互作用により生じる周波数シフトの分布画像を求める状況に対応しています。



FemAFM

事例紹介ページを下左図に示します。

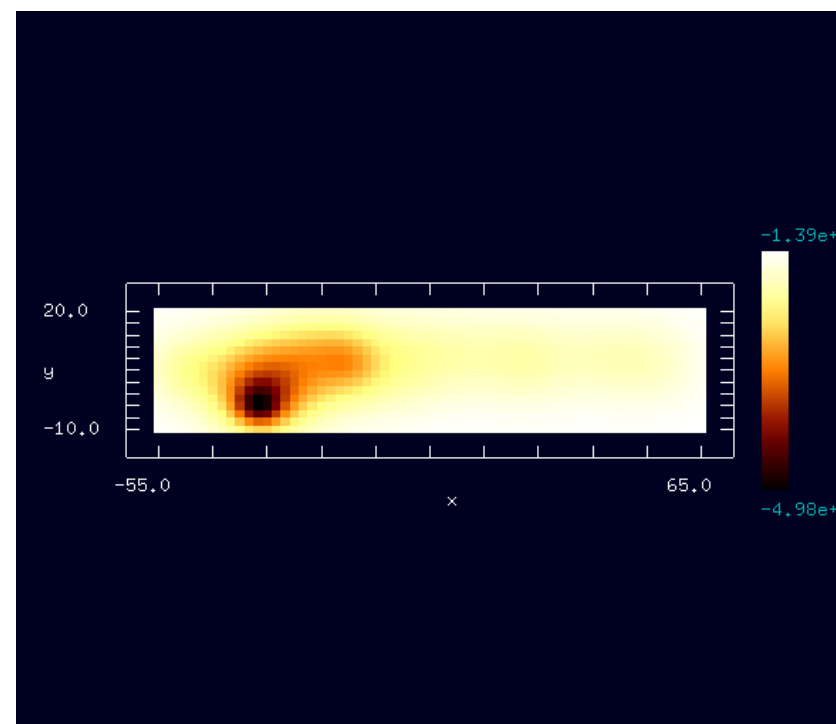
本事例は、コラーゲンを、周波数シフトの分布像でシミュレートします。データはPDB: id「3dmw」で検索します。

本事例のデータは「非対称単位」(asymmetric unit)です。

探針は登録済みデータ「pyramid」(先端角度 32 度)

