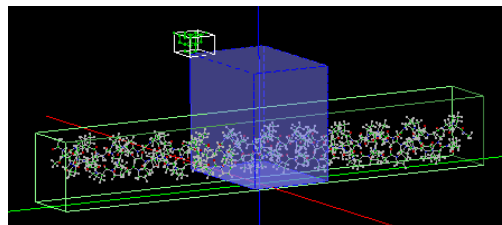


分子原子ナノ材料AFM像シミュレータ
シミュレーション例 - 1
(カー定モード)

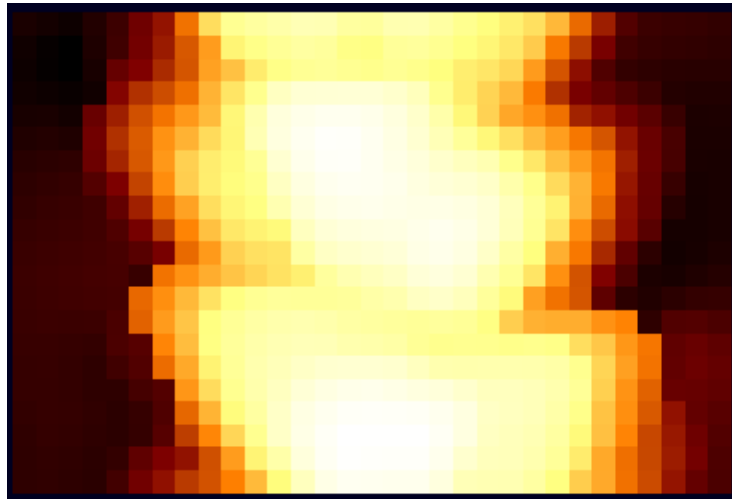


	設定内容	操作
1	Protein Data Bankからデータファイルを入力する	PDBj(http://www.pdbj.org/index.j.html)にアクセスして、PDB ID "1clg"で検索し、ファイルをダウンロードする
2	拡張子をpdbに変更する	
	OpenBABELを起動する	
3	入力ファイルの形式を指定する	"INPUT FORMAT"から"pdb -- Protein Data Bank format"を選択する。
4	上記でダウンロードしたファイルを指定する	
5	出力ファイルの形式を指定する	"OUTPUT FORMAT"から"txyz -- Tinker MM2 format"を選択する
6	出力ファイルの出力場所と名前を指定する	
7	水素を加える	"Add hydrogens"にチェックを入れる
8	ファイルの変換を開始する	"CONVERT"ボタンをクリックする
	SPM Simulatorを起動する	
9	プロジェクトファイルを作成する。	ツールバー[File] - [New]をクリック "Project name"の欄に適切なプロジェクトファイル名を入力し、"OK"ボタンをクリック
10	探針モデルを選択する	Project Editorの"Component"を右クリックして[Add Tip] - [Database]を選択し、"Tip6.xyz"を選択する
11	試料モデルを選択する	Project Editorの"Component"を右クリックして[Add Sample] - [File]を選択し、作成したファイルを選択する(※1)
12	探針の初期位置を(-15,-10,30)に設定する	Project Editorの"Component" - "Tip" - "Position"の設定項目において、 "x"を[-15]、 "y"を[-10]、 "z"を[30] に設定する
13	探針を動かす範囲を(30, 20, 28) Angに設定する	Project Editorの"Component" - "Tip" - "ScanArea"の設定項目において、 "w"を[30]、 "d"を[20]、 "h"を[28] に設定する
14	構造最適化AFM像シミュレータ(CG)の入力パラメータを設定する	シミュレータ選択ボックスから[CG]、[Calculation]を選択する。
15	スキャンモードをカー定モードに設定する	Project Editorの"Tip_Control" - "scanmode"を[ConstForce]に設定する(※2)
16	探針移動距離を1.0 Angに設定する	Project Editorの"Tip_Control" - "delta_xy"を[1.0]に設定する
17	ForceConst値を0.05に設定する	Project Editorの"Tip_Control" - "ForceConst"を[0.05]に設定する
18	カットオフを設定する	Project Editorの"ForceField" - "nonElectroStatic"を[6-exp_LJ_withCutoff]に設定する
19	入力内容を保存する	ツールバーの[File] - [Save]をクリック
20	シミュレーションを実行する	ツールバーの[Simulation] - [Start]をクリック
21	シミュレーションの結果を表示する	ツールバーの[Display] - [Result View]をクリック ボックスから[tipz.csv]を選択する

※1 作成された分子構造ファイルはインストールフォルダ内の、[data¥Sample¥Mol¥CGMDsample¥1clg.txyz]に用意しています。例えばインストール先が[C:¥Program Files¥SpmSimurator¥]なら、[C:¥Program Files¥SpmSimurator¥data¥Sample¥Mol¥CGMDsample¥1clg.txyz]です。

