

産官学SPMユーザ、セミナー参加者各位様へお願い

各位の属する市場分野で必要とされる、代表的計算例を用意。上より「無機・金属」「有機・バイオ」
https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_Simulator_Seminar_sample_Inorganic_Organic_Bio.htm
https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_Simulator_Seminar_sample_Organic_Bio.htm

各位が使用法習得したい構成ソルバ名称 又は 統合型Standard型、Professional型かを指定頂く

▼ソルバは3ヶ月程度、統合型は6ヶ月程度、無償供与習得機会、ご提供させていただきます

▲SPMシミュレータ・活用法 お問い合わせ・購入検討 申込 ご相談窓口

WEBセミナー申し込み窓口 spm-simulator-howto@aes-ri.co.jp

・https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_Simulator_purchase_process_ver2.pdf

・https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_Simulator_User_Support_Manual_v03s_171029.pdf

初心者の方でも、気軽にシミュレーションできるように、約600種類の計算事例を集めました。

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/spm_case_examples.pdf

SPMシミュレータ WEBセミナー

株式会社アドバンスアルゴリズム&システムズ
販売代理店契約締結パートナー様

「実測—計算」画像比較型[密度汎関数法に基づく強結合法(第一原理計算)]SPMシミュレータ活用法/運用法の修得

以下領域の方々, ご参加お待ちしております

- a. セミナー参加者SPM無償供与版使用実技修得目指す方々
- b. 平成23年無償供与旧版からVersion Up版の使用実技修得目指す方々
- c. バイオ関連、高分子、有機半導体、無機・有機材料、半導体関連、表面科学分野の方々
- d. 接触問題、ソフトマター、粘弾性系、水皮膜効果、液中計測など、現実的なタッピングモードのシミュレーション法、関心お持ちの方々
- e. DFTB使用元素 **69種** 活用方法を習得頂けますと、有機化合物系、有機半導体系、無機半導体系、金属系等、の材料・試料のSTM、STS、AFM、KPFMシミュレーションが、DFTB計算時間[1日]程度で実行可能となり、SPM計算課題お持ちの、使用価値が飛躍的拡大したSPMシミュレータ活用可能領域の方々
SPMシミュレータ旧version購入済みの方々には新version版を無償交換し、1年後からメンテ料(ライセンス)/年のみでお使い頂けます。
- f. SPMシミュレータ普及にご賛同頂ける、ご自身SPM計算テーマ結果をAASのHP掲載(1回/年)承知の方々、にはSPMシミュレータ掲載年・無償供与、ご提案
- g. ソフト・バイオマテリアルに対してAFMシミュレーション解析を希望される方々

SPMシミュレータの購入契約申し込み形態として、以下の3通りが想定されます。

(1)SPM有識者向け 購入契約申込ご案内

SPMシミュレータWebセミナー・SPMガイドブックを活用された後、SPMシミュレータを購入前に、相互選択、計算テーマの検証機会(無償供与ルール適用3ヶ月)をご提供いたします。

両者評価後、所有権が移転する契約方式です。質問メール(spm-simulator-howto@aes-ri.co.jp)でその旨をお申し越し下さい。

https://www.aesri.jp/pub/spm/pdf/SPM_exploit_future.pdf

https://www.aesri.jp/pub/spm/pdf/SPM_Simulator_purchase_process_ver2.pdf

https://www.aesri.jp/pub/spm/about_spm.html

https://www.aesri.jp/pub/spm/pdf/spm_howtouse.pdf

https://www.aesri.jp/pub/spm/pdf/SPM_Simulator_User_Support_Manual_v03s_171029.pdf

(2)SPM初心者向け 購入契約申込ご案内

SPMシミュレータWebセミナー・SPMガイドブックを活用しながら、使用者の喫緊の計算課題を代表的計算事例から選び、集中的演習実践指導(SPM技術サポート・コンサル)下で計算手法を体験し、習得後にSPMシミュレータを購入する契約です。

質問メール(spm-simulator-howto@aes-ri.co.jp)でその旨をお申し越し下さい。

https://www.aesri.jp/pub/spm/SPM_Simulator_Seminar_sample_Organic_Bio.htm

https://www.aesri.jp/pub/spm/SPM_Simulator_Seminar_sample_Inorganic_Organic_Bio.htm

以下の点にご留意ください。

SPMシミュレータの操作方法を習得されている期間内は、無償供与ルールが適用されます。

さらに、技術サポート・コンサルタントを有償でご案内申し上げます。

(3)上記の、SPM有識者向け・SPM初心者向けの範囲に入らないお客様向け

お客様のご意見を伺い、特別措置として、上記二つの販売契約方法以外を取らせていただくことも可能です。

購入契約申し込みの条件を、お客様の事情に応じて、弾力的に運用することが可能です。

ユーザ様の意見を拝聴させて頂き、特別措置として、販売契約以外で、取引形態の弾力的運用をご案内しています。

質問メール(spm-simulator-howto@aes-ri.co.jp)でその旨をお申し越し下さい。

WEBセミナープログラム 実行条件ご提示

原子分子材料科学高等研究機構(WPI-AIMR)理学博士 塚田 捷 特任教授ご指導の下、
以下知見を基に開発致しました。

https://www.aasri.jp/pub/demo/application/SPM_PressRelease.pdf

・SPMの理論と汎用シミュレーション

<https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm16720101125.pdf>

・液中AFM及び接触過程の理論シミュレーション

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/AFM_theory_eng.pdf

・SPMシミュレータの現状と課題

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_Simulator_Simple_Introduction_2017Dec_V6.pdf

・DLVO理論による液中AFMシミュレータ

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/DLVO_national_project_20171122a.pdf

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_progress_report_meeting20180224_document.pdf

WEBセミナープログラム 実行条件ご提示

[日本発][世界初SPM「実験-計算」画像比較版・粘弾性接触解析適用]型SPMシミュレータ の適用

研究/業務・テーマ領域区分単位・用途区分別 市場へ[日本発][世界初SPM「実験-計算」画像比較版・粘弾性接触解析適用]型SPMシミュレータ 適用となり、産 官 学SPMユーザ様は、SPM有識者 SPM初心者に関らず、自身が属される、市場領域、認識がAdvanced Algorithm & Systemsと共有される事が必須になります。

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf

- ・SPMユーザ様各位は、自身が属する市場を意味する、研究/業務・テーマ領域をクリック頂き、計算実績、計算可能範囲 用途区分を認識下さい。
- ・研究/業務・テーマ領域が自身が属する市場領域になるので、SPMシミュレーションAlgorithmが固定された、SPMシミュレーション体系が、「研究/業務・テーマ領域市場と 属するSPMユーザ様自身」の間で共有される。
- ・それ故、その共有の在り様は、SPMユーザ様自身のテーマ領域市場、国内・国外アドレス、研究論文テーマ、実験仕様 次元のメッシュで個人情報DBとコンピュータ比較可能になるので、必須情報マッチングが可能になり、SPMシミュレーションの情報インフラを産 官 学 SPMユーザ様と共有出来ている事になります。

