

# 統合化カタログ・SPMイノベーター

理論的計算シミュレータ機能  
有限要素法、分子動力学法、  
密度汎関数法に基づく強結  
合法(DFTB法)の採用

実験画像データの3D処理機能  
世界主要SPMメーカーのデータを  
**直接読み込み可能**  
データ画像のデジタル補正機能、  
探針先端形状の推定機能、グラ  
フィック機能全体の強化、etc

SPMシミュレータ 俯瞰  
“夢のシミュレータ”のコンセプト  
SPMシミュレータの特徴・メリット  
SPMシミュレータの使い方(説明・解説)  
DFTBバンド構造計算結果はPHASE/0の  
プリプロセッサの役割を果たす  
構成ソルバ毎: 新機軸/イノベーション  
SPMシミュレータ販売価格リスト

粘弾性接触力学の導入による、  
バイオ・ソフトマテリアル・シミュレ  
ーション(逆問題含む)への挑戦

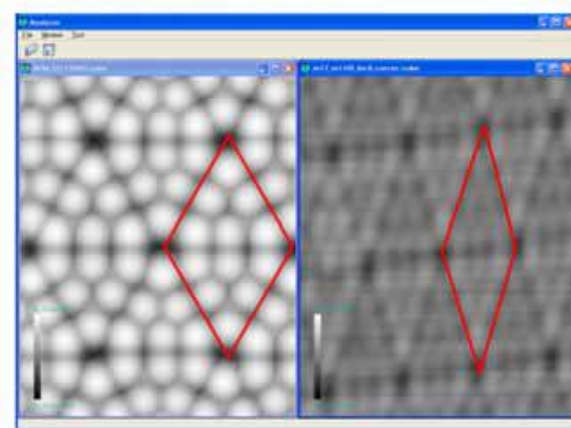
DFTBシミュレーションで69種類の元  
素パラメータを完備することで、あ  
らゆる無機・有機化合物のシミュレ  
ーションに対応

SPM実験画像とシミュレーション画  
像の比較機能の実装により、試料  
表面の原子の真の状態を特定可能

## 世界初の“2機能の活用”

- SPM「実験—シミュレーション」画像比較機能
- 世界標準仕様・粘弾性接触解析機能  
あらゆる(有機・無機)化合物のDFTB計算が可能

シミュレーション画像と実験画  
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**



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)

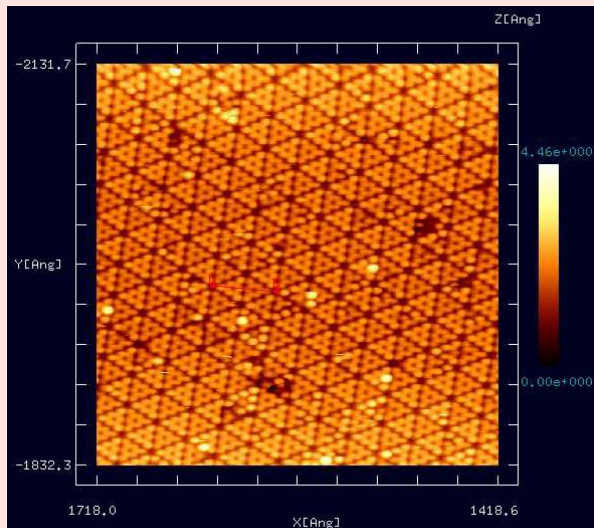
# SPMシミュレータ 俯瞰

## SPM (Scanning Probe Microscopy)

↓  
走査型プローブ顕微鏡

日本発・世界初「実験－計算」画像比較型の世界標準仕様SPMシミュレータは、東北大学 特任教授 理学博士・塚田 捷先生監修の下、多数の有識者の方々のご協力を頂き、開発されました。

あらゆる材料のミクロな性質を、**シミュレーションの力**で解き明かします。



走査型トンネル電子顕微鏡で見たシリコン結晶表面の様子  
→このように原子オーダーでの物質の性質に迫ります

シミュレーションの様子を見たい方は[こちら](#)をクリック  
(原子が整列した結晶表面上に6個の原子からなる分子が置かれています。この分子の画像を得るために、探針と呼ばれる鋭い針を接触させています。針自体も、原子の集まりです。この針が感じる力を測定することで、AFM(原子間力顕微鏡)の画像が得られます。)

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**商用ソフトウェアです

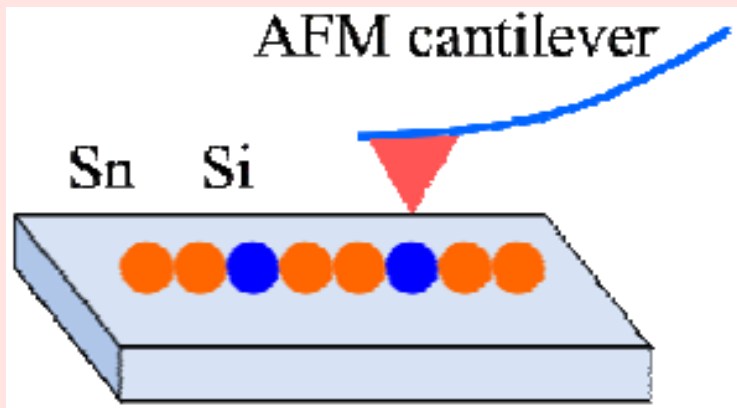
実験画像とシミュレーション画像を同一プラットフォーム上で比較可能とすることで、従来の見かけのSPM実験画像(何が見えているか不明)から、原子の真の配置を特定できる、**SPM実験画像処理手法イノベーション**達成しました。

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



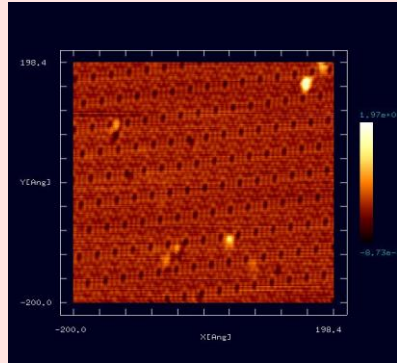
→ **原子操作**: 原子・分子を寄せ集めて、**ナノ構造体**を組み立てる

AFMによる、原子の移動、配置、**ナノ構造の組み立て**

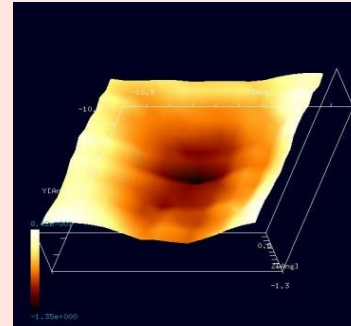
# シミュレーション技術の更なる深化・高度化

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)

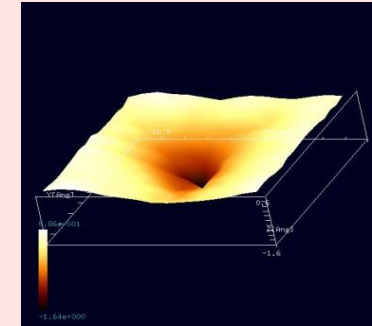
粘弾性試料と探針との接触力学シミュレーション(バイオ関連)



複数の探針形状が  
推定可能  
どれが最適解か?



or



Si結晶表面AFM画像(東京大学生産技術研究所 福谷研究室提供)

一種の逆問題

世界初SPM「実験—計算」画像比較型・世界標準仕様(計算機能)、粘弾性接触解析手法新規適用、及び DFTB計算元素69種活用に依り、あらゆる(有機・無機)化合物に対してシミュレーションが実行可能です。

日本発、世界標準仕様(計算機能)・世界初「実験—計算」画像比較型・公開事例210件参照下さい。[「実験—計算」画像比較型計算機能によるシミュレーション](#)

[SPMシミュレーションの適用分野](#)の技術者・研究者・科学者をサポートします。

[SPMシミュレータ販売価格リスト](#) ソルバ[ばら売り]も参照下さい。

Advanced Algorithm & Systems



ソルバー	特徴	機能
Analyzer 実験データ画像処理プロセス	シミュレーションの前処理 実験データを補正して計算用入力へ変換する。探針形状の予測と形状効果を補正する	<ul style="list-style-type: none"> <li>・探針構造推定機能</li> <li>・メーカー各社のSPM実験データの読み込み機能</li> <li>・画像データの傾斜補正機能 etc.</li> </ul>
SetModel 原子モデリングツール	シミュレーションの前処理 探針と試料の原子構造モデルを作成	<ul style="list-style-type: none"> <li>・半導体薄膜等の結晶性の周期構造を持ったモデルを作成する機能</li> <li>・個々の原子を操作して欠陥・不純物や探針構造を作成する機能</li> <li>・他のソフトでモデリングした構造の読み込みや、終端に水素を付加する機能</li> </ul>
GeoAFM 高速相互予測AFMシミュレータ	像解像度は原子尺度ではなく、メゾからマクロスケールでのシミュレーション。精密でないが、試料構造・探針構造・AFM像の二つから、残りを高速で予測する。液中・大気中・ソフトマター全てに対応する。近似的ではあるが実用的	<ul style="list-style-type: none"> <li>・試料と探針から計測像を予測する機能</li> <li>・計測像と探針から試料形状を予測する機能</li> <li>・計測像と試料から探針形状を予測する機能</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> </ul>
FemAFM 連続弾性体AFMシミュレータ	試料および探針の弾性変形を考慮して、メゾからマクロスケールの像解像度でAFMイメージを計算する。GeoAFMとの併用、あるいはLiqAFM(tapping)との併用で活用する。	<ul style="list-style-type: none"> <li>・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応</li> <li>・単振動加振・二重加振／多モードに対応</li> <li>・カンチレバーの共鳴曲線(真空中、大気中、液中)を描く</li> <li>・マルチコア並列計算機能</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> </ul>

実用・開発者向き

実用・開発者向き

<p>LiqAFM (tapping) 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ</p>	<p>液中のカンチレバー振動を考慮しつつ、ソフトマターおよび粘弾性凝着系のタッピングモードシミュレーションを行うことができる。単振子に射影した計算では、標準理論を用いると効率的である。適用領域は(液中)ソフトマター、高分子など広範囲であり、使いやすくニーズは高いと思われる。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応</li> <li>・単振動加振・二重加振／多モードに対応</li> <li>・カンチレバーの共鳴曲線(真空中、大気中、液中)を描く</li> <li>・マルチコア並列計算機能</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> <li>・逆問題解析機能が追加された。これにより、AFM周波数シフト、位相シフトの値から、試料のヤング率、表面張力、高さ情報が逆算できるようになった。(参考資料)</li> </ul>
<p>macroKPFM 巨視的KPFM像シミュレータ (2017年3月頃リリース見通し)</p>	<p>KPFM像シミュレーションを、<math>\mu\text{m}</math>から<math>\text{nm}</math>のオーダーで行う。境界要素法を用いて、古典電磁気学のポテンシャル問題を解くことに相当する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・任意の形状の誘電体を試料として設定可能</li> <li>・試料表面に電荷の分布を指定可能</li> <li>・任意の位置の電荷を置くことができる</li> <li>対象(高分子、トナー粒子)</li> </ul>

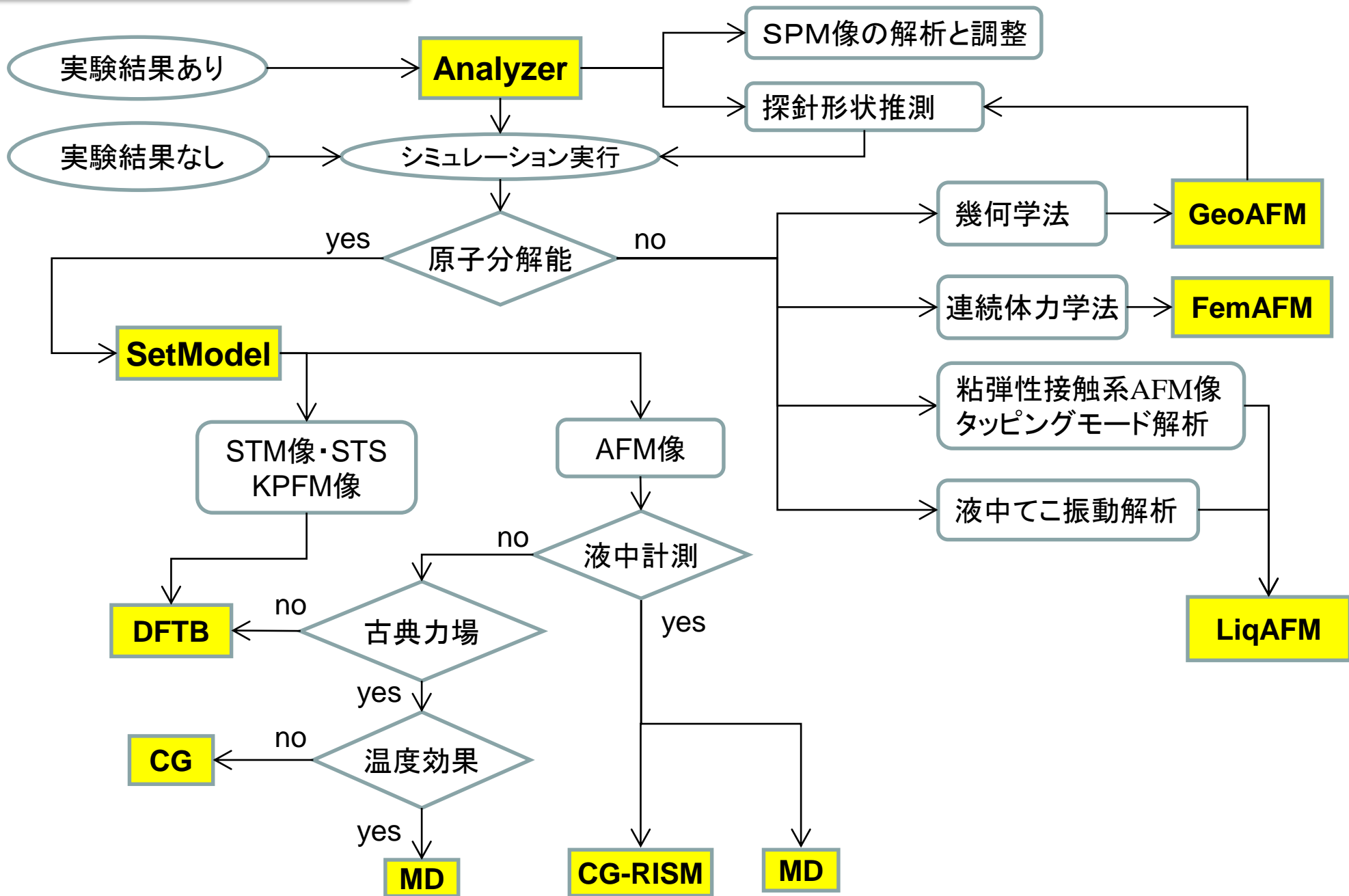
研究者向き

<p>CG 構造最適化AFM像シミュレータ</p>	<p>古典力学法による原子モデルの最適化計算 液中CG-RISM計算</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・散逸像・周波数シフト像、フォースマップ等を計算</li> <li>・接触高さ、カー一定のコンタクトモード像計算</li> <li>・振幅一定、周波数シフト一定のダイナミックモード像計算</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> </ul>
<p>MD 分子動力学AFM像シミュレータ</p>	<p>古典力学法による原子モデルの分子動力学計算</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・フォースカーブの計算</li> <li>・三次元力場の計算、散逸像・周波数シフト像予測に対応</li> <li>・AFM探針－測定試料間の相互作用に伴う試料の動的変形挙動を予測計算</li> <li>・液中計算に伴う溶媒の分子動力学計算</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> </ul>

## DFTB 量子論的SPM 像シミュレータ

量子力学計算による探針力とトンネル電流の計算 STM/STS, AFM, KPFMに対応 KPFMはより実用的に拡張したい

- ・AFM像: 力、周波数シフト分布を計算
- ・STM像: 高さ一定モードのトンネル電流像を計算
- ・STM像: 電流一定モードのトポグラフィ像を計算
- ・KPFM像: 局所接触電位差分布を計算
- ・多重極静電力、軌道混成力の計算可(KPFM)
- ・分子修飾探針の影響を考慮可(STM)
- ・対象(半導体ドーパント)
- ・バンド構造計算機能が追加された。PHASE/0との連携運用も視野に入れている。[\(参考資料\)](#)





# “夢のシミュレータ”のコンセプト

理論的計算シミュレータ機能  
有限要素法、分子動力学法、密度汎関数法に基づく強結合法(DFTB法)の採用

実験画像データの3D処理機能  
世界主要SPMメーカーのデータを直接読み込み可能  
データ画像のデジタル補正機能、探針先端形状の推定機能、グラフィック機能全体の強化、etc

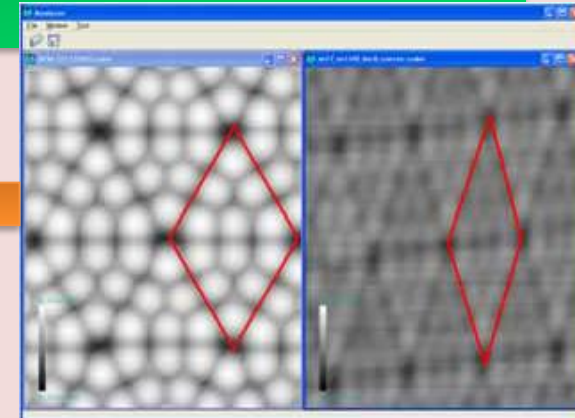
粘弾性接触力学の導入による、  
バイオ・ソフトマテリアル・シミュレーション(逆問題含む)への挑戦

DFTBシミュレーションで69種類の元素  
パラメータを完備することで、あらゆる無機・有機化合物のシミュレーションに対応

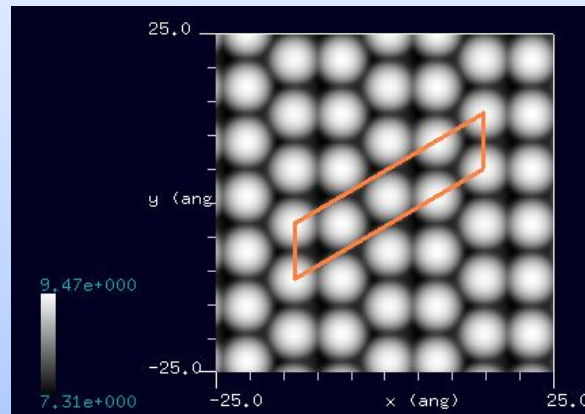
SPM実験画像とシミュレーション画像の  
比較機能の実装により、試料表面の原子の真の状態を特定可能

\* PHASE/O: 物質材料研究機構  
で開発されたフリーの第一原理計算ソフトウェアです。

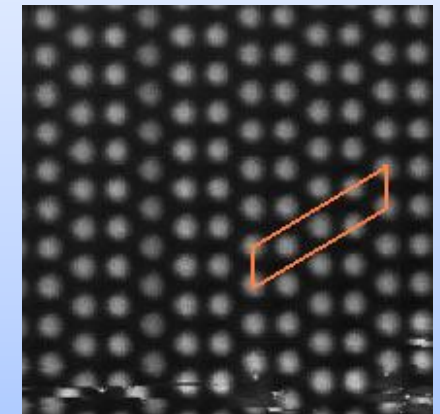
シミュレーション画像と実験画像データの比較を同一のプラットフォーム上で実現する



【DFTB】Ge(111)-c(2×8)のconstant current STMシミュレーション



DFTBソルバによるシミュレート結果



実測. D. Sawada et al., Materials Transactions 50, 940-942 (2009).

SPMシミュレータはPHASE/Oのプリプロセッサとしても運用可能です

# SPMシミュレータの特徴・メリット

## 世界標準仕様・粘弾性接触解析機能 及び 逆問題へのアプローチ

周波数シフト、位相シフトの値を実験結果により既知として、それらの値から、試料のヤング率、表面張力等の物性値を逆算することができます。

SPMシミュレータDFTBソルバ用計算パラメータ・データベース保有し、DFTB計算元素69種類適用可能となる。これにより、ほぼ全ての(無機・有機)化合物のDFTB計算による、STM/STS, AFM, KPFMシミュレーションが可能となります

これまで、様々なSPM実験画像データ処理ソフトの代表例として、Image Metrology社のSPIPが有名でしたが、画像から何が見えるのか判別が困難という事実が常に存在していました。SPMシミュレータは、見かけのSPM実験画像から、原子の真の配置を特定できる、従来とは一線を画すイノベーションです。

実験データ画像と理論的に得られたシミュレーション画像をPC上で簡単に比較・検討する事が出来ます。量子力学的なシミュレーション計算をパソコンで従来計算時間の半分程度で実行します。

SPM装置据付現場のSPM実験担当者が作成するSPM実験画像の精度が向上する、「実験－計算」画像比較型・(検討)画面を出力できる。

分かりやすい“システムの使い方説明と解説”(オンラインヘルプ)

SPM初心者ユーザ補助機能(活用ガイド)

# SPMシミュレータの使い方(説明・解説)

3. 「SPMシミュレータ操作ナビシステム」(初心者、不慣れな方々のSPM必須知識を補うツール)を経由して、ユーザとAASRIは協議し、ユーザへの指示項目となる。(使用法を運用指示にて、ユーザは自立的にシミュレーション出来ます)

- (1) SPM構成ソルバ8本の使用順序、選択の方法など使用者への導き手が必要(標準)
- (2) 使用者 初心者～不慣れな方々の自立的な使用支援ツール(質問・指示繰り返し)
- (3) 使用者とAASRIの間のSPMシミュレーション実行 GO/STOP指示に活用
- (4) SPM計算課題提案後、ユーザとAASRIは「SPMシミュレータ操作ナビシステム」を通して見積書を作成

GO/STOP指示工数 コンサル見積  
→ コンサル費+価格  
→ 見積額の予算化  
→ 検証計算  
→ 支払い

SPMシミュレータ操作ナビシステム→計算実行指示→8本ソルバから構成されるSPMシミュレータの稼働の過程は、SPM初心者ユーザ補助機能が「2システム」に具備されており、誰方にも容易にお使い頂けます。

## SPMシミュレータ操作ナビシステム・併用型SPMシミュレーション手法

ご自身による購入前の「無料お試し計算」を、SPM計算課題を共有化条件で、SPMシミュレータ購入前検証計算に置き換えることとなります。

(1) (2) (3) (4)の内容は「SPMシミュレータ操作ナビシステム」を経由してのユーザとAASRIの間で相互補完的協議の結果、合意される

# SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ



SPMシミュレータは、あらゆる産業分野で威力を発揮する、未来のシミュレータです

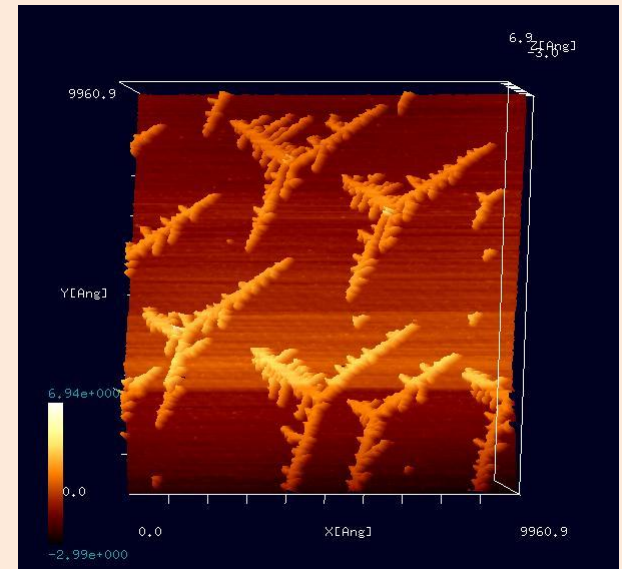
日常の実験・検査業務を強力にサポートします

- ミクロなスケールでの新素材開発を加速します
- 分子・原子レベルでの材料観察を可能にします
- あらゆる無機・有機化合物が分析できます

[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)

S. Ogura et al., Phys. Rev. B 73, 125442 (2006);

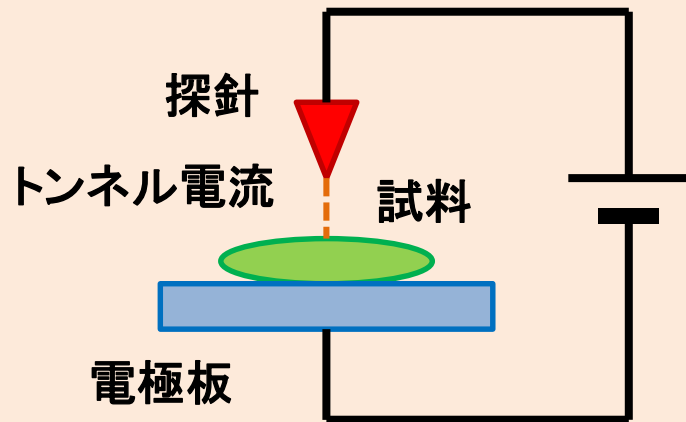
S. Ogura and K. Fukutani, J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 474210.]