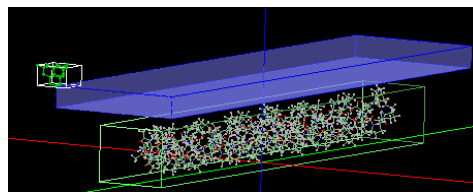
※2 各スキャンモードで設定が必要なパラメータについては、リファレンスマニュアルp.19図1をご参照ください。

【結果】



本結果は、サンプルプロジェクト(SampleProject¥CG¥collagen_constF¥collagen_constF.pro)で参照することができます。

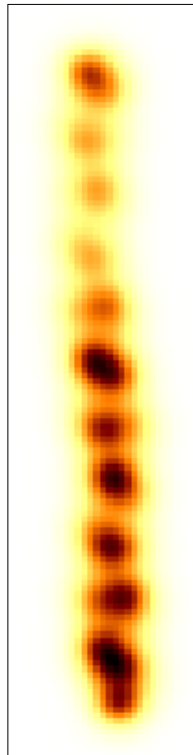
分子原子ナノ材料AFM像シミュレータ
シミュレーション例 - 2
(ノンコンタクトモード)



	設定内容	操作
1	Protein Data Bankからデータファイルを入力する	PDBj(http://www.pdbj.org/index.j.html)にアクセスして、PDB ID "1clg" で検索し、ファイルをダウンロードする
2	拡張子をpdbに変更する	
	OpenBABELを起動する	
3	入力ファイルの形式を指定する	"INPUT FORMAT" から "pdb -- Protein Data Bank format" を選択する。
4	上記でダウンロードしたファイルを指定する	
5	出力ファイルの形式を指定する	"OUTPUT FORMAT" から "txyz -- Tinker MM2 format" を選択する
6	出力ファイルの出力場所と名前を指定する	
7	水素を加える	"Add hydrogens" にチェックを入れる
8	ファイルの変換を開始する	"CONVERT" ボタンをクリックする
	SPM Simulatorを起動する	
9	プロジェクトファイルを作成する。	ツールバー[File] - [New]をクリック "Project name" の欄に適切なプロジェクトファイル名を入力し、"OK" ボタンをクリック
10	探針モデルを選択する	Project Editorの"Component"を右クリックして[Add Tip] - [Database]を選択し、"Tip6.xyz"を選択する
11	試料モデルを選択する	Project Editorの"Component"を右クリックして[Add Sample] - [File]を選択し、作成したファイルを選択する(※1)
12	探針の初期位置を(-15,-65,22)に設定する	Project Editorの"Component" - "Tip" - "Position" の設定項目において、 "x"を[-15]、 "y"を[-65]、 "z"を[22] に設定する
13	探針を動かす範囲を(30, 130, 5) Angに設定する	Project Editorの"Component" - "Tip" - "ScanArea" の設定項目において、 "w"を[30]、 "d"を[130]、 "h"を[5] に設定する
14	分子動力学AFM像シミュレータ(MD)の入力パラメータを設定する	シミュレータ選択ボックスから[MD]、[Calculation]を選択する。 Project Editorの[MD]タブを選択する
15	スキャンモードをノンコンタクトモードに設定する	Project Editorの"Tip_Control" - "scanmode"を[NC_ConstZ]に設定する(※2)
16	探針移動距離を1.0 Angに設定する	Project Editorの"Tip_Control" - "delta_x", "delta_y"を[1.0]に設定する
17	ノンコンタクトモードのパラメータを設定する	Project Editorの"Tip_Control" - "NC_Mode Setting" - "ThetaStepNumber"を[1], "TipZanplitude"を[10]に設定する(※3)
18	ステップ数を1に設定する	Project Editorの"MD_Setting" - "StepNumber"を[1]に設定する
19	力場計算の設定をする	Project Editorの"ForceField_Parameter" - "Safety_mode"を[fixMolecule]に設定する
20	入力内容を保存する	ツールバーの[File] - [Save]をクリック
21	シミュレーションを実行する	ツールバーの[Simulation] - [Start]をクリック
22	シミュレーションの結果を表示する	ツールバーの[Display] - [Result View]をクリック ボックスから[FS.csv]を選択する

- ※1 作成された分子構造ファイルはインストールフォルダ内の、[data¥Sample¥Mol¥CGMDsample¥1clg.xyz]に用意しています。例えばインストール先が[C:¥Program Files¥SpmSimurator¥]なら、[C:¥Program Files¥SpmSimurator¥data¥Sample¥Mol¥CGMDsample¥1clg.xyz]です。
- ※2 各スキャンモードで設定が必要なパラメータについては、リファレンスマニュアルp.24図1をご参照ください。
- ※3 ノンコンタクトモードの設定パラメータについての意味については、リファレンスマニュアルp.25図2をご参照ください。

【結果】



本結果は、サンプルプロジェクト(SampleProject¥MD¥collagen_freqShift¥collagen_freqShift.pro)で参照することができます。