

【開発成果の活用・普及促進_課題】

事後評価用終了報告書

平成27年4月17日

国立研究開発法人科学技術振興機構
執行役（産学連携事業担当）
齊藤 仁志 殿

（住所）〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F
（機関名）Advanced Algorithm & Systems
（所属部署名）－
（チームリーダー氏名）柿沼 良輔 印

標題の件、平成24年10月10日付通知のありました課題「SPM装置シミュレータの活用・普及促進」の平成26年度事後評価用終了報告書を添付の如く提出致します。

(別紙)

- ・ 領域：開発成果の活用・普及促進
- ・ 開発課題名：SPM装置シミュレータの活用・普及促進
- ・ チームリーダー氏名：柿沼 良輔
- ・ 採択年度：平成24年度

[全体計画における達成状況自己評価]

本開発課題の全体としての主たる目標は、以下の二つである。

- Advanced Algorithm & Systems (以下 AA&S と記述)が事務局となって、SPM(Scanning Probe Microscope:走査型プローブ顕微鏡)コンソーシアム及びユーザー会を編成し、戦略的セミナーを開催する。さらには、電子システム、ソーシャルメディアの活用により、SPM ユーザー、および、今後 SPM ユーザーとなり得る候補者を対象とした、情報収集・発信・共有を促進し、SPM コミュニティを、SPM シミュレータの市場に変化させる。
- SPM ユーザーの要望に基づき、SPM シミュレータのより一層の高機能化、ユーザビリティ向上を実現する。具体的には、以下の項目の要素技術の実装に取り組む。
 - (a)実測-計算比較機能の高度化
 - (b)接触力学の検討
 - (c)トンネル電流計算の精度向上
 - (d)ウィザードによる使い勝手の向上
 - (e)計算パラメータの充実化(43 種類の元素・平成 27 年 9 月完成の目標)
 - (f)ソルバーの高速化

上記二つの目標は、今回の共用実施計画において、十分に満足できるレベルで達成された。これらの成果の具体的な説明に移る前に、以下に、【共用の最終目標】の達成状況について述べる。

1. 共用装置の年間稼働日数・時間

本共用対象は個人用 PC 上で稼働するプログラムであるため、稼働日数・時間での目標設定は行わなかった。その代替りとして、最大普及可能数として、国内 3000 本、国外 7000 本のプログラム・ダウンロードを目標とした。

2. 稼働状況(夜間停止、夏季停止、1日〇時間のみ稼働など)

本共用対象は個人用 PC 上で稼働するプログラムであるため、稼働日数・時間での目標設定は行わなかった。その代替りとして、ダウンロード数、セミナー発表数、本シミュレータを引用した論文数を目標とした。これらは、以下、3.~7.の各項目を

参照のこと。

3. 年間内部利用（時間・件数・人）

4. 年間外部利用（時間・件数・人）

本シミュレータは、まずダウンロードをもってその使用が始まる。しかし、平成 21 年度に実施したソフトウェア本体およびチュートリアル(ドキュメント)の無償供与は、SPM 実験装置を普段から使用している平均的な有識者だけにとどまり、それ以外のユーザーにはなかなか浸透しなかった。このように、無償供与の実質的な成果を挙げられなかった結果を踏まえ、SPM シミュレータの仕様の詳細、計算機能の説明、効果的な使用方法に関する情報をまとめたガイドブックの編集・公開等をはじめとした、SPM シミュレータ活用方法に関する総合的な情報の開示を、「SPM 情報交換プラットフォーム」上で展開した。これらのプラットフォーム上の公開情報を、チュートリアルと対にして配布し、SPM シミュレータの有効性をユーザーに理解してもらう方式を前提として、活用・普及活動を進めることとした。海外向けとしては、宣伝資料の英文化完成が平成 27 年 1 月となり、周知期間が不足している状態である。このような状況下で、本シミュレータの新規ダウンロード数に関する目標設定を行った。(その際、対象者について内部、外部の区別は置かない。)具体的には、新規ダウンロード数、国内 300 本、国外 350 本を目標とした。

達成状況としては、国内ダウンロード数約 300 本、国外ダウンロード数 24 本の実績となった。

5. 外部利用公募・PR 活動（随時受付、年 3 回公募、説明会開催など）

第一の目標を、顧客情報等のデータベース、SPM ユーザーへのメール発信システム、本シミュレータに関する技術情報を掲載した Web サイト等の電子システム・ソーシャルメディアを組み合わせて構成される、「SPM 情報交換プラットフォーム」の構築とした。第二の目標を、「SPM ユーザー会」の立ち上げとした。

達成状況は、以下の通りである。「SPM 情報交換プラットフォーム」の構築、「SPM ユーザー会」の発足は、無事に完了している。また、平成 21 年度ソフトウェア無償供与を受けた方々を中心とする約 250 人のコアユーザーを獲得した。これらのコアユーザーの中には、AA&S におけるソフトウェア開発に必要な SPM 実験画像を提供して下さった研究者の方々も含まれている。さらには、今後、コアユーザーになって頂けると期待される周辺ユーザー約 1400 人の獲得に成功した。

6. チームとしての成果発表等件数（学会発表、論文、特許、プレス発表含む）

7. 共用による成果発表等件数

本共用においては、チームと外部の区別は置かず、共通の目標として設定した。普段から本シミュレータ開発に協力して下さっている大学の先生方に、本シミュレータを使用した結果を含む研究成果を論文発表して頂くこと、および、弊社社員による学会での研究・開発成果の口頭発表・ポスターセッション参加を目標とした。達成状況は以下の通りである。

[学会発表] 25 件

(東北大学 原子分子材料科学高等研究機構)

[1] Masaru Tsukada, “Theory of Scanning Probe Microscopy and Molecular Bridges”, icsfs16 (16th edition of the International Conference on Solid Films and Surfaces), July 1-6, 2012, Genoa, Italy.