# SPM(走査型プローブ顕微鏡)とは?

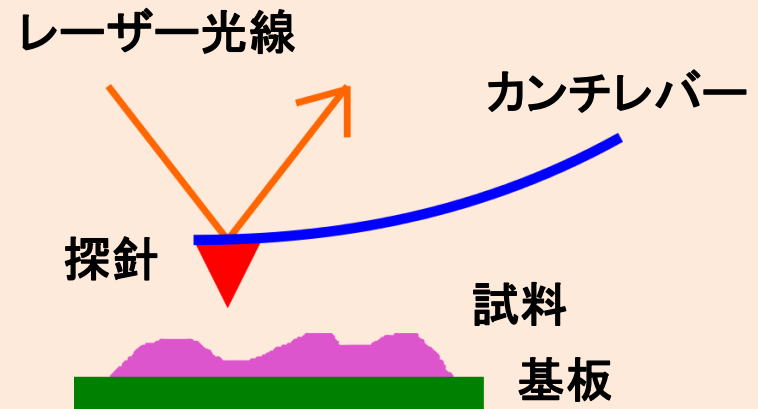
## 走査型トンネル顕微鏡



### 半導体物性

探針・試料間に電圧をかけてトンネル電流を発生させる

## 原子間力顕微鏡



### ソフトマテリアル・バイオ

探針・試料間に働くファンデルワールスカ(原子間力)を検出する

原子レベルの画像が得られる( $\text{\AA}$ オーダー)

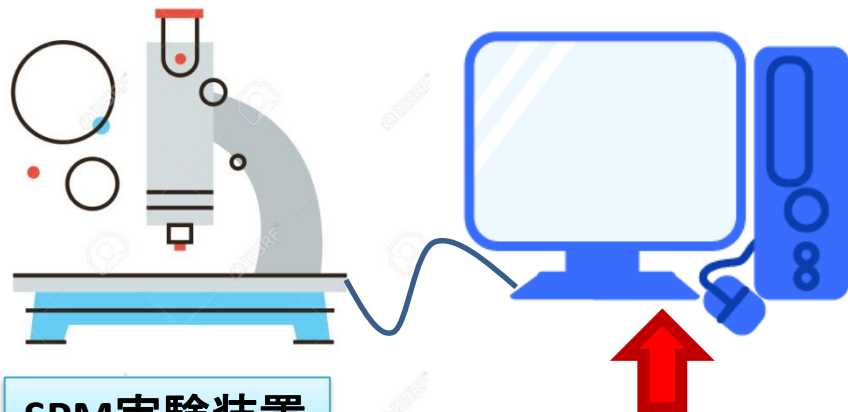
SPMシミュレータは、あらゆるSPM実験画像を理論シミュレーションします

実験サンプルがどのような物質でも構いません

あらゆる業種の実験研究に対応できます

Windowsのパソコンにインストールするだけで、誰でもすぐに使えます

購入前に、無料お試し計算の特典が付いています



SPM実験装置

SPM実験装置のすぐそばのPCにSPMシミュレータをインストール

SPMシミュレータを使えば、SPM実験装置で得られた生データが、お手元のWindowsパソコン上でデジタル処理可能です

シミュレーション初心者でも、すぐに使える、充実のナビシステム

[SPMシミュレータ操作ナビシステム](#)

[SPMシミュレータ・オンラインヘルプ](#)

## SPM実験画像処理手法イノベーション

これまで、様々なSPM実験画像データ処理ソフトの代表例として、Image Metrology社のSPIPが有名でしたが、画像から何が見えるのか判別が困難という事実が常に存在していました

SPMシミュレータは、このSPIPを超えるソフトウェアを目指して、実測画像とシミュレーション計算画像を直接比較できるシミュレータとして開発が進められてきました

AFM実験画像が、そのまま試料の形状を反映しているとは限りません

- 探針の形状が、AFM実験画像に影響を与える場合が考えられます
- 探針と試料の間に、水分子が作る薄い被膜が入り込んでいるかもしれません
- 高分子の試料がコロイド溶液中にある場合、電解質の効果が影響します



SPMシミュレータは、実験画像とシミュレーション画像を比較することにより、実際の試料の形状がどのようなものであるかの、ヒントを与えてくれます  
8種類の用意されたシミュレーションソルバを、上手く使い分ければ、試料の真の形状を推定することが出来ます

SPMシミュレータは、見かけのSPM実験画像から、原子の真の配置を特定できる、従来とは一線を画すイノベーションです

## SPMシミュレータ用途別機能紹介資料

[SPMシミュレータの具体的な計算事例が、用途別に紹介されています。]

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 全体

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part1: 高分子の単分子観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part2: 液中環境下での高分子の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part3: バイオ関連試料の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part4: 繊維状高分子の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part5: 有機半導体の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part6: 金属・無機半導体の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part7: 触媒物質の観察

SPMシミュレータ用途別機能紹介資料 Part8: 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

## 日本発・世界標準仕様版SPMシミュレータ

SPMシミュレータ・ユーザ補助機能ページ

[SPMシミュレータ初心者ユーザの方は、まずこのページからご覧下さい]

SPMシミュレータ・初心者のための参考計算事例検索ページ

SPMシミュレータが初めてのユーザの方は、これらのシミュレーション計算例の中から、ご自分がやってみたいシミュレーションと似た例を探して下さい。

計算事例用Projectファイル・ダウンロードページ

[具体的な計算例の入力データがダウンロードできます]

調べたい探針・試料のデータをお持ちのユーザの方のためのページ

[自分が用意した探針・試料のデータを元に、シミュレーションを行いたいとお考えのユーザの方のためのページです]

統合化カタログ・SPMイノベーター

SPMイノベーター(世界標準仕様シミュレータ)活用ご案内

SPMシミュレータ販売価格リスト

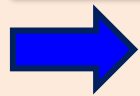


# SPMシミュレータはPHASE/0の計算速度をアップさせます

PHASE/0は物質材料研究機構で開発されたフリーの第一原理計算ソフトウェアです

PHASE/0は半導体や金属などの性質を求めることができ、新素材の開発に役立ちます

PHASE/0の問題点：  
精密な計算ができるが、計算時間が長い



DFTBソルバで、PHASE/0の入力データを作成



PHASE/0の繰り返し計算回数を減らせます

DFTB(密度汎関数法)ソルバはSPMシミュレータに含まれているモジュールの一つです

SPMシミュレータはPHASE/0のプリプロセッサとして運用

PHASE/0の入力データのうち、次の二つにデータを、DFTBソルバで計算します

- initial\_wavefunctions(初期波動関数)
- initial\_charge\_density(初期電荷密度)

DFTBソルバは、適切な初期データを作成し、計算速度をアップしてくれます

メリットは?

- PHASE/0の繰り返し計算の回数を減らし、収束する速度を上げることが可能です
- 結果として、PHASE/0の計算時間を短縮できます

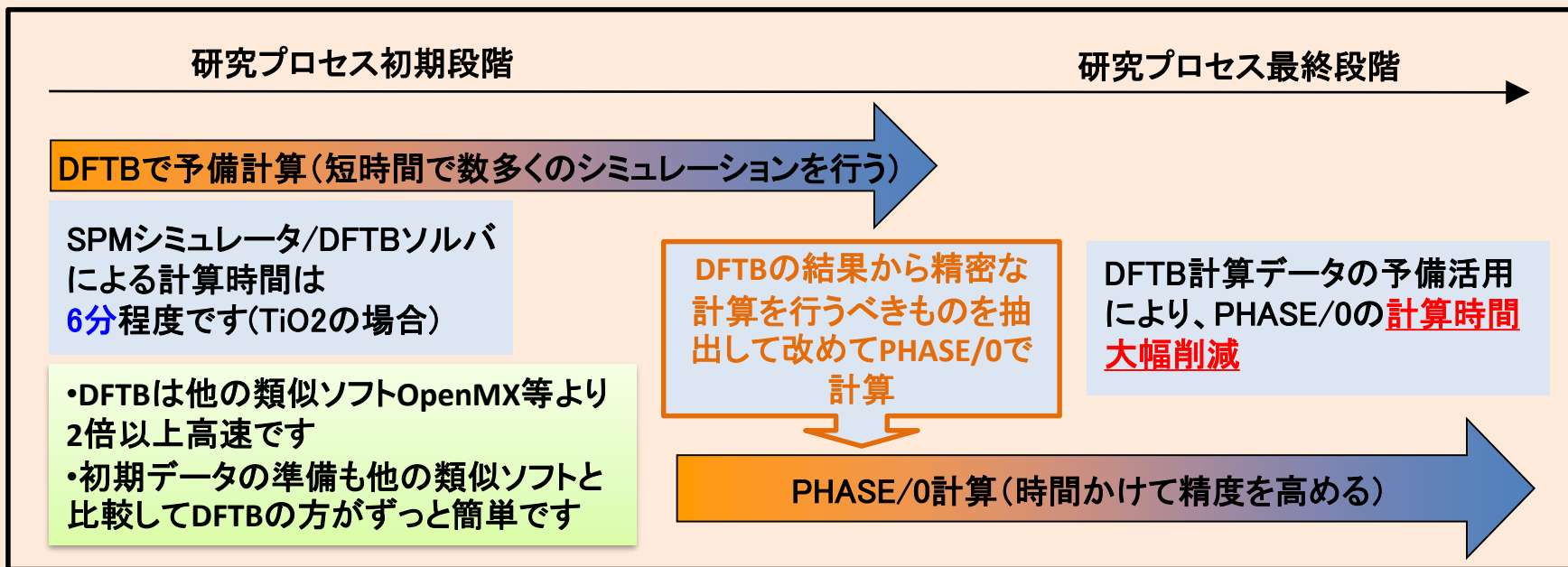
## 作業の流れ

DFTBソルバで  
初期データを準備



PHASE/0で  
本格的な計算

SPMシミュレータに付属のDFTB(量子力学的密度汎関数法)ソルバを使って、  
第一原理計算PHASE/0の計算時間を大幅短縮



SPMシミュレータのDFTBソルバに付属している**バンド構造計算機能**を利用すれば、PHASE/0をさらにお使い易くなります

ユーザは、PHASE/0での本格的な計算に先立って、SPMシミュレータDFTBソルバで、あらかじめ予備的なバンド構造計算を行うことができます

### メリットは?

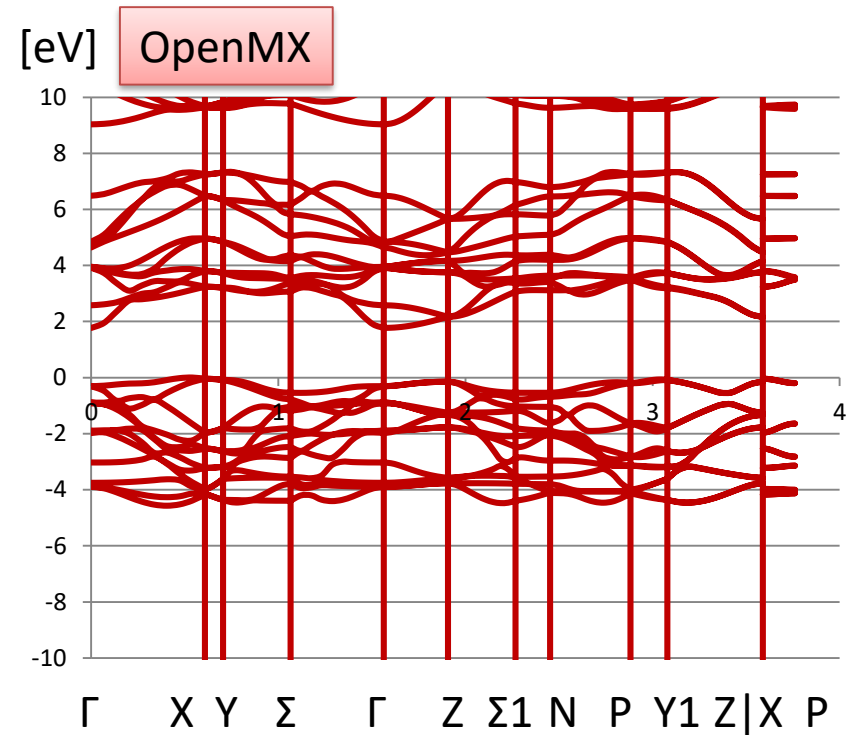
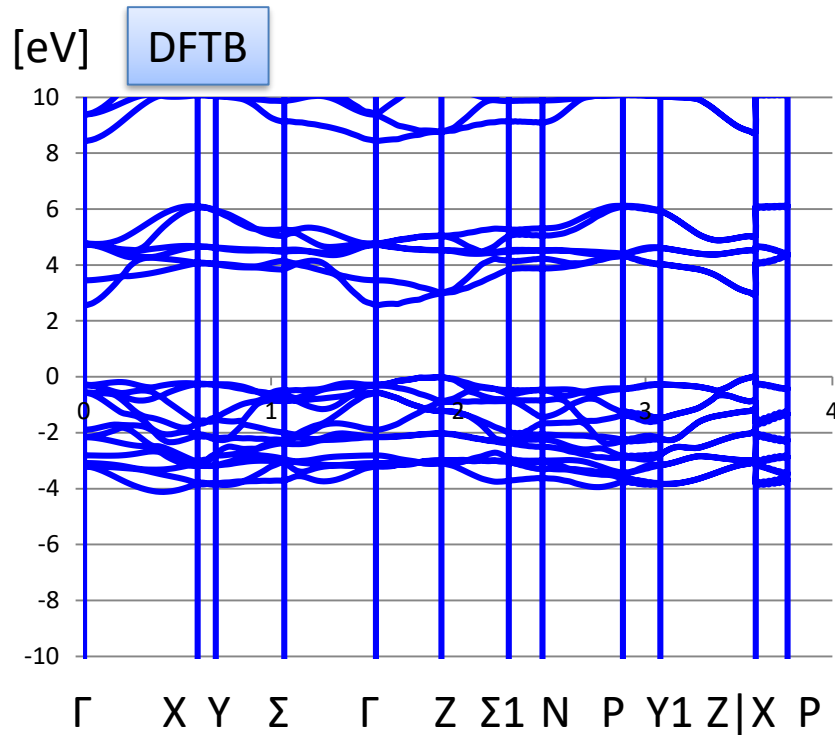
- ユーザは小規模なDFTB計算を高速で行えます
- ユーザは、DFTBソルバで得られるバンド図を参照して、PHASE/0の計算を行えます
- 調べようとしている化合物の第一原理によるバンド構造計算が、易しい問題か、難しい問題かが、DFTBソルバの結果を参照することで予測できます

### 技術的な観点から見た長所

- 計算速度が比較的早く、計算結果も信頼できます
- Linux上でも動作可能です
- 69種類の元素の量子力学的パラメータが用意されており、事実上、あらゆる化合物のバンド構造が計算可能です

## DFTBソルバのベンチマークテスト

### DFTBソルバとOpenMXで、酸化チタン( $\text{TiO}_2$ )のバンド構造を計算した結果の比較



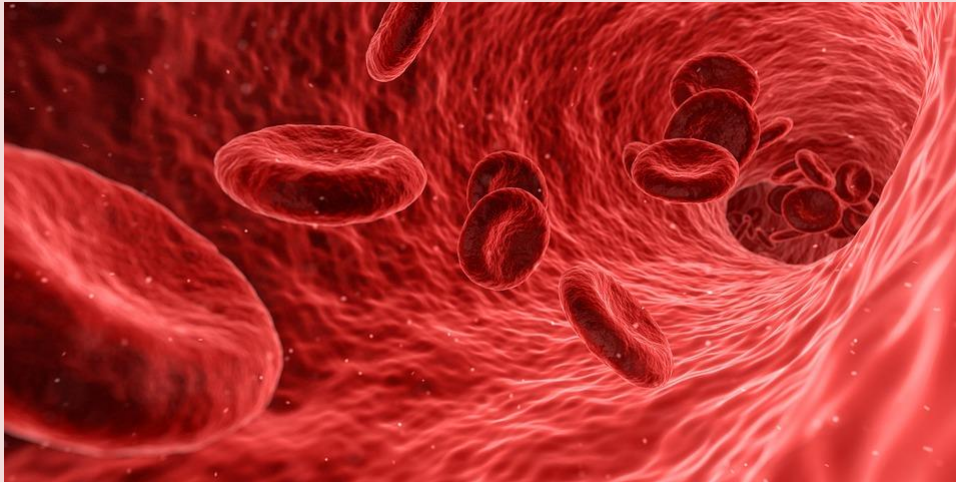
DFTBソルバは、本来、走査型プローブ顕微鏡画像のシミュレーションを行うためのソフトですが、計算途中の過程で密度汎関数法によるバンド構造計算を行います。このDFTBのバンド計算機能と、OpenMXによるバンド計算の結果を比較したのが上の図です。両者は良く一致していることが分かります。DFTBソルバは、バンド構造出力機能も備えています。

OpenMXは、東京大学物性研究所の尾崎泰助教授が中心となって開発された、フリーの第一原理計算ソフトです。信頼性の高いソフトであることが、広く認められています。



# SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ

バイオ・  
ソフトマテリアル分野



美しく健やかな  
未来のために

Advanced Algorithm & Systems  
<https://www.aasri.jp/>

医薬品開発をサポートし、先進医療の実現をお手伝いします

食品開発に貢献し、安全な食の未来を約束します

SPMシミュレータは、バイオ・ソフトマテリアル分野での新素材開発を応援します



## 先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

長寿社会を支える  
画期的な薬品を開発したい

安全なダイエット食品を作ってみたい

アルツハイマー症の特効薬を開発したい

地球温暖化でも大丈夫な作物を  
品種改良したい

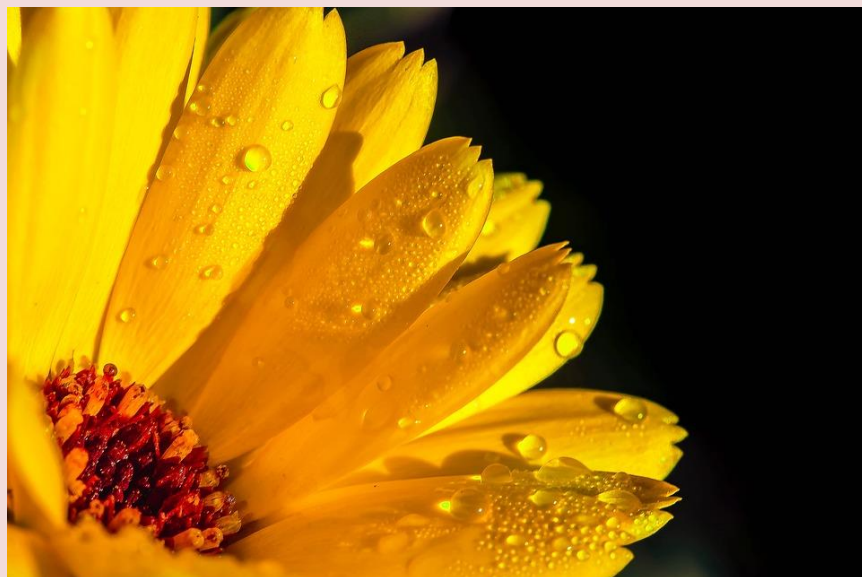


難病の特効薬を開発したい

安価なジェネリック医薬品を開発したい

新食感の食品を作ってみたい

付加価値の高いゴム・プラスチック素材を  
開発したい

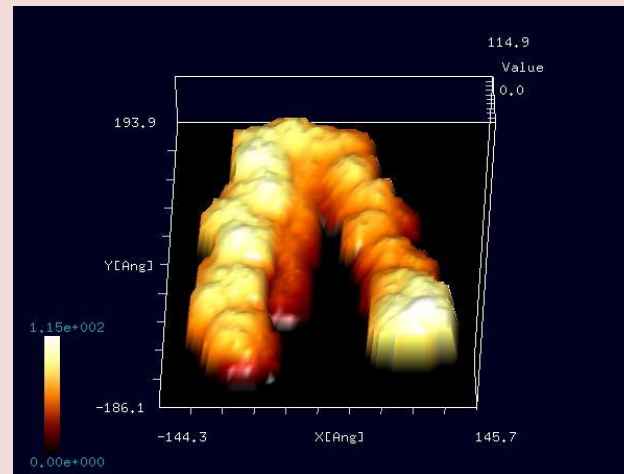


## 実験現場での様々なニーズにお応えします

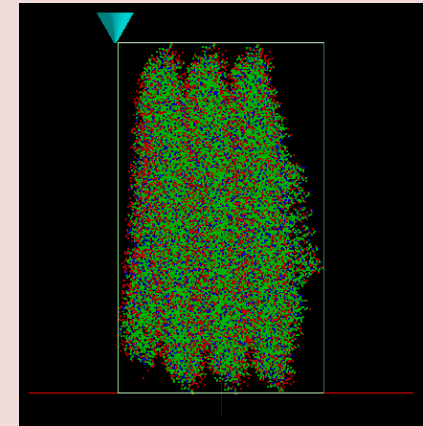
- 生理的溶液中のDNAの振る舞いを調べたい
- 高分子の粘性を調べたい
- 表面張力を伴う材料の界面を調べたい
- 巨大タンパク質の実験画像をシミュレーションしたい
- ゴム分子のような弾性を持つ材料の変形を調べたい
- 実験画像をデジタル処理したい

以下の研究分野を  
サポートします

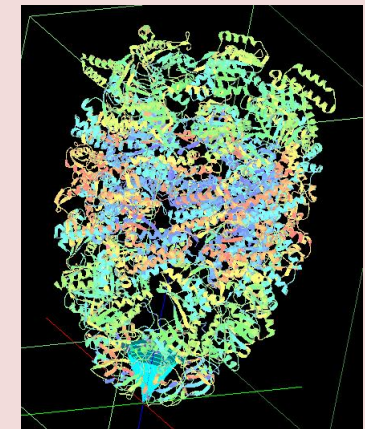
- バイオ
- ソフトマテリアル
- 高分子
- ゴム・プラスチック材料
- 薬品



生体高分子ミオシンVの  
AFM像シミュレーション



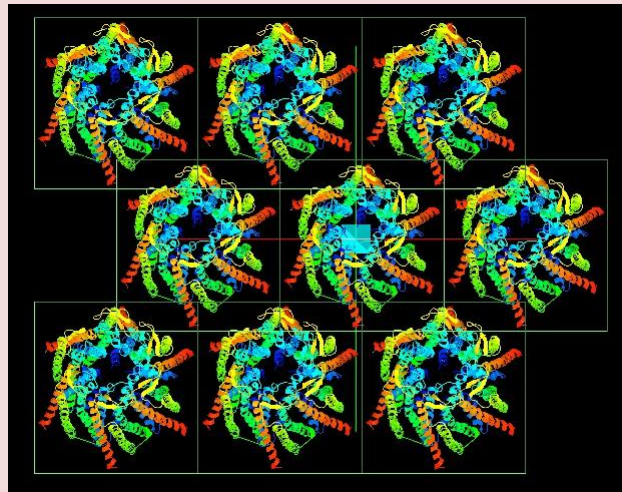
タバコモザイクウィルスのよ  
うな原始的な生物でもシミュ  
レーションが可能です



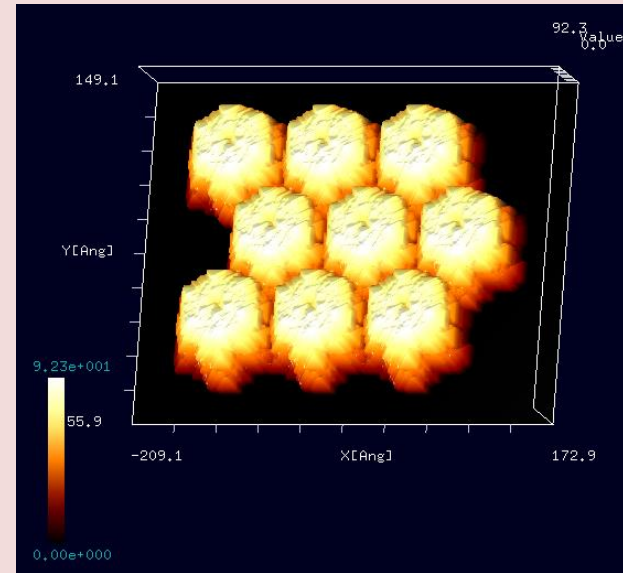
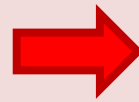
原子数が数万個の巨大タン  
パク質でもシミュレーション  
が可能です



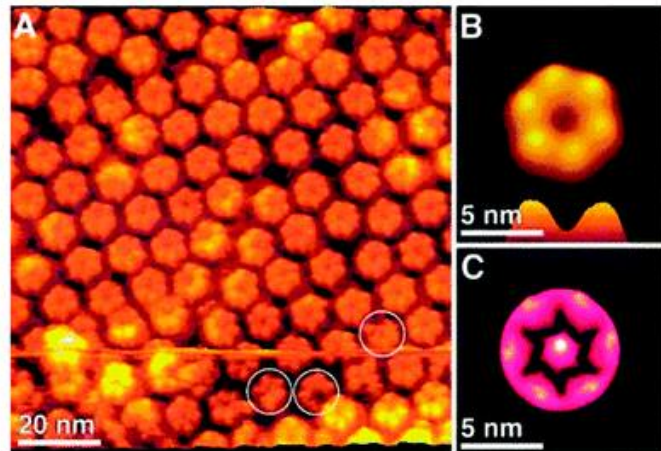
整列したコネクソンのAFM(原子間力顕微鏡)シミュレーション画像  
(connexon:タンパク質の複合体で細胞間のチャンネルの働きをする)



分子構造データ



シミュレーション画像



実験画像

実験データ画像と、  
理論的に得られたシミュレーション画像を、  
パソコン上で簡単に比較検討することができます

F. Variola, 'Atomic force microscopy in biomaterials surface science',  
*Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2015, 17, 2950.



新素材で  
未来を築く

Advanced Algorithm & Systems  
<https://www.aasri.jp/>

繊維材料の開発に貢献し、住み良い暮らし作りを約束します

SPMシミュレータは、高分子繊維分野での新素材開発を応援します

高機能繊維の開発をサポートし、豊かな社会の実現をお手伝いします





## 先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

肌に優しい衣料品を開発したい

丈夫な繊維素材を開発したい

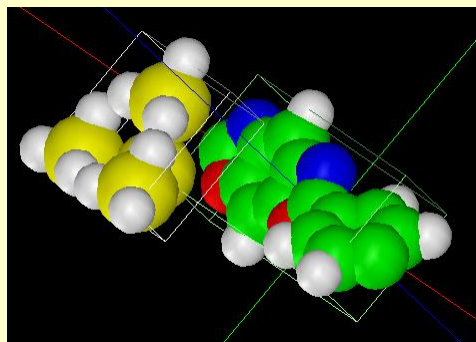
海水から真水を作る高機能をろ過膜を開発したい

人体に安全な人工血管を作りたい

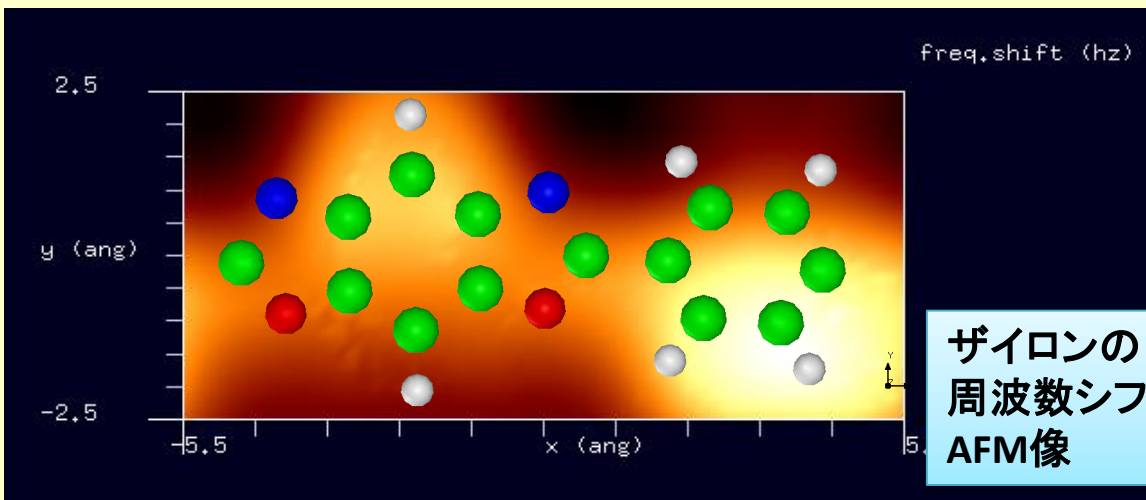


## 実験現場での様々なニーズにお応えします

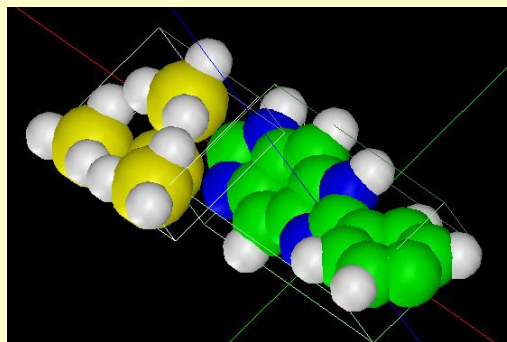
- AFM(原子間力顕微鏡)測定によって得られた実験画像が真の分子形状を反映しているか確かめたい
- AFM測定で繊維分子に探針を押し付けたときの変形を調べたい
- 探針が受ける試料からの反発力を見積もりたい
- 高分子の緩和過程による変形を調べたい