研究/業務・テーマ領域区分 状況 & テーマ領域計算事例 クリック下さい、

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_simulator_application_examples.html

- ・PMユーザ様各位は、自身が属する市場を意味する、8個の、研究/業務・テーマ領域をクリック頂き、計算実績、計算可能範囲 用途区分を認識下さい。

WEBセミナープログラム 実行条件ご提示

- ・8個の、研究/業務・テーマ領域が、SPMユーザ、自身が属する市場領域になり、更には、Inorganic_Organic_Bio 分野と Organic_Bio 分野に大別され、SPMシミュレーションAlgorithmが固定された、SPMシミュレーション体系が、「研究/業務・テーマ領域市場」と属するSPMユーザ様自身」の間で共有される。
- ・それ故、その共有の在り様は、SPMユーザ様自身のテーマ領域市場、国内・国外アドレス、研究論文テーマ、実験仕様 次元のメッシュで個人情報DBとコンピュータ比較可能になるので、必須情報マッチングが可能になり、SPMシミュレーションの情報インフラを産官学SPMユーザ様と共有出来ている事になります。
- ・研究/業務・テーマ領域区分単位・用途区分別 市場へ[日本発][世界初SPM「実験-計算」画像比較版・粘弾性接触解析適用]型SPMシミュレータ 適用となると、産官学SPMユーザ様は Inorganic_Organic_Bio. 分野と Organic_Bio. 分野何れかに属する事になる。

これら、Inorganic_Organic_Bio. 分野と Organic_Bio.htm 分野に、[日本発][世界初SPM「実験-計算」画像比較版・粘弾性接触解析適用]型SPMシミュレータ と適用すれば、2分野に応じて、以下、代表的計算 事例、を定義する事が可能である。

SPMシミュレータ 有機・バイオ分野の代表的な計算例

https://www.aasri.jp/pub/spm/WebSeminar/SPM_Simulator_Seminar_sample_Inorganic_Organic_Bio.htm

SPMシミュレータ 無機・金属分野の代表的な計算例

https://www.aasri.jp/pub/spm/WebSeminar/SPM_Simulator_Seminar_sample_Organic_Bio.htm

WEBセミナープログラム 実行条件ご提示

有識者向け

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf

SPMシミュレータ用途区分計算事例

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_simulator_application_examples.html

初心者向け

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_ApplicationField_for_beginners.pdf

新規計算機能活用計算事例は、DB2種（各研究テーマ及び用途区分、市場分類計算事例 DB & ソルバ機能単位計算事例 DB）からご認識下さい。

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/pdf/SPM_ApplicationField_for_beginners.pdf

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/case_examples_20170223/spm_case_examples.pdf

計算事例 DB2種 を ソルバ単位・計算機能適用マニュアルを結び付ける
マニュアルリストと活用ガイダンス ご案内

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_movie.html

WEBセミナープログラム 実行条件ご提示

現在、SPMシミュレータは、ソルバーとしての性能を、抜本的に修正中です。
これにより、SPMシミュレータは、実験分野の研究者の皆様方に、より一層、ご利用しやすくなる予定です。

従来のSPMシミュレータでは、探針、試料の構造データを最初に用意し、これらの構造データの物理的な相互作用を計算して、SPM画像をシミュレーションする方式を採用していました。
しかし、これでは、研究者の方が実験で得られたSPM画像などの実験結果を、シミュレータの入力データとして利用することは出来ず、そのため、SPMシミュレータが手元にあっても、これを、実際の研究に、なかなか結び付けられない、という問題がありました。

そこで、弊社は、SPM実験画像データをはじめとする実験で得られた測定値を元にして、探針、試料の物理特性を求める、いわば、逆問題ソルバーの開発に注力しています。
これにより、例えば、SPM実験で得られた、周波数シフト値、位相シフト値から、最適な、試料のヤング率、表面張力等を推測することが可能となります。

従来のSPMシミュレータは、探針、試料のモデルを設定して、そこから、SPM画像を導出する、順問題に特化されたソルバーでした。
しかし、今後は、実験結果データから、試料の物理的特性を求める、逆問題ソルバーへと、コンセプトを変えつつあります。

新しいコンセプトとして逆問題解法を備えた、SPMシミュレータの導入を、ぜひともご検討ください。

WEBセミナープログラム 実行条件ご提示

SPMシミュレータ計算事例

http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/case_examples_20170223/spm_case_examples.pdf

新規計算機能活用計算事例は、DB2種（各研究テーマ及び用途区分、市場分類計算事例 DB & ソルバ機能単位計算事例 DB）からご認識下さい。

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/pdf/SPM_ApplicationField_for_beginners.pdf

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/case_examples_20170223/spm_case_examples.pdf

計算事例 DB2種 をソルバ単位・計算機能適用マニュアルを結び付ける
マニュアルリストと活用ガイダンス ご案内

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_movie.html

WEBセミナープログラム 実行条件ご提示

[SPM初心者ユーザ補助機能] は下段URL で示されます。

- ・SPMシミュレータ操作ナビシステムの活用俯瞰、

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm_howtouse.pdf

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

- ・初心者に、必要マニュアルの使用法を指示します。

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/DFTB_BAND_PHASE0.pdf

<https://www.aasri.jp/pub/spm/mail/mail20161102.html>

https://www.aasri.jp/pub/spm/mail/mail20170811_2.html

<https://www.aasri.jp/pub/spm/mail/mail20170228.html>

▼初心者に、必要マニュアルの使用法を指示します。

必要なら、AASからOJT的に技術サポート/コンサルを 無償 有償 で提供をうけられます

SPMワールド

- ・[日本発/世界初]ソフト・バイオマテリアルAFMシミュレータ組込版・「実験-計算」画像比較型SPMシミュレーション
- ・粘弾性接触解析を要するバイオ・ソフトマテリアル分野へ新規拡大
- ・DFTB使用元素69種へ拡大し、有機化合物系、有機半導体系、無機半導体系、金属系新規市場拡大
- ・SPMとPHASE/Oの独立的連携運用で両者の超効果活用及び連携計算成果