[2]塚田捷、「液中 AFM および接触過程の理論シミュレーション」、ナノプローブテクノロジー第 167 委員会第 67 回研究会(主催:日本学術振興会)、2012 年 7 月 18 日、物質・材料研究機構

[3]塚田捷、「走査プローブ顕微鏡のシミュレーション理論—水・電極界面と KPFM など—」、触媒・電池元素戦略研究拠点 第 5 回公開シンポジウム、2014 年 10 月 14 日、京都大学桂キャンパス

[4] Masaru Tsukada, “How does theory contribute to nano-Sciences? SPM and Solid-Water Interfaces”, FON’14 (The 2nd International Symposium on the Functionality of Organized Nanostructures), November 26, 2014, Miraikan Hall (日本未来館).

(北海道大学 低温科学研究所)

[5]長嶋剣、佐崎元、麻川明俊、古川義純、阿部真之、森田清三、「液中非接触原子間力顕微鏡によるリゾチーム表面での吸着分子観察」(08aC12)、第 43 回結晶成長国内会議(NCCG-43)(主催:日本結晶成長学会)、2013 年 11 月 8 日、長野市生涯学習センター

[6]長嶋剣、「液中非接触原子間力顕微鏡による結晶表面での吸着分子観察」(MIS36-10)、日本地球惑星科学連合 2014 年大会(主催:日本地球惑星科学連合)、2014 年 5 月 1 日、パシフィコ横浜

(神戸大学 理学研究科化学専攻)

[7]西岡利奈、「原子間力顕微鏡を用いた p-ニトロアニリン-液体界面の観察」、神戸大学理学研究科第 2 回サイエンスフロンティア研究会、2011 年、神戸大学理学研究科

[8]西岡利奈、日浅巧、木村建次郎、大西洋、大田昌弘、渡邊一之、山崎将嗣、粉川良平、大藪範昭、小林圭、山田啓文、「周波数変調方式原子間力顕微鏡による p-ニトロアニリン結晶の表面観察」、研究会「物理化学的手法による新規表面評価」、2011 年 3 月

[9]西岡利奈、日浅巧、木村建次郎、大西洋、大田昌弘、渡邊一之、山崎将嗣、粉川良平、大藪範昭、小林圭、山田啓文、「周波数変調方式原子間力顕微鏡による p-ニトロアニリン結晶の表面観察」(1D5-19)、日本化学会第 91 春季年会(主催:日本化学会)、2011 年 3 月 26 日、神奈川大学横浜キャンパス

[10]西岡利奈、日浅巧、木村建次郎、大西洋、「周波数変調方式原子間力顕微鏡を用いた p-ニトロアニリン-液体界面の観察」(2P062)、第 5 回分子科学討論会 2011(主催:分子科学会)、2011 年 9 月 21 日、札幌コンベンションセンター

[11] Rina Nishioka, Takumi Hiasa, Hiroshi Onishi, Kenjiro Kimura, ‘Interfacial Water over p-Nitroaniline (101) Surface’, 15th International Conference on Non-Contact Atomic Force

Microscopy (NC-AFM2012), July 1-5, 2012, Cesky Krumlov, Czech.

[12]西岡利奈、日浅巧、大西洋、木村建次郎、「ニトロベンゼン誘導体結晶-水界面の FM-AFM を用いた構造解析」(22Bp07S)、第 32 回表面科学学術講演会(主催：日本表面科学会)、2012 年 11 月 22 日、東北大学さくらホール

(金沢大学 理工研究域数物科学系生物物理学研究室)

[13]内橋貴之、安藤敏夫、「高速 AFM を用いた膜超分子のダイナミクス観察」(I2-1)、第 36 回日本生体エネルギー研究会(主催：日本生体エネルギー研究会、特定領域研究「膜超分子モーターの革新的ナノサイエンス」総括班)、2010 年 11 月 18 日、大阪大学銀杏会館

[14]内橋貴之、古寺哲之、安藤敏夫、「高速原子間力顕微鏡で明らかにするタンパク質のダイナミクス」、先端的共通技術部門平成 23 年度オープンセミナー、日本顕微鏡学会走査型プローブ顕微鏡(SPM)分科会、平成 23 年度オープン研究会、走査型プローブ顕微鏡における最先端技術～イノベーションのキーテクノロジー～、2011 年 12 月 12 日、物質・材料研究機構、つくば

[15] T. Uchihashi, “Image analysis of HS-AFM movies for dynamic events on biological molecules: F_1 -ATPase and cellulase”, 3rd Kanazawa Bio-AFM Workshop, November 7, 2012, KKR Hotel Kanazawa, Kanazawa, Japan

[16]内橋貴之、「高速原子間力顕微鏡でイメージングするタンパク質の一分子ダイナミクス」、第 12 回名古屋大学遺伝子実験施設公開セミナー、2012 年 11 月 29 日、名古屋大学 坂田・平田ホール

[17]内橋貴之、「高速 AFM によるバイオ分子の液中動的観」、生体分子機能解析のための走査型プローブ顕微鏡手法研究部会(主催：日本顕微鏡学会)、2012 年 12 月 9 日、湯沢ニューオータニホテル

[18]内橋貴之、「高速 AFM を用いた 1 分子ダイナミクス」(3S04-3)、第 85 回日本生化学会大会(主催：日本生化学会)、シンポジウム“少数性・生化学の新たな視点”、2012 年 12 月 16 日、福岡国際会議場、福岡