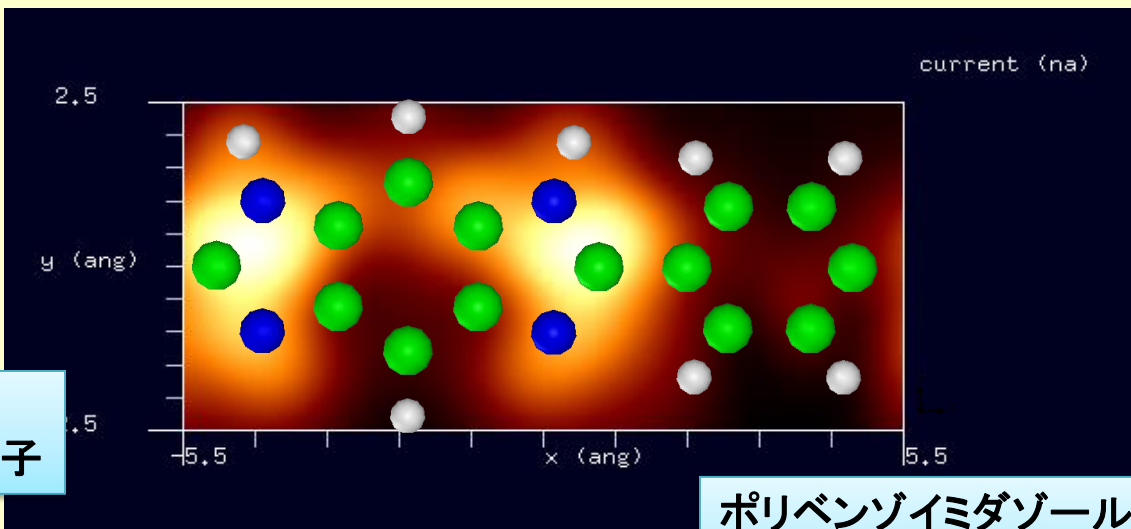
合成繊維ザイロン(Zylon)にシリコン探針を近づけた様子



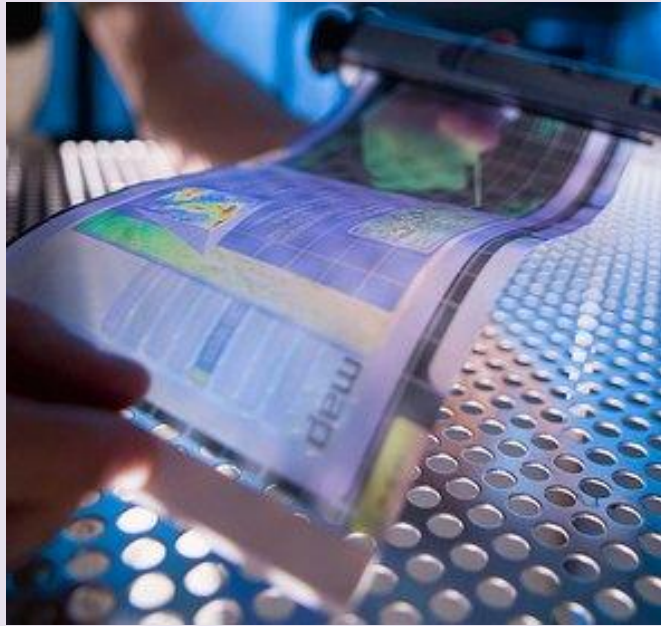
ザイロンの周波数シフトAFM像



合成繊維ポリベンゾイミダゾール(PBI)にシリコン探針を近づけた様子



ポリベンゾイミダゾールの周波数シフトAFM像



創造性あふれる  
社会を実現

Advanced Algorithm & Systems  
<https://www.aasri.jp/>

有機半導体の開発を通して、クリーンエネルギーの発達に貢献します

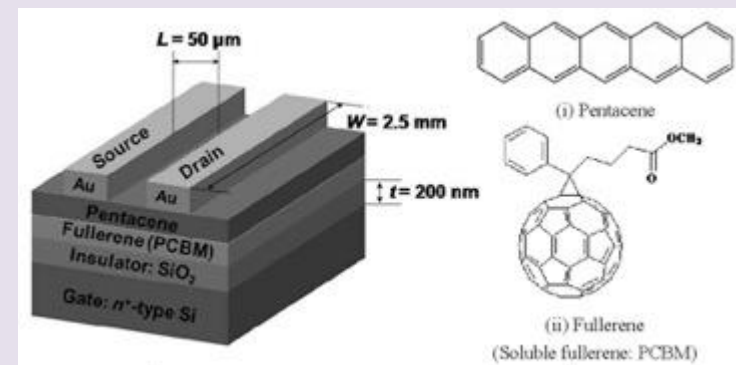
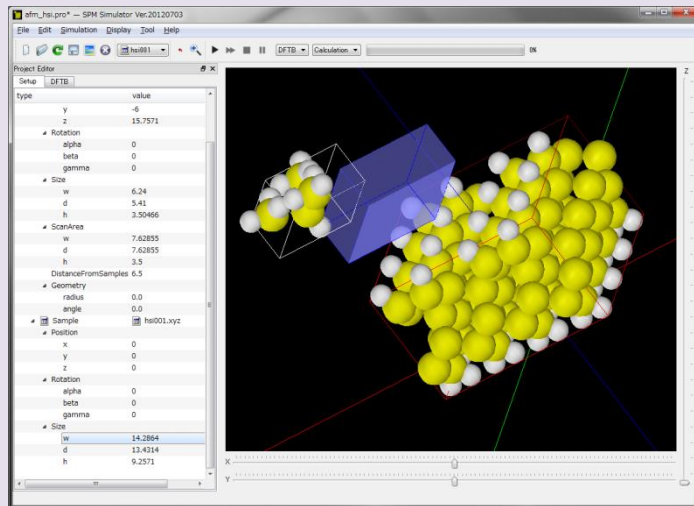
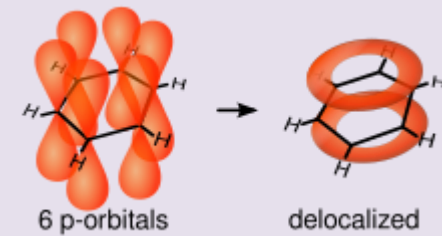
SPMシミュレータは、有機半導体分野での新素材開発を応援します

創造性にあふれた社会の実現のお手伝いをします



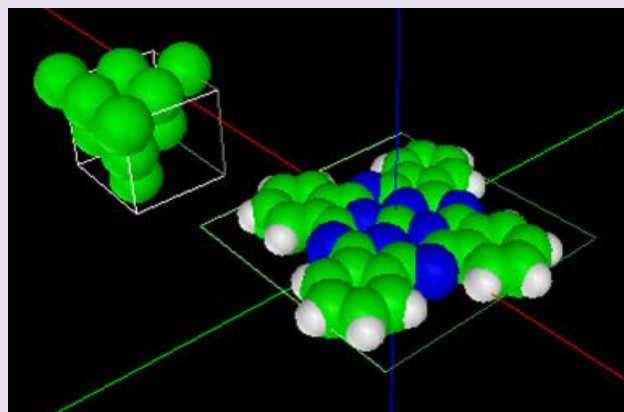
# 実験現場での様々なニーズにお応えします

- 実験画像とシミュレーション画像を比較したい
- 有機半導体の電気的な性質を調べたい
- ドープによる効果を調べたい
- 状態密度の分布について調べたい
- 接触電位差について調べたい

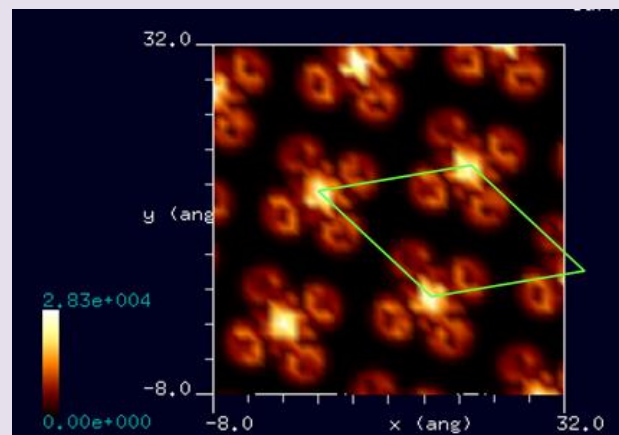




# 銅フタロシアニンのトンネル電流像シミュレート

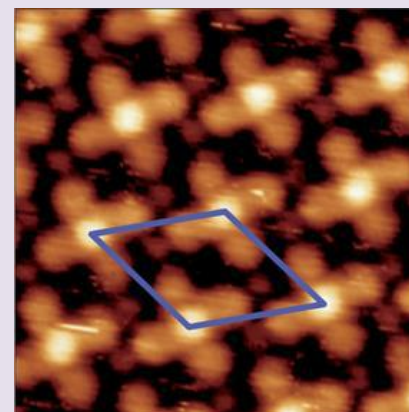


分子構造データ



シミュレーション画像

実験データ画像と、理論的に得られたシミュレーション画像を、パソコン上で簡単に比較検討することができます



実験画像

F. Sedona et al., Nature Materials 11, 970–977 (2012).

# SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ



材料開発で  
社会に貢献する

Advanced Algorithm & Systems  
<https://www.aasri.jp/>

金属・無機半導体などの材料開発  
をお手伝いします

新デバイスの開発による新たなテ  
クノロジーの発達を応援します

SPMシミュレータは、エコロジー社  
会の実現に貢献します





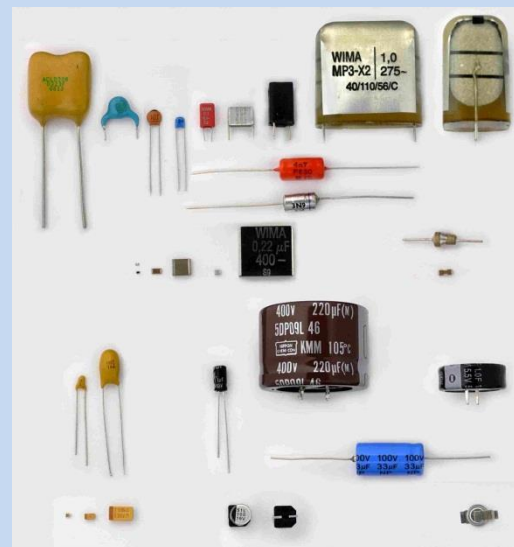
## 先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

丈夫で軽量な新素材を開発したい

高効率のデバイスを開発し、社会の省エネ化に貢献したい

車の軽量なボディーを開発し、 $CO_2$ の削減に貢献したい

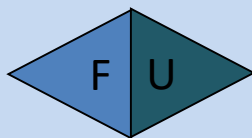
太陽電池の開発を通して、エネルギー問題に取り組みたい



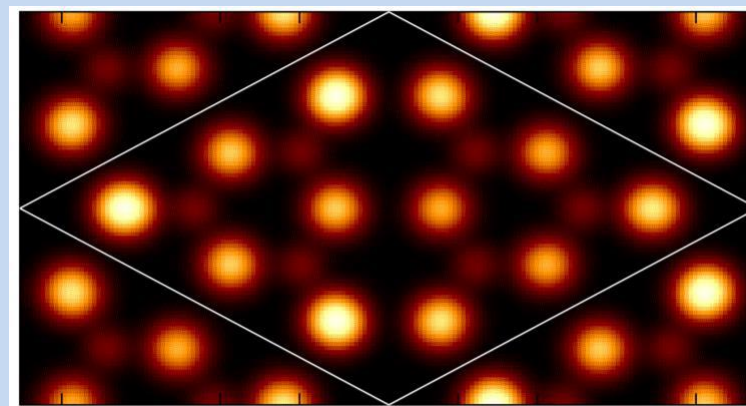
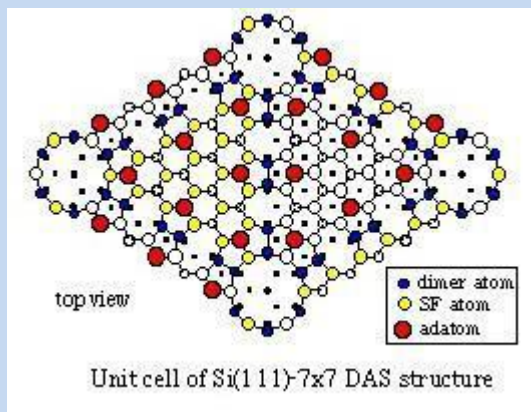
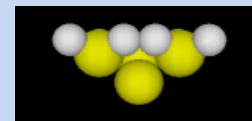
## 実験現場での様々なニーズにお応えします

- 金属・無機半導体等の材料の表面のSTM像をÅオーダーで求めたい
- 半導体のドーピングによる電気的な性質の変化を調べたい
- 金属表面の付着物質による電荷の移動を調べたい
- 半導体薄膜の電気的性質を調べたい

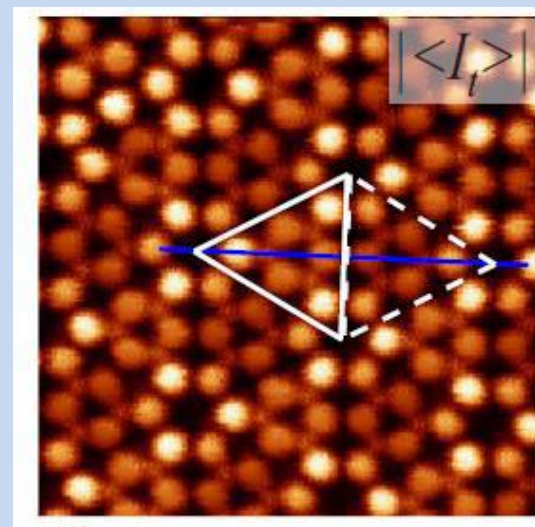
# Si(111)-7x7 DAS構造のSTM画像



STMシミュレーション  
シリコン探針、高さ 4.0 Å



F領域とU領域の明るさの違いを再現  
レストアトムがわずかに見えることを再現



実験 Sawada et al. (2009)



明日の世界の  
エコロジーを実現

Advanced Algorithm & Systems  
<https://www.aasri.jp/>

触媒材料の開発に貢献し、地球規模  
の環境保護を約束します

SPMシミュレータは、触媒分野での新  
素材開発を応援します

化学触媒の研究・開発をサポートし、  
エコロジーの実現をお手伝いします





## 先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

自動車排気ガスを無害化する化学触媒を開発したい

化学薬品を効率的に生産するための触媒を開発したい

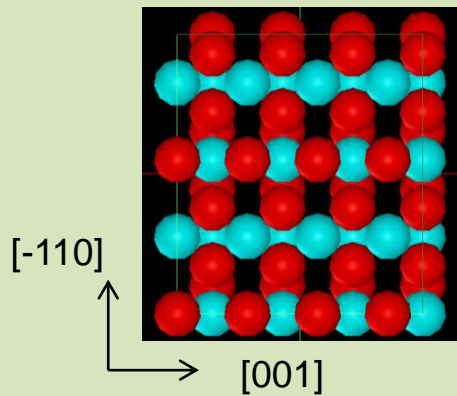
触媒開発でエコロジーに貢献したい

光触媒を環境浄化に役立てたい

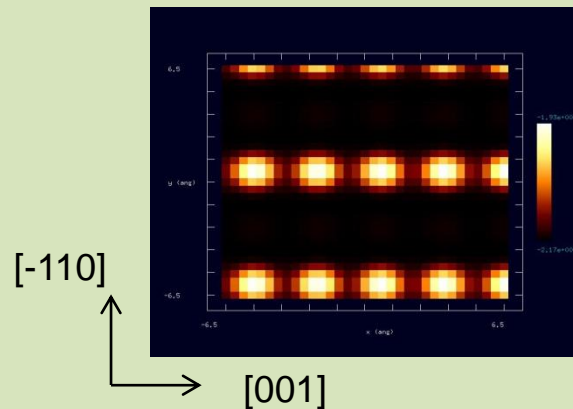


## 実験現場での様々なニーズにお応えします

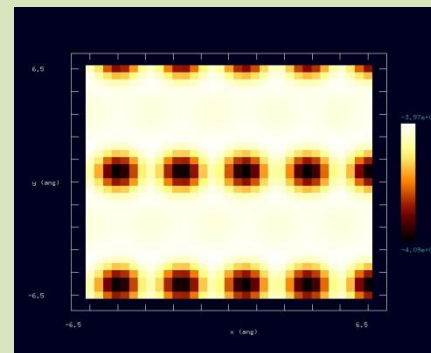
- STM(走査型トンネル顕微鏡)測定によって触媒表面に吸着した分子の様子を調べたい
- 触媒表面の分子が吸着する位置を特定したい
- 触媒表面で単位面積あたりに吸着する分子の個数を求めたい
- 触媒表面に吸着した分子の安定性を調べたい



光触媒TiO<sub>2</sub>

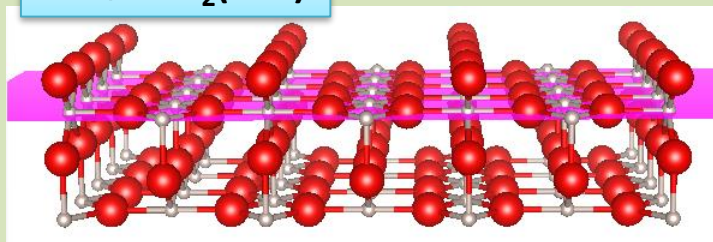


周波数シフトAFM像

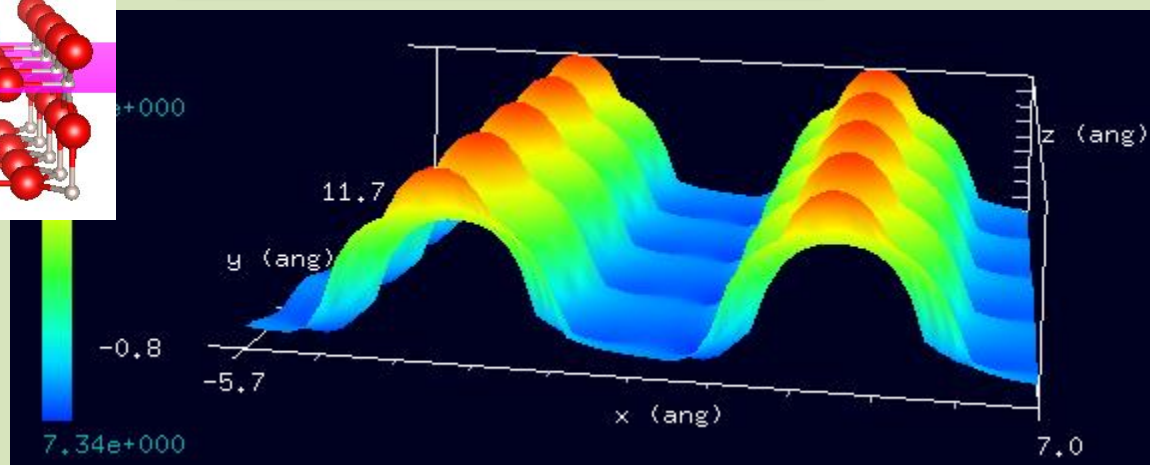


KPFM像

触媒RuO<sub>2</sub>(110)

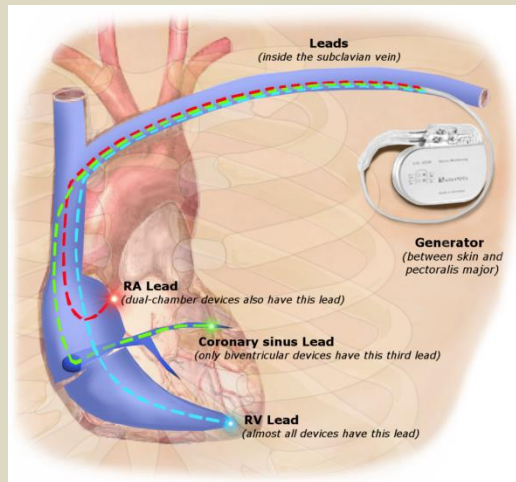


トンネル電流値0.46 nAのSTM像



# SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ

リチウム電池・  
透明電極分野



便利で豊かな  
明日のために

Advanced Algorithm & Systems  
<https://www.aasri.jp/>

リチウム電池・透明電極の開発を  
サポートし、新製品を産み出すお  
手伝いをします

SPMシミュレータは、新しいテクノロ  
ジーの発達により、より便利で豊か  
な社会になることを応援します





## 先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

安全で長持ちするリチウム電池を開発したい

高効率の透明電極を開発し、太陽電池の開発に活かしたい

リチウム電池の開発を通して医療分野に貢献したい

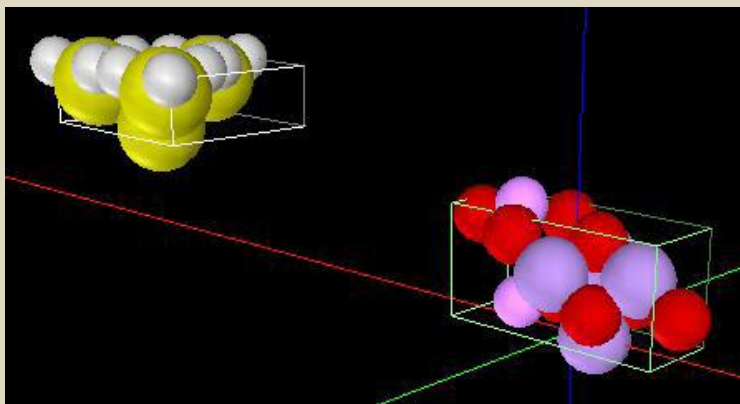
電気自動車の開発に役に立てたい



## 実験現場での様々なニーズにお応えします

- リチウム電池、透明電極等の材料の結晶のSTM像をÅオーダーで求めたい
- リチウムイオン電池の電極上に、別の金属原子や化合物分子が付着した様子を、シミュレーションしたい
- グラファイト層間にリチウム原子が配置された様子を調べたい
- デバイスの電氣的性質を調べたい

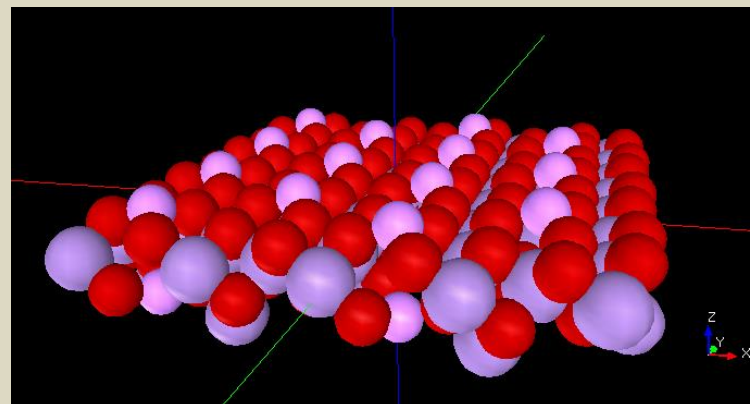
# リチウムイオン電池の正極活物質 $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ 粒子のSTM画像



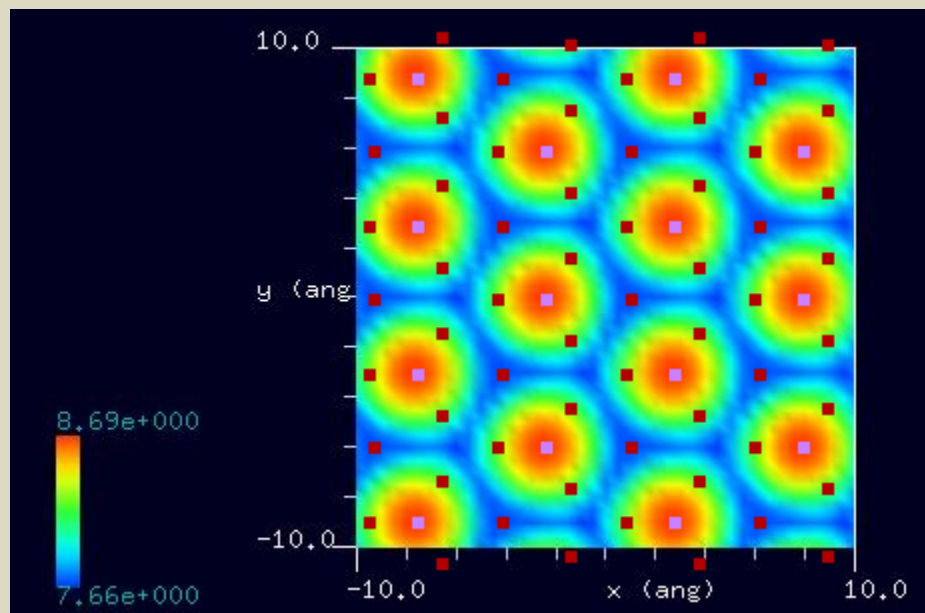
- : 酸素、 ● : リチウム、
- : マンガン、
- : シリコン、 ● : 水素

探針:  $\text{Si}_4\text{H}_9$ 探針  
試料:  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  (111)表面 (Li 終端)  
スキャンエリア:  $20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$   
スキャンモード:  
Constant current STM  
探針バイアス: +1.0 V  
電流値: 10 nA

計算結果



周期的境界条件を課した  
Li 終端モデル



世界初SPM「実験—計算」画像比較型・世界標準仕様(計算機能)、粘弾性接触解析手法新規適用、及び DFTB計算元素69種活用に依り、あらゆる(有機・無機)化合物に対してシミュレーションが、各研究テーマ及び用途区分に対して、実行可能です。

## 各研究テーマ

バイオ・ソフトマテリアル

繊維状高分子

有機半導体

金属・無機半導体

触媒

リチウム電池・透明電極

SPMシミュレータはPHASE/0のプリプロセッサとして運用

## 用途区分

食品

製薬

化粧品

バイオ

合成ゴム

医療用品

繊維

化学合成

炭素素材

プラスチック

電子デバイス

有機EL

半導体素子

ハードディスク

金属材料

セラミックス

情報通信機器

自動車

化学プラント

バッテリー

液晶

# 構成ソルバ毎： 新機軸/イノベーション

- 計算機能
- 新機軸/イノベーション  
SPMシミュレータの利用が見込める産業分野を対象として、シミュレーション と その結果をSPM実験装置で活用して頂くという側面で 新機軸/イノベーション、普及による市場の活性化、視点でまとめる。
- 産官学ユーザへのメリット // 研究テーマ/用途区分

Analyzer

実験データ画像処理プロセッサ

以下の機能をご用意しています

SPM実験画像データの直接読み込み機能

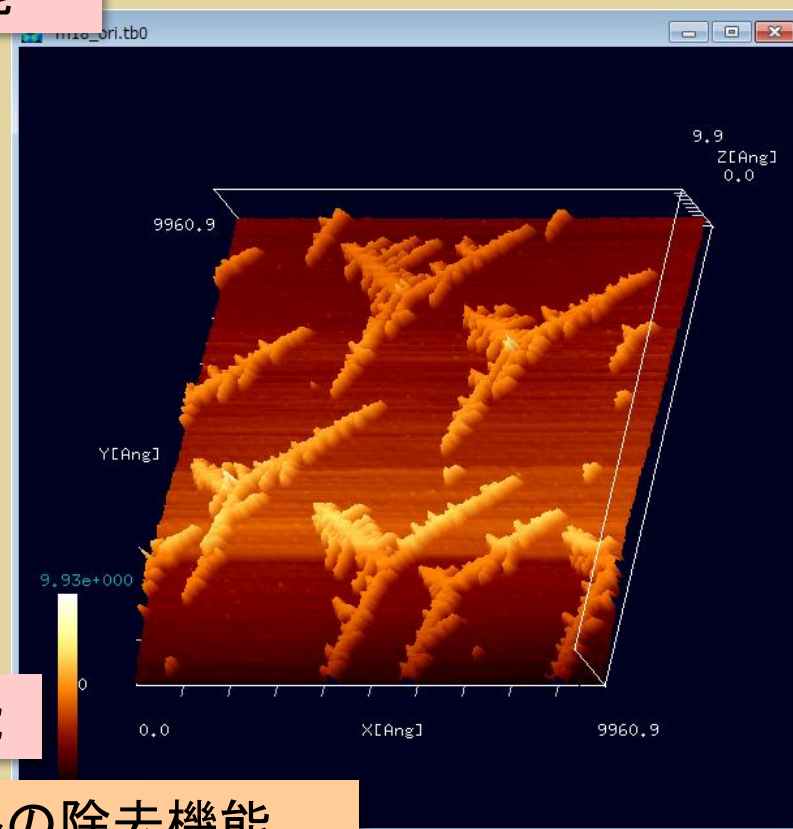
SPM実験画像とシミュレーション画像の比較機能

様々なデジタル画像処理機能

- 基板傾斜補正機能
- 立体表示機能
- 探針形状推定機能
- フーリエ画像解析機能
- コントラスト調整機能
- 画像ノイズ除去機能
- エッジ抽出機能
- 画像の高解像度化機能