SPMシミュレータは、理論的シミュレーション結果と実験画像データの比較を同一のプラットフォーム上で実現する、世界初の新機軸商用ソフトウェア、SPMシミュレーション市場構築が期待されます。人間は60兆個の細胞からなり、その細胞は20桁よりはやや少ないが、原子・分子が極めて秩序だった動きをする、統計的扱いが出来る総体としての細胞であり、高分子、タンパク質、バイオ・ソフト・マテリアルの分析を軸に、薬学・医療分野へのSPMシミュレータ適用が期待されます。

SPMワールド

[日本発/世界初]ソフト・バイオマテリアルAFMシミュレータ組込版・「実験- 計算」画像比較型
SPMシミュレーションのご提供 「■1 ■2」方針、ご承知頂けましたら誠に幸いです



■1 研究/業務・テーマ領域区分単位 用途区分別 定義市場に適用。Web セミナープログラム活用 購入前 無
料計算テーマ検証機会(3カ月)ご提供・両者評価後/所有権移転型、購入契約手法 ご案内



ご提供SPMシミュレーター・販売契約条件

●無料検証したい計算テーマを両者で契約前に確認共有化が条件

SPMシミュレーションWebセミナー産官学SPMユーザー様に計算方法習得頂きたい、研究テーマ市場領域対応
代表的計算事例 ご紹介

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_Simulator_Seminar_sample_Organic_Bio.htm

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_Simulator_Seminar_sample_Inorganic_Organic_Bio.htm

▲研究/業務・テーマ領域区分単位 用途区分別 市場

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf

▲SPMシミュレータ用途別機能(含む、計算事例)

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_simulator_application_examples.html

SPMワールド

●購入契約時に、契約担保金(買取価格10%入金)、及び無料計算テーマ検証期間(3カ月)・両者評価合意後、に買取価格残金支払条件/所有権移転、以後は新旧SPM交換公式 メンテ料支払(契約期間内)

■計算実行データの準備・用意、入力作業が不要になる、「初心者向けの参考計算検索ページ」、適用により、類似案件指定だけで、自身のPCに実行画面出力させる機能、引き続き 計算実行・モニタリング機能、換言すれば、産官学SPMユーザ様による、マニュアルの使用は事実上皆無となり、自動運転状態が実現され、手作業は不要となり、マニュアル/モニタリングリストと活用ガイダンスを見守るだけが、産官学SPMユーザ様に要請されます。

<https://www.aasri.jp/pub/spm/mail/mail20170228.html>

■ マニュアル/モニタリングリストと活用ガイダンス

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_movie.html

SPMワールド

■SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ操作ナビシステム

https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_assistant_top.htm

https://www.aasri.jp/pub/spm/about_spm_assistant_intro.html

SPM Simulator 情報交換プラットフォーム

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

SPMシミュレータ WEBセミナー 参加ご希望者は、HP-TOP画面、ご覧下さい

<https://www.aasri.jp/>



■2 新規に定義された研究テーマ領域への対応に於いて、研究又はビジネス取引上、代表的計算事例SPMシミュレーション手法の獲得・習得が、喫緊に要請される方々

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_Simulator_Seminar_sample_Organic_Bio.htm

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_Simulator_Seminar_sample_Inorganic_Organic_Bio.htm

には、[SPMシミュレーション Web セミナー](#) 集中的演習実践指導付き、へご参加下さい。

申し込みはこちらへ: spm-simulator-howto@aas-ri.co.jp

SPMワールド



基本・販促Info

[SPMシミュレーション Web セミナー](#)

<https://www.aasri.jp/>

SPM Simulator 情報交換プラットフォーム

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

SPM「計算科学ソフト/ITインフラ」配信 to SPMの販売施策

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM Simulator purchase process ver2.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_Simulator_purchase_process_ver2.pdf)

WEBセミナープログラム 実行条件ご提示

お問合せ・申し込み ご相談窓口 連携先

▲SPMシミュレーション連携先リンク

- ・東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 特任教授 理学博士 塚田 捷先生
[tsukada Masaru <tsukada@wpi-aimr.tohoku.ac.jp>](mailto:tsukada@wpi-aimr.tohoku.ac.jp)
- ・(国研)物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクニクス研究拠点 特命研究員
ナノ材料科学環境拠点 GREENコーディネータグリーン計算科学グループ GREENリーダー
東京理科大学 理学研究科 客員教授 理学博士 大野隆央先生
大野S3 [<OHNO.Takahisa@nims.go.jp>](mailto:OHNO.Takahisa@nims.go.jp)
奈良純 [<NARA.Jun@nims.go.jp>](mailto:NARA.Jun@nims.go.jp), 山崎隆浩 [<YAMASAKI.Takahiro@nims.go.jp>](mailto:YAMASAKI.Takahiro@nims.go.jp)
- ・元JAXA/(株)アジア宇宙環境研究機構
代表取締役社長 理学博士 小山孝一郎先生
小山 孝一郎 [<koh_ichiro@yahoo.co.jp>](mailto:koh_ichiro@yahoo.co.jp)

▲SPM購入手続き、お問合せ・購入申込 ご相談窓口

・メールでこちらまで: spm-simulator-howto@aas-ri.co.jp

▲SPMシミュレータ・活用法 お問合せ・購入検討 ご相談窓口

まずは双方にて協議開始し頂き、SPM仕様・購入価格を双方で評価頂き、購入契約是非合意を明確して頂き、その上で、SPMシミュレータ購入・手続きの順序となります

WEBセミナープログラム 実行条件ご提示

- 1) 完成度レベル、計算事例/コンテンツから確認頂けます。
- 2) 購入価格の年賦払い適用・入手し易い支払計画ご提案で、産官学SPMユーザー様に、入手し易いビジネス条件ご提示、ご承知頂ければ幸いです
- 3) SPM無償供与検証期間ご提供、SPM有識者 SPM初心者に関らず実施

・https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_Simulator_purchase_process_ver2.pdf

・https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm_howtouse.pdf

・https://www.aasri.jp/pub/spm/about_spm.html

・https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_Simulator_User_Support_Manual_v03s_171029.pdf

