

走査型プローブ顕微鏡(SPM)

シミュレータ開発

世界標準を目指して

Advanced Algorithm & Systems

代表者 柿沼良輔

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)「開発成果の活用・普及促進」

JST東京本部別館 2012.9.24

1. 開放(共用)しようとするプロトタイプ機の独創性・新規性

SPMシミュレータは、以下の三つの機能を**同一のプラットフォーム上**で実現する、世界初の商用ソフトウェアである

- **理論的計算シミュレータ機能**

密度汎関数法に基づく強結合法(**第一原理計算**)の採用

↔競合他社製品(Nt_STM等)の多くは**半経験的現象論**に留まる

- **実験画像データの3D処理機能**

世界主要STM装置メーカーのデータ出力形式を**直接読み込み可能**
データ画像の傾斜補正機能、探針先端形状の推定機能、グラフィックの強化、etc

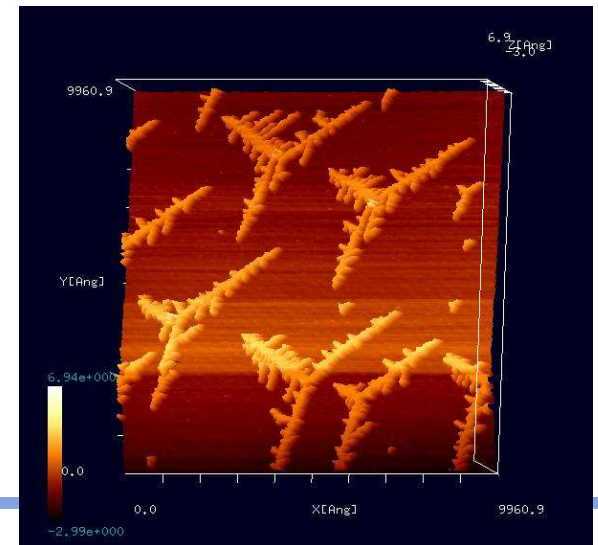
- **理論的シミュレーション結果と**

実験画像データの比較機能

理論・実験の二つの画像データを
並べて比較

ユーザー自身の目でモデル、

パラメータの妥当性を確認可能



[東京大学生産技術研究所 福谷研究室提供]

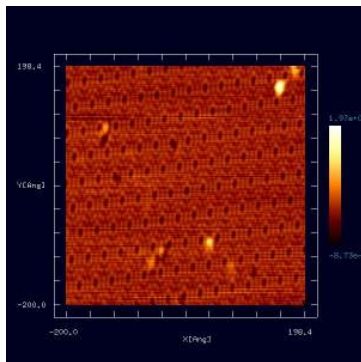
(Ir結晶表面上にAuを蒸着、アニーリングしてフラクタル島状構造を自己形成させたもの)

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

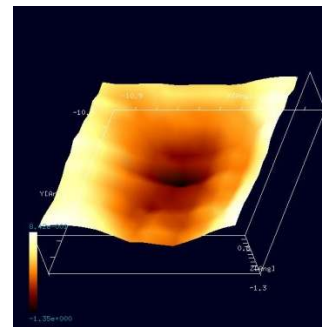
2. プロトタイプ機を開放(共用)する際の課題・問題点とその解決策について

SPMシミュレータを**世界標準ソフトウェア**に成長させるため、以下の三つのポイントに絞って、開発リソースを集中する

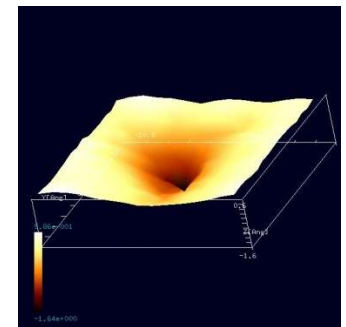
- **シミュレーション技術の更なる深化・高度化**
探針-試料形状の自動推定機能の強化(**逆問題へのアプローチ**)
粘弾性試料と探針との接触力学シミュレーション(バイオ関連)
- **理論・実験を同時にカバーするソフトとしての地位確立**
SPM技術に関する**理論家・実験家の双方が満足するソフトウェア**
➡ このコンセプト自体が新しいことを強調する
- **非専門家にも容易に使いこなせるGUIの開発**
探針・試料の、元素レベルからの**モデリング機能**の充実
より多くの種類の元素パラメータの**データベース化**



複数の探針形状が
推定可能
どれが最適解か?