を用います。

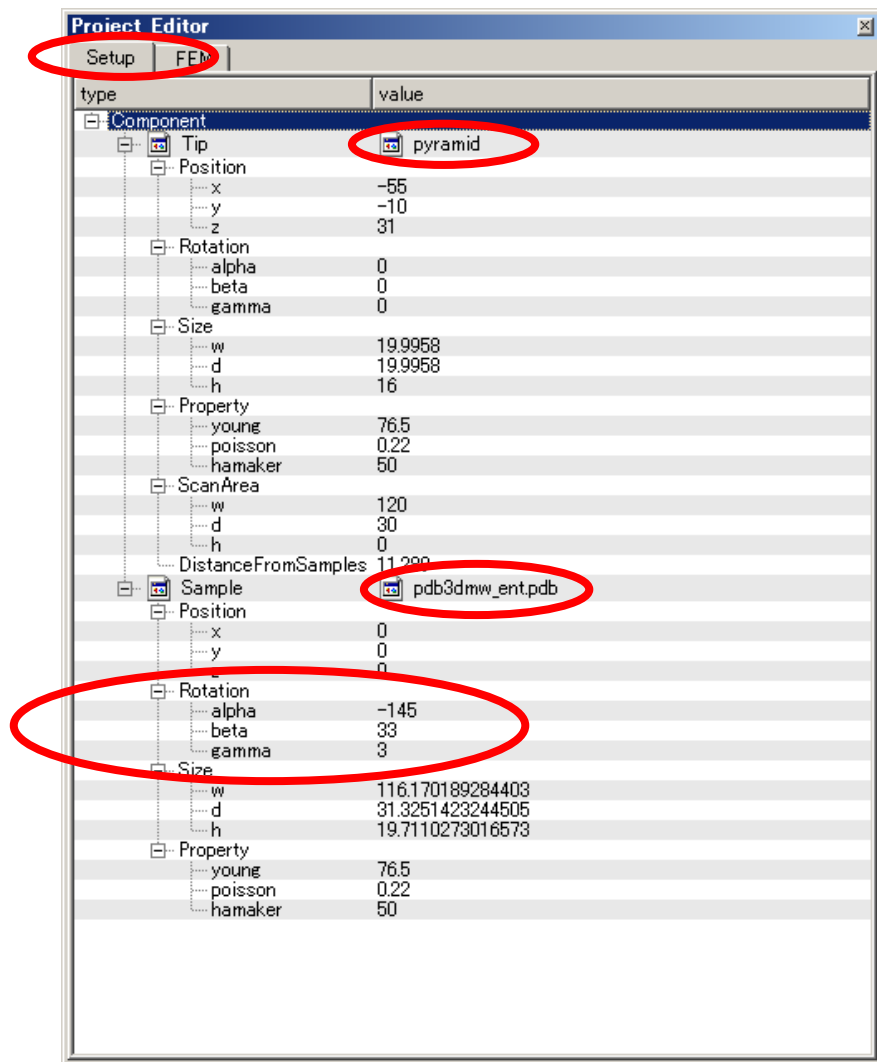
探針試料間距離は 11.289 Å としています。



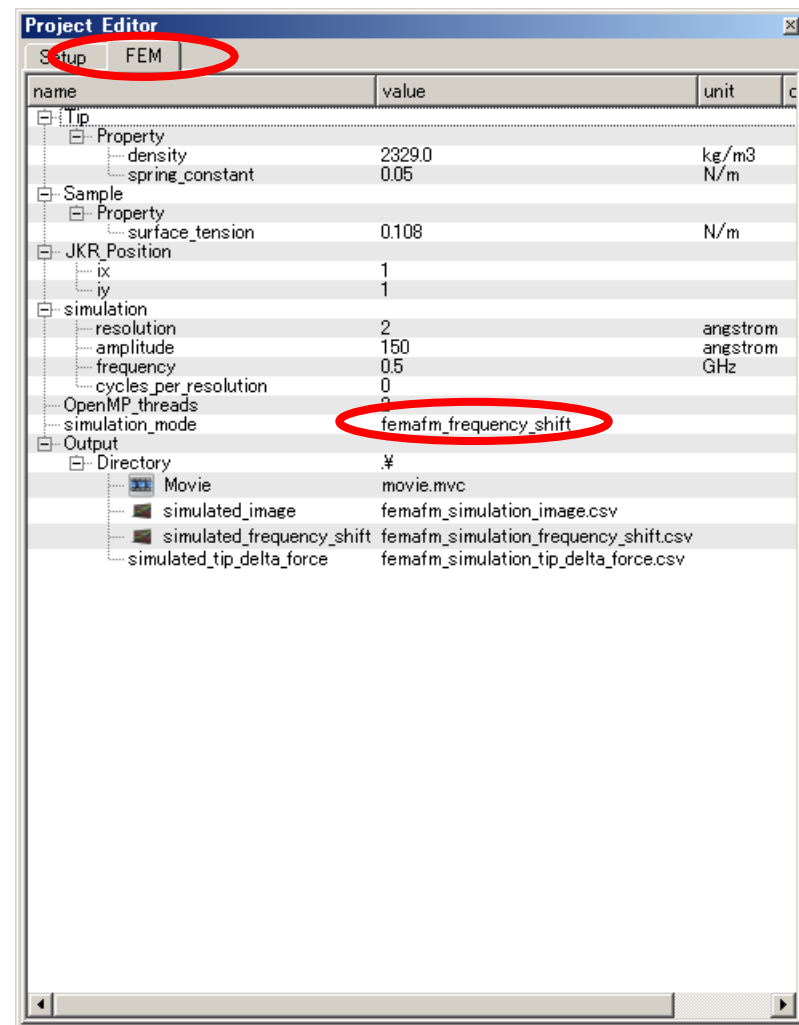
事例紹介ページ

試料の向き (Rotation) を調節することにより所要の結果を得ることができます。

紹介事例の結果像 (高さ方向Hz)



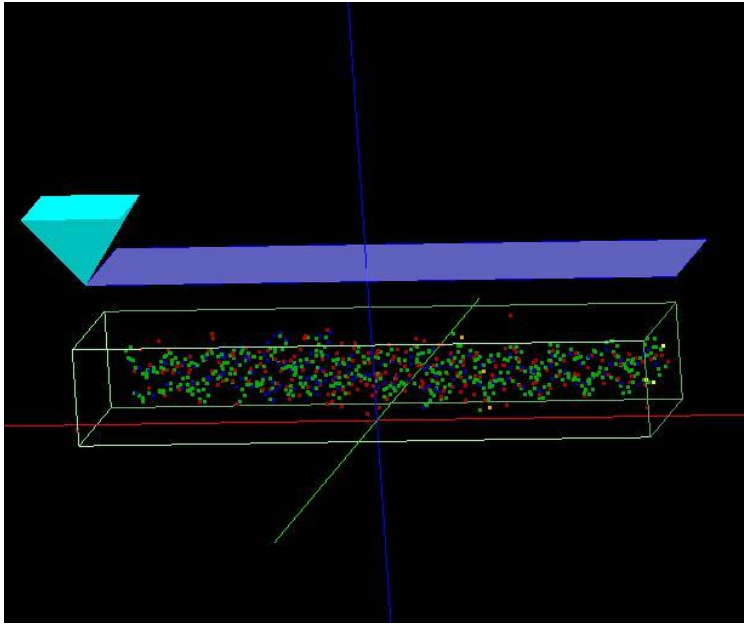
事例紹介モデルのセットアップ条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。





解析モデル俯瞰図

Collagen alpha-1(III) chain/ PDB : id 「3dmw」

Crystal structure of human type III collagen G982-G1023 containing C-terminal cystine knot

#### ・参考

連続弾性体AFMシミュレータFemAFMの計算モードの一つである、周波数シフト像モード(femafm\_frequency\_shift)について

周波数シフトを用いる非接触型AFM画像をシミュレートするモードです。

一定の周波数で探針を励振させながら、試料表面を走査して、探針-試料間の相互作用によって引き起こされる共鳴周波数のずれを、2次元平面上にプロットします。

カンチレバー先端の探針が、試料表面から数Å離れて振動した状態で原子間に働く相互作用を測定しつつ、試料表面を走査する状況に対応しています。

## ●FemAFM：コラーゲン(Collagen ALPHA 1)の周波数シフト AFM 像シミュレーション 計算事例⑫

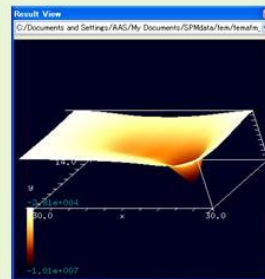
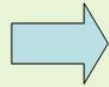
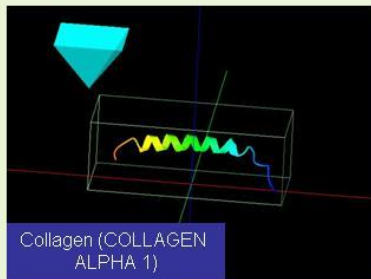
計算モード識別番号：[FemAFM\_FreqShift\_Polymer\_003]

ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/FemAFM/FreqShift/FemAFM\\_FreqShift.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/FemAFM/FreqShift/FemAFM_FreqShift.php)

分類：FemAFM 周波数シフトAFM像、 $\mu\text{m}$ オーダー、無機半導体

### 【FemAFM】周波数シフト像モード

カンチレバーを外力によって一定の周波数で振動させながら、非接触で試料表面に近付け、探針-試料間の相互作用により生じる周波数シフトの分布画像を求める状況に対応しています。

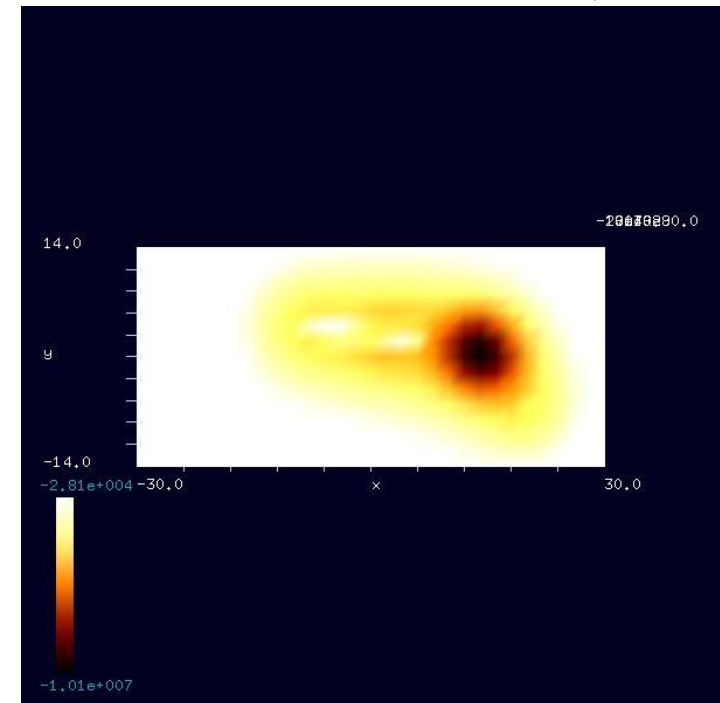


FemAFM

事例紹介ページを下左図に示します。

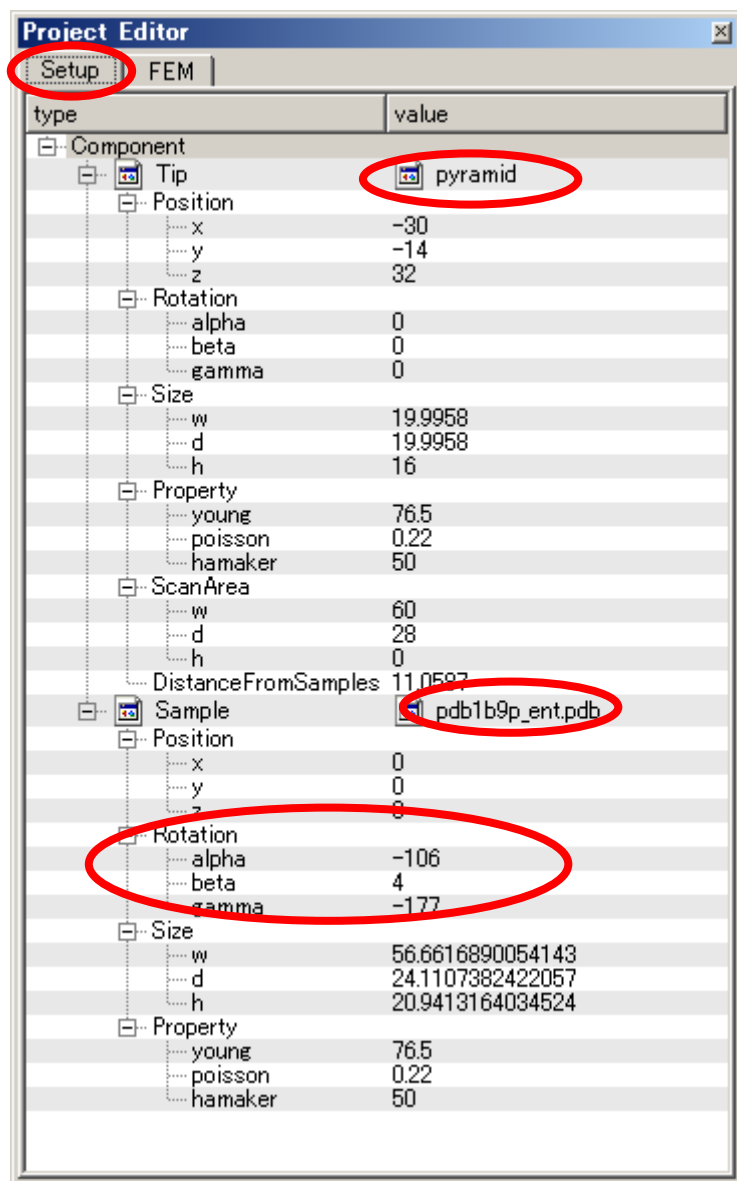
本事例は、コラーゲンを、周波数シフトの分布像でシミュレートします。データはPDB：id「1b9p」で検索します。本事例のデータは「非対称単位」(asymmetric unit)です。探針は登録済みデータ「pyramid」(先端角度 32 度)を用います。