ニューラルネットワーク学習による画像補正機能

探針欠損によって引き起こされるアーティファクトの除去機能



## Analyzer

## 実験データ画像処理プロセッサ

以下のイノベーションを実現します

SPM実験画像とシミュレーション画像との比較により、新たな物理的知見が得られます

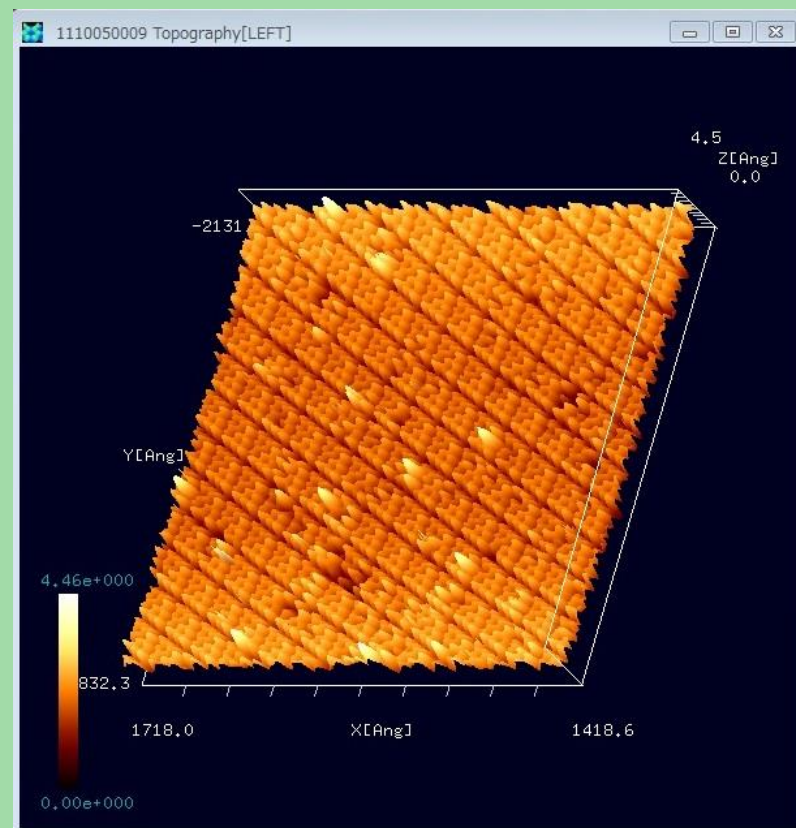
これまで、あいまいだったSPM実験画像の物理的解釈を、シミュレーション画像との比較により、明確にすることができます

特に走査型トンネル電子顕微鏡実験画像においては、明るい部分と暗い部分が、そのままでは、高さ情報と対応しない場合があります、そのような際の、実験画像解釈に威力を発揮します

→

明るい部分が高い点、暗い部分が低い点、とは限りません

DFTBソルバと併用して確認作業を行ってみてください





# Analyzer

## 実験データ画像処理プロセッサ

以下の市場への波及効果が期待できます

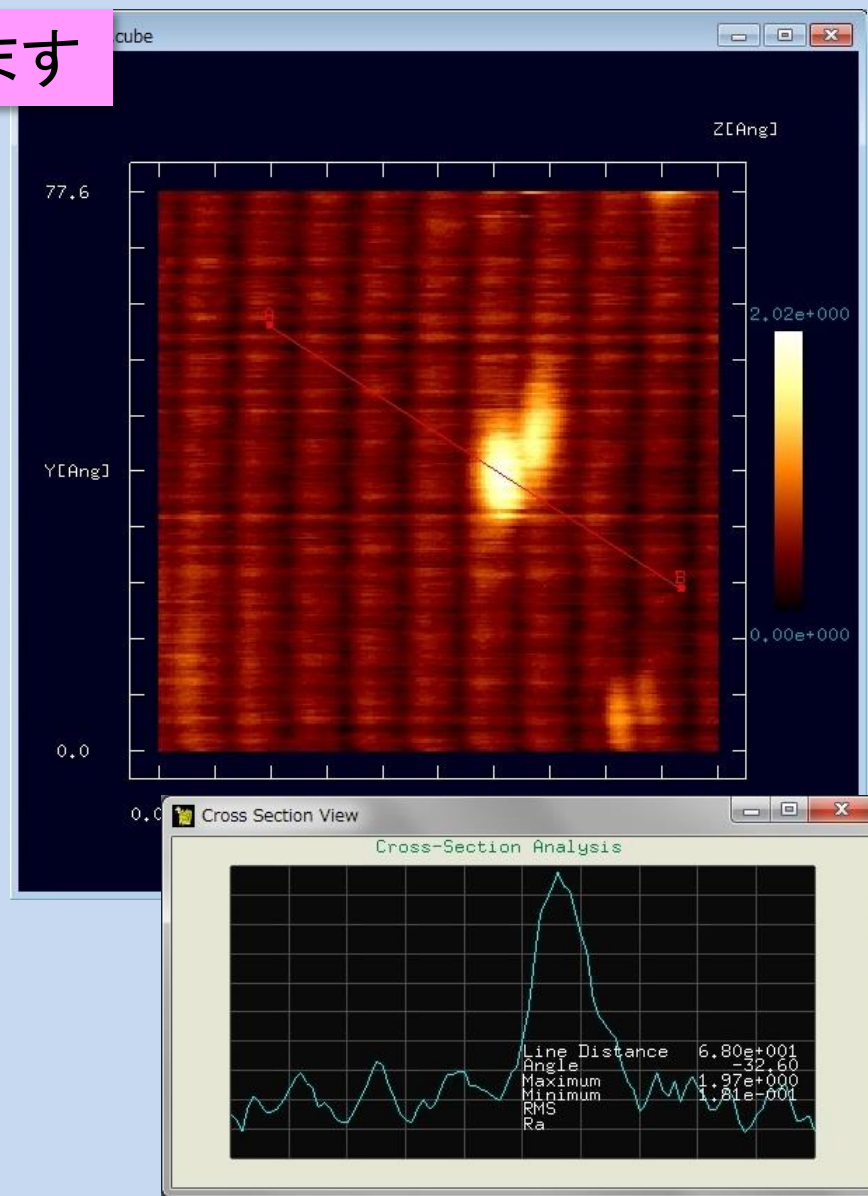
あらゆるSPM実験画像を取り扱えますので、化学、バイオ、薬学、半導体など、分野を問わず、ご利用いただけます

大学内の研究室、公的研究機関、民間企業などの、あらゆる現場でご活用いただけます

デバイス開発の例として、CG, MDソルバを使えば、有機半導体分子の周波数シフトAFM像が得られます

自動車関連分野への応用として、DFTBソルバを使えば、触媒金属上に吸着した分子のSTM像が得られます

これらのシミュレーション結果と、実験画像データの比較に、Analyzerは威力を発揮します



# Analyzer

## 特徴

SPM実験データとシミュレーション計算データの同時デジタル処理を実現します

## 適用分野

無機・有機材料全般、ナノマテリアル、有機ソフトマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス関連

SPM実験装置から出力されるバイナリ形式画像データを読み込んでメインウィンドウに表示し、デジタル画像処理を施すことができます。実験画像とシミュレーション画像を同一のウィンドウ上に表示し、比較・検討により新たな物理的知見を得ることが可能です。

## 実験データ画像処理プロセッサ

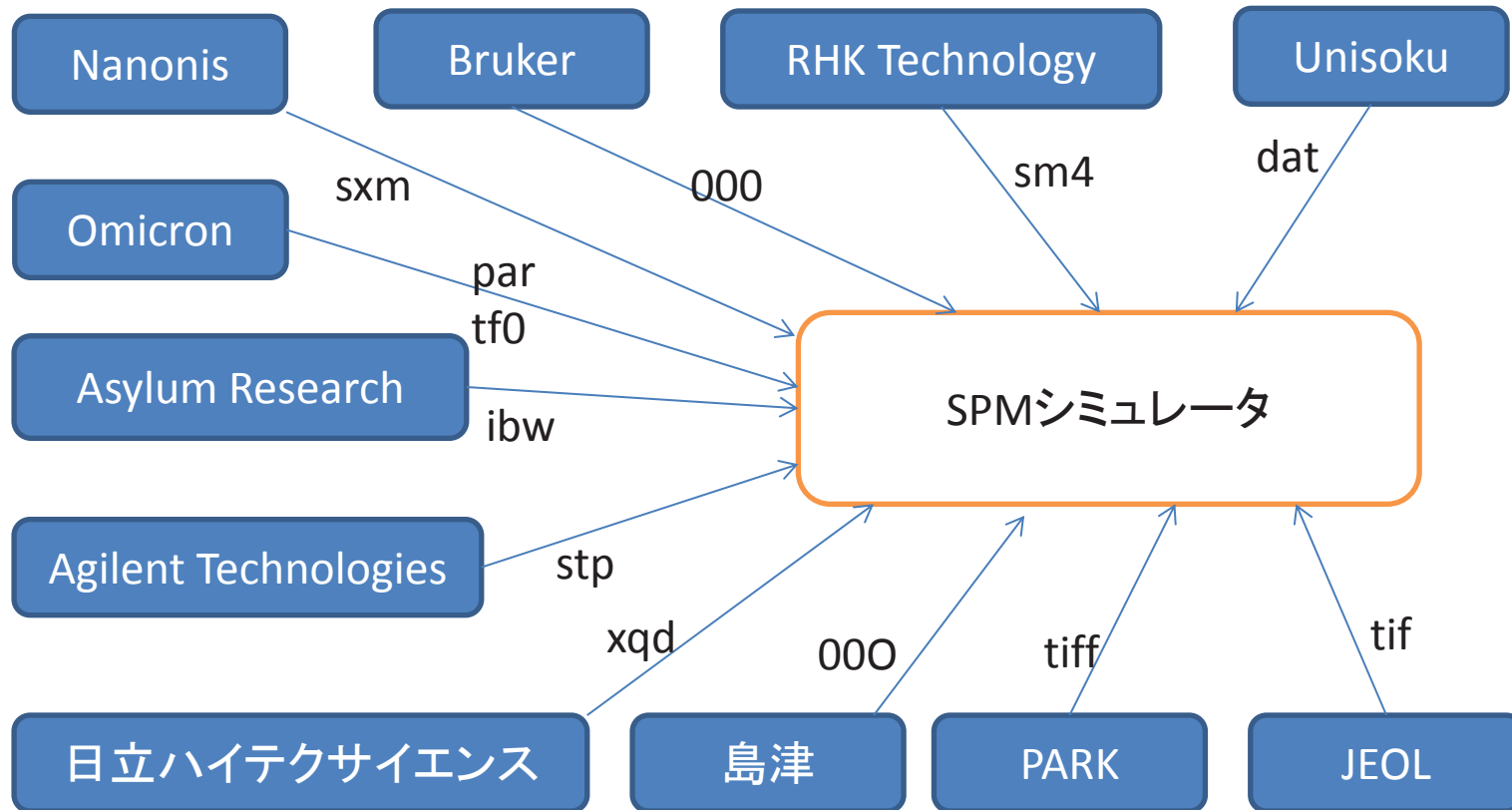
探針形状推定機能  
メーカー各社のSPM実験データの読み込み機能

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

従来のシミュレータと比較して、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

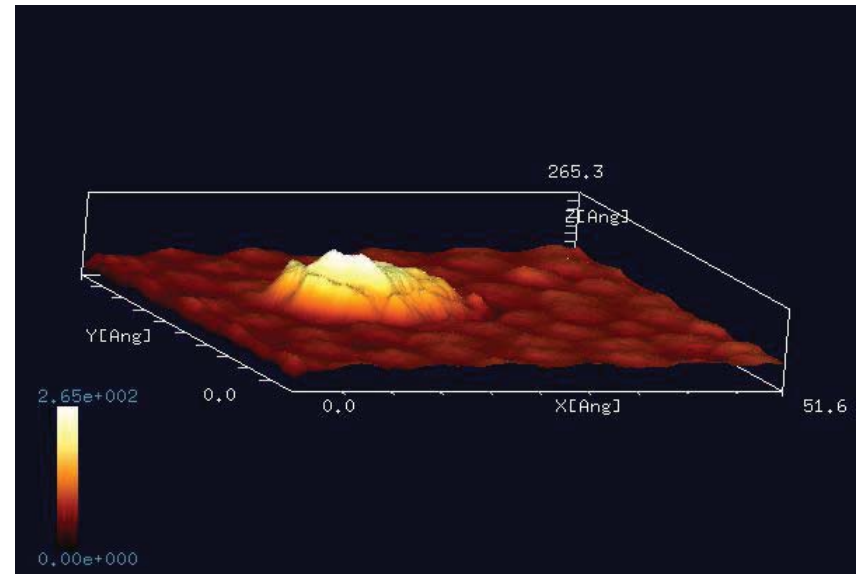
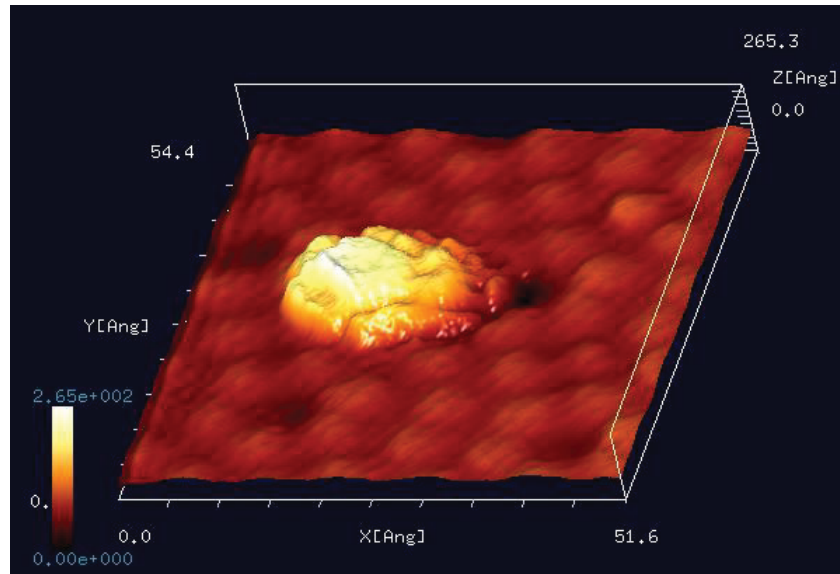
# 実験データ読み込み機能

ほぼ全てのメーカー製SPM実験データを直接読み込み可能



この他にも、JPEG, BitMap等、ほぼ全ての種類の画像データが読み込み可能

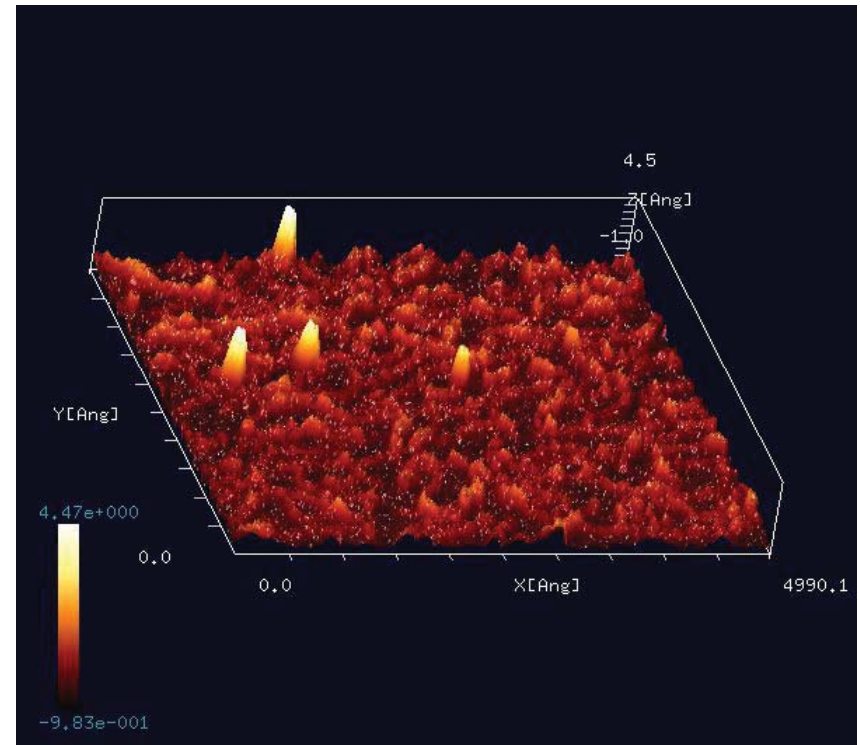
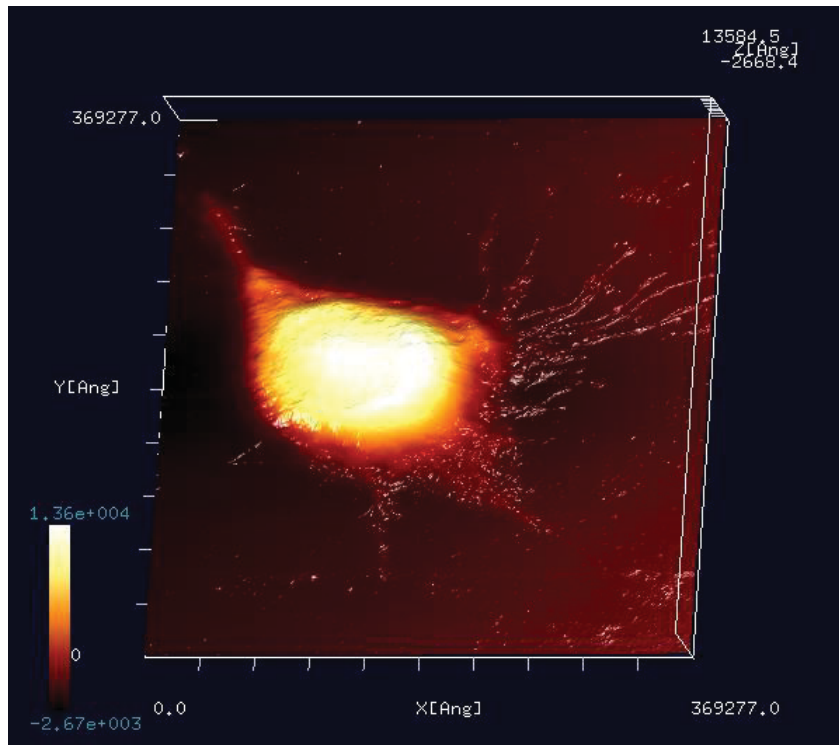
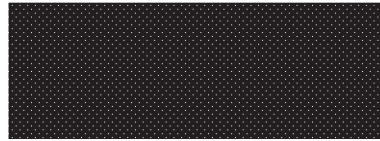
# データ読み込み例:



データの拡張子はtxt

メーカー名は伏せてあります

# データ読み込み例:

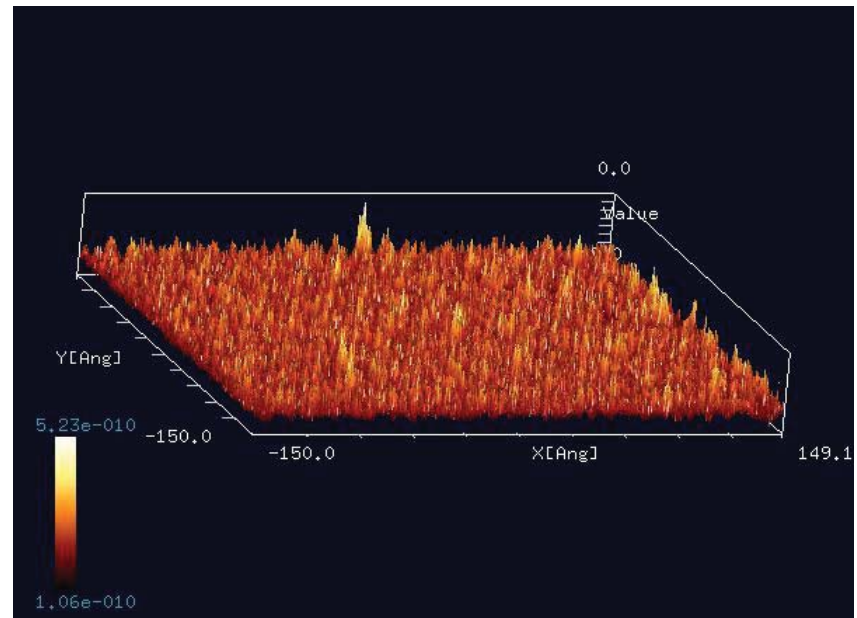
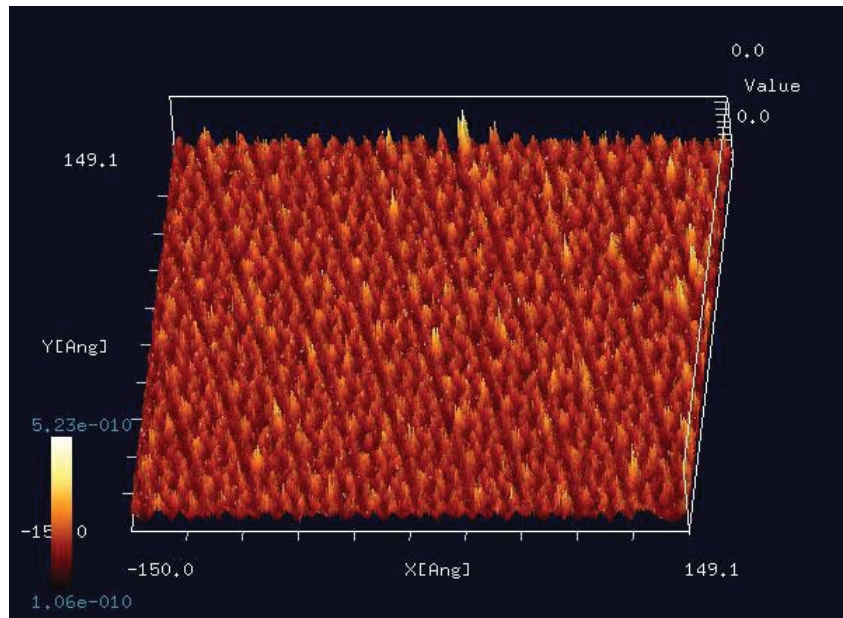
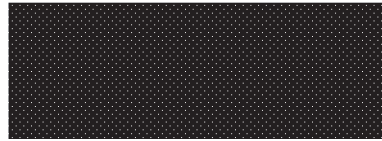


データの拡張子はstp

メーカー名は伏せてあります



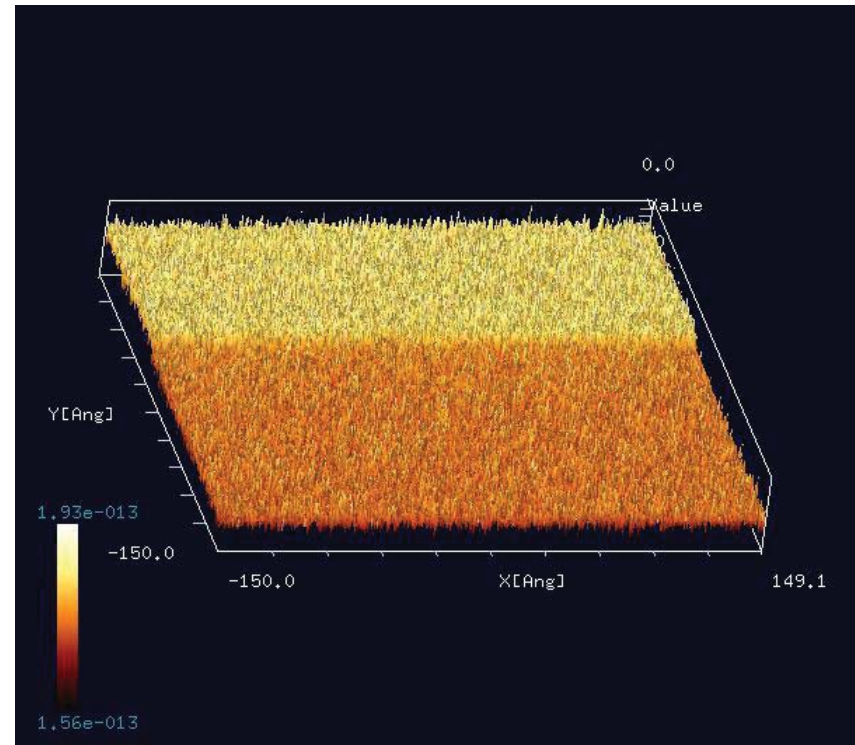
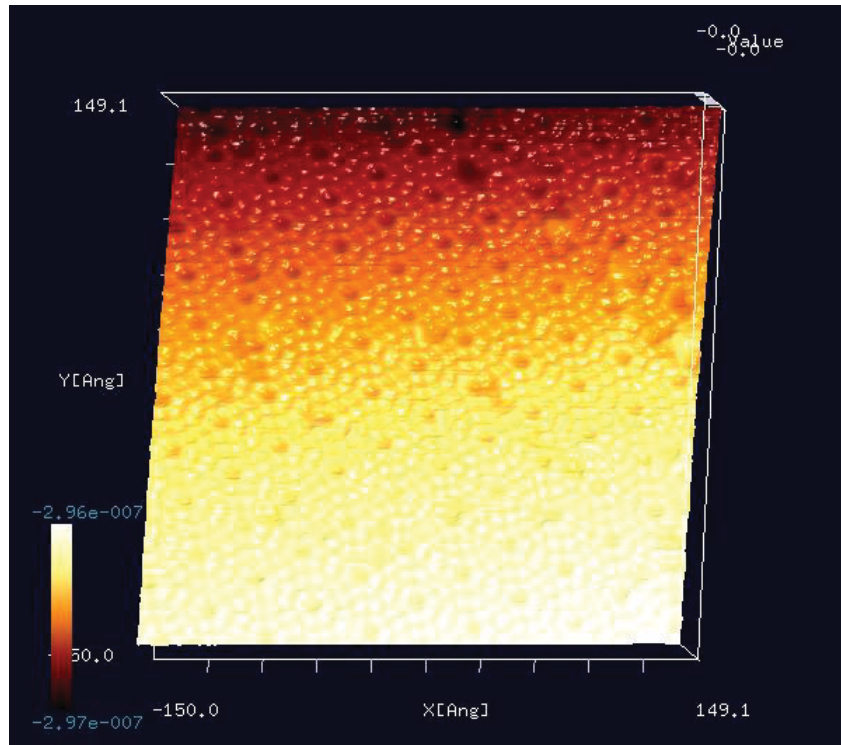
# データ読み込み例:



データの拡張子はsxm

メーカー名は伏せてあります

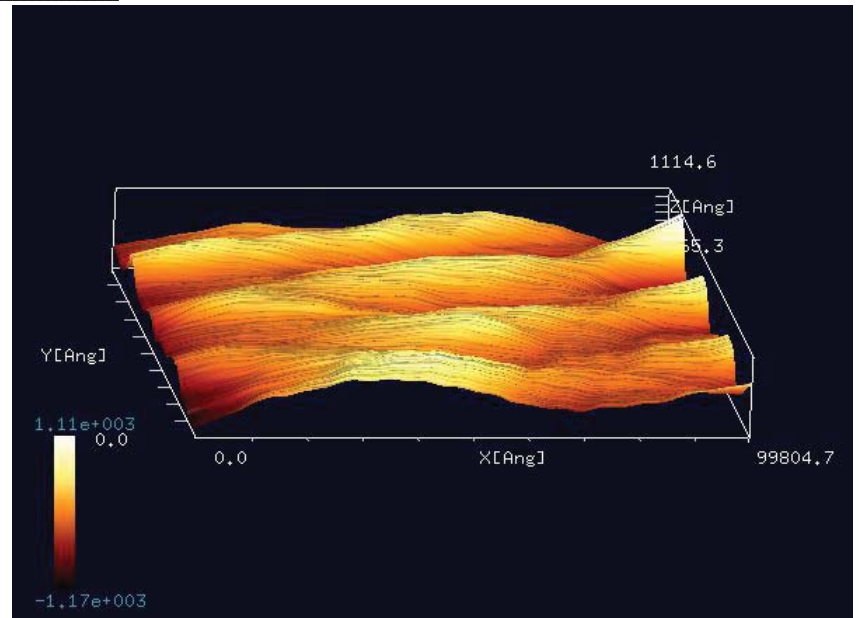
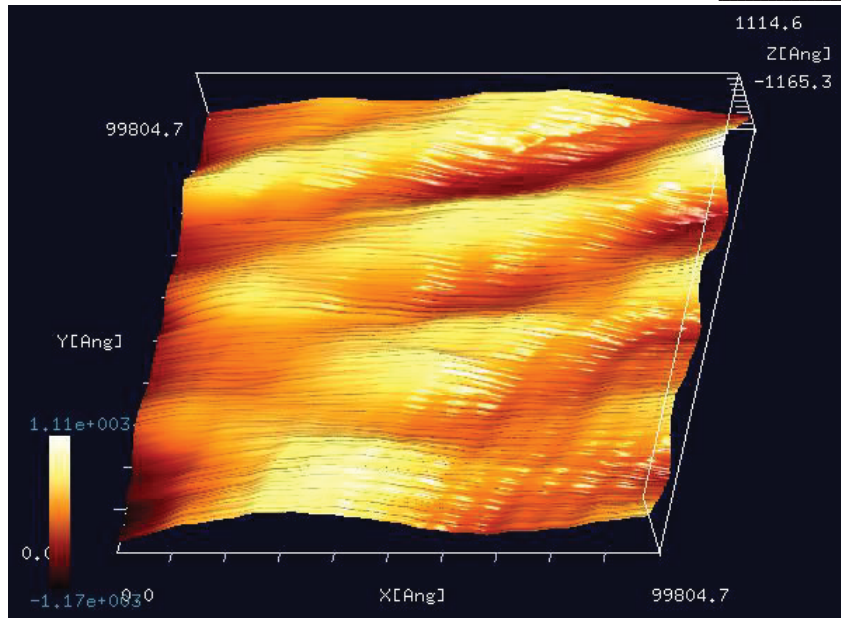
# データ読み込み例:



データの拡張子はsxm

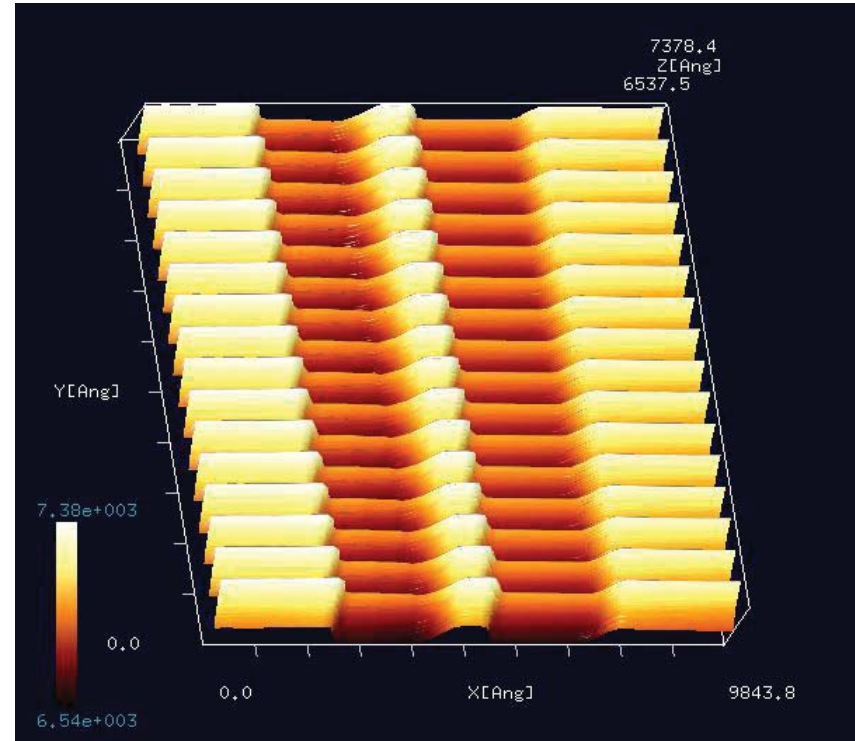
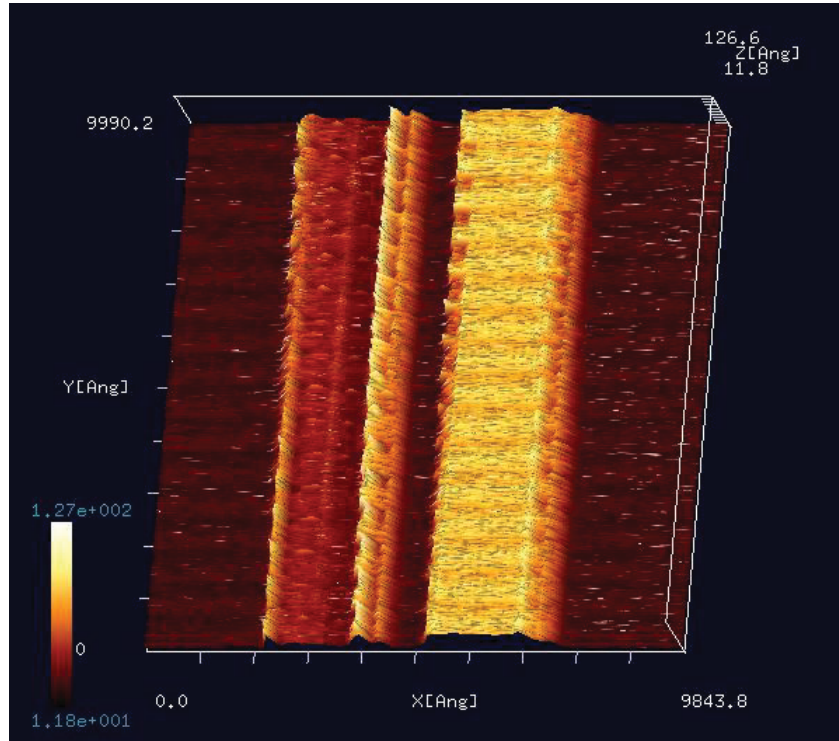
メーカー名は伏せてあります

# データ読み込み例:



データの拡張子は000等

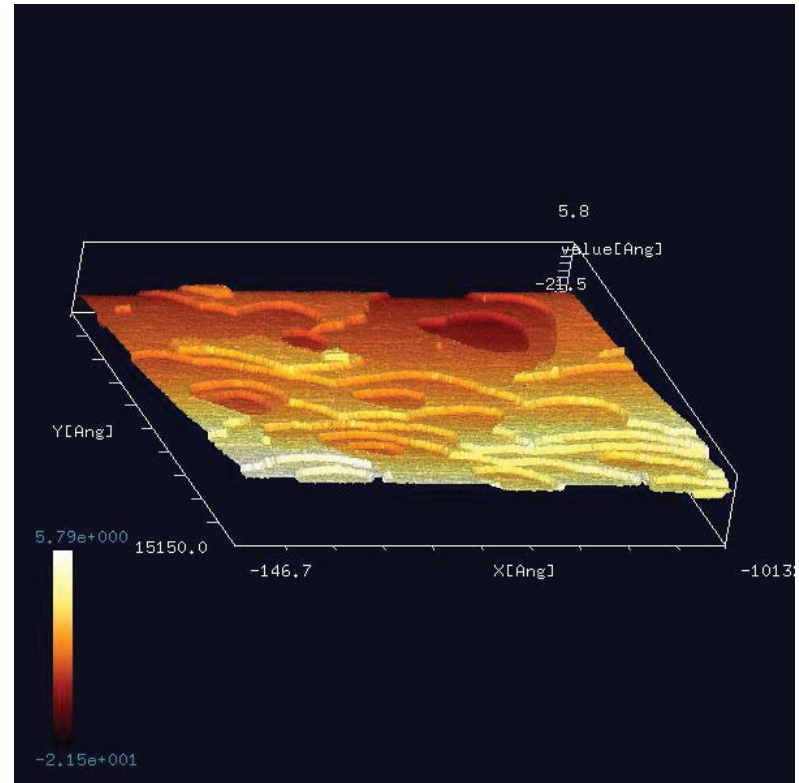
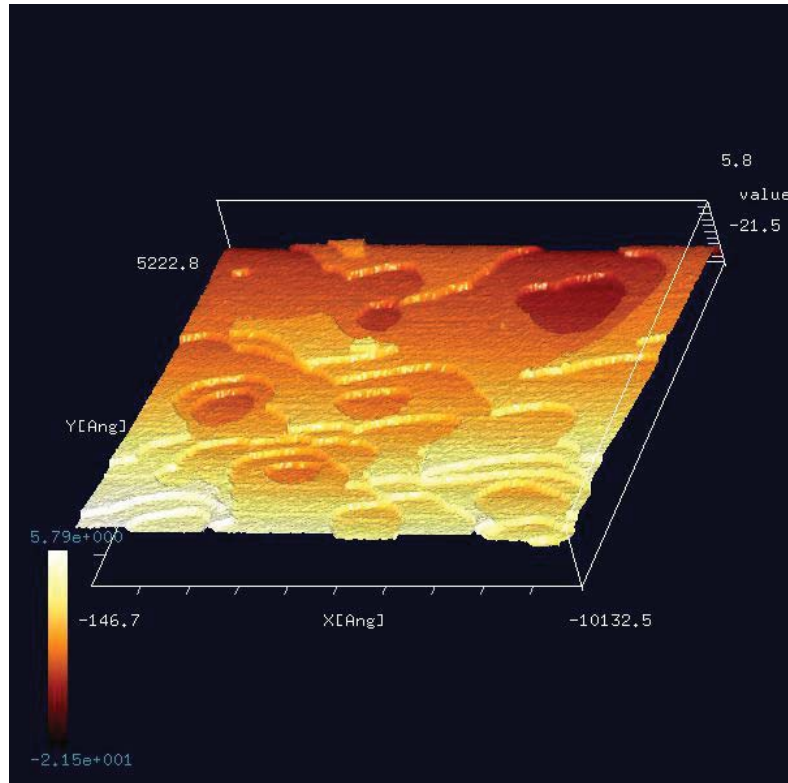
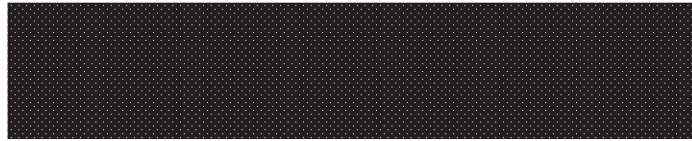
# データ読み込み例:



データの拡張子は000等

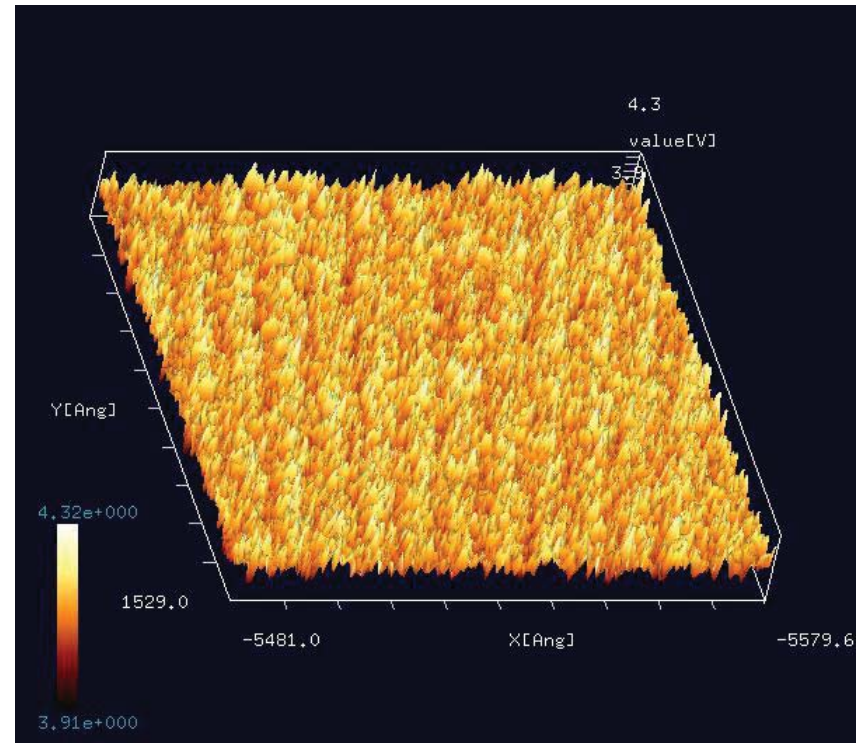
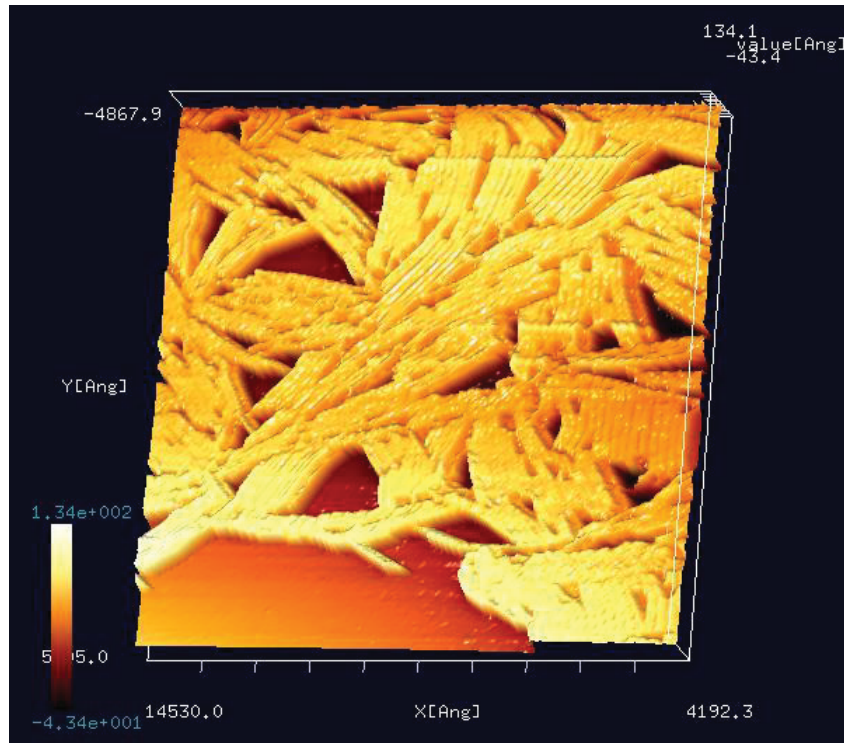


# データ読み込み例:



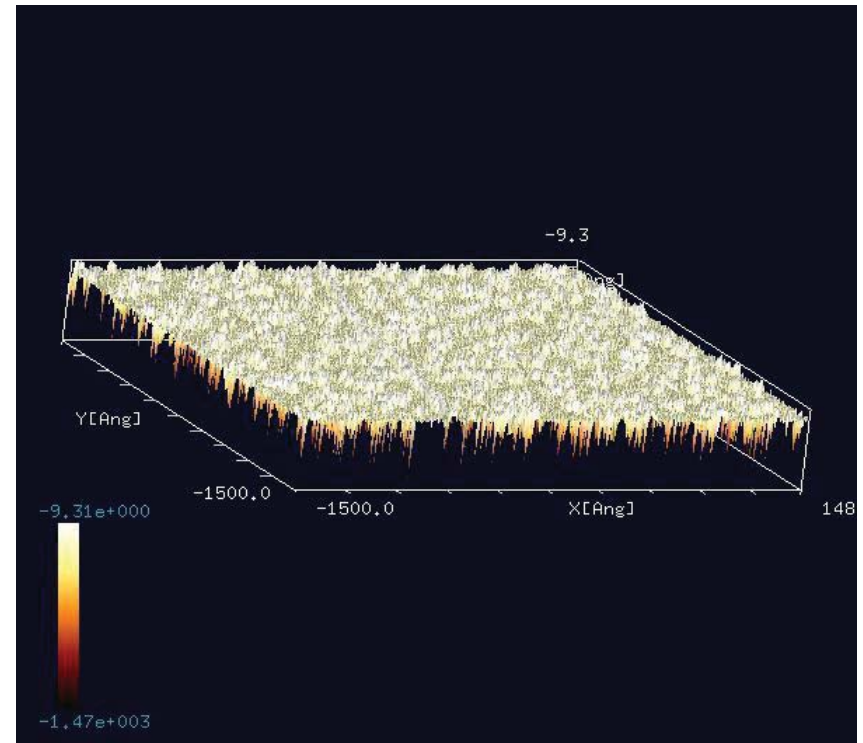
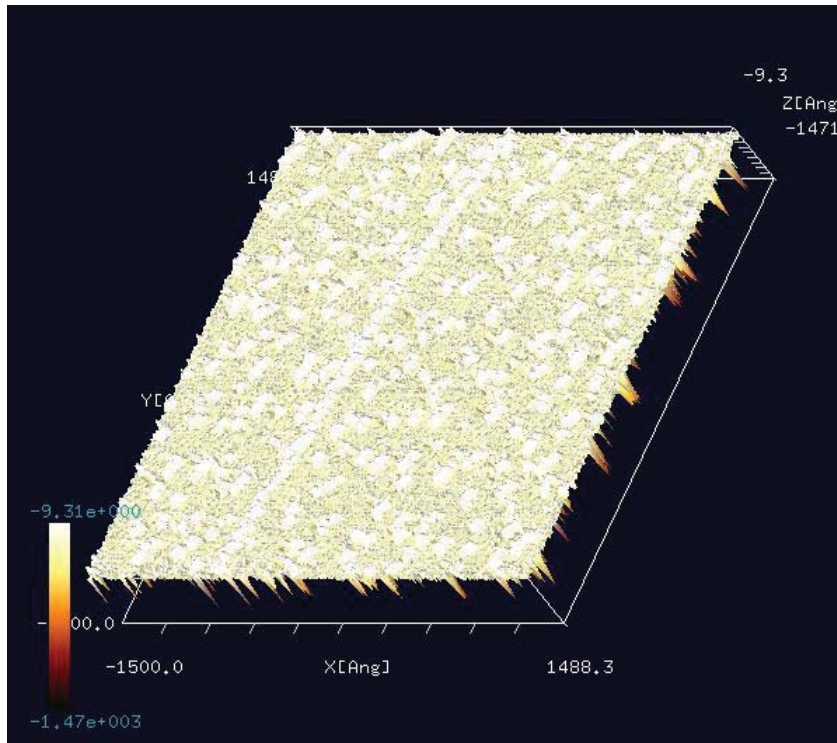
データの拡張子はsm4

# データ読み込み例:



データの拡張子はsm4

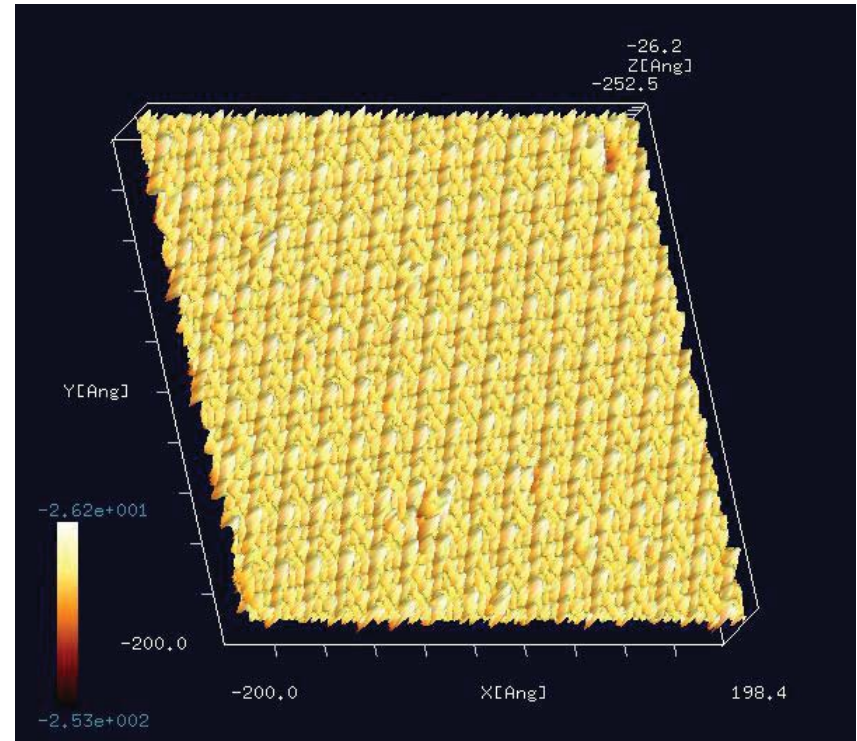
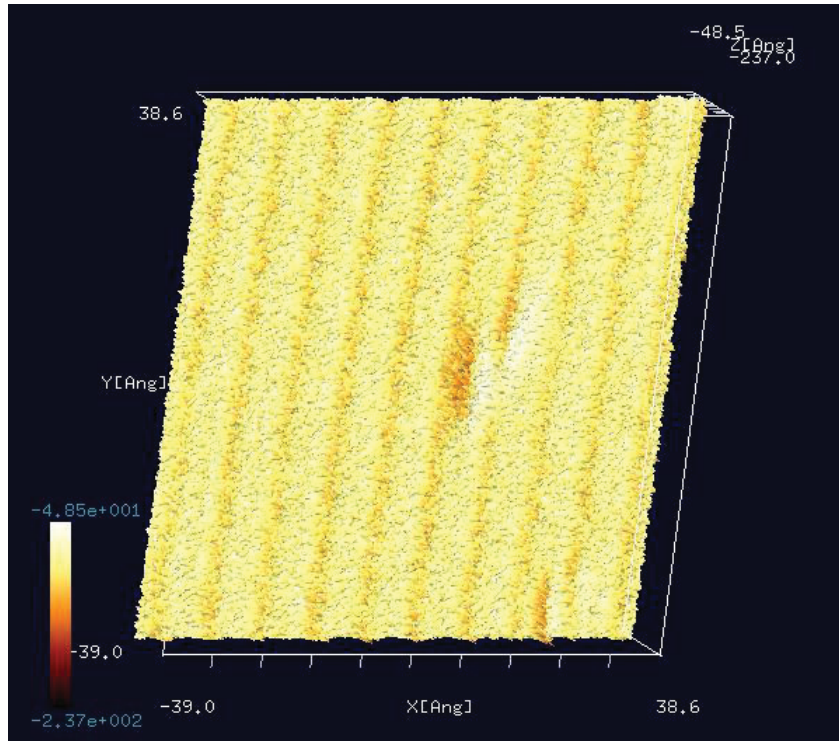
# データ読み込み例:



データの拡張子はtxt

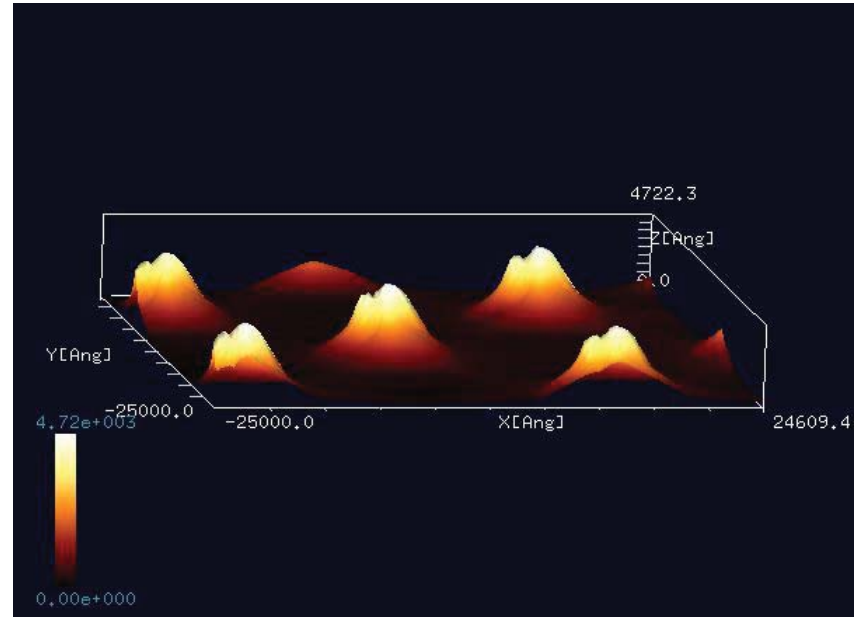
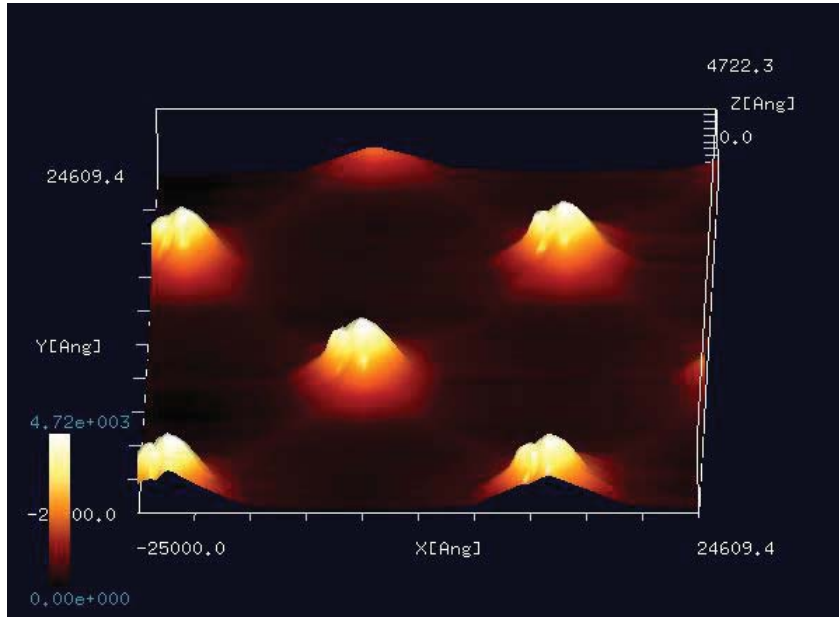
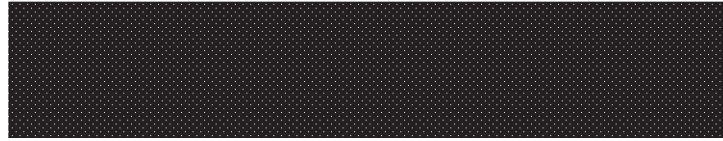