or



3. 開放(共用)されたプロトタイプ機の想定される利用者・利用ニーズについて

SPM装置の利用者の多くがSPMシミュレータの利用者となる

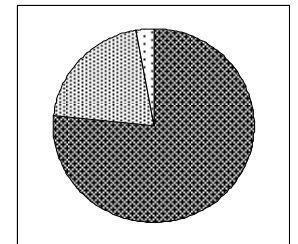
● 昨年6月からの無償配布実績

国内600ソルバー(約200件)配布

このうち10%が利用者になるとするなら約20件
ユーザーはもっというはず

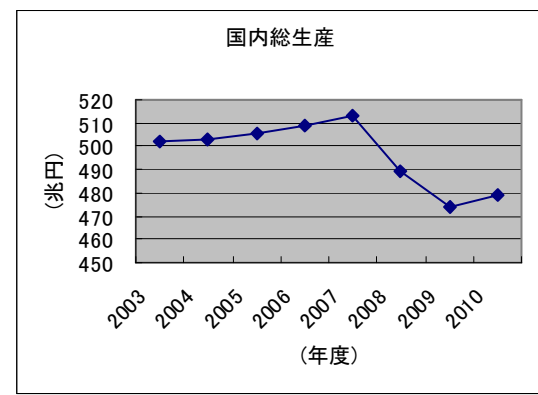
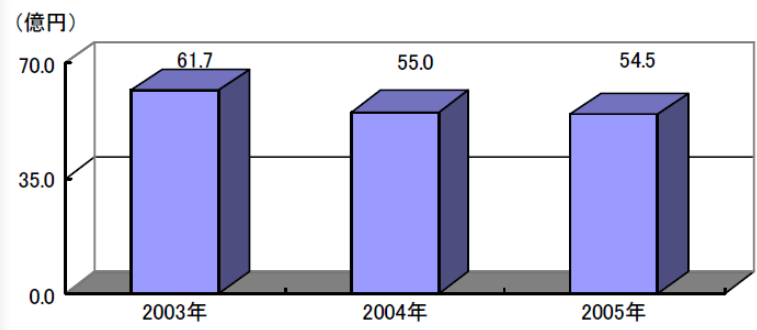
配布先内訳

研究者	142
メーカー	38
ユーザー	5



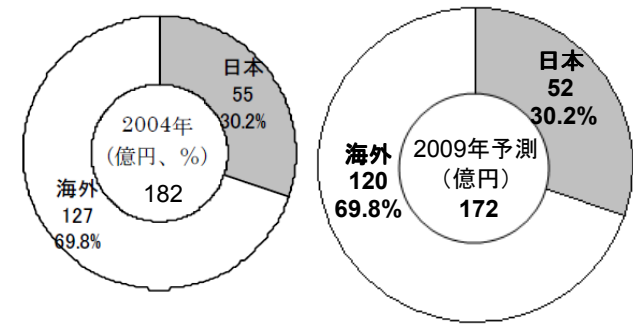
将来的には高価なSPM装置を購入できない利用者によるSPMシミュレータの利用が拡大すると見込める