[19]内橋貴之、「高速 AFM による生体分子のダイナミクス解析」、KEK PF 第 1 回先進的観測技術研究会(主催：KEK(高エネルギー加速器研究機構) PF(物質構造科学研究所 放射光科学研究施設 Photon Factory))、2012 年 12 月 26 日、KEK 小林ホール、つくば

[20] T. Uchihashi, “High-Speed Atomic Force Microscopy for Imaging of Protein Dynamics”, 2013 MRS (Materials Research Society) Fall Meeting, Symposium LL: Advances in Scanning Probe Microscopy, December 13, 2013, Boston, USA

[21]内橋貴之、飯野亮太、渡辺洋平、野地博行、安藤敏夫、“HS-AFM observations of Conformational dynamics of ring-shaped ATPases: F_1 and ClpB”, 231st IMEG seminars & Minisymposium(第 231 回発生研セミナー兼ミニシンポジウム): ATP/GTP 駆動分子マシナリーの高速 AFM イメージングと分子機構解明の進展、2014 年 2 月 20 日、熊本大学発生医学研究所

(Advanced Algorithm & Systems)

[22]小方亨、「SPM シミュレータのご紹介～DFTB 法に基づいたシミュレーション計算～」、実用顕微評価技術セミナー2014(主催：日本表面科学会)、2014年6月6日、東京大学小柴ホール

[23]吾妻広夫、「試料-探針間の粘弾性接触を考慮した液中 AFM シミュレーション」、実用顕微評価技術セミナー2014 (主催：日本表面科学会)、2014年6月6日、東京大学小柴ホール

[24]吾妻広夫、「連続弾性体シミュレータによる周波数シフト AFM 像計算」(7Dp08)、第 34 回表面科学学術講演会(主催：日本表面科学会)、2014年11月7日、島根県立産業交流会館(くにびきメッセ)

[25]小方亨、「DFTB 法に基づいた走査型プローブ顕微鏡のシミュレーション」(7Dp09)、第 34 回表面科学学術講演会(主催：日本表面科学会)、2014年11月7日、島根県立産業交流会館(くにびきメッセ)

[論文] 8 件

(神戸大学 理学研究科化学専攻)

[1] Rina Nishioka, Takumi Hiasa, Kenjiro Kimura, and Hiroshi Onishi, “Specific Hydration on p-Nitroaniline Crystal Studied by Atomic Force Microscopy”, *Journal of Physical Chemistry C*, 2013, **117** (6), pp. 2939-2943.

(金沢大学 理工研究域数物科学系生物物理学研究室)

[2] 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).

[3] H. Yamashita, A. Taoka, T. Uchihashi, T. Asano, T. Ando, and Y. Fukumori, “Single molecule imaging on living bacterial cell surface by high-speed AFM”, *Journal of Molecular Biology* **422**(2), pp. 300-309 (2012).

[4] K. Igarashi, T. Uchihashi, T. Uchiyama, H. Sugimoto, M. Wada, K. Suzuki, S. Sakuda, T. Ando, T. Watanabe, and M. Samejima, “Two-way traffic of glycoside hydrolase family 18 processive chitinases on crystalline chitin”, *Nature Communications* **5**, Article Number 3975 (2014).

[5] T. Ando, T. Uchihashi, and S. Scheuring, “Filming Biomolecular Processes by High-Speed Atomic Force Microscopy”, *Chemical Reviews* **114**(6), pp. 3120-3188 (2014).

[6]内橋貴之、飯野亮太、安藤敏夫、野地博行、「高速 AFM による F₁-ATPase 分子回転の直接可視化」、*生化学* **86**(2), pp. 127-136 (2014).

(浜松医科大学 解剖学講座細胞生物学分野)

[7] H. Asakawa, K. Ikegami, M. Setou, N. Watanabe, M. Tsukada, and T. Fukuma, “Submolecular-Scale Imaging of α -Helices and C-Terminal Domains of Tubulins by Frequency Modulation Atomic Force Microscopy in Liquid”, *Biophysical Journal* **101**(5), 1270-1276 (2011).

(京都大学 工学研究科電子工学専攻)

[8] S. Ido, K. Kimura, N. Oyabu, K. Kobayashi, M. Tsukada, K. Matsushige, and H. Yamada, "Beyond the Helix Pitch: Direct Visualization of Native DNA in Aqueous Solution", ACS Nano 7(2), 1817-1822 (2013).

[その他] 6 件

(Advanced Algorithm & Systems)

[1] プレス発表、「走査型プローブ顕微鏡像シミュレーションソフトの実用化に成功」、(科学技術振興機構(JST)、Advanced Algorithm & Systems、東北大学原子分子材料科学高等研究機構)、2012 年 5 月 21 日

[2] JRSS10 (The 10th Japan-Russia Seminar on Semiconductor Surfaces)、[企業ブースでのデモムービー上映、及び、来場者への SPM シミュレータの説明]、2012 年 9 月 26 日～27 日、東京大学本郷キャンパス理学部 1 号館小柴ホールホワイエ

[3] 柿沼良輔、「SPM 装置シミュレータの活用・普及促進」、JASIS2013[分析展 2013(第 51 回)/科学機器展 2013(第 36 回)]、(主催：日本分析機器工業会/日本科学機器協会)、[JASIS コンファレンスプログラム、「先端計測分析技術・機器開発プログラム」開発成果の活用・普及促進、科学技術振興機構]、2013 年 9 月 5 日、幕張メッセ国際展示場