探針試料間距離は 11.0587 Åとしています。



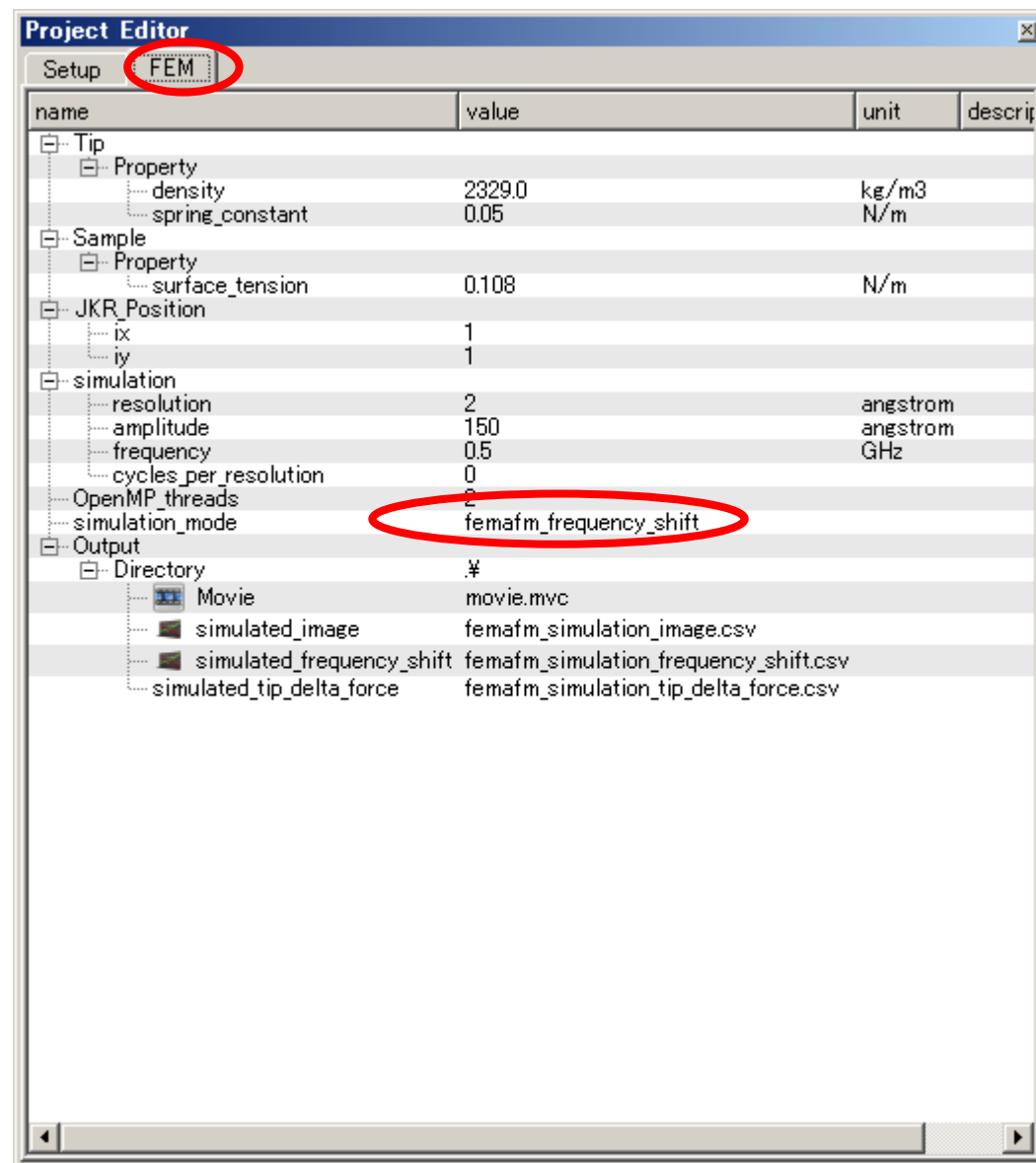
事例紹介ページ

紹介事例の結果像（高さ方向Hz）

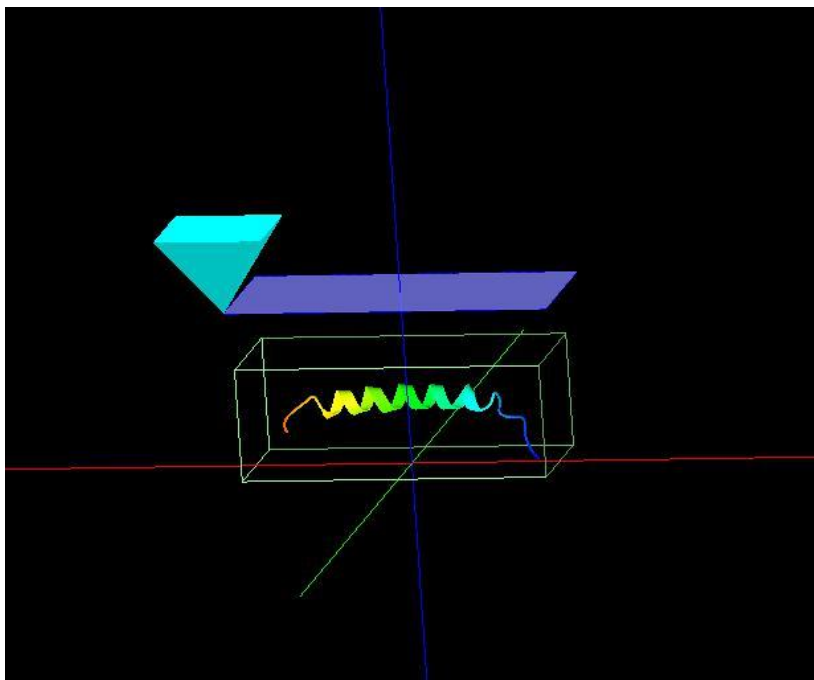


事例紹介モデルのセットアップ条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。



設定条件



解析モデル俯瞰図

## 参考

PROTEIN (COLLAGEN ALPHA 1) /PDB : id 「1b9p」

NMR STRUCTURE OF HEPARIN BINDING SITE OF NON COLLAGENOUS DOMAIN I (NC1) OF COLLAGEN FACIT XIV

## 9・FemAFM(連続弾性体 AFM シミュレータ) FreqShift

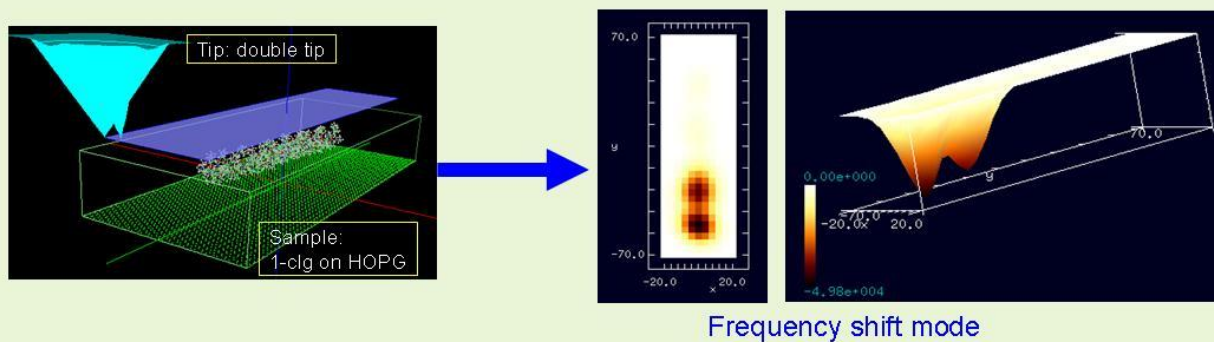
### ●FemAFM: double-tip を使った、HOPG 基板上的 1-clg の高さ一定モード、周波数シフト AFM 像シミュレーション 計算事例⑬

計算モード識別番号: [FemAFM\_FreqShift\_Polymer\_004]

ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/FemAFM/FreqShift/FemAFM\\_FreqShift.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/FemAFM/FreqShift/FemAFM_FreqShift.php)

