

# 理論と実験の融合: 走査プローブ顕微鏡シミュレータの開発

Development of Scanning Probe Microscope simulator: Towards integration of theory and experiment

走査プローブ顕微鏡シミュレータ

Scanning Probe Microscope simulator

問い合わせ先

柿沼 良輔

所属・役職

Advanced Algorithm & Systems 代表取締役

住所 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 ISビル 7F

TEL 03-3447-5501

E-mail rkakinuma@aas-ri.co.jp

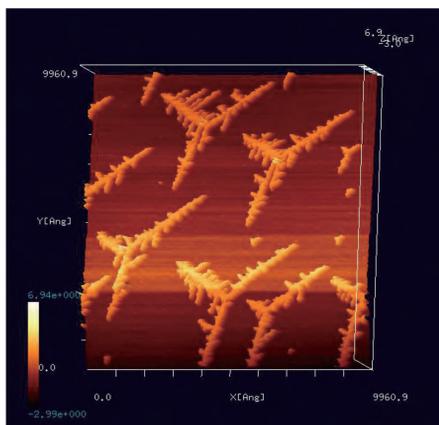
## 開発目的

### ➤ 走査プローブ顕微鏡シミュレータとは?

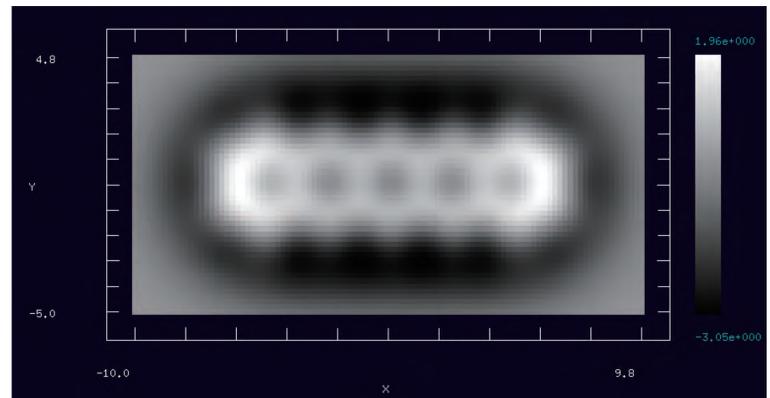
- あらゆる走査プローブ顕微鏡の実験を、数値計算シミュレーションで再現
- 計算手法は、連続体力学、流体力学、分子動力学、密度汎関数法
- SPM実験データの画像処理機能も充実

### ➤ ニーズ

表面科学(物理・化学)からバイオ関連まで、幅広いユーザー層がターゲット金属・半導体表面分析から、化学触媒反応、DNA等の生体試料観察まで、幅広いニーズに対応将来的には、様々なナノスケール製品の生産現場での、活用に期待



東京大学生産技術研究所  
福谷研究室提供  
(fractal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. Fu-  
kutanji, J. Phys.: Condens. Matter 21  
(2009) 474210.



ペンタセンの周波数シフト像計算例

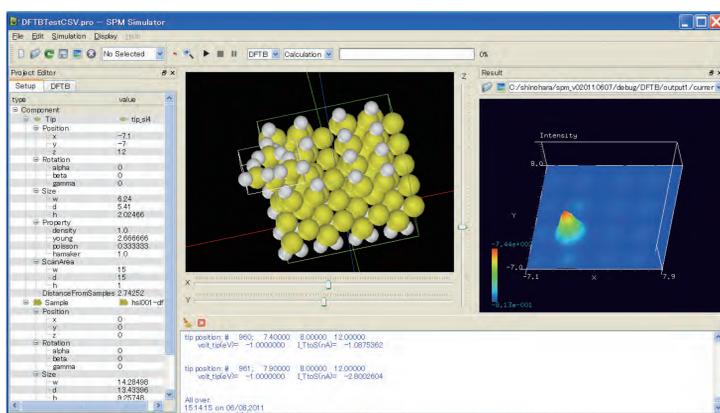
## 装置・技術の特徴

### ➤ 実験家でも手軽に扱えるシミュレータの実現

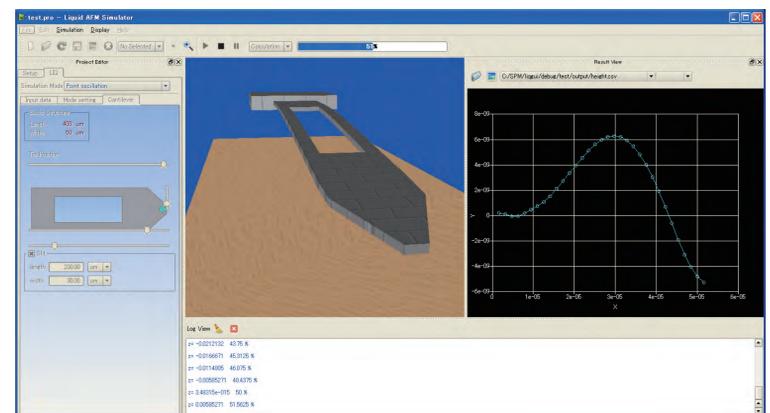
- 高度に洗練されたGUIにより、実験が専門の研究者であっても、あらゆる走査型プローブ顕微鏡のシミュレーションが実行可能
- 初心者にもやさしい補助機能

### ➤ 従来技術との違い

- SPM実験画像データと、シミュレーション計算結果データを、同一のプラットフォーム上で処理できるのは、世界的に見ても、本ソフトウェアだけである
- 液体中のAFMシミュレーション等、高分子・バイオ関連ユーザーにも配慮している



GUIによる操作画面の例



液体中でのAFMカンチレバーのシミュレーション実行画面

## 製品化・実用化への展望

### ➤ 製品化・実用化への課題

- 表面物性を専門とする物理・化学の分野だけでなく、高分子・有機化学、バイオ、医療分野の研究者へと、ユーザーの裾野を広げる
- ユーザー間の意見交換の場を、メーリングリスト、ブログ等の形で実現し、常にユーザーの生の要望の声を参考にして、製品へのフィードバックを行う体制作り
- 粘弾性試料のAFMシミュレーション等、バイオ・医療分野の機能を充実する

### ➤ 製品化・実用化の見込み

- ソフトウェア製品のプロトタイプは完成しており、トライアルユーザーに無料提供を行っている
- 現在、地道なバグ修正、機能拡張作業を続けることにより、製品としての完成度を上げている段階である
- 製品化・実用化の見込みは極めて高い。それよりも、ユーザーの裾野を広げることが、現時点での急務の課題である。