[4] JASIS2013[分析展 2013(第 51 回)/科学機器展 2013(第 36 回)]、(主催：日本分析機器工業会/日本科学機器協会)、[開発成果のパネル展示]、2013 年 9 月 4 日～6 日、幕張メッセ国際展示場

[5] 2013 年真空・表面科学合同講演会(第 33 回表面科学学術講演会、第 54 回真空に関する連合講演会)、[真空・表面科学機器展示会の参加]、2013 年 11 月 26 日～27 日、つくば国際会議場

[6] 第 5 回走査プローブ顕微鏡シミュレータ導入セミナー(実技指導実践講座)、(主催：Advanced Algorithm & Systems)、[参加ユーザーに SPM シミュレータの使用方法をマスターして頂くための公開講座]、2013 年 12 月 11 日、国立オリンピック記念青少年総合センター、センター棟 1 階 107 号室

8. その他共用により生まれた成果

「SPM 情報交換プラットフォーム」の構築により、大学・公的研究機関の SPM ユーザー・研究者から、SPM 実験画像データを提供して頂くことが可能となった。これにより、SPM シミュレータの実験画像表示機能の、さらなる改良が可能となった。具体的には、ユーザーの皆様から、Unisoku、Omicron、Asylum Research、Digital Surf、JEOL、Agilent Technology、Nanonis、RHK Technology、日立(セイコー)、島津製作所、Park System Corp.等の、世界各国の SPM メーカーの実験装置のバイナリ出力データを提供して頂き、それらのデータを解析することにより、様々なファイル形式の実験画像を、SPM シミュレータのウィンドウ上において、自由に表示・デジタル加工することが可能となった。現時点では、世界中のほぼ全ての SPM メーカーの実験装置に対応できている状況である。

[共用実施計画の各項目の実績の具体的な説明]

[1]普及活動

A)セミナー開催、「SPM 情報交換プラットフォーム」の立ち上げ、SPM コミュニティへの周知活動

JST からの「日本の大学研究室発の商業ソフトウェア SPM シミュレータが、世界市場においてデファクトスタンダードの地位を占め、日本の産業界の底上げに寄与する」という助言を踏まえ、このような高い視点から、塚田捷教授(東北大学原子分子材料科学高等研究機構)の指導の下で開発を推し進めた。その成果として、粘弾性接触解析機能等の高度なシミュレーション計算機能を実装し、「実験-計算」画像比較型 SPM シミュレータとして完成させ、適切な価格でのリリースにこぎ付けた。SPM コミュニティへの情報開示を目的とした「SPM 双方向型情報交換プラットフォーム」は以下のホームページに設置されている。

http://www.aasri.jp/pub/spm/about_spm.html

上記のホームページは、前の項目 3, 4 の説明で示した課題の解決を目的とした内容となっている。

B)専門研究者の使用結果への対応

上記の学会発表・論文で例示したように、東北大学原子分子材料科学高等研究機構の塚田捷教授、北海道大学低温科学研究所の長嶋剣博士、神戸大学理学研究科化学専攻の大西洋教授グループ、金沢大学理工研究域数物科学系生物物理学研究室の内橋貴之教授グループ、浜松医科大学解剖学講座細胞生物学分野の瀬藤光利教授グループ、京都大学工学研究科電子工学専攻の山田啓文准教授グループにおいて、SPM シミュレータの研究使用実績を蓄積することが出来た。また、以下の研究者の方々と、実際の研究活動における SPM シミュレータの使用法、各種パラメータの設定方法、計算アルゴリズムが適切か否かについて、協議を重ね、SPM シミュレータのさらなる改良点について、継続的に検討を行った。

藤田大介博士(物質・材料研究機構 先端的共通技術部門 極限計測ユニット)

福間剛士教授(金沢大学 理工研究域電子情報学系)

横田泰之博士(大阪大学 基礎工学研究科、表面・界面機能化学グループ)

黒川修准教授(京都大学 工学研究科材料工学専攻)

中嶋健准教授(東北大学 原子分子材料科学高等研究機構)

須藤彰三教授(東北大学 理学研究科物理学専攻、表面物理研究室)

C)近隣分野、海外のユーザーへのアピール

SPM を使用するバイオ・薬学・医学等の近隣分野のユーザーの把握に努め、これらの研究者(1600 人)の情報をデータベース化し SPM シミュレータの情報共有体制を整えた。また、英語版 SPM 情報交換プラットフォーム

(http://www.aasri.jp/pub/spm/en/about_spm_eng.html)の構築、SPM シミュレータのマニュアル・チュートリアル英文化作業を完了し、海外ユーザーがアクセスしやすい環境作りを努めた。さらに、海外ユーザー(1000 人)の情報をデータベース化できた。その結果、

SPM シミュレータに興味を持つ海外研究者として、以下の方々と情報交換を行い、さらに、ソフトウェア購入の打診を二件受けることが出来た。

Joost Snijder 博士(ユトレヒト大学、オランダ)

Abdennaceur Karoui 教授(ノースカロライナ州立大学、アメリカ)

Johannes Preiner 博士(リンツ ヨハネス ケプラー大学、オーストリア)

Shuai Zhang 博士(オーフス大学、デンマーク)

Duckhoe Kim 博士(コロンビア大学、アメリカ)

Igor Sokolov 教授(タフツ大学、アメリカ)

D)販売・購入の打診の実績

(1)販売実績

光岡義仁様 (株)デンソー 基礎研究所 基礎研究 1 部材料解析課

藤田大介博士(物質・材料研究機構)

福間剛士教授(金沢大学 理工研究域電子情報学系)

内橋貴之教授(金沢大学 理工研究域数物科学系生物物理学研究室)