# データ読み込み例:



データの拡張子はtxt

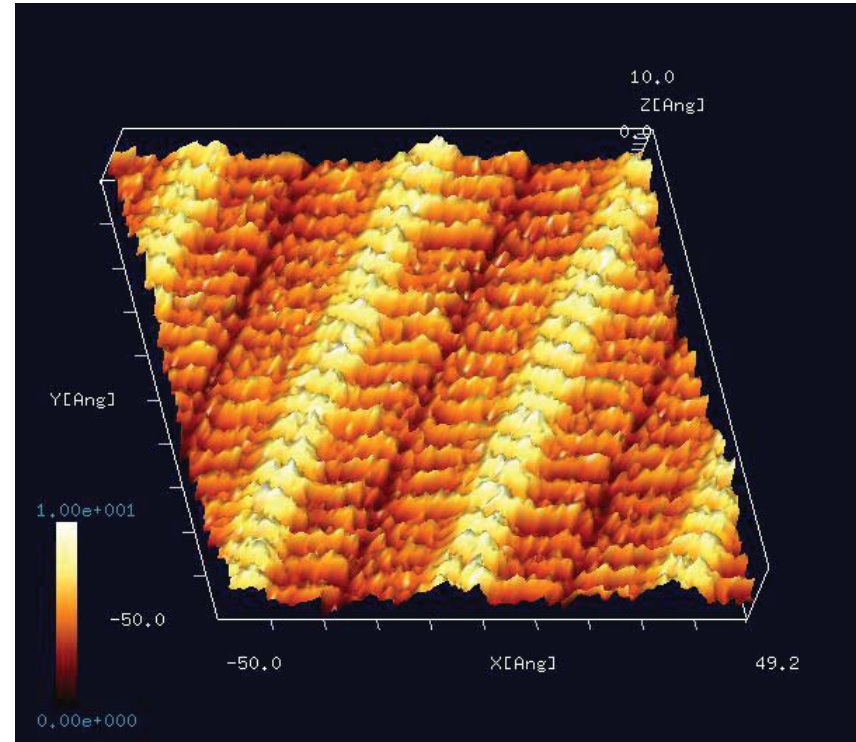
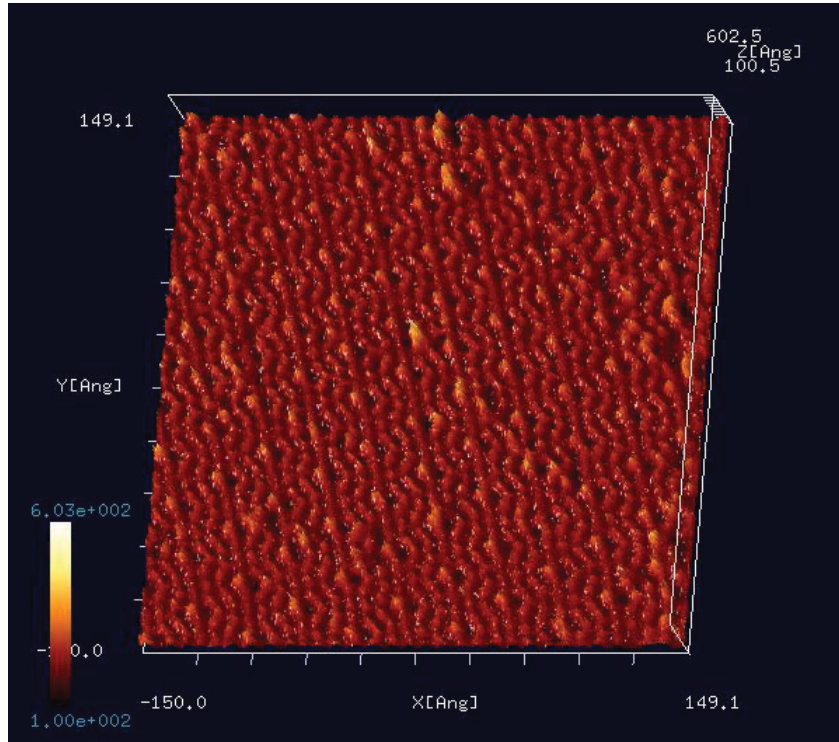
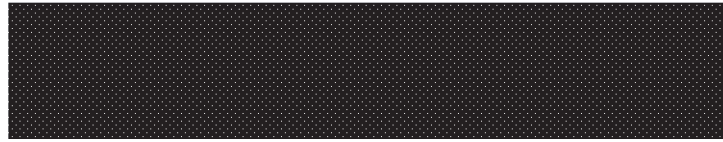
# データ読み込み例:



データの拡張子はasc

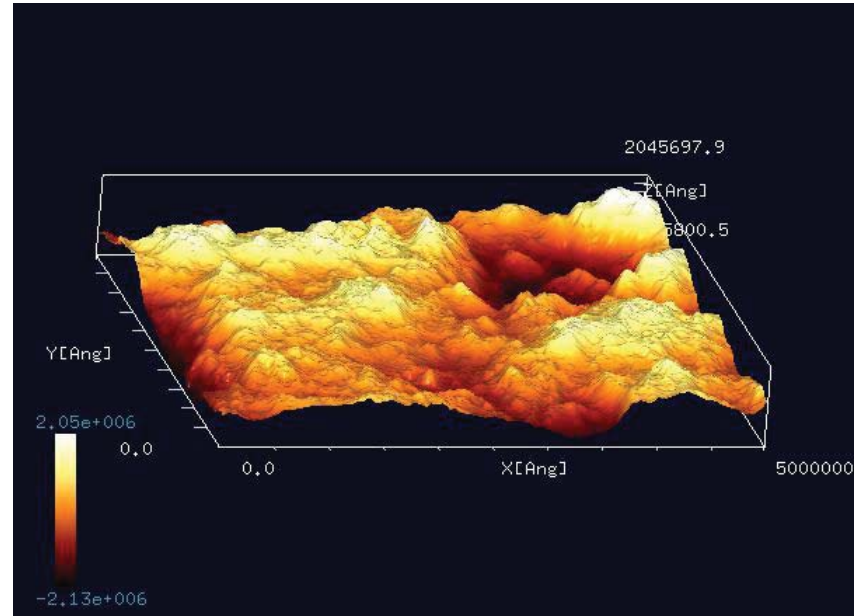
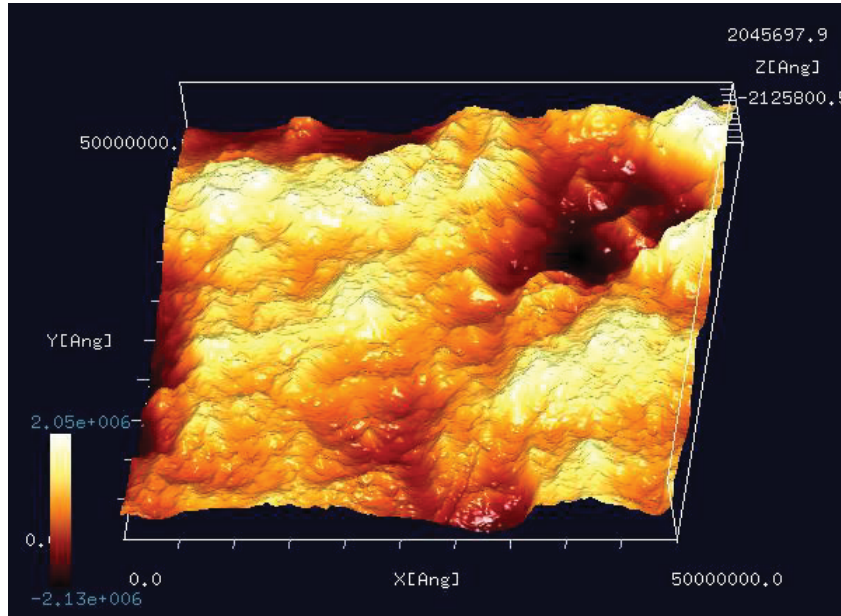
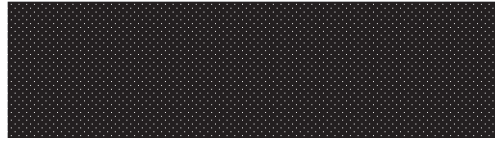


# データ読み込み例:



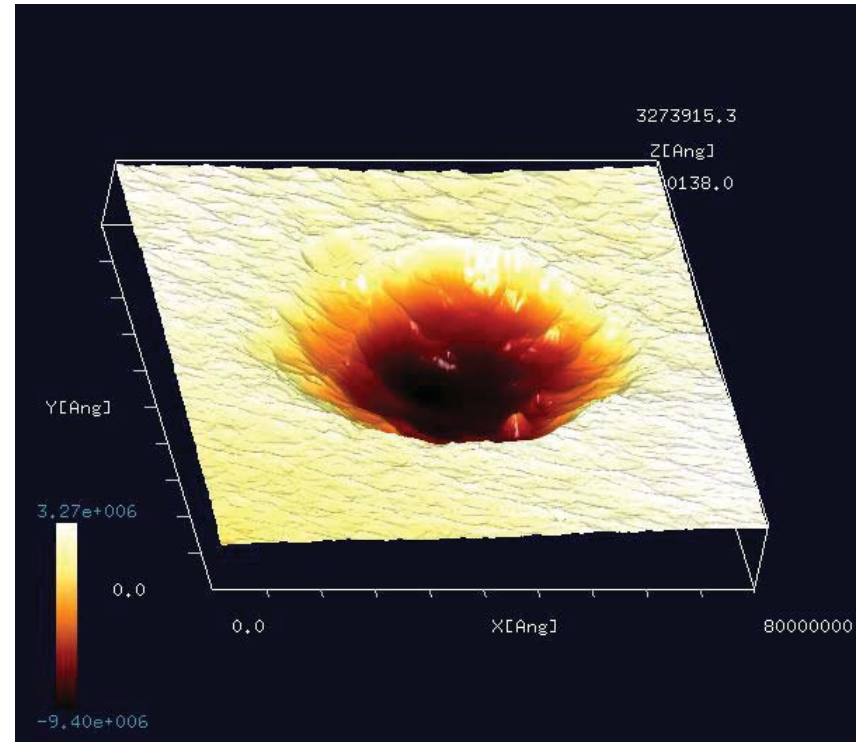
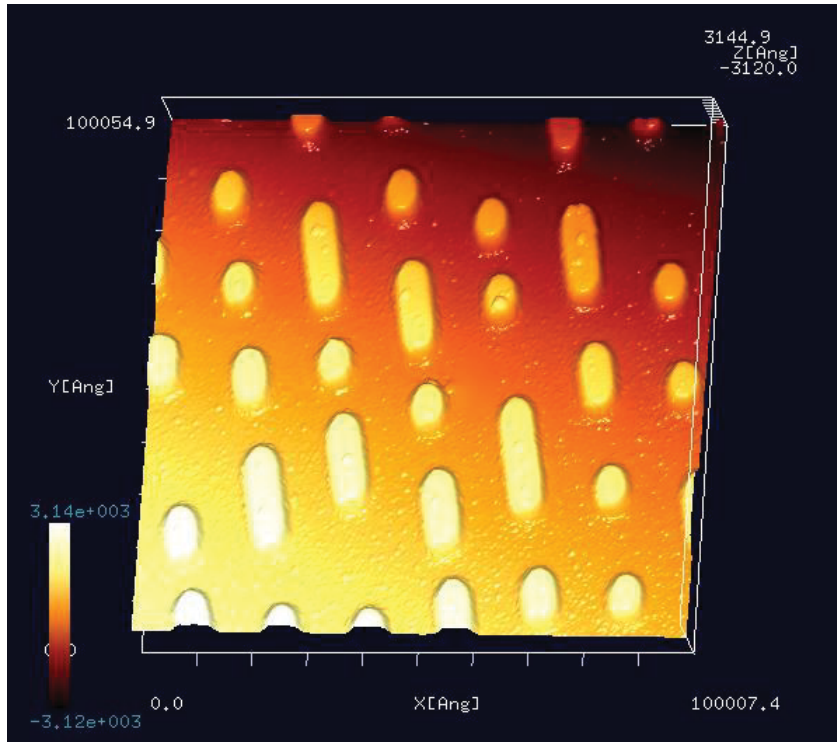
データの拡張子はasc

# データ読み込み例:



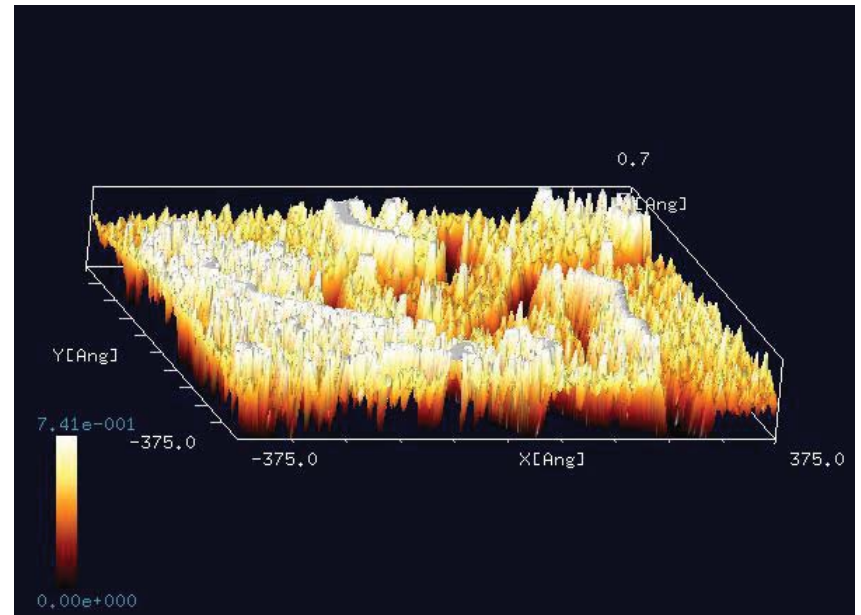
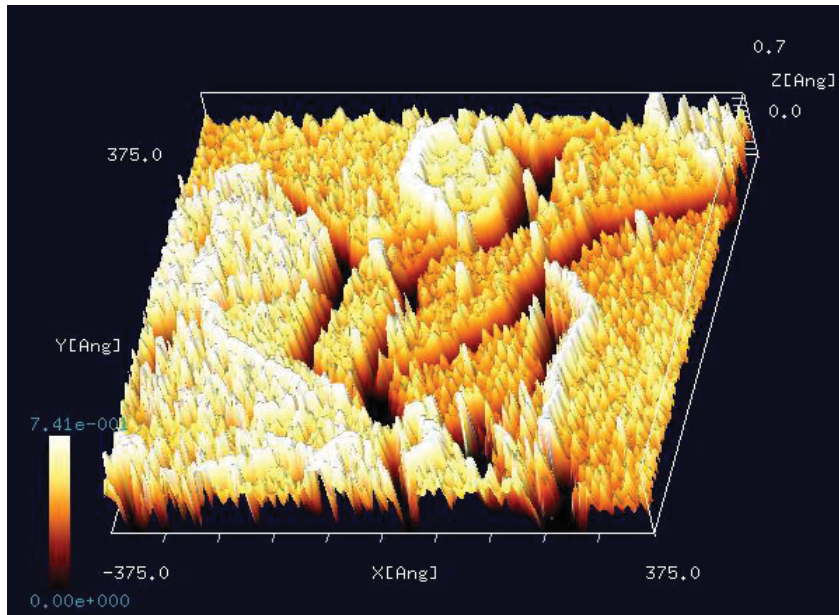
データの拡張子はsur

# データ読み込み例:



データの拡張子はsur

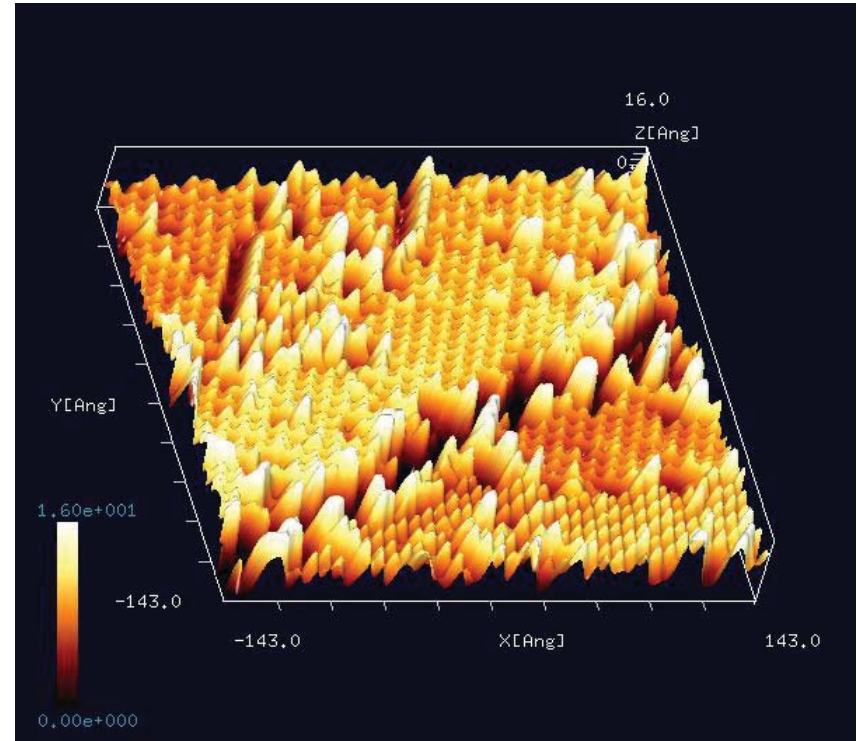
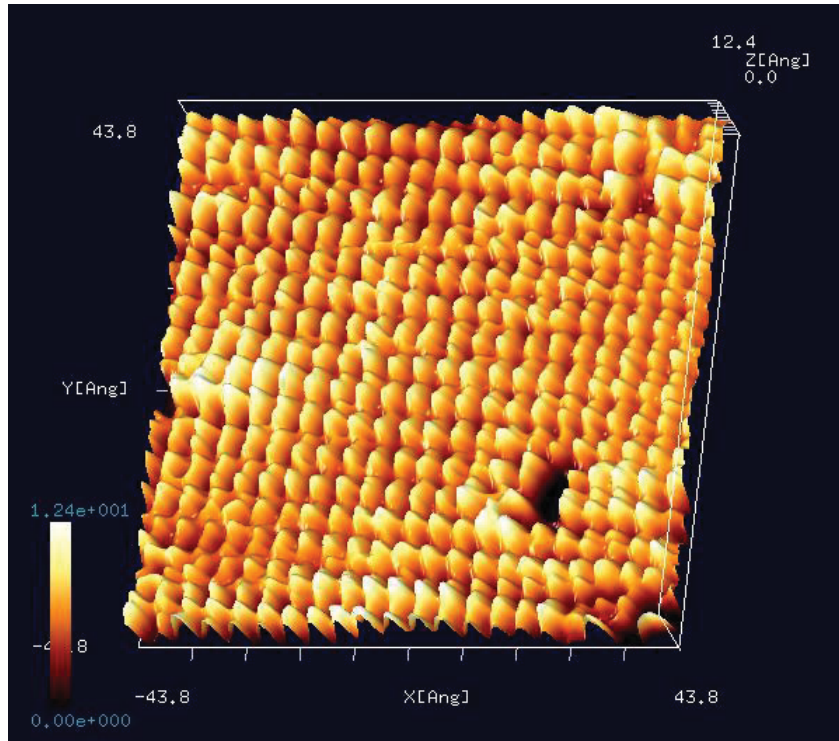
# データ読み込み例:



データの拡張子はhdr,dat

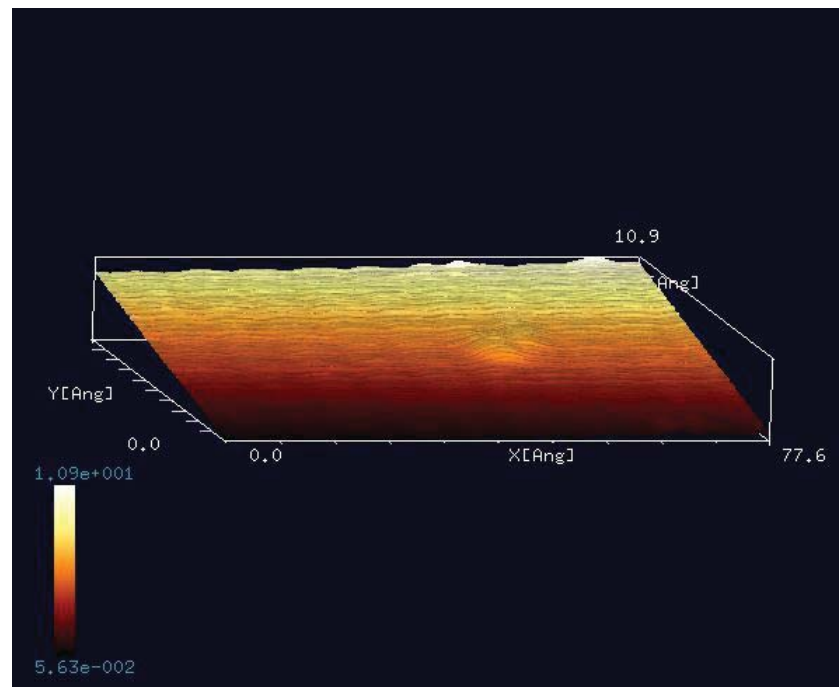
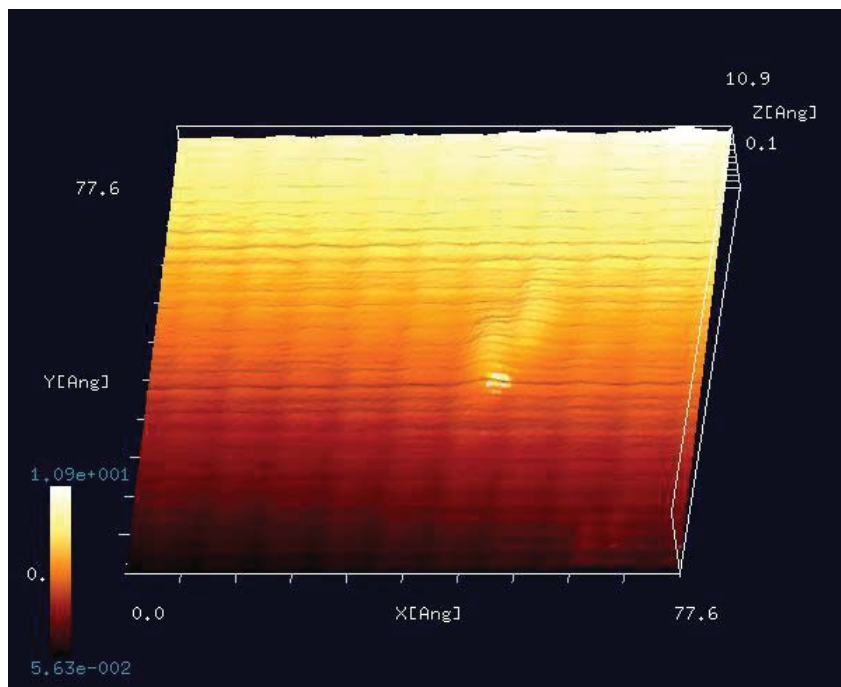


# データ読み込み例:



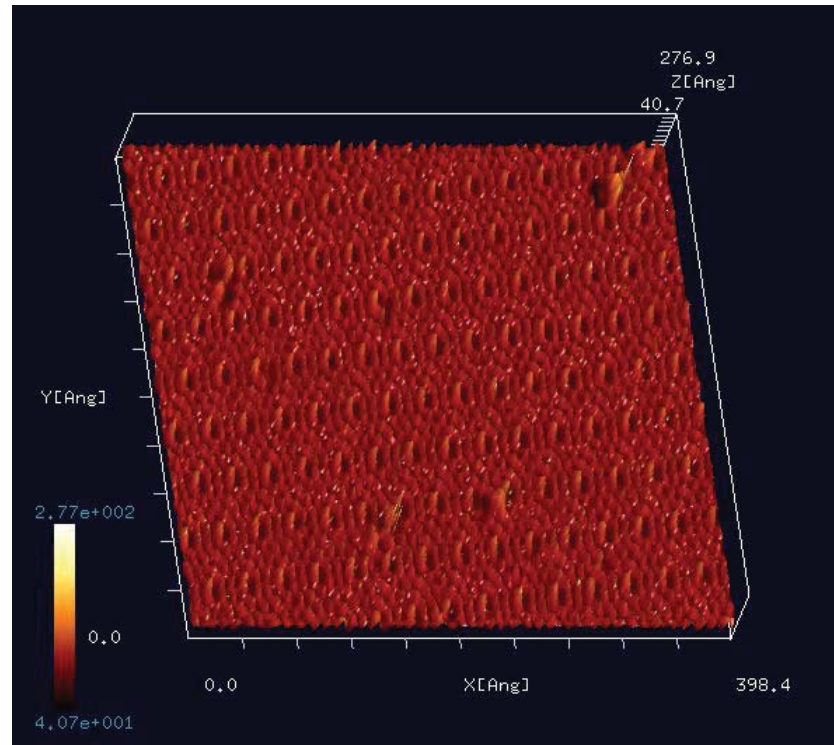
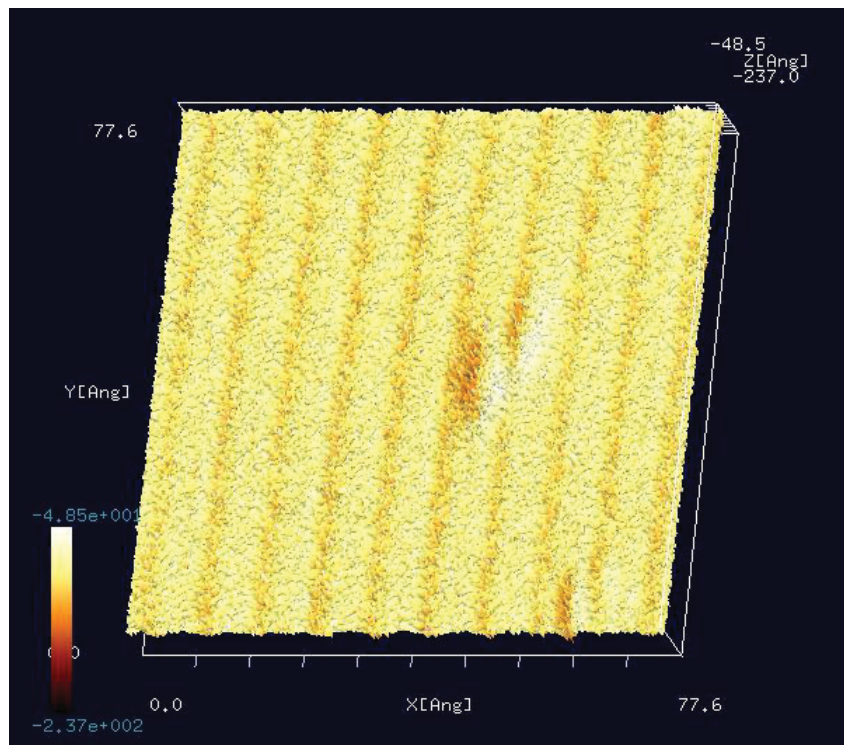
データの拡張子はhdr,dat

# データ読み込み例:



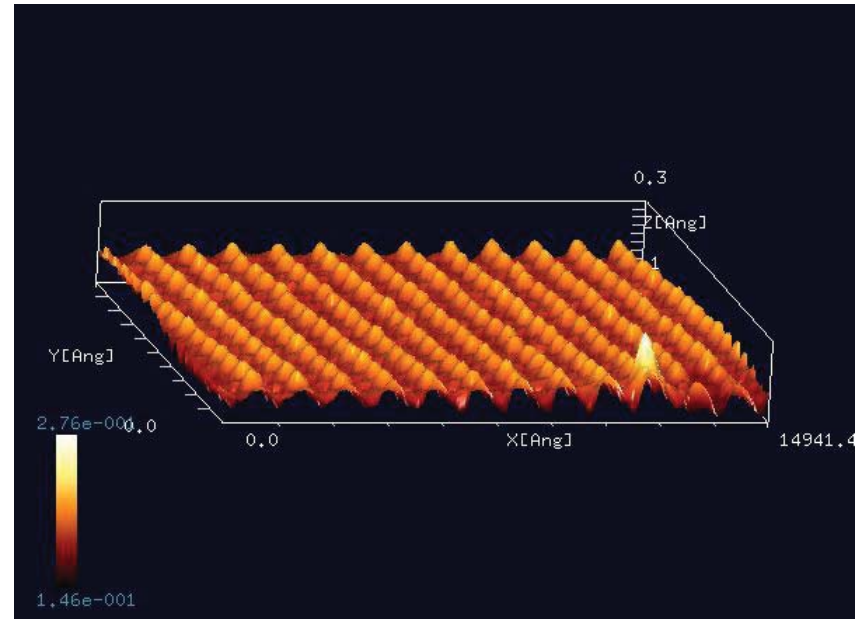
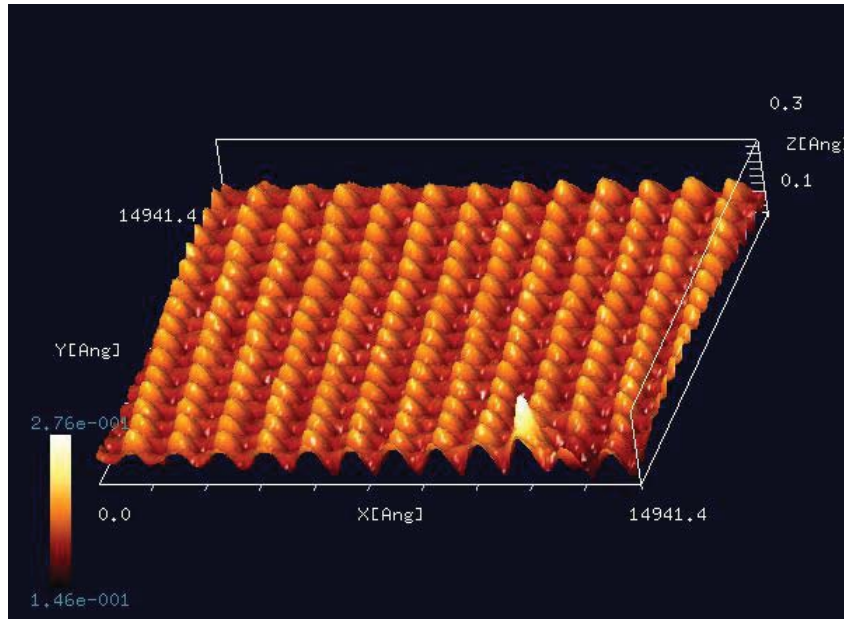
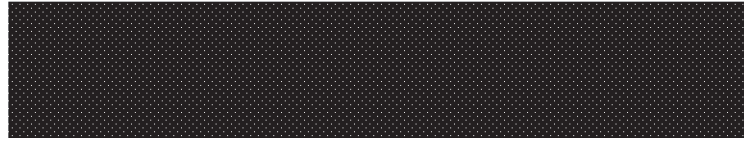
データの拡張子はpar,tf0等