▲AAS 計算科学必須実績知見開示 ビジネスエリア ご案内

https://www.aasri.jp/pub/public/AAS_knowledge_info.html

https://www.aasri.jp/pub/top_private/area.html

SPM・計算科学必須開示

・<https://www.aasri.jp/> HP- TOP画面 [各種お申込] ご認識下さい。

・https://www.aasri.jp/pub/spm/about_spm.html

・https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm_howtouse.pdf

■SPMシミュレータ Web セミナー 参加者各位様

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/WebSeminar_Organic_Bio.pdf

▼ SPMシミュレータ Web セミナー 参加予約 受付 は以下に準じます。

メールでこちらまで: spm-simulator-howto@aes-ri.co.jp



SPMシミュレータ

理論と実験の融合: 走査プローブ顕微鏡シミュレータ

日本の大学研究室発 世界標準仕様

走査プローブ顕微鏡シミュレータとは？

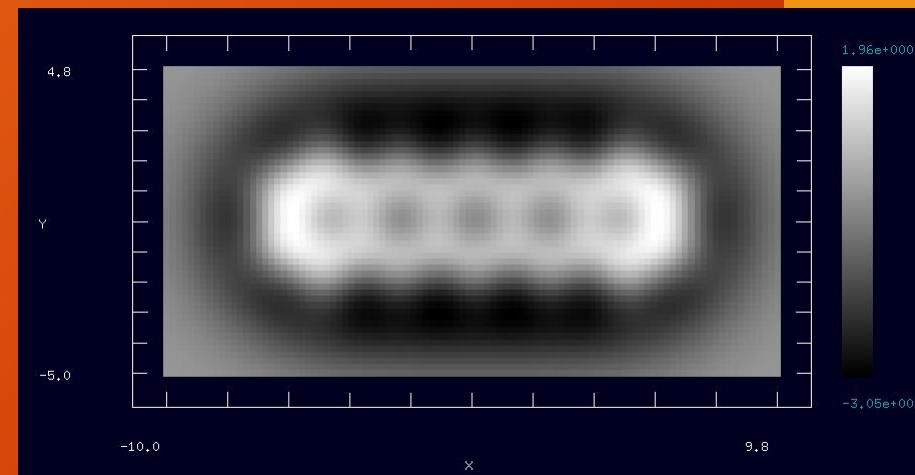
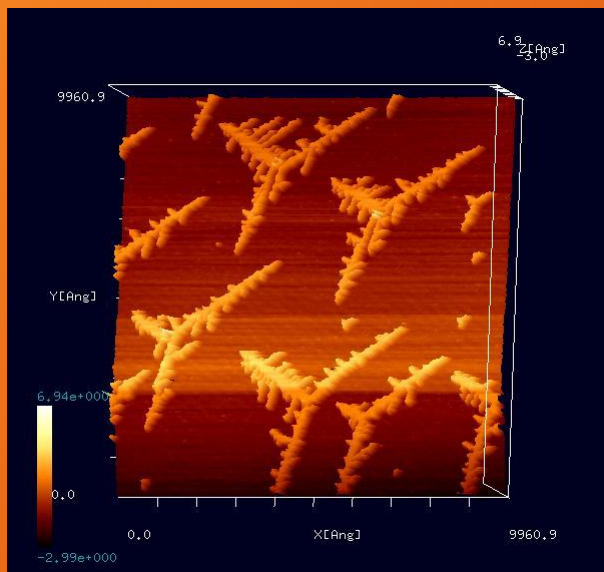
- 様々な走査プローブ顕微鏡の実験を、数値計算シミュレーションで再現
- 計算手法は、連続体力学、流体力学、分子動力学、密度汎関数法
- SPM実験データのデジタル画像処理機能も充実
- 実験データとシミュレーション結果の比較により、新しい知見の導出

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
- 連続弾性体モデルシミュレーション、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たソフトウェア構成
- 実験家ユーザーでも、手軽に数値計算シミュレーションが実行可能な動作環境
- 充実のGUI機能によるシンプルな操作性を実現し、高い生産性を保証

SPMワールド

- 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→23ページ参照
- 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→27ページ参照
- 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→28ページ参照



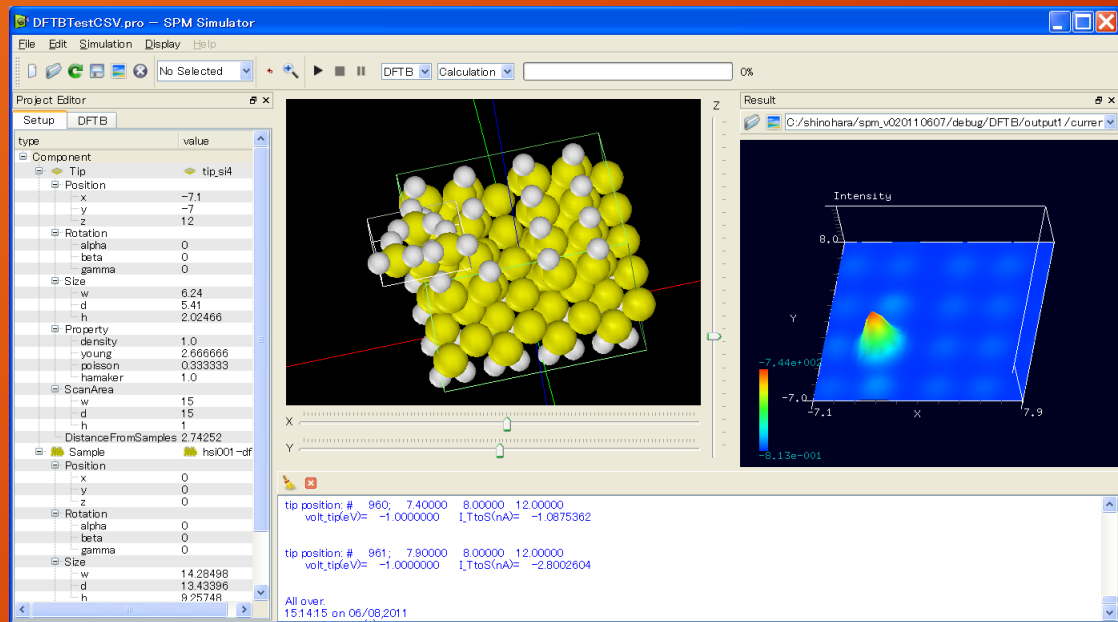
実験画像の効果的な表示

[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.]