(2)SPM シミュレータの活用の検討に関して、意思表示を頂いた方々

平山博之教授(東京工業大学 理学部物理学科)

中嶋健准教授(東北大学 原子分子材料科学高等研究機構)

松山秀生准教授(北海道大学 大学院理学院 物性物理学専攻)

山田太郎博士(理化学研究所 表面科学研究室)

本間芳和教授(東京理科大学 理学部第一部物理学科)

大西洋教授(神戸大学 理学研究科化学専攻)

安藤敏夫教授(金沢大学 理工研究域数物科学系生物物理学研究室)

鷺坂恵介博士(物質・材料研究機構 先端的共通技術部門 極限計測ユニット)

福井信志博士(豊田工業大学 クラスター研究室 (株)コンボン研究所)

鈴木秀士准教授(名古屋大学 大学院工学研究科 結晶材料工学専攻)

松本卓也教授(大阪大学 理学研究科化学専攻 反応物理化学)

大西桂子博士(物質・材料研究機構 先端的共通技術部門 極限計測ユニット)

菅原康弘教授(大阪大学 大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻)

長谷川幸雄准教授(東京大学 物性研究所 ナノスケール物性研究部門)

野田 武司博士(物質・材料研究機構 量子ドットセンター デバイス応用グループ)

黒川修准教授(京都大学 工学研究科材料工学専攻)

正木紀隆博士(浜松医科大学 解剖学講座細胞生物学分野)

瀬藤光利教授(浜松医科大学 解剖学講座細胞生物学分野)

山田啓文准教授(京都大学 工学研究科電子工学専攻)

今村元紀博士(理化学研究所 基幹研究所 ヘドル国際研究ユニット)

廣瀬崇至博士(京都大学 大学院工学研究科 合成・生物化学専攻)

横山創一博士(京都大学 大学院工学研究科 合成・生物化学専攻)

秋永広幸博士(産業技術総合研究所 ナノエレクトロニクス研究部門)

橋詰富博教授(株式会社日立製作所 基礎研究所)
繁野雅次博士(株式会社日立ハイテクサイエンス)
高野明雄(NTT アドバンステクノロジー株式会社)
菊地賢司教授(茨城大学 フロンティア応用原子科学研究センター)
朝岡秀人博士(日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門)
小河浩晃博士(日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究センター)
石島暖大(日本原子力研究開発機構 原子力基礎工学研究センター)
大久保成彰(日本原子力研究開発機構 耐照射性原子力材料開発グループ)

E)メーカー、販売代理店との協力検討案作成

● **株式会社ユニソク 駿河正次様**

平成 23 年度に弊社が SPM シミュレータに関する情報開示を行う際、DFTB 原子間相互作用パラメータを多種類の元素に関して網羅出来る状態に有れば、「UNISOKU の製品にバンドルして出荷」の意向ありとの連絡頂く。

● **オミクロンナノテクノロジージャパン株式会社 大岩烈様**

新たに 43 種類の元素に関する DFTB 計算パラメータ完成後に、この情報をご提示して意見交換段階に移ればという考えである。

● **株式会社東陽テクニカ 山下泰久様**

SPM シミュレータの使用方法が難しいので、東洋テクニカの顧客層に、どのように対応するか検討中とのことである。

[2]ユーザーの要望に基づく技術的改良

(I)実測-計算比較機能の高度化

SPM シミュレータに、実験画像データとシミュレーション結果を直接的に比較可能とする数値計算モジュールとして、Analyzer を実装した。このモジュール Analyzer は、世界各国のメーカーが供給する SPM 実験装置から出力される、様々なファイル形式の実験画像データを表示・デジタル加工することができる。デジタル処理機能としては、以下のものが用意されている。

(a)SPM 実験画像の基板傾斜傾き補正機能

(b)実験画像データ・フーリエ解析機能

(c)実験画像データ高解像度化機能(Lanczos 補間法)

(d)ニューラルネットワーク学習による実験画像データ補正機能

(e)探針形状推定(Blind Tip Reconstruction Method)機能およびアーティファクト除去機能

(f)コントラスト調整機能(ガンマ補正)

(g)エッジ抽出機能(Sobel フィルタ)

(h)ノイズ除去機能(メディアンフィルタ処理)