分類: FemAFM 周波数シフトAFM像、 $\mu\text{m}$ オーダー、無機半導体

【FemAFM】double-tipを使った、HOPG基板上的1-clgの周波数シフトAFM像シミュレーション



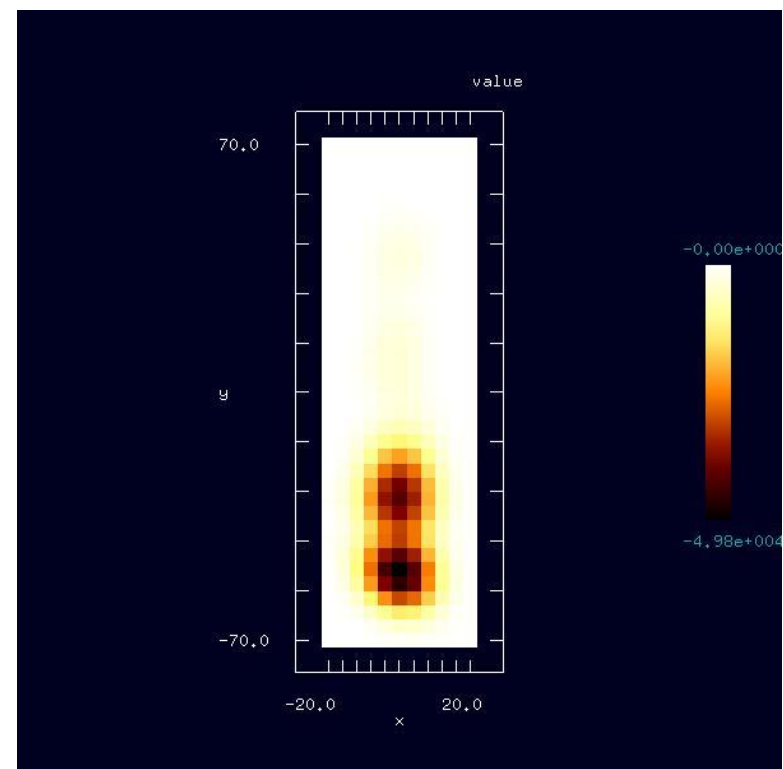
事例紹介ページ

事例紹介ページを下左図に示します。

1-clgを、周波数シフトの分布像でシミュレートします。