構造最適化AFM像シミュレータによるペンタセンの周波数シフト像計算例

実験家でも手軽に扱えるシミュレータの実現

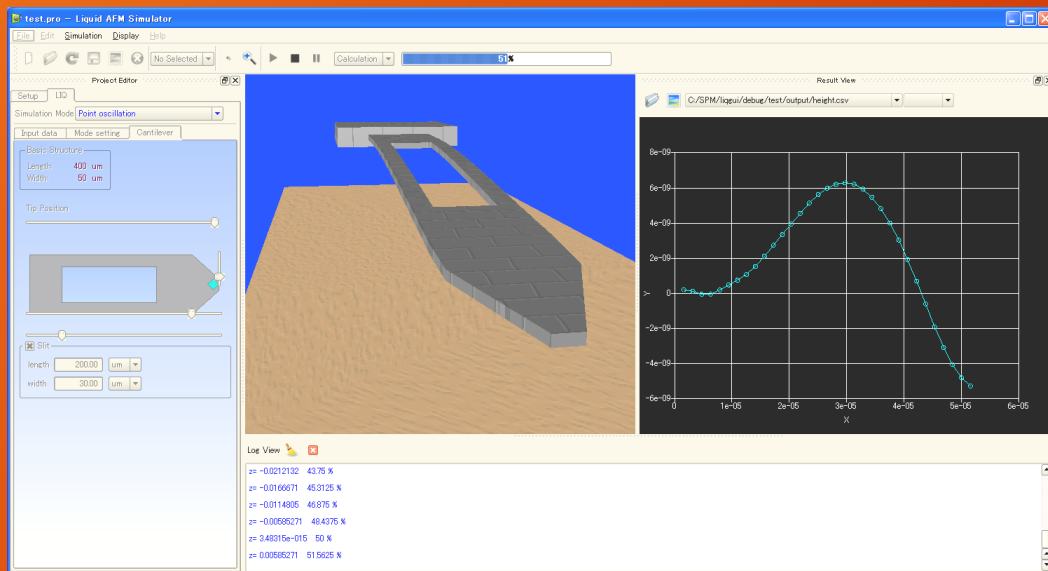
高度に洗練されたGUIにより、実験が専門の研究者であっても、様々な走査型プローブ顕微鏡のシミュレーションが実行可能



GUIによる操作画面の例



初心者にもやさしい補助機能



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

SPMシミュレータの構成

Analyzer

実験データ画像処理プロセッサ

探針形状推定機能

メーカー各社のSPM実験データの読み込み機能

実験データ画像とシミュレーション画像を、高度なデジタル処理・比較することにより、新しい知見を導出

GeoAFM

高速相互予測AFMシミュレータ

幾何学

ナノ構造デバイス
(生体)高分子化合物

数秒でシミュレーション結果が得られることにより、実験とリアルタイムに併用可能

FemAFM

連続弾性体AFMシミュレータ

古典論

ナノ構造デバイス
(生体)高分子化合物

高分子や生体試料をAFM観察することを想定して、粘弾性接触力学解析機能を実装
さらに、探針・試料を連続弾性体モデル化することによる、周波数シフト像シミュレーション機能も搭載

LiqAFM

液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ

古典論

(生体)高分子化合物

複雑な形状のカンチレバーにも対応した、液体中AFMシミュレーション機能を実装
粘弾性接触力学解析機能も搭載

CG

構造最適化AFM像シミュレータ

古典論

有機低分子・無機物質

周波数シフト像シミュレーション機能搭載

MD

分子動力学AFM像シミュレータ

古典論

有機低分子・無機物質

探針・試料間のフォースカーブ等の物理量を評価可能

DFTB

量子論的SPM像シミュレータ

量子論

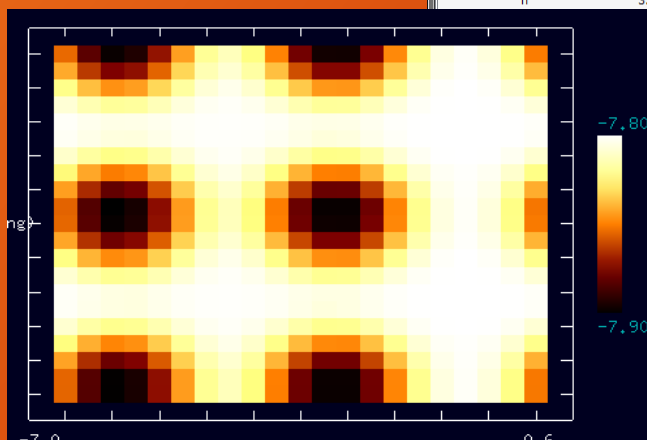
ミクロな原子・分子レベルでのAFM周波数シフト像
STMトンネル電流像・KPFM像