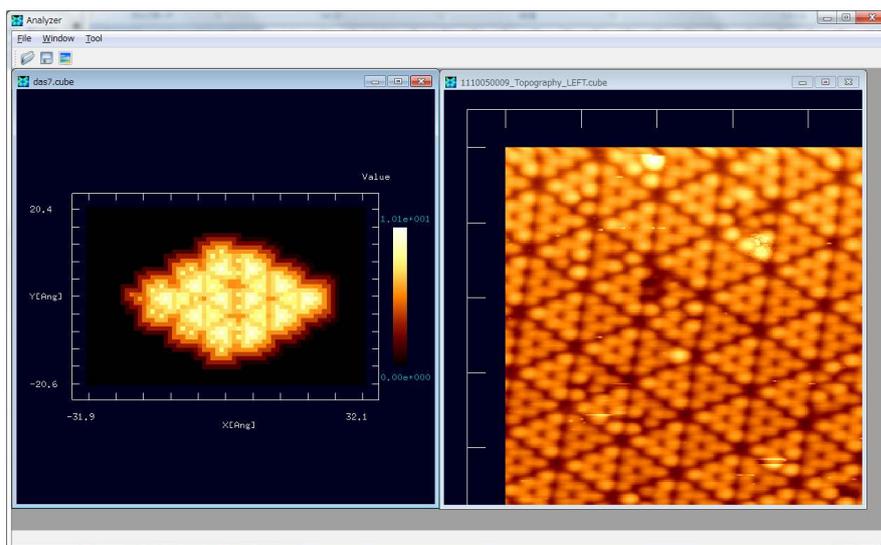


図 1 Si(111)-(7×7)DAS の、GeoAFM によるシミュレーション画像と、AFM 実測画像の比較を、ウィンドウ画面内で行っている様子

(II)接触力学の検討

JKR(Jhonson-Kendall-Roberts)理論に基づき粘弾性接触問題を解く計算エンジンを、二種類のソルバー、FemAFM(連続弾性体 AFM シミュレータ)、LiqAFM(液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ)に実装した。これにより、探針と試料が分離している際は London-vander Waals 型ポテンシャルによって引き起こされるファンデルワールス力が相互作用として働き、探針と試料が接触している際は試料表面の表面張力に由来する凝着力が相互作用として働き、両者の間でスムーズな転移が生じるモデルが、シミュレーションできるようになった。

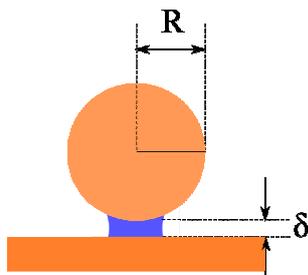


図 2 半径 R の球と無限に広い表面を持つ半無限固体の間の凝着力を説明した図

(III)トンネル電流計算の精度向上

DFTB(量子論的 SPM シミュレータ)ソルバーにおいて、今までの計算ルーチンは価電子が s 軌道、p 軌道の計算しかできなかったが、d 軌道の計算にも対応するように機能拡張した。また、走査トンネル分光(STS)、及び、走査トンネル顕微鏡(STM) の計算において、電子の結晶運動量がゼロ以外の状態を考慮するように機能拡張した。この二つの修正により、トンネル電流の計算精度の向上、及び、計算可能な元素の拡張を図った。その結果、Si(001)-3x1:H 表面などの STS 計算で、以前のプログラムでは再現することが出来なかったバンドギャップを再現することが出来るようになった。

(IV)ウィザードによる使い勝手の向上

SPM シミュレータの操作性向上のため、GUI(グラフィック・ユーザー・インターフェース)の改良に努めた。複数のウィンドウがディスプレイ上に同時に表示され、ユーザーは、これらのウィンドウに付属するメニューバーやボタンをマウスでクリックするだけで、ほとんどのシミュレーション操作が実行可能となるように設計されている。煩雑な数値パラメータはデフォルトで設定されており、ユーザーは必要最小限の入力操作でシミュレーション計算を実行できるようになっている。このようなユーザビリティの向上は、今回の課題終了後も、継続して取り組む所存である。

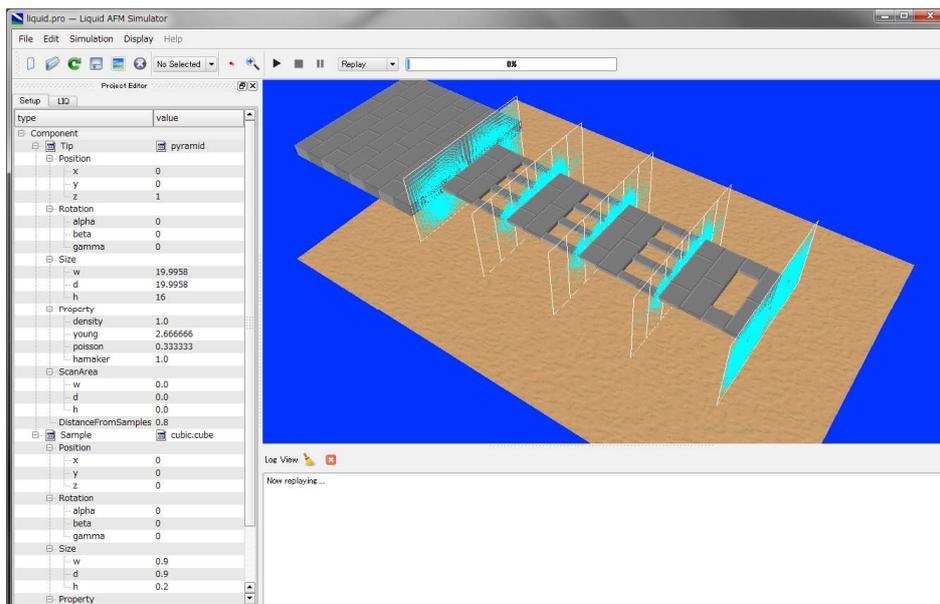


図 3 10 個の孔の開いたカンチレバーの振動をシミュレーションしている際の、LiqAFM の GUI の外観 (V)計算パラメータの充実化

DFTB(量子論的 SPM シミュレータ)ソルバーは、原子の価電子軌道や二原子間の重なり積分に関する情報を数値化した「原子間相互作用パラメータ」を外部からデータとして受け取り、これに従って電子状態を計算する方式を取っている。この原子間相互作用パラメータの計算には、多大な労力と時間を必要とする。継続的な計算作業の結果、現時点において原子間相互作用パラメータが利用できる原子の種類は、水素 H、炭素 C、窒素 N、酸素 O、リン P、アルミニウム Al、シリコン Si、チタン Ti、ルテニウム Ru、タングステン W、白金 Pt、金 Au の 12 種類の元素となっている。(今後も、この原子間相互作用パラメータの拡充作業は地道に取り組む所存である。)