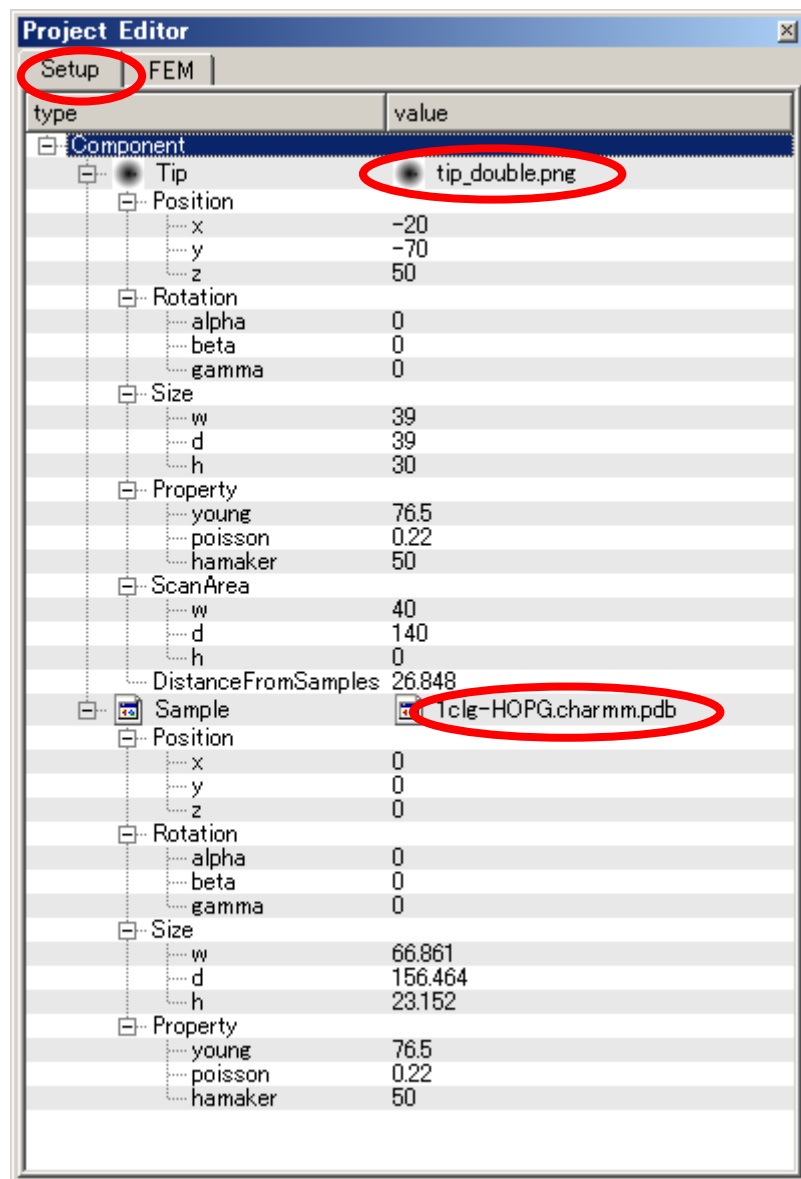
探針は登録済みデータ「tip\_double.png」を用います。

探針試料間距離は  $22.014125\text{\AA}$  としています。

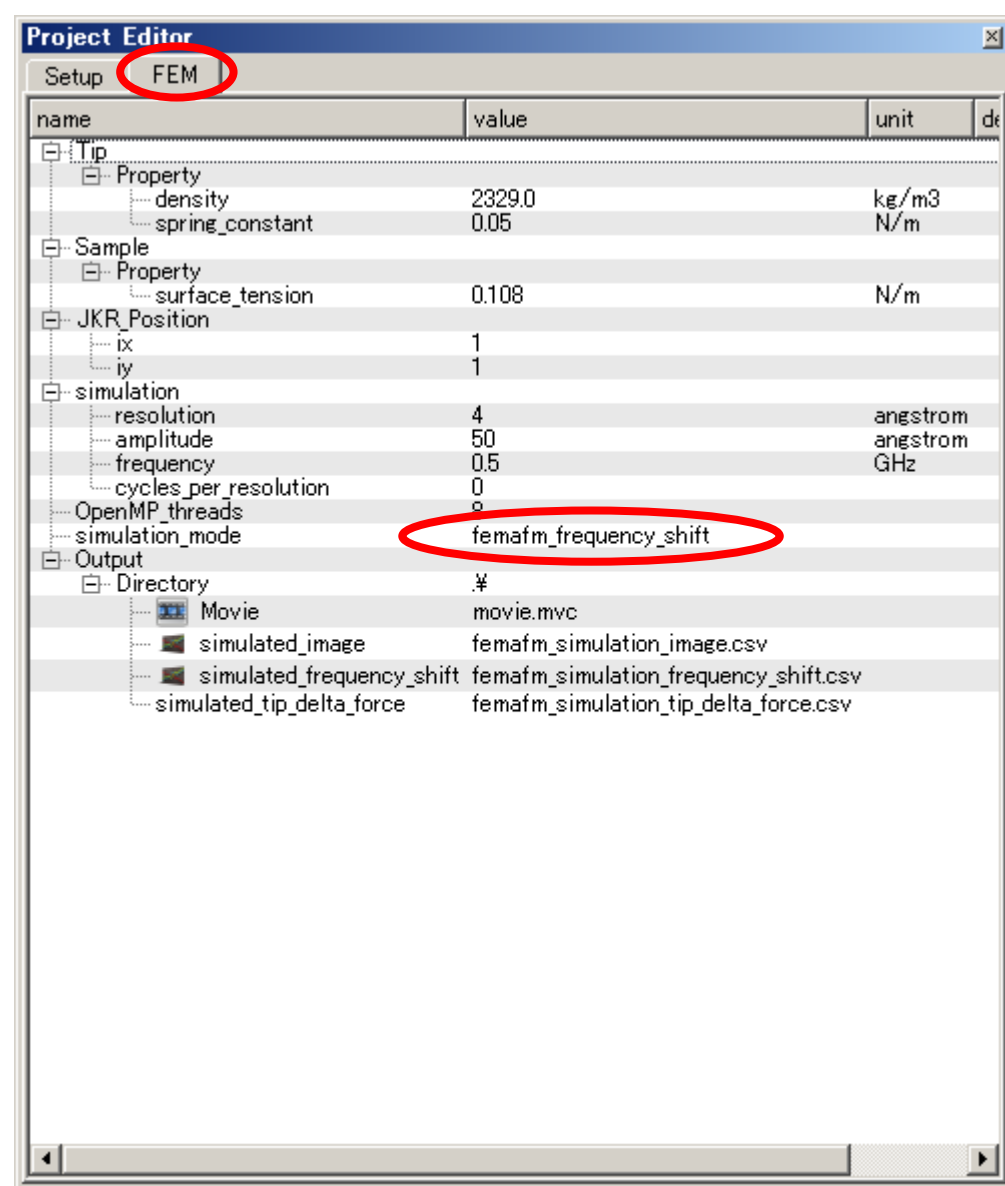


紹介事例の結果像 (高さ方向Hz)