様々な種類の元素に対応した、DFTB法によるSTMシミュレーションを手軽に実現
市販されている密度汎関数法シミュレータとしては最もシンプル

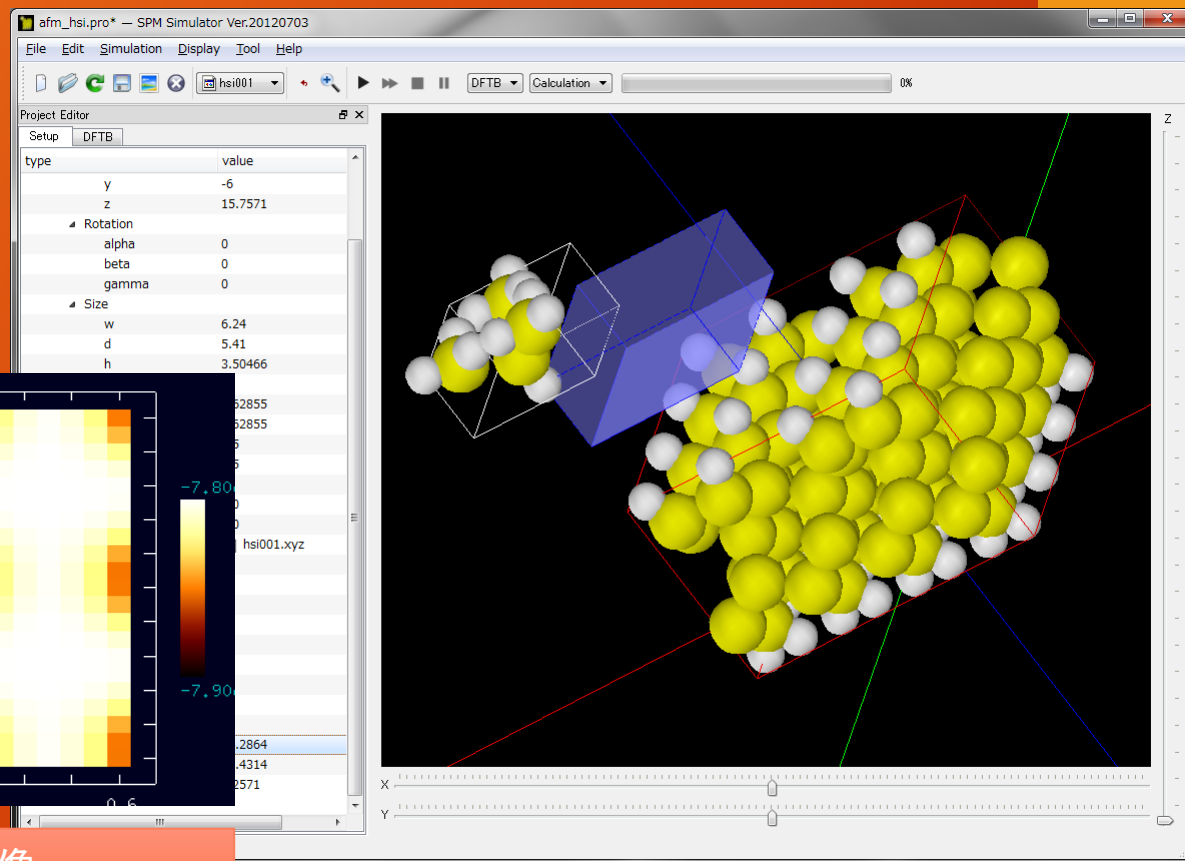
原子モデリングツール

ユーザーが求める半導体薄膜を、簡単にモデリング可能
シミュレーション計算の材料となる原子モデルを、ユーザー自身が自由に構成可能

DFTBによるAFM周波数シフト像のシミュレーション例：
水素終端されたシリコン表面を、
水素が吸着したシリコン探針で
スキャンしている様子



得られたAFM周波数シフト像：
水素原子が黒い点として現れている



SPMワールド

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

SPM実験画像をデジタル処理したい

→Analyzerで画像処理

[SPMシミュレータ操作ナビシステム説明ページ](#)

[Analyzerの各機能の説明ページ](#)

各機能のご紹介(各種データ、参考Webページへジャンプできます。参考Webページには、操作説明動画が含まれます。)

[探針形状推定・探針影響除去](#)

[画像処理\(フーリエ解析、Lanczos補間法による高解像度化、コントラスト調整\)](#)

生体高分子のAFM画像をシミュレートしたい

→FemAFMでシミュレーション

[SPMシミュレータ操作ナビシステム説明ページ](#)

[FemAFMの各機能の説明ページ](#)

各機能のご紹介(各種データ、参考Webページへジャンプできます。参考Webページには、操作説明動画が含まれます。)

[高分子のAFMシミュレーション\(ノンコンタクト・モード\)](#)

[高分子のAFM周波数シフト像シミュレーション](#)

[高分子の粘弾性接触解析](#)

液中環境下でのAFMをシミュレートしたい

→LiqAFMでシミュレーション

[SPMシミュレータ操作ナビシステム説明ページ](#)

[LiqAFMの各機能の説明ページ](#)

各機能のご紹介(各種データ、参考Webページへジャンプできます。参考Webページには、操作説明動画が含まれます。)

[カンチレバーの液中での振動解析](#)

[液中でのカンチレバー振動の共鳴周波数計算](#)

[液中での高分子の粘弾性接触解析](#)

短時間で巨大な分子のAFMをシミュレートしたい

→GeoAFMでシミュレーション

[SPMシミュレータ操作ナビシステム説明ページ](#)

[GeoAFMの各機能の説明ページ](#)

各機能のご紹介(各種データ、参考Webページへジャンプできます。参考Webページには、操作説明動画が含まれます。)

[探針・試料からAFM像計算](#)

[探針・AFM像から試料形状計算](#)

[試料・AFM像から探針形状計算](#)

Åオーダーの有機分子のAFMを古典論の範囲でシミュレートしたい

→CGでシミュレーション

[SPMシミュレータ操作ナビシステム説明ページ](#)

[CGの各機能の説明ページ](#)

各機能のご紹介(各種データ、参考Webページへジャンプできます。参考Webページには、操作説明動画が含まれます。)

[探針の高さを一定にして、力の2次元マップをシミュレーション](#)

[探針にかかる力を一定にしてAFM像シミュレーション](#)

[周波数シフトAFM像シミュレーション](#)

[フォース・カーブをシミュレーション](#)

[力最小モードでのAFM像シミュレーション](#)

液中環境下での、Åオーダーの有機分子のAFMを古典論の範囲でシミュレートしたい

→CG-RISMでシミュレーション

[SPMシミュレータ操作ナビシステム説明ページ](#)

[CG-RISMの各機能の説明ページ](#)

各機能のご紹介(各種データ、参考Webページへジャンプできます。参考Webページには、操作説明動画が含まれます。)

[探針の高さを一定にして、力の2次元マップをシミュレーション](#)

[フォース・カーブをシミュレーション](#)

[周波数シフトAFM像シミュレーション](#)

Åオーダーの有機分子のAFMを分子動力学に基づいてシミュレートしたい
→MDでシミュレーション

[SPMシミュレータ操作ナビシステム説明ページ](#)

[MDの各機能の説明ページ](#)

各機能のご紹介(各種データ、参考Webページへジャンプできます。参考Webページには、
操作説明動画が含まれます。)

[フォース・カーブをシミュレーション](#)

[探針の高さを一定にして、力の2次元マップをシミュレーション](#)

[周波数シフトAFM像シミュレーション](#)

[分子構造の緩和をシミュレーション](#)

SPMワールド

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

Åオーダーの無機化合物・半導体・金属のSTM、AFM、KPFMを、量子力学に基づいてシミュレートしたい

→DFTBでシミュレーション

[SPMシミュレータ操作ナビシステム説明ページ](#)

[DFTBの各機能の説明ページ](#)

各機能のご紹介(各種データ、参考Webページへジャンプできます。参考Webページには、操作説明動画が含まれます。)

[周波数シフトAFM像シミュレーション](#)

[探針の高さ一定での、トンネル電流像シミュレーション](#)

[トンネル電流一定での、STMトポグラフィ像シミュレーション](#)

[ケルビンプローブ顕微鏡像シミュレーション](#)

無機化合物・半導体・金属・カーボンナノチューブの結晶構造データを作成したい

→SetModelで構造データ作成

[SPMシミュレータ操作ナビシステム説明ページ](#)

[SetModelの各機能の説明ページ](#)

SPMワールド

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

SPMシミュレータの産業分野別のご利用方法が、以下のWebページで紹介されています

化学メーカー・バイオ関連メーカー・食品メーカー・医療関連メーカー(化粧品・洗剤・薬品など)

SPMシミュレータによる高分子の単分子観察

[資料](#)

[事例集](#)

SPMシミュレータによる液中環境下での高分子の観察

[資料](#)

[事例集](#)

SPMシミュレータによるバイオ関連試料の観察

[資料](#)

[事例集](#)



繊維メーカー

SPMシミュレータによる繊維状高分子の観察

資料

事例集



半導体メーカー・デバイス産業・金属メーカー(有機・無機半導体・金属)

SPMシミュレータによる有機半導体の観察

資料

事例集

SPMシミュレータによる金属・無機半導体の観察

資料

事例集



自動車メーカー・化学メーカー(排気ガス用触媒・化学反応触媒)

SPMシミュレータによる触媒物質の観察

資料

事例集



電子デバイスメーカー(ディスプレイ・リチウムイオン電池)

SPMシミュレータによるリチウム電池・透明電極等の特殊な用途のための材料の観察

資料

事例集



WEBセミナープログラム(その0)