(VI)ソルバーの高速化

シミュレータの計算速度を向上させるため、OpenMP と呼ばれる手法で数値計算アルゴリズムの並列化を行った。OpenMP 並列化を行ったソルバーは、FemAFM(連続弾性体 AFM シミュレータ)、LiqAFM(液中ソフトマテリアル AFM シミュレータ)、CG(構造最適化 AFM 像シミュレータ)、MD(分子動力学 AFM 像シミュレータ)、DFTB(量子論的 SPM シミュレータ)の 5 種類である。これにより、例えば、Windows 7、Windows 8 等の OS で動作する複数のコアを積んだ CPU(Core i7 等)の搭載されたパソコンで、ユーザーは手

軽に並列計算を実行することが可能となっている。

・ 共用終了後の実用化の見通しについて

SPM シミュレータは、2011 年 6 月から無償供与を実施し、2014 年 10 月から販売を開始した。販売実績本数は現時点では、国内 4 本、国外 0 本であるが、販売普及活動の項目で詳細に説明したように、SPM シミュレータは、日本のトップクラスの大学・有識者に十二分に評価されている。今後は、新たに 25 種類の元素に関して、DFTB ソルバーに必要な原子間相互作用計算パラメータが平成 27 年 12 月には完成する予定であり、バイオ・薬学、有機半導体、分野向け、SPM 装置メーカー各社にバンドル化、販売の実現が見込まれる。(日本国内での SPM 実験装置の販売台数は、約 180 台/年程度である。SPM 装置の市場動向については、以下のホームページの資料を参照のこと。)

http://www.aasri.jp/pub/demo/proposal/20141014JSTpresen_p14.pdf

国内・海外市場での販売を合計すると、「日本の大学研究室発 SPM シミュレータが世界市場でデファクトスタンダードの地位を占めること、日本の産業界の底上げを可能とすること」の期待に対して、十二分に応えうるシミュレーション・ソフトウェアが誕生したと自負している。

現在販売されている SPM シミュレータのバージョンでは、DFTB 計算において使用できる元素の種類が H、C、N、O、P、Al、Si、Ti、Ru、W、Pt、Au の合計 12 種類となっている。これは、基本的な SPM 実験シミュレーションに十分対応した仕様である。今後は、バイオ・薬学、有機半導体分野向けパラメーターを加えて、25 種類の元素 H、C、N、O、P、Si、Al、S、F、Cl、Br、I、Au、Cu、Na、Mg、Zn、Y、Gd、W、Bi、Ag、Ge、Ga、As が使用可能になり、2015/10 以降販売への弾みをつけたい所です。

将来的には、使用可能な元素数をさらに 43 種類まで増やす予定である。特に、ユーザーから集約された意見によれば、遷移金属元素の需要が見込まれており、これに対応すべく、原子間相互作用パラメータの計算作業は 43 種類に増やす為には 4 人で 2 年半掛かる膨大な作業となり、別途 JST 様もご相談もさせて頂けたらと考えている。

・ 目標に掲げていなかった成果

1. **[ガイドブック日本語版、英語版完成]**

SPM シミュレータは、実験データを手軽にシミュレーションすることを目的として開発されており、ユーザーは実験分野の専門家を想定している。このため、SPM シミュレータの計算原理を、実験が専門の研究者向けに簡潔に説明したガイドブックを発行することは、ユーザーの利便性を高めると考えられる。そこで、SPM シ

ミュレータの計算原理、数値計算アルゴリズムを説明したガイドブックを、日本語版、英語版の両方で発行し、その内容をインターネット上で無料公開することとした。ガイドブックは、これから SPM シミュレータを購入しようかと考えているユーザーにとって、貴重な情報源となり、販売促進効果もあると期待される。なお、ガイドブック日本語版、英語版は、以下のホームページで、誰でも見る事が可能となっている。

http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_guidebook.pdf

http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_guidebook_eng.pdf

2. **[FemAFM：周波数シフト AFM 像シミュレーション機能追加]**

これまで、FemAFM(連続弾性体 AFM シミュレータ)では、探針-試料間の距離を一定に保って、探針の受ける引力の分布による AFM 画像をシミュレーションしていた。今回、この機能に加えて、探針を一定周波数で励振させながら試料表面を走査した際の、周波数の揺らぎの分布をプロットする機能を追加した。これは、周波数シフト AFM 像と呼ばれるものをシミュレーションしていることに対応する。周波数シフト AFM 像は、実際の実験においても頻繁に行われる測定方法であり、今回の機能追加で、より現実に近いシミュレーションが可能となったといえる。

3. **[CG-RISM(原子スケール液中 AFM 像シミュレータ)の実装]**

CG(構造最適化 AFM 像シミュレータ)に関して、探針・試料が共に液中にある場合の計算ソルバーとして、CG-RISM を実装した。探針・試料が液体と相互作用すると、自由エネルギーの変化が生じる。探針に働く力は、この自由エネルギーの変位に関する微分として表現される。このような自由エネルギーの増減量は、探針・試料・液体を構成する原子の組の相関関数を基にして計算される。CG-RISM ソルバーは、相関関数を計算する方法として Reference Interaction Site Mode (RISM)法を採用している点に特徴がある。

4. **[DFTB ソルバー：64bit 版、GPU 並列化版の完成]**

これまで、DFTB ソルバー実行プログラムは、Windows 32bit パソコンでの使用を想定し、Intel 社製 32bit 用 Fortran コンパイラで作成されていた。しかし、近年、Windows 8 等の最新の OS がインストールされたパソコンでは、64bit マシンが当たり前になりつつある。この動向を受けて、64bit 版 DFTB ソルバーを作成することとした。さらに、NVIDIA 社製 GPU(Graphics Processing Unit)を搭載したパソコンも一般化しつつある流れを受けて、GPU 並列化を施した DFTB ソルバーも作成した。GPU 並列化により、計算速度は通常の約 3 倍弱に高速化されている。64bit 版、GPU 並列化版 DFTB ソルバーは、共に PGI 社製 Fortran コンパイラによって作成された。以下に、三種類の DFTB ソルバーの特徴をまとめておく。