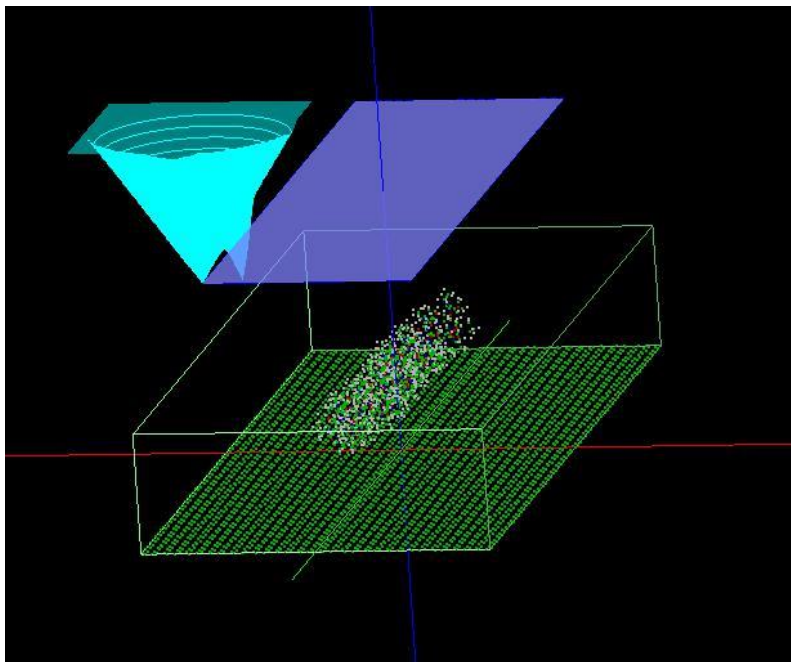


事例紹介モデルのセットアップ条件



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。



解析モデル俯瞰図

・参考

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:  $\epsilon$  カプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)

・参考

画像ファイル(PNG 形式, BMP, JPG 形式) で形状データを与える事ができます。

GeoAFM、及び、FemAFM では探針・試料の形状データとしてグレースケール(白黒)の画像ファイルを用いることができます。

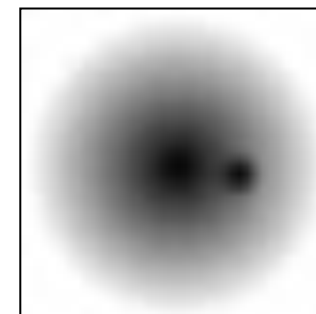
PNG 形式、BMP 形式、及び JPG 形式のグレースケールの画像ファイルを使用することができます。

PNG 形式、BMP 形式、及び JPG 形式の画像ファイルは GIMP などのペイントツールを用いて作成することができます。

詳しい用意の仕方は計算事例ファイルの 24 ページ目である 下記リンク先 にまとめられています。

【GeoAFM】オリジナルの探針形状データの作成／使用 1/2、2/2

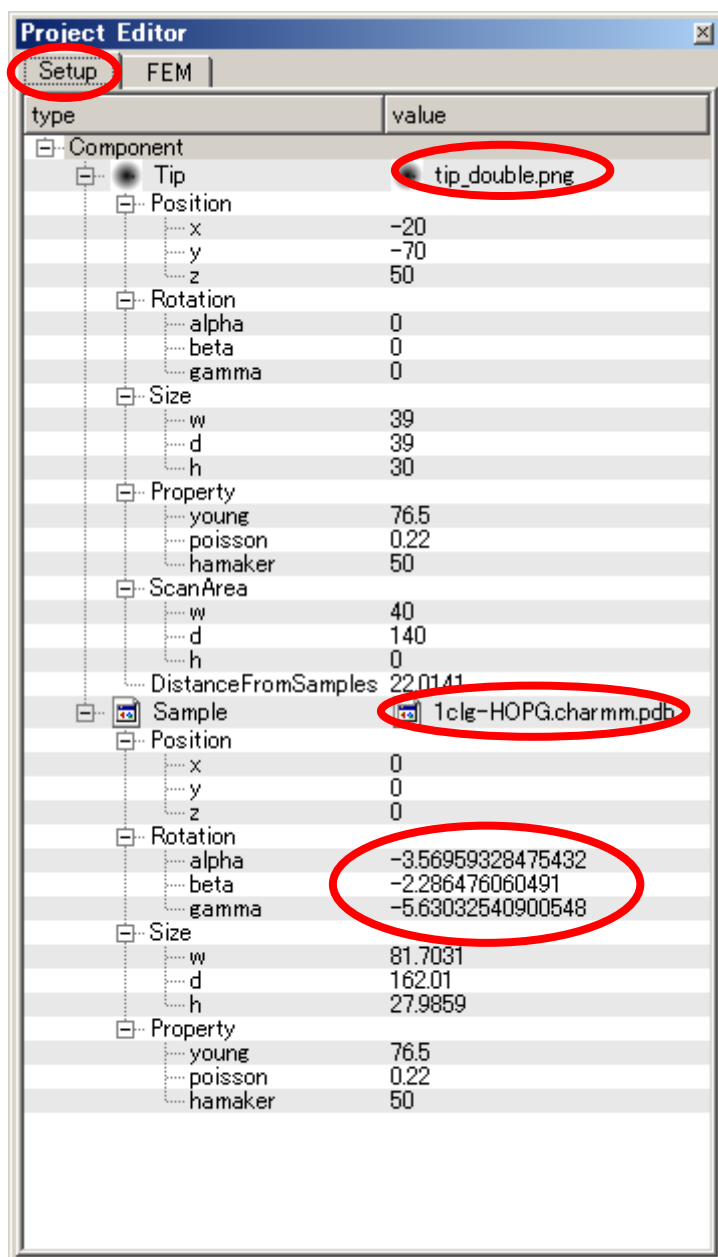
[http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/spm\\_case\\_examples.pdf#page=24](http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/spm_case_examples.pdf#page=24)