「SPM教科書(チュウトリアル/デザイン/SPM高度化計画)」とSPM無償供与に依る、活用法習得機会をSPM初心者への対応として用意

[0]SPM初心者への対応として、SPM知識無しで理解・独学が可能となる「SPM教科書(チュウトリアル/デザイン/SPM高度化計画)」を用意。

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm_tutorial_design.pdf

http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm_further_improving_plan_20121004.pdf

ユーザ様のカスタマイズ希望特別措置弾力的運用方針、ご承知置き下さい。

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku_uc.pdf#page=31

「SPMシミュレータ操作ナビシステム」のご紹介

SPMシミュレータの操作が、まだ不慣れな初心者の方は、以下のホームページをご参考にしてください。

[SPM\(走査型プローブ顕微鏡\)シミュレータ操作ナビシステム](#)

https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_assistant_top.htm

- ・指示に従って、ホームページを進んでいくうちに、どのソルバーがお客様の目的に合っているか自動的に判断されます。
- ・自分のやってみたいシミュレーションと類似の計算例を見つけることができます。
- ・プロジェクトファイル編集画面に行けば、類似の計算例の物理量を書き替えることで、お客様のやってみたいシミュレーション用のプロジェクトファイルが自動的に生成されます。
これにより、面倒なデータ入力が簡単に行えます。
あとは、生成されたプロジェクトファイルをダウンロードして、お手元のSPMシミュレータに読み込ませるだけで、計算が自動運転相当で実行できます。

不明点・ご質問はお気軽にどうぞ。

spm-simulator-howto@aas-ri.co.jp

WEBセミナー概要

AFMシミュレーション基礎コース

有機・生体分子のAFMシミュレーション演習

(分野)

バイオ関連、高分子、有機半導体

(演習内容)

シミュレータの基本操作の演習

シミュレータのGUI使用方法の演習

事例によるシミュレーションの計算演習

WEBセミナー参加申し込みは、メールでこちらまで

spm-simulator-howto@aas-ri.co.jp

WEBセミナープログラム(その1)

[1]演習:シミュレータの基本操作

チュートリアル・ソフトウェアの操作(チュートリアル 第2章 ソフトウェアの操作へ)

1. GUI概要

2. 画面説明

3. GUIの起動

4. プロジェクトのファイル操作

新規プロジェクト作成

既存プロジェクト読み込み

プロジェクトの表示

プロジェクトの保存

プロジェクトの終了

5. プロジェクトの編集

コンポーネント

(1)追加・置換・削除

(2)初期配置設定(移動・回転・リセット)

(3)データ表示・属性変更

スキャンエリア設定・表示

シミュレータ選択とパラメータ設定

実行・再生・停止・一時停止

結果表示

コンポーネントの表示／非表示

視点の変更・Zoom All・拡大縮小・遠近法表示

View Option設定

8. GUIの終了

9. その他

画面の表示／非表示

コンポーネントの選択

コンポーネントのデータベース登録

イメージの保存

WEBセミナープログラム(その2)

[2]演習:シミュレータのGUI使用方法

チュートリアル・計算事例(チュートリアル 第3章 計算事例へ)

1. 探針・試料・測定AFM像予測シミュレータ

探針形状データおよび試料表面形状データから測定AFM像データを求める

・事例 (a) ラクトン系高分子の構造データとピラミッド型探針を使用

[GeoAFM_Calclmage_Polymer_002a]

説明用PowerPointファイル (pptx形式、244.9 KB)

projectファイル(a) (zip形式、50.4 KB)

参考Webページ

探針形状データおよび測定AFM像データから試料表面形状データを求める

・事例 ラクトン系高分子のAFM像から、ダブルチップ探針に伴うアーティファクトを除去

[GeoAFM_CalcSample_Polymer_002]

説明用PowerPointファイル (pptx形式、201.6 KB)

projectファイル (zip形式、19.3 KB)

参考Webページ

試料表面形状データおよび測定AFM像データから探針形状データを求める

・事例 ラクトン系高分子のAFM像と構造データを使用

[GeoAFM_CalcTip_Polymer_001]

説明用PowerPointファイル (pptx形式、196.0 KB)

projectファイル (zip形式、58.0 KB)

参考Webページ

WEBセミナープログラム(その2)

[2]演習:シミュレータのGUI使用方法

チュートリアル・計算事例(チュートリアル 第3章 計算事例へ)

2・連続弾性体AFMシミュレータ

高分子量ポリマーの測定AFM像データ予測(ノンコンタクトモード)

シリコン結晶表面のAFM周波数シフト像データ予測(周波数シフト像モード)

シリコン結晶表面のAFM粘弾性接触解析データ予測(粘弾性接触解析モード)

3・液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ

水中でのカンチレバーの動作

カンチレバーの周波数特性—共鳴曲線—

より複雑な形状のカンチレバーを使ったシミュレーション

粘弾性接触力学を考慮したシミュレーション

4・原子分子ナノ材料AFM像シミュレータ

真空中にあるペンタセンの周波数シフト像計算の例

水中フォースカーブ計算の例

アルカン分子のフォースカーブ計算の例

5・量子論的SPM像シミュレータ

AFM(周波数シフト像)計算の例

STM計算の例

(1)トンネル電流像の計算

(2)STSの計算

KPFM計算の例

バンド計算の例

6・サンプル動画

DFTB STM・高さ一定モードによるAu(111)基板のトンネル電流像シミュレーション

WEBセミナープログラム(その3)

[3]演習:シミュレータのGUI使用方法

チュートリアル・シミュレーション画像比較機能 (チュートリアル 第4章 実測画像へ)

1. 概要

2. 画面説明

3. Analyzer の起動と終了

4. ファイル操作

データファイルの読み込み

データファイルの保存、イメージの保存

5. 画像のフーリエ解析・高解像度化

画像のフーリエ解析

画像高解像度化

6. ニューラルネットシミュレータ

ニューラルネットシミュレータの起動

学習データの設定

学習の実行・停止・一時停止

学習結果の保存と読み込み

学習結果のチェックと新規入力画像に対する試行

ウィンドウの表示／非表示・LogView のクリア

7. 探針形状推定・探針影響除去

探針形状推定

探針影響除去

8. 可視化設定

描画法の変更

視点の変更・Zoom All・拡大縮小・遠近法表示

9. デジタル画像処理機能

閾値による画像の二値化機能

コントラスト調整(ガンマ補正)機能、エッジ抽出(Sobel フィルタ処理)機能

ノイズ除去(メディアンフィルタ処理)機能

10. 3点で指定される角度の計測

11. その他

データ表示

傾き自動補正、Image View の整列・クローズ

WEBセミナープログラム(その4)