ソルバー名	特徴
32bit DFTB ソルバー	従来のソルバー。Intel 社製 Fortran でコンパイルされている。Windows XP 等の一世代前の 32bit パソコンでの使用を想定

	<p>している。計算に使用できるメモリが約 3Gb に制限されており、多数の原子を含むシミュレーションは実行できない。例えば、Si(111)面の(7×7)DAS 構造の STM(走査型トンネル顕微鏡)画像は計算不可能である。(この種の計算は、約 11Gb のメモリを消費するので)OpenMP による並列化が可能である。</p>
64bit DFTB ソルバー	<p>今回、新たに作成されたソルバー。PGI 社製 Fortran でコンパイルされている。Windows 8 等の現在主流の 64bit パソコンでの使用を想定している。計算に使用できるメモリは約 128Gb であり、事実上、無制限にメモリが使用できると考えて良い。Si(111)面の(7×7)DAS 構造の STM 画像もシミュレーション可能である。OpenMP による並列化が可能である。</p>
64bit GPU DFTB ソルバ ー	<p>今回、新たに作成されたソルバー。PGI 社製 Fortran および NVIDIA 社の規格 CUDA でコンパイルされている。Windows 8 等の現在主流の 64bit パソコンで、かつ、NVIDIA 社製の GPU を備えたパソコンでの使用を想定している。計算に使用できるメモリは数 Gb 程度で、あまり多くない。これは、本来、画像描画装置である GPU に供えられているメモリの容量が比較的小さいからである。例えば、Si(111)面の(7×7)DAS 構造の STM 画像はシミュレーション不可能である。GPU による並列化がなされている。計算速度は、通常の約 3 倍弱に高速化される。</p>

・ 共用着手後の状況変化等

SPM シミュレータの存在を、多くの SPM ユーザーに周知した結果、興味を持って下さる研究者が増加している。これに伴い、SPM シミュレータのさらなる機能強化を求めるユーザーの声も聞かれるようになった。具体的には、以下の要望が寄せられている。

- Mg(マグネシウム)等の遷移金属元素も DFTB で扱えるように、原子間相互作用パラメータを拡張して欲しい。(京都大学工学研究科 黒川修准教授)
- Ag(銀)、Bi(ビスマス)も DFTB で扱えるように、原子間相互作用パラメータを拡張して欲しい。(東京工業大学理学部物理学科 平山博之教授)
- DFTB で STM をシミュレーションする際、コンスタントハイト・モード(探針高さ一定モード)だけでなく、コンスタントカレント・モード(トンネル電流一定モード)にも対応して欲しい。(東北大学理学研究科物理学専攻 須藤彰三教授)

・ 出願特許

新たに出願された特許はない。

・ 発表論文

(神戸大学 理学研究科化学専攻)

[1] Rina Nishioka, Takumi Hiasa, Kenjiro Kimura, and Hiroshi Onishi, “Specific Hydration on p-Nitroaniline Crystal Studied by Atomic Force Microscopy”, *Journal of Physical Chemistry C*, 2013, **117** (6), pp. 2939-2943.

(金沢大学 理工研究域数物科学系生物物理学研究室)

[2] T. Uchihashi, R. Iino, T. Ando, and H. Noji, “High-speed atomic force microscopy reveals rotary catalysis of rotorless F_1 -ATPase”, *Science* **333**, pp. 755-758 (2011).

[3] H. Yamashita, A. Taoka, T. Uchihashi, T. Asano, T. Ando, and Y. Fukumori, “Single molecule imaging on living bacterial cell surface by high-speed AFM”, *Journal of Molecular Biology* **422**(2), pp. 300-309 (2012).

[4] K. Igarashi, T. Uchihashi, T. Uchiyama, H. Sugimoto, M. Wada, K. Suzuki, S. Sakuda, T. Ando, T. Watanabe, and M. Samejima, “Two-way traffic of glycoside hydrolase family 18 processive chitinases on crystalline chitin”, *Nature Communications* **5**, Article Number 3975 (2014).

[5] T. Ando, T. Uchihashi, and S. Scheuring, “Filming Biomolecular Processes by High-Speed Atomic Force Microscopy”, *Chemical Reviews* **114**(6), pp. 3120-3188 (2014).

[6]内橋貴之、飯野亮太、安藤敏夫、野地博行、「高速 AFM による F_1 -ATPase 分子回転の直接可視化」、*生化学* **86**(2), pp. 127-136 (2014).

(浜松医科大学 解剖学講座細胞生物学分野)

[7] H. Asakawa, K. Ikegami, M. Setou, N. Watanabe, M. Tsukada, and T. Fukuma, “Submolecular-Scale Imaging of α -Helices and C-Terminal Domains of Tubulins by Frequency Modulation Atomic Force Microscopy in Liquid”, *Biophysical Journal* **101**(5), 1270-1276 (2011).

(京都大学 工学研究科電子工学専攻)

[8] S. Ido, K. Kimura, N. Oyabu, K. Kobayashi, M. Tsukada, K. Matsushige, and H. Yamada, “Beyond the Helix Pitch: Direct Visualization of Native DNA in Aqueous Solution”, *ACS Nano* **7**(2), 1817-1822 (2013).

・ その他特記事項

特になし