TIP : double-tip 画像 (tip\_double.png)

- ・ 試料モデルの傾きをスキャンエリアに水平になるよう調整した場合のシミュレーション結果を記します (TIP は double-tip 使用します)。

## (計算事例⑭)

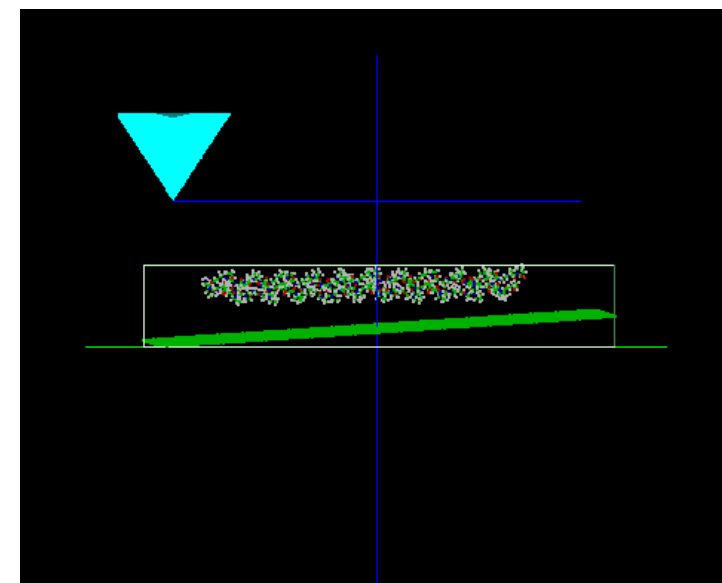


参考事例モデルのセットアップ条件

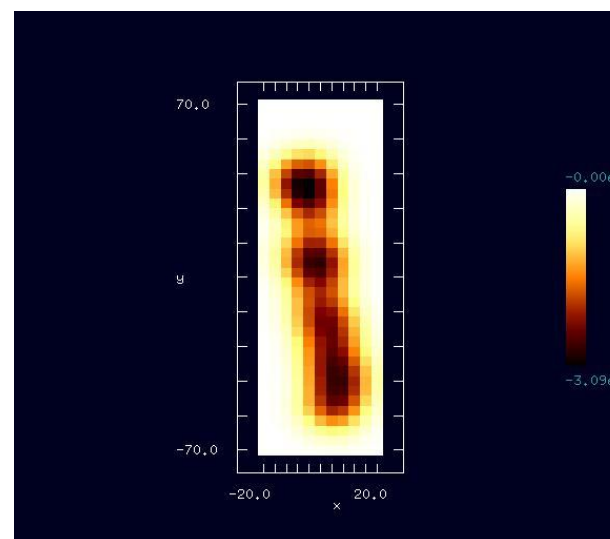
Sample の Rotation 設定を

alpha : 0 → -3.56 . . .  
beta : 0 → -2.28 . . .  
gamma : 0 → -5.63 . . .

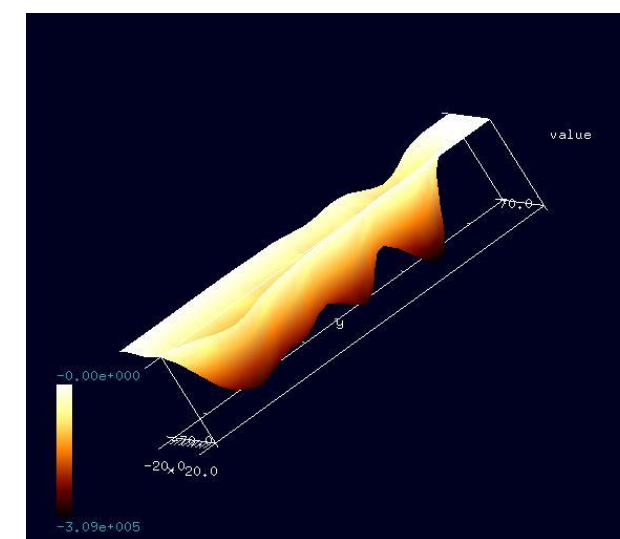
と変更することにより、試料モデルの傾きをスキャンエリアに、ほぼ水平となるようにしました。本参考事例の結果像 (高さ方向 Hz) は、試料モデルの形状と物性の変化に対応して共鳴周波数のズレがシミュレートされています。



参考事例モデルSIDE図



参考事例の結果像 (高さ方向Hz)



参考事例の3D結果像 (高さ方向Hz)

10・本編での SPM シミュレータにおけるソルバー一覧 (事例として取上げたソルバー・モード・機能を赤字で示しました)

●: 対応済	×: 未対応					
V20170313	V20160722	ソルバー	モード 1	モード 2	モード名称	機能・その他
●	●	GeoAFM				探針形状、試料形状、AFM 像の幾何学法による交互予測 AFM シミュレーション  ポップアップ・メニュー[GeoAFM] →[Show Simulated Sample]で表示
●	●	FemAFM	femafm_Van_der_Waals_force		ノンコンタクトモード	連続弾性体 AFM シミュレータ  古典力学により問題を取り扱う点に特徴
			femafm_frequency_shift		周波数シフト像モード	
			femafm_JKR		粘弾性接触解析モード	
●	●	Analyzer				実験データの画像処理プロセッサ  走査型プローブ顕微鏡 (SPM) 実験装置から直接出力されるデータファイルを読み込む  基板面の傾き補正  探針形状推定と探針影響除去  コントラストの調整 (ガンマ補正)