[4]演習:シミュレータのGUI使用方法

チュートリアル・試料モデリング機能 (チュートリアル 第5章 試料モデリング機能へ)

1・薄膜モデリング

画面説明

モデリングツールの起動

画面の基本操作

薄膜モデルの作成事例

モデルの保存

既存モデルの読み込み

既存モデルのインポート

モデリングツールの終了

モデルの編集

結合情報の編集

Link Mode

Distance Mode

Angle Mode

編集操作の undo, redo

ツールバー

カーボンナノチューブ作成

グラフェンシート作成

SPM シミュレータでの利用に関する注意点

ChemSketch のダウンロード

OpenBabel のダウンロード

ChemSketch を用いたオクタン分子の作成

ChemSketch を用いたキニーネ分子の作成

Open Babel を用いたファイル形式の変換

2・分子モデリング

WEBセミナープログラム(その5)

[5]演習: Analyzer

SPM実験画像データのデジタル処理 (チュートリアルへ)

• SPMメーカー各社の実験バイナリデータの読み込みの演習 (チュートリアルへ)

SPM実験データの読み込み、基板面の傾き補正、および、立体表示 (事例集へ)

[Analyzer_ImageProcessing_009]

説明用PowerPointファイル (pptx形式、969.4 KB)

実測画像ファイル(実験生データ)(a) (zip形式、305.6 KB)

実測画像ファイル(実験生データ)(b) (SM4形式、4.3 MB)

実測画像ファイル(実験生データ)(c) (STP形式、3.0 MB)

実測画像ファイル(実験生データ)(d) (STP形式、3.0 MB)

実測画像ファイル(実験生データ)(e) (ibw形式、336.2 KB)

実測画像ファイル(実験生データ)(f) (zip形式、129.5 KB)

実測画像ファイル(実験生データ)(g) (zip形式、151.4 KB)

実測画像ファイル(実験生データ)(h) (zip形式、166.6 KB)

参考Webページ(1)

参考Webページ(2)

参考Webページ(3)

参考Webページ(4)

参考Webページ(5)

参考Webページ(6)

参考Webページ(7)

WEBセミナープログラム(その6)

[6]演習: Analyzer

SPM実験画像データのデジタル処理 (チュートリアルへ)

• 探針形状推定機能の演習 (チュートリアルへ)

探針形状推定・探針影響除去 1 (事例集へ)

[Analyzer_TipEstimation_001]

説明用PowerPointファイル (pptx形式、259.9 KB)

先端が二股になった不完全な探針によって得られた人工的な立体構造のAFM像 (cube形式、1.5 MB)

参考Webページ

WEBセミナープログラム(その7)

[7]演習 : Analyzer

SPM実験画像データのデジタル処理 (チュートリアルへ)

• 実験画像データのフーリエ変換の演習 (チュートリアルへ)

[Analyzer_ImageProcessing_003]

説明用PowerPointファイル (pptx形式、438.5 KB)

実測画像ファイル(a) (cube形式、6.0 MB)

高周波が強調された画像ファイル(a) (cube形式、6.0 MB)

低周波が強調された画像ファイル(a) (cube形式、6.0 MB)

実測画像ファイル(b) (cube形式、6.0 MB)

高周波が強調された画像ファイル(b) (cube形式、2.7 MB)

低周波が強調された画像ファイル(b) (cube形式、2.9 MB)

参考Webページ(1)

参考Webページ(2)

• 実験画像データのコントラスト調整の演習 (チュートリアルへ)

[Analyzer_ImageProcessing_006]

説明用PowerPointファイル (pptx形式、283.0 KB)

実測画像ファイル (cube形式、6.0 MB)

コントラスト調整した画像ファイル (cube形式、6.0 MB)

参考Webページ

WEBセミナープログラム(その8)

[8]演習: GeoAFM Analyzer

たんぱく質等のAFM画像の高速シミュレーション

- 実験データ、理論データ、探針形状データの相互高速予測シミュレーションの演習
(チュートリアルへ)

探針・試料からAFM像計算 GeoAFM(高速相互予測AFMシミュレータ) CalcImage (事例集へ)

探針・AFM像から試料形状計算 GeoAFM(高速相互予測AFMシミュレータ) CalcSample (事例集へ)

試料・AFM像から探針形状計算 GeoAFM(高速相互予測AFMシミュレータ) CalcTip (事例集へ)

実際的な例で演習を行ってください。

- 欠陥のある探針データからAFM実験画像のアーティファクト除去 (チュートリアルへ)

[Analyzer_TipEstimation_002]

説明用PowerPointファイル (pptx形式、255.6 KB)

STM実験画像データ (cube形式、1.5 MB)

推定によって得られた探針形状データ (cube形式、4.0 KB)

探針形状の影響を除去したSTM画像 (cube形式、640.1 KB)

参考Webページ

WEBセミナープログラム(その9)

[9]演習 : FemAFM (連続弾性体AFMシミュレータ)

たんぱく質等の変形を考慮したAFMシミュレーション (チュートリアルへ)

• 高さ一定AFM画像シミュレーション 演習

(チュートリアルへ)

ノンコンタクトモード、力の2次元マップ

FemAFM ConstHeight (事例集へ)

• 周波数シフトAFM画像シミュレーション 演習

(チュートリアルへ)

周波数シフトAFM像

FemAFM FreqShift (事例集へ)

• 粘弾性接触解析シミュレーション 演習

(チュートリアルへ)

粘弾性接触解析

FemAFM Viscoelastic (事例集へ)

実際的な例で演習を行ってください。

WEBセミナープログラム(その10)

[10]演習: LiqAFM 液中ソフトマテリアルAFMシミュレーション (チュートリアルへ)

カンチレバーの振動: BarMotion [Point oscillation] (事例集へ)

共鳴曲線: Resonance [Parameter Scan] (事例集へ)

粘弾性接触解析: Viscoelastic [Point oscillation] (事例集へ)

実際的な例で演習を行ってください。

WEBセミナープログラム(その11)

[11]演習 : CG-RISM 原子スケール液中AFMシミュレーション (チュートリアルへ)

高さ一定、力の2次元マップ: [ConstZ] (事例集へ)

フォースカーブ: [ForceCurve] (事例集へ)

周波数シフトAFM像: [ncAFM-ConstZ] (事例集へ)

実際的な例で演習を行ってください。

WEBセミナープログラム(その12)

[12-1]演習 : FemAFM_DLVO

連続弾性体AFMシミュレータDLVO理論機能 (チュートリアルへ)

[12-2]演習 : macroKPFM_DLVO

macroKPFMシミュレータDLVO理論機能 (チュートリアルへ)

実際的な例で演習を行ってください。