SPM装置の市場規模



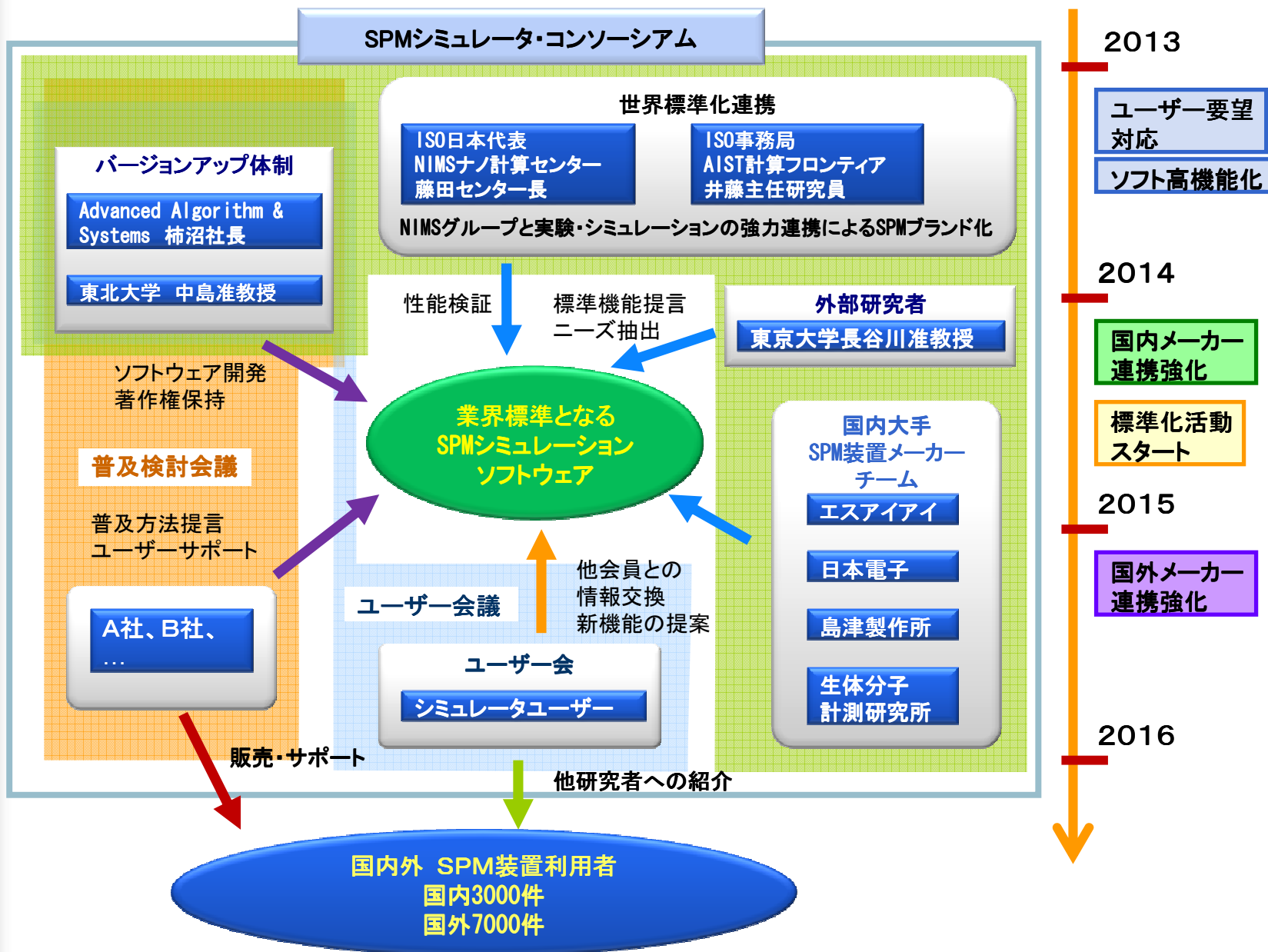
国内外SPM装置利用者想定

国内 3000 件
海外 7000 件



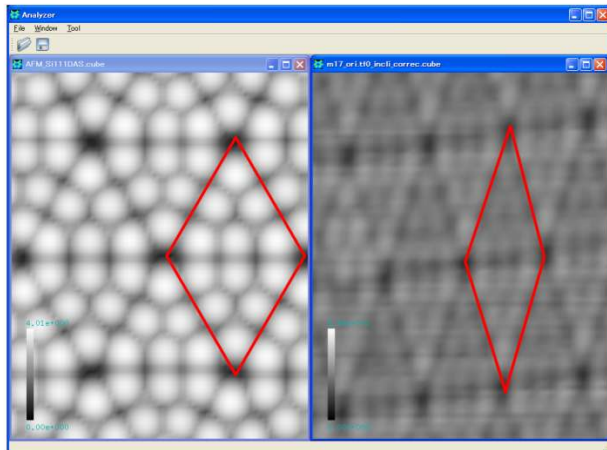
GDP比率から2009年の規模を予測

4. 開放(共用)スケジュール・体制・予算について

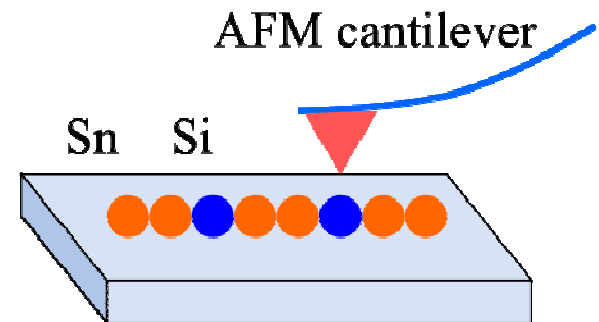


5. プロトタイプ機の開放(共用)による波及効果について

- メーカーの枠を超えたSPM実験データの統一的処理
異なるメーカーのSPM実験装置の出力データ、および、シミュレーション結果を、同一のプラットフォーム上で比較・加工処理可能
➡ 原子・分子の(XYZ)位置座標をテキストデータとして出力
- バイオ・薬学・化学触媒関連分野の研究者の参入を促す
粘弾性を持つ(生体)試料に対する接触力学解析
触媒金属(Pt, Ru等)に対して第一原理計算を適用
➡ 当該分野は、今後、産業上の大きな発展・投資が見込める
- 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
➡ 原子操作: 原子・分子を寄せ集めて、ナノ構造体を組み立てる



シリコン表面AFM観察に関するシミュレーション画像(左)と実験画像(右)
(実験画像提供: 東京大学 生産技術研究所 福谷研究室)



AFMによる、原子の移動、配置、ナノ構造の組み立て

6. 知的財産の状況について

SPMシミュレータでは、以下の二つの特許化された技術が使われている

- 特許公開2008-076247(平成20.4.3):特許番号4866695(平成23.11.18)
探針形状データと、試料の原子配列データを元に、幾何学的な計算に従って、AFM画像データを高速シミュレーションする方法
SPMシミュレータGeoAFMモジュールに採用されている
- 特許公開2009-109235(平成21.5.21)
液体中でAFMによって試料を観察する際の、弾性体であるカンチレバーのたわむ様子等を、シミュレーションする方法(流体と弾性体の相互作用を、力学的な方程式に従い、数値計算する)
SPMシミュレータLiqAFMモジュールに採用されている

将来的には、以下の技術要素の特許化したい考えである

- 粘弾性のある(生体)試料と、AFM探針との相互作用を、接触力学によりシミュレーションする方法
バイオ・薬学・医学関連分野の需要に応える技術
- 理論的シミュレーション画像データと、SPM実験画像データを比較し、物性値パラメータ推定、理論モデルの妥当性判定を行うアルゴリズム
画像処理に関連した技術