# データ読み込み例:



データの拡張子はpar,tf0等

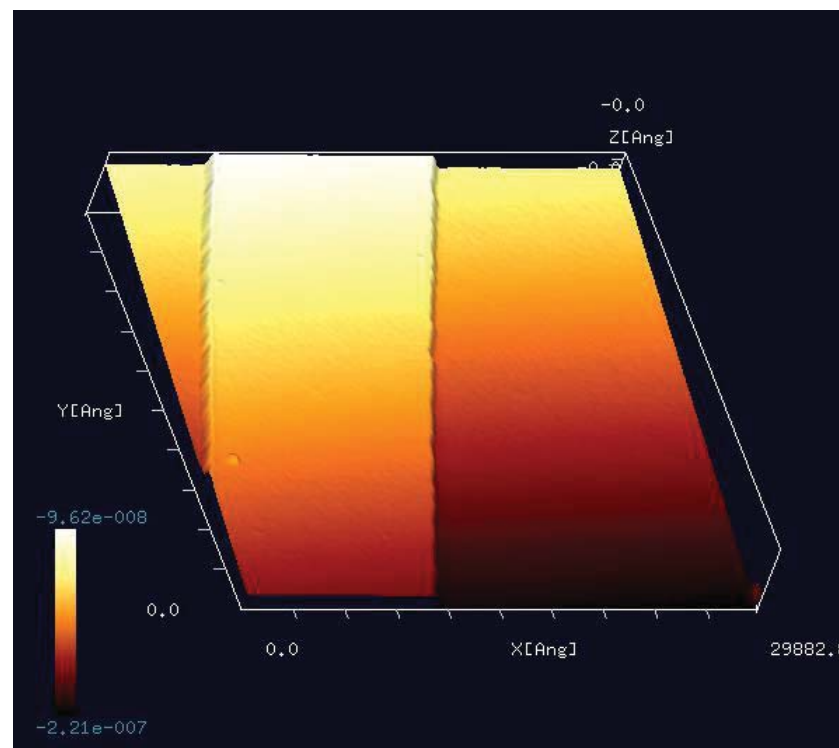
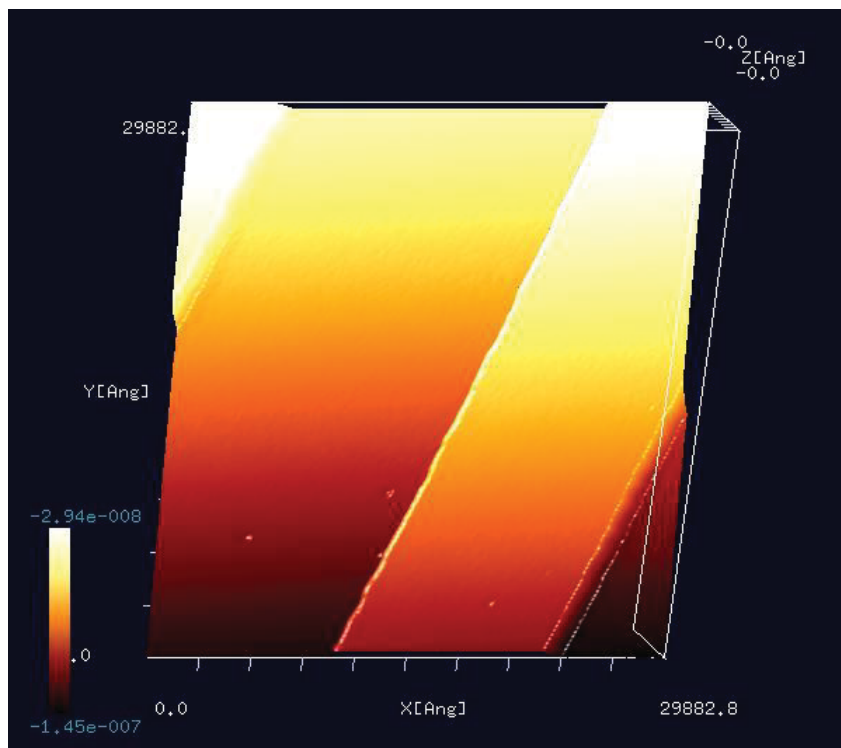
# データ読み込み例:



データの拡張子はibw



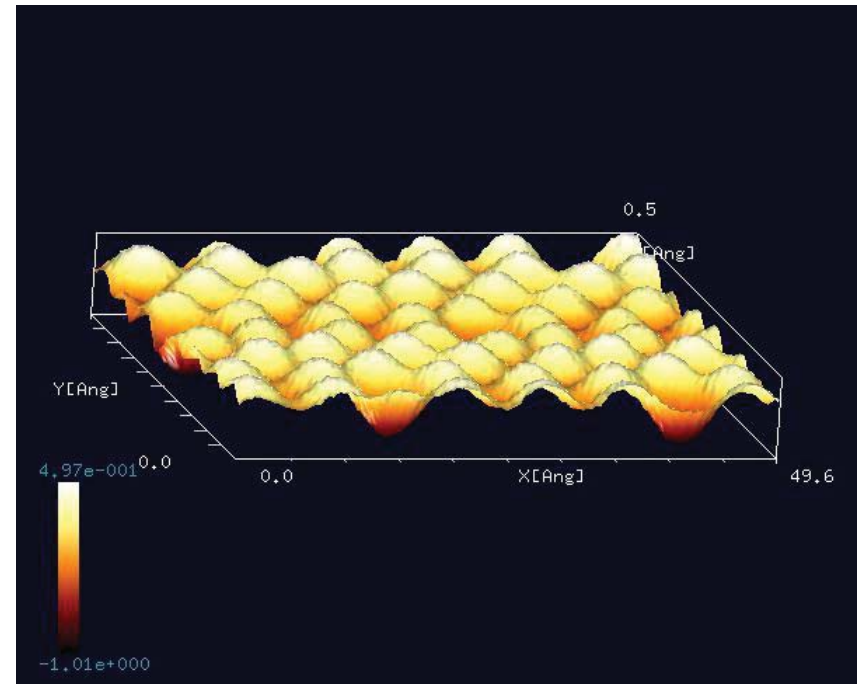
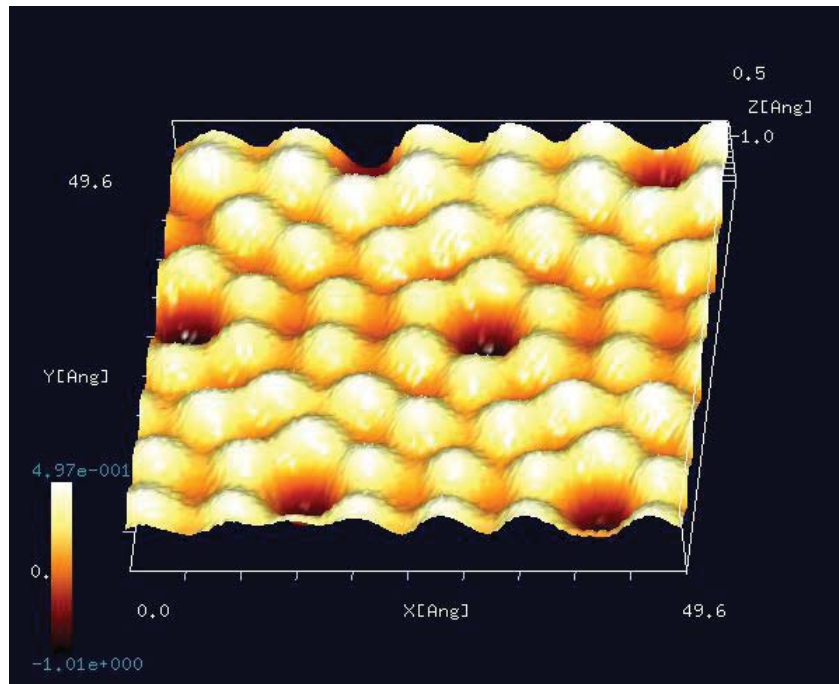
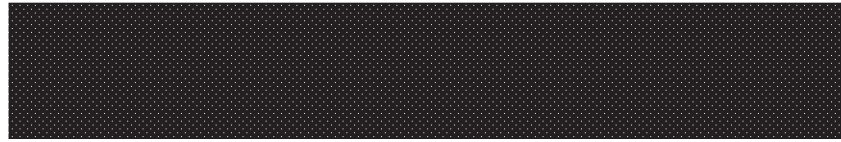
# データ読み込み例:



データの拡張子はibw

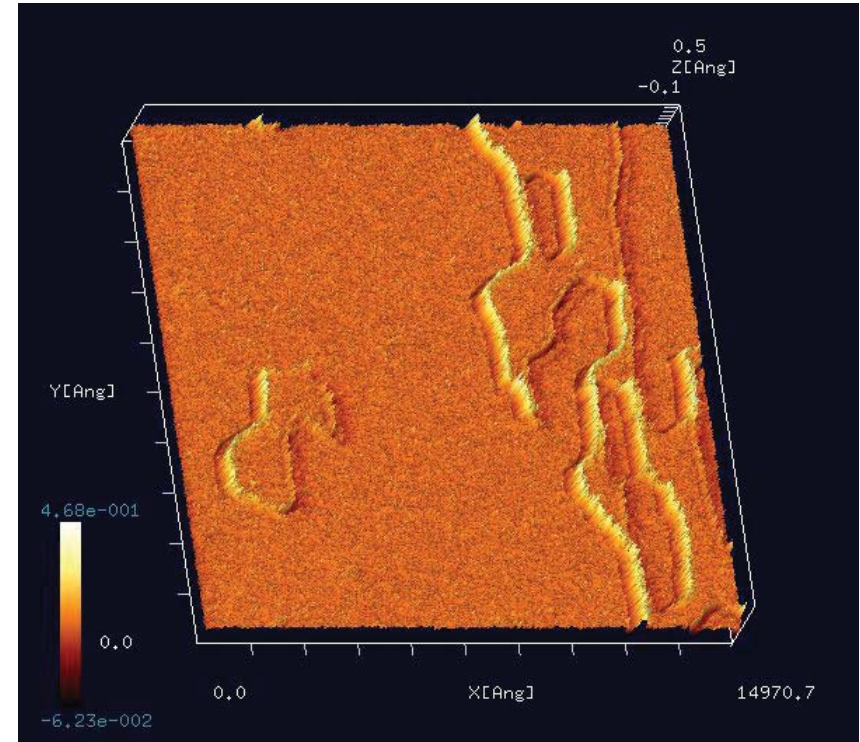
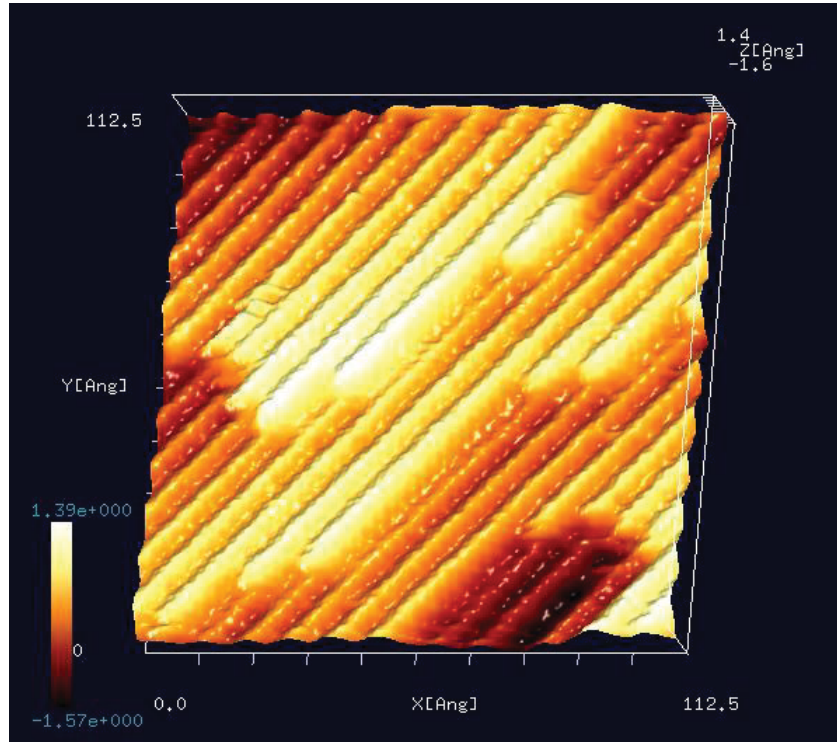
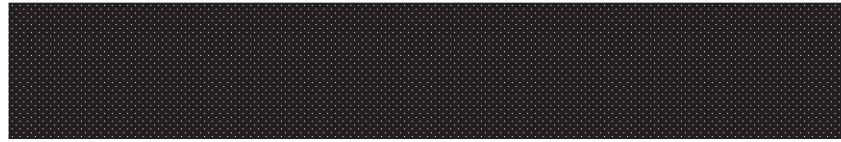


# データ読み込み例:



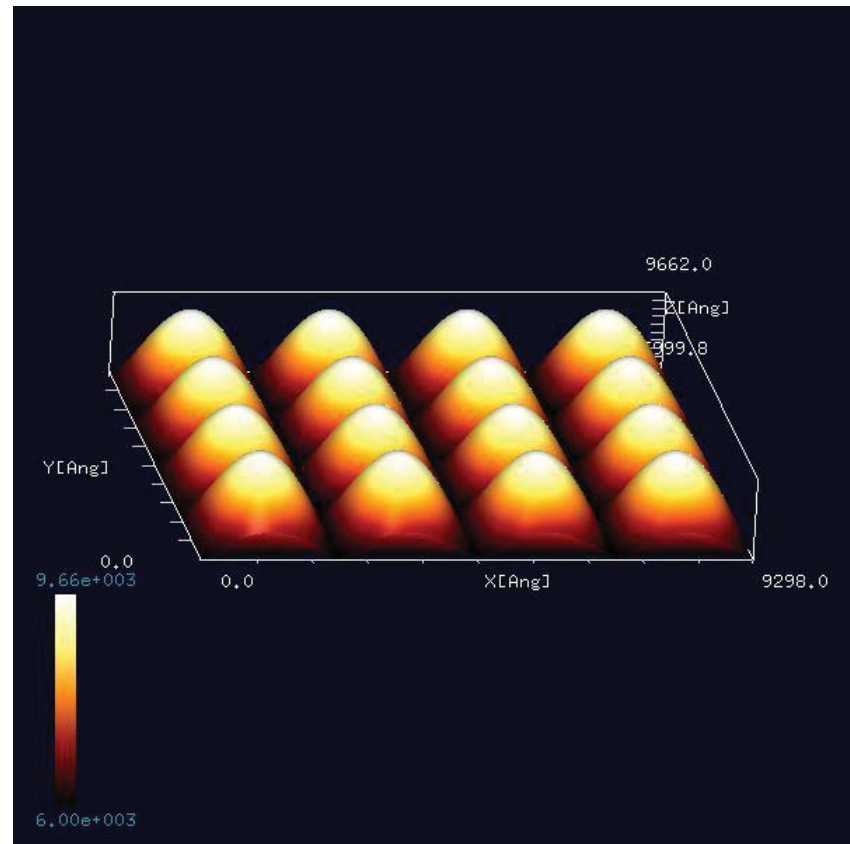
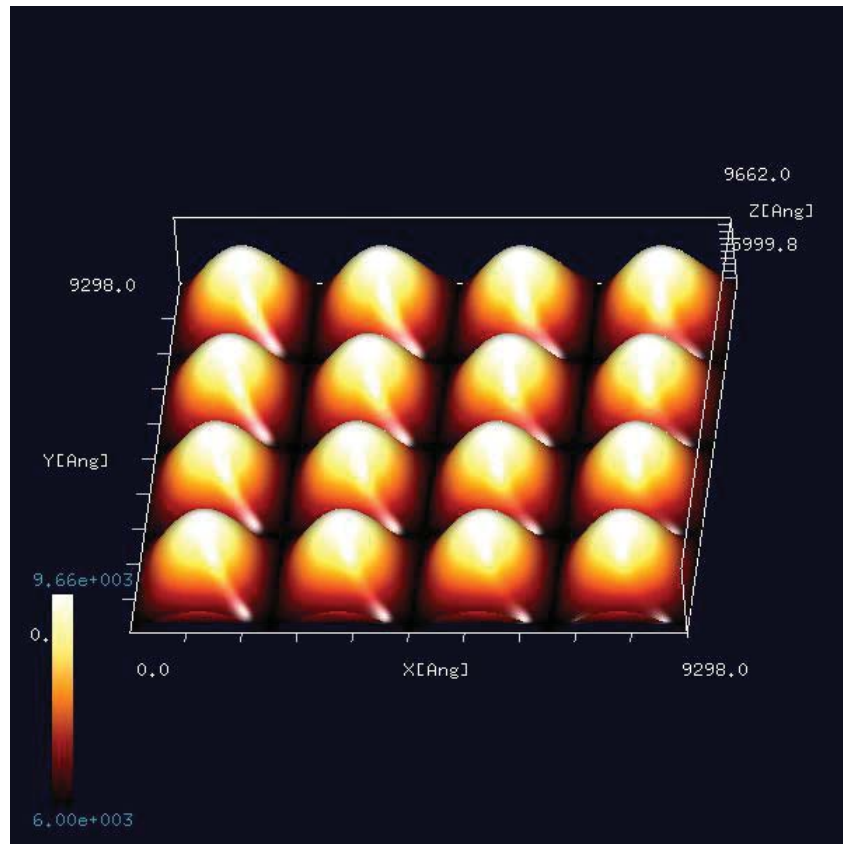
データの拡張子はstp

# データ読み込み例:



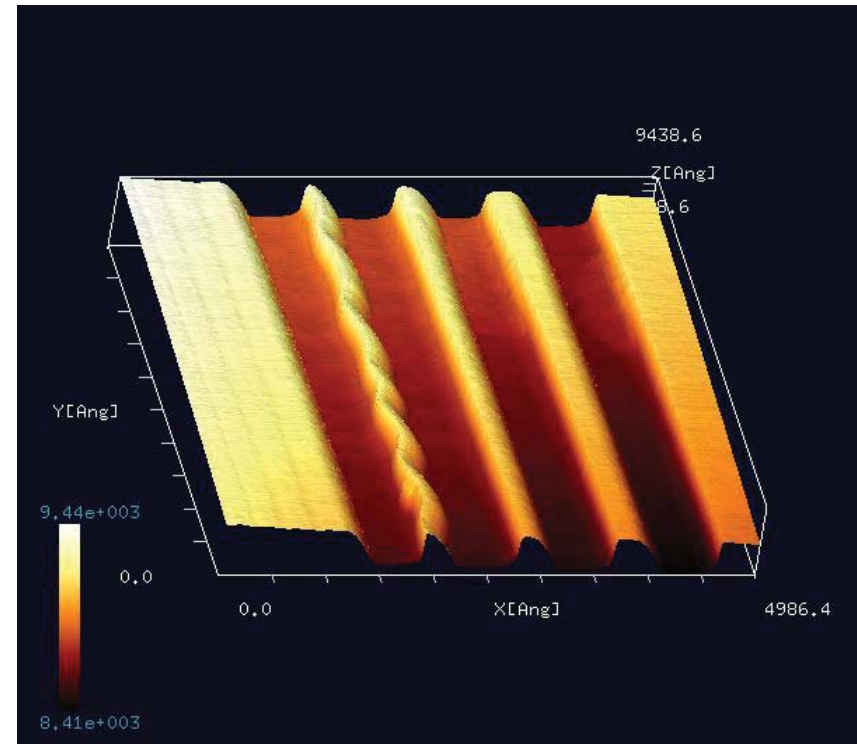
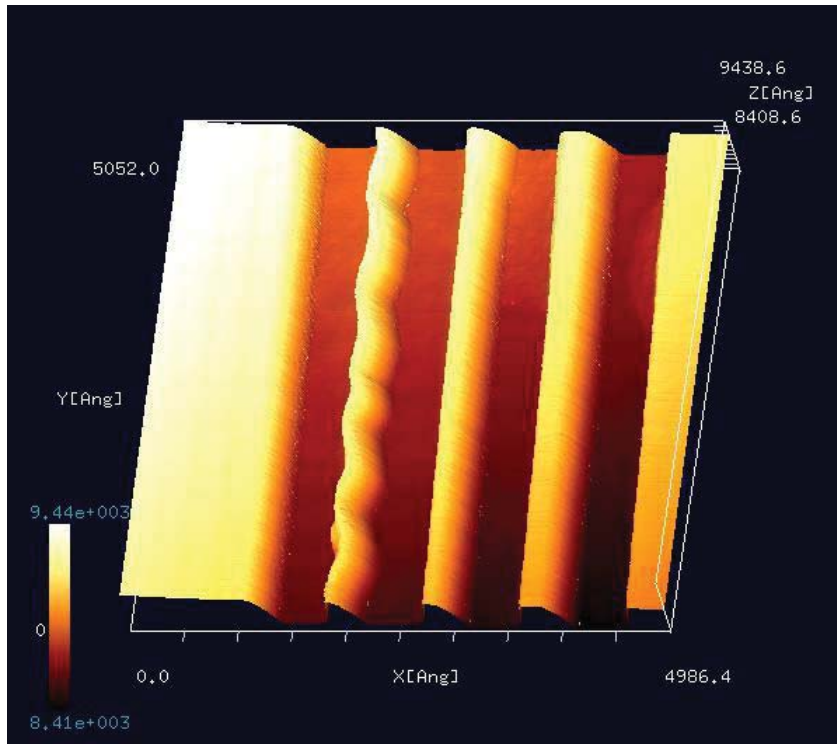
データの拡張子はstp

# データ読み込み例:



データの拡張子はxqd

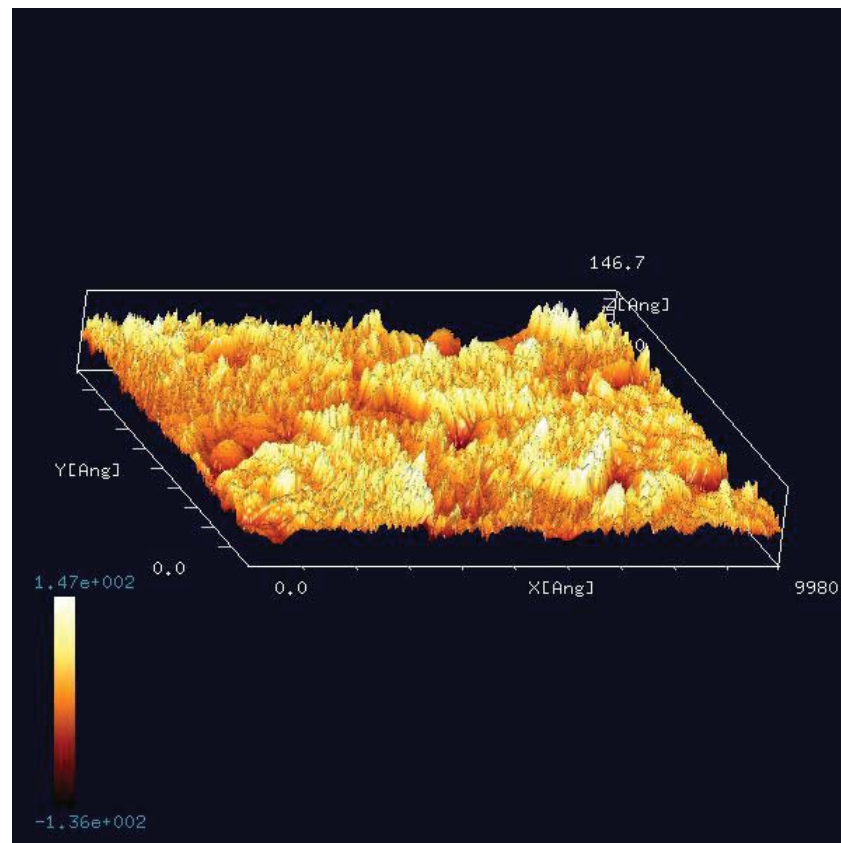
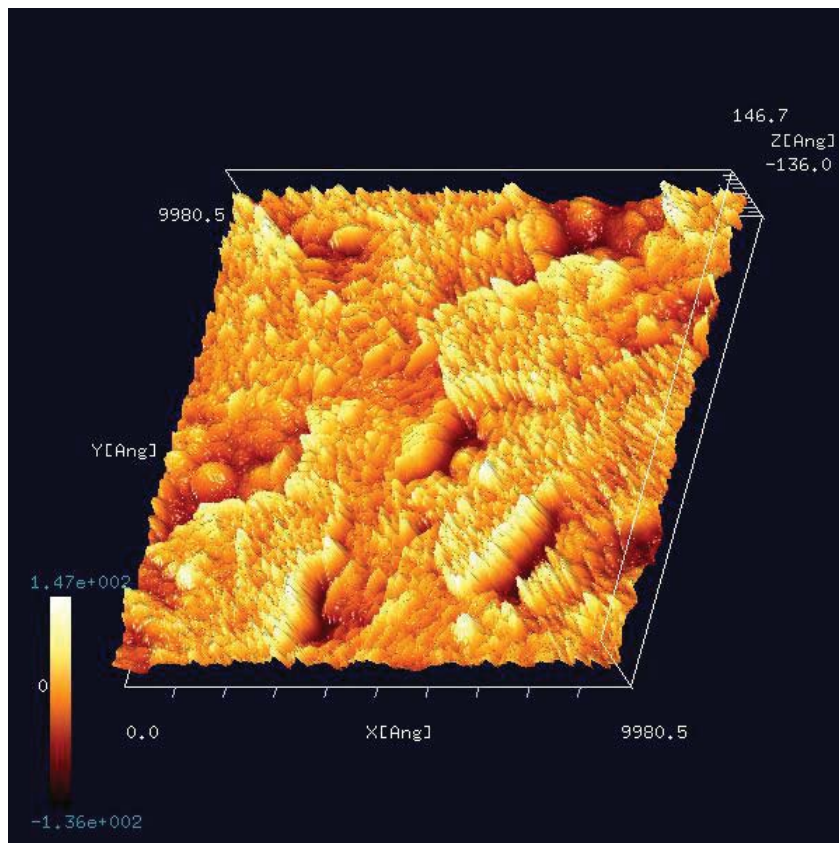
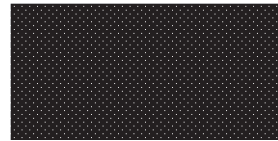
# データ読み込み例:



データの拡張子はxqd



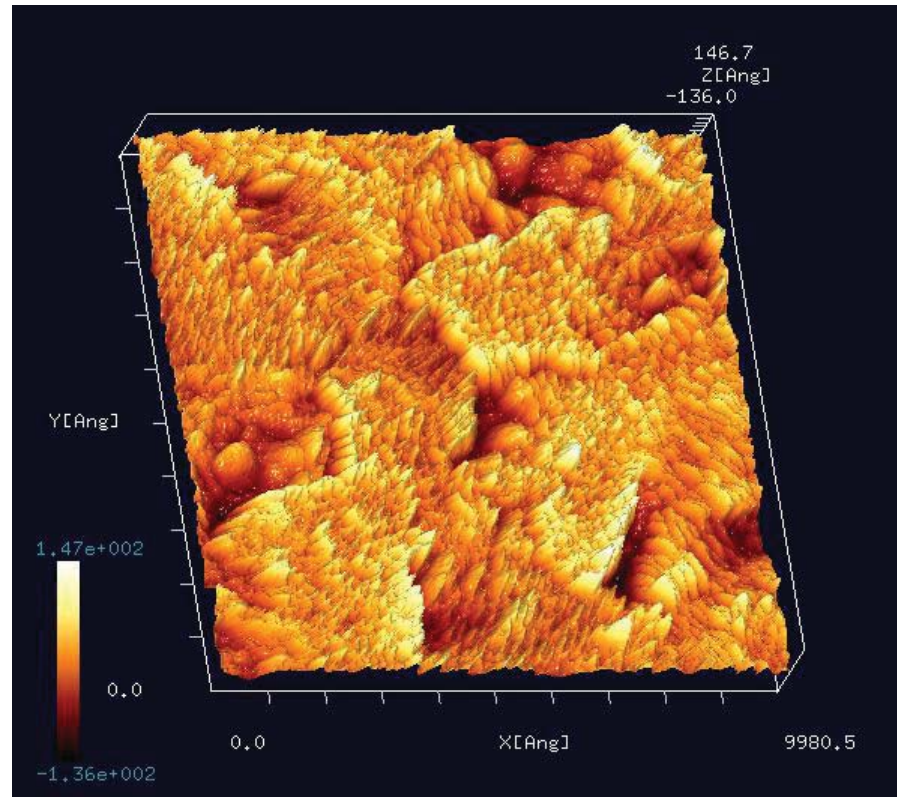
# データ読み込み例:



データの拡張子は000

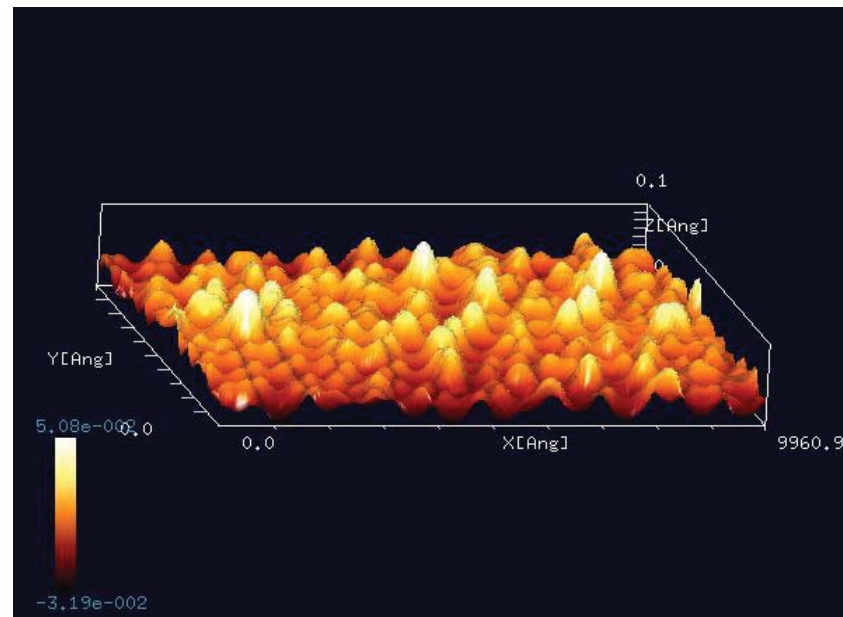
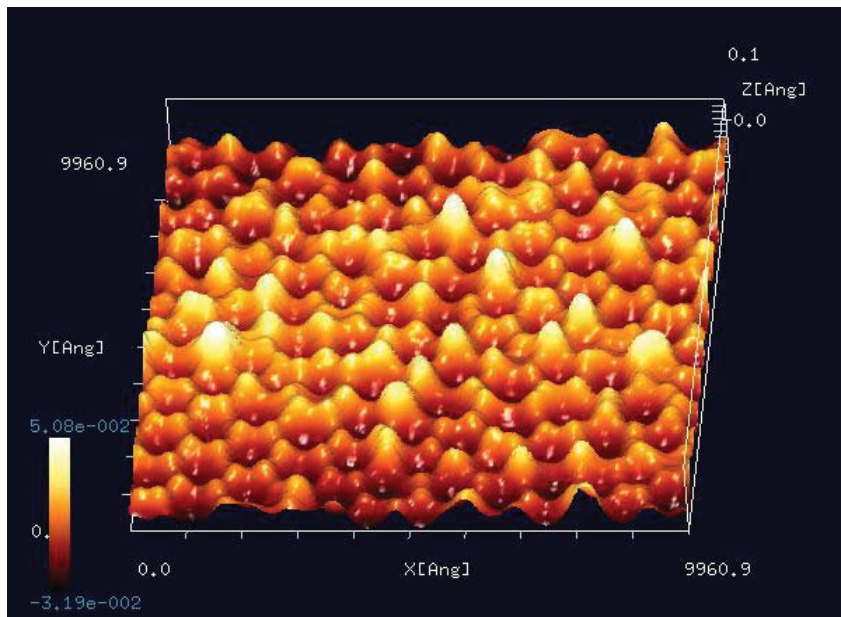


# データ読み込み例:



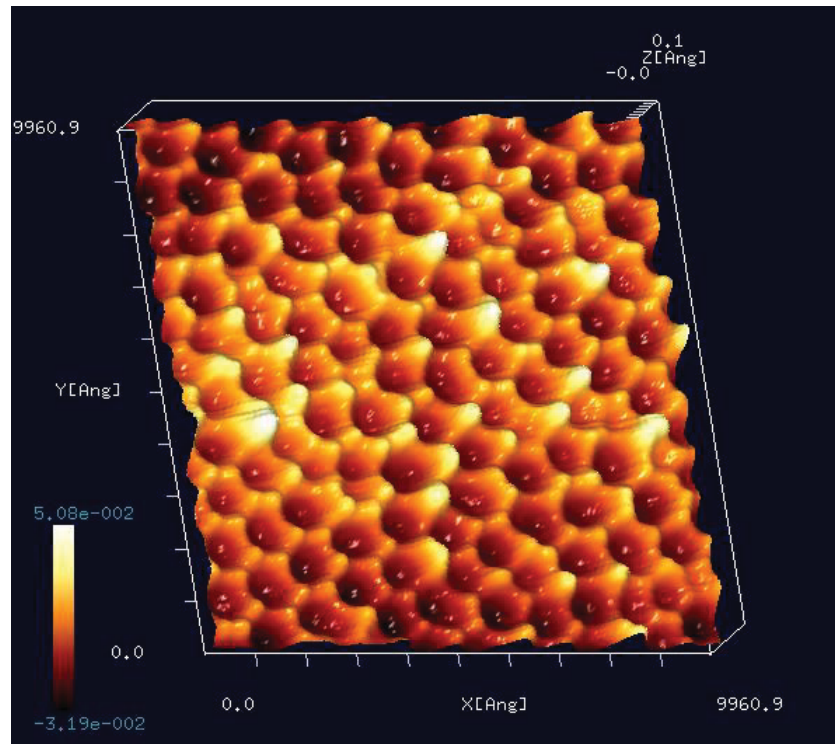
データの拡張子は000

# データ読み込み例:



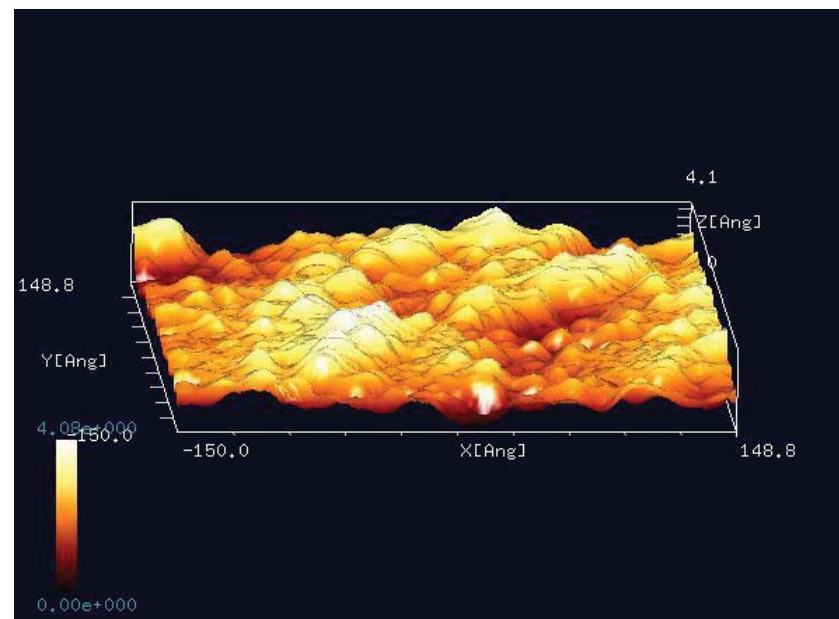
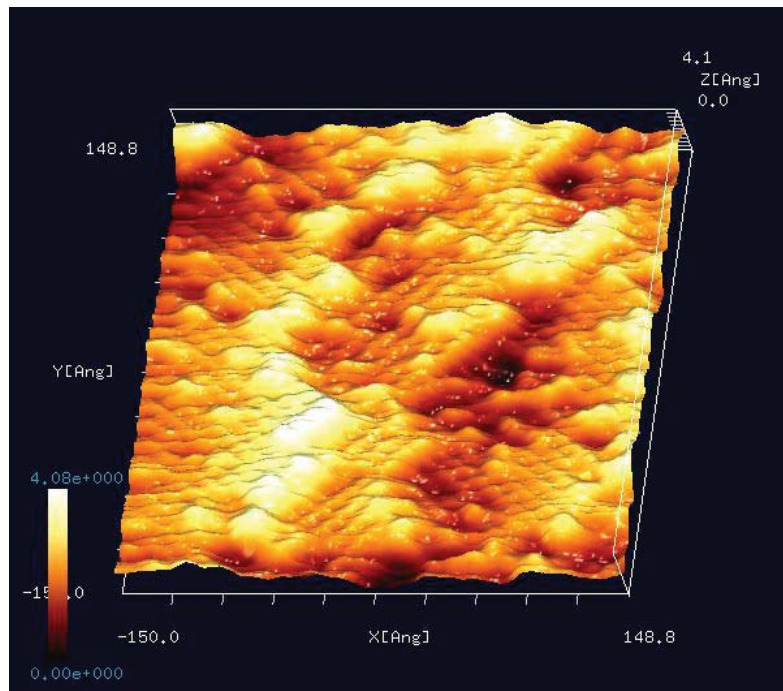
データの拡張子はtiff

# データ読み込み例:



データの拡張子はtiff

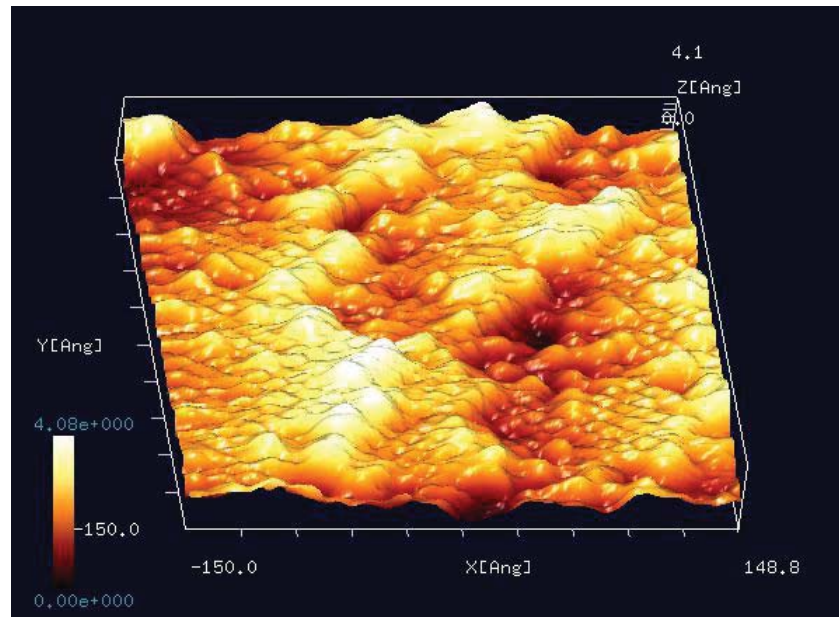
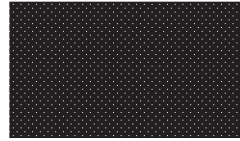
# データ読み込み例:



データの拡張子はtif



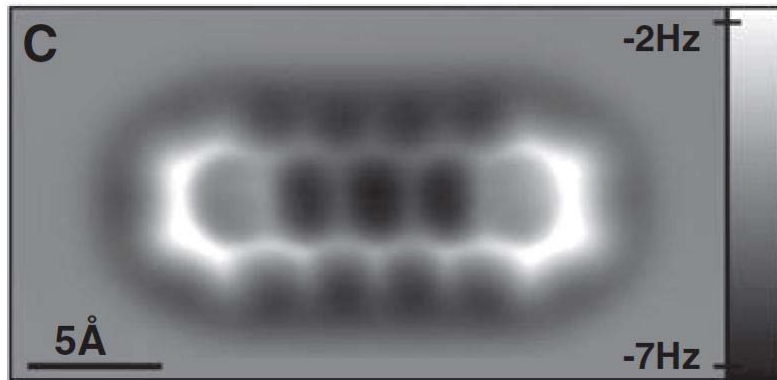
# データ読み込み例:



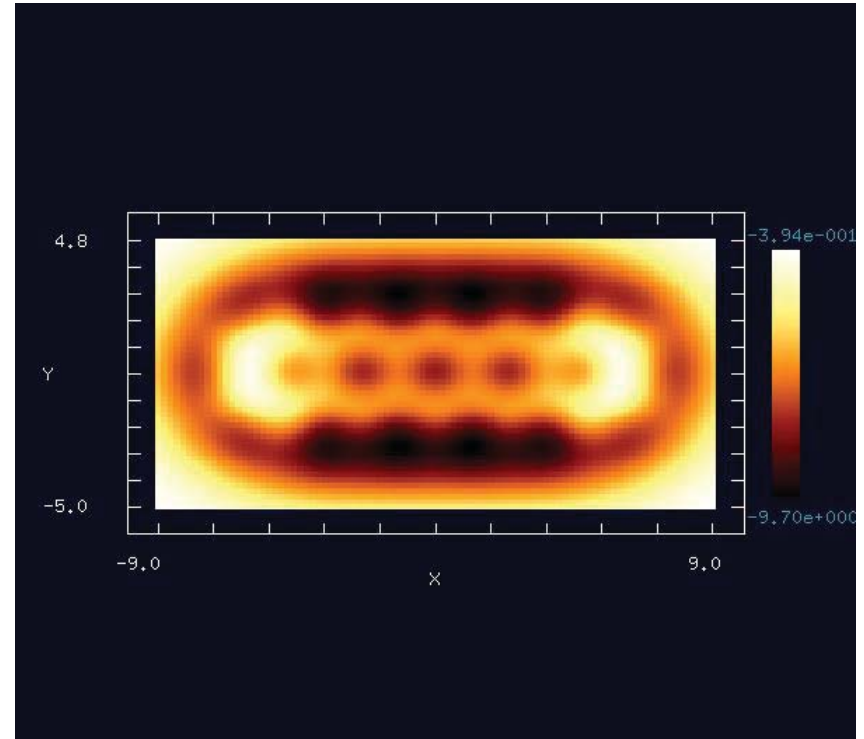
データの拡張子はtif

# シミュレーションのデータの読み込み

シミュレーションデータの読み込み可能



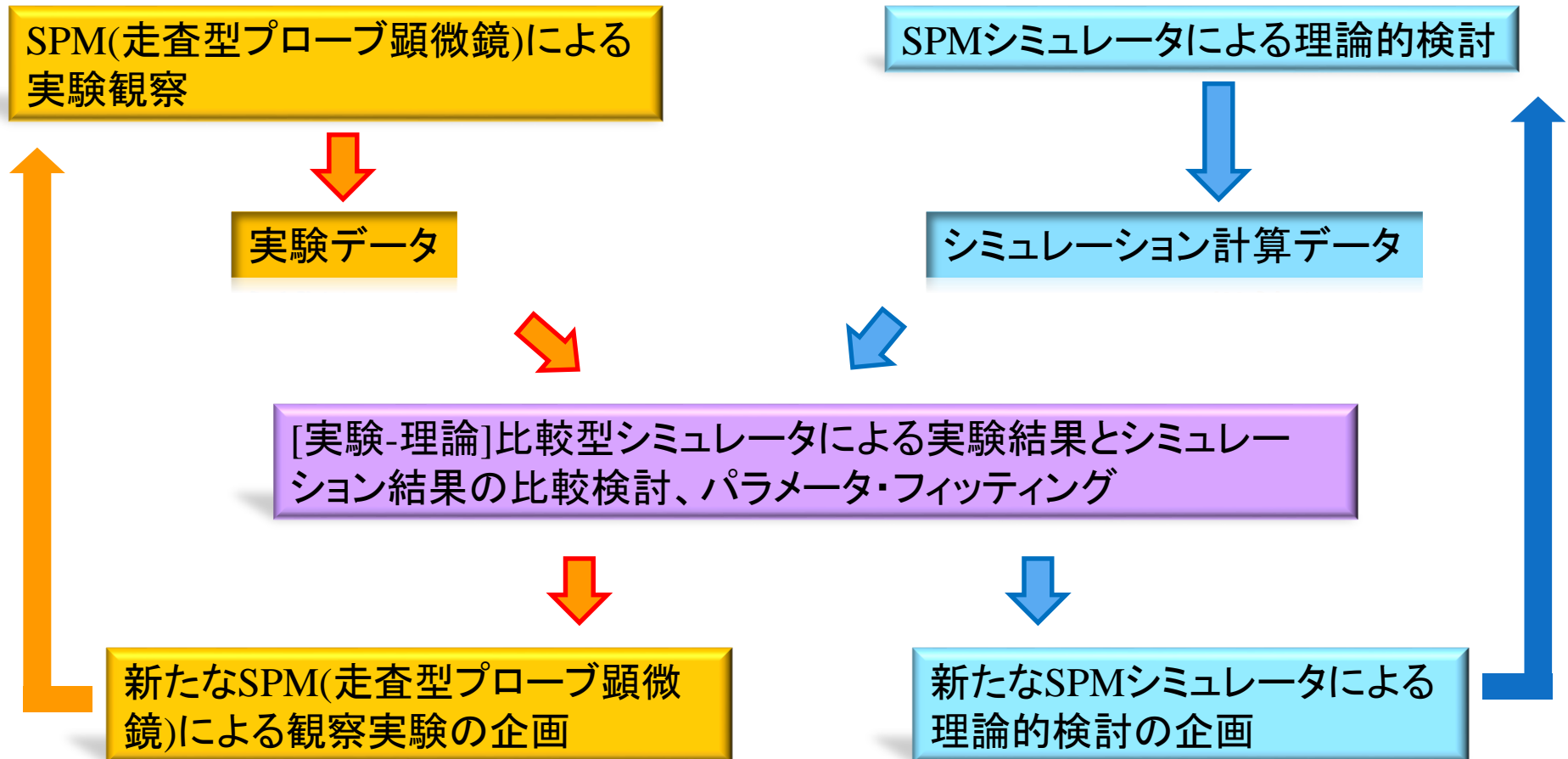
AFM imaging of pentacene on Cu(111).  
(Leo Gross, *et al.* (2009). The chemical structure of a molecule resolved by atomic force microscopy. *Science*, 325, 1111)



左のシミュレーションデータ

[実測-計算]比較型SPM シミュレーターは、これまで別々に取り扱われてきた実験データと理論シミュレーションデータを統合的に扱います

これにより、実験とシミュレーションの相互が補完し合うサイクルを確立することが可能となります



## SPM実験画像処理手法イノベーション

これまで、様々なSPM実験画像データ処理ソフトの代表例として、Image Metrology社のSPIPが有名でしたが、画像から何が見えるのか判別が困難という事実が常に存在していました

SPMシミュレータは、このSPIPを超えるソフトウェアを目指して、実測画像とシミュレーション計算画像を直接比較できるシミュレータとして開発が進められてきました

AFM実験画像が、そのまま試料の形状を反映しているとは限りません

- 探針の形状が、AFM実験画像に影響を与える場合が考えられます
- 探針と試料の間に、水分子が作る薄い被膜が入り込んでいるかもしれません
- 高分子の試料がコロイド溶液中にある場合、電解質の効果が影響します



SPMシミュレータは、実験画像とシミュレーション画像を比較することにより、実際の試料の形状がどのようなものであるかの、ヒントを与えてくれます  
8種類の用意されたシミュレーションソルバを、上手く使い分ければ、試料の真の形状を推定することが出来ます

SPMシミュレータは、見かけのSPM実験画像から、原子の真の配置を特定できる、従来とは一線を画すイノベーションです



# SetModel

# 探針・試料データ作成ソフト

以下の機能をご用意しています

あらゆる化合物の結晶構造データを作成できます

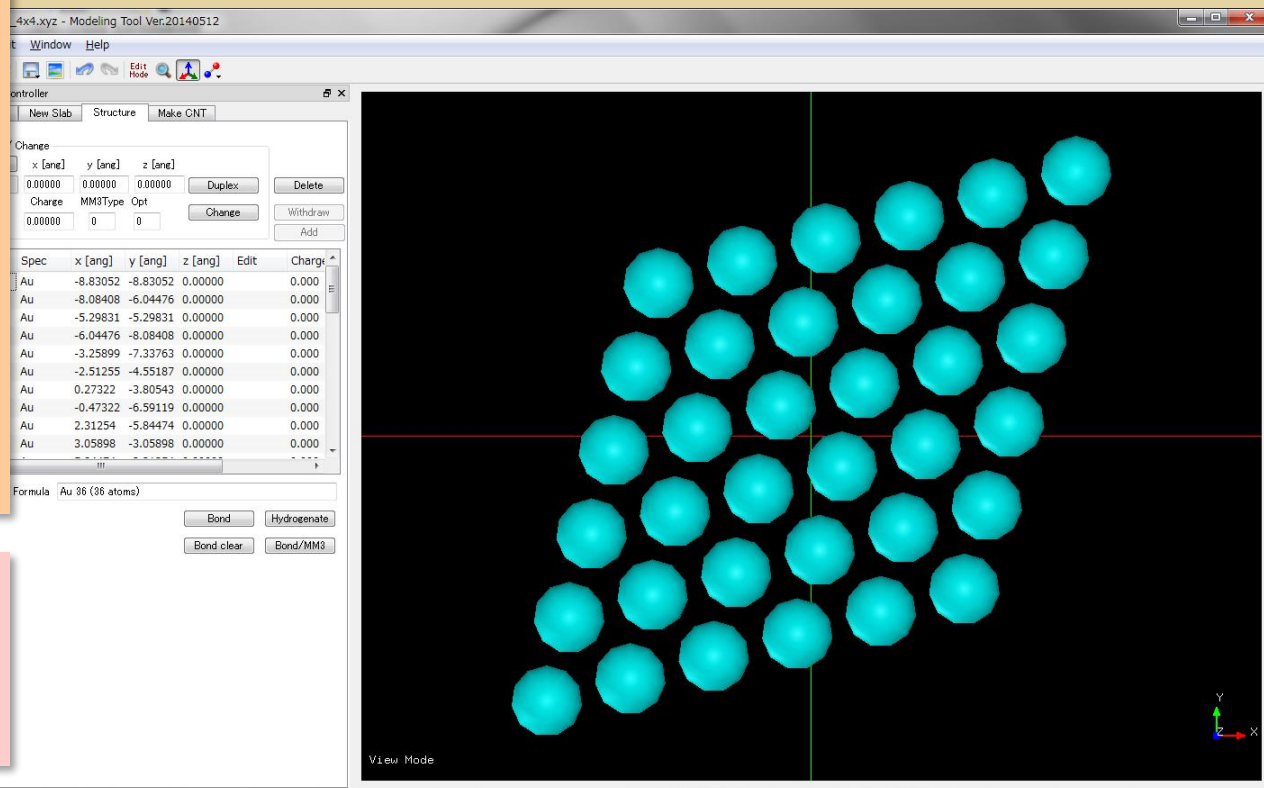
空間群、格子定数、へき開面を指定するだけでOK

ChemSketch(フリーソフト)を使えば有機分子の形状構造データを用意できます

→

SetModelとChemSketchの併用で、あらゆる探針・試料の形状データが準備できます

例えば、結晶基板上的有機高分子の試料形状データを、簡単に作成できます



SetModel

探針・試料データ作成ソフト

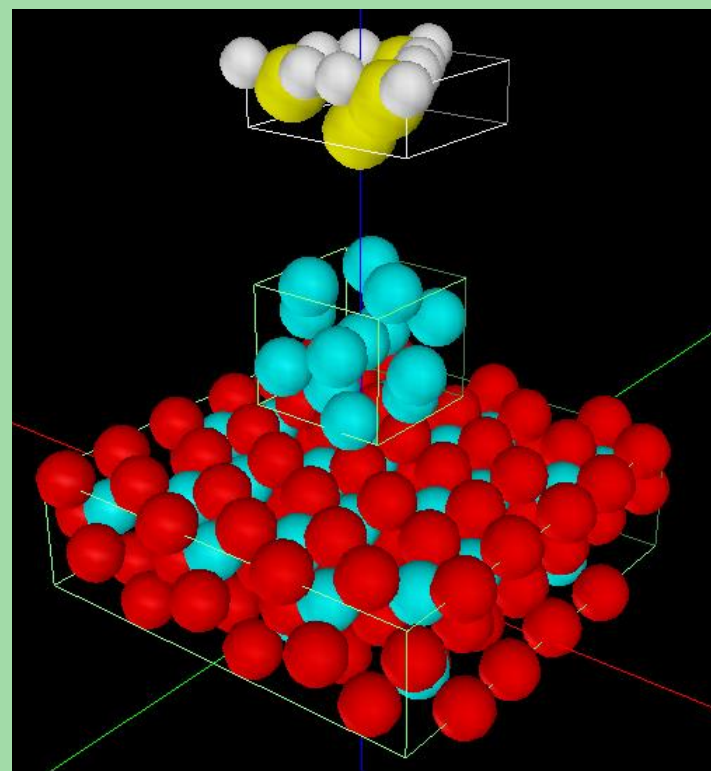
以下のイノベーションを実現します

SetModelを使えば、わずかな予備知識で、手軽に複雑な結晶構造データを作成できます→あらゆる材料の結晶構造がシミュレーション可能となります

ChemSketchを併用すれば、金属基板上の有機半導体分子のAFM, STMシミュレーション用データの準備が簡単に行えます

触媒物質の結晶、リチウムイオン電池の極板、半導体結晶などの構造データが、自由に作成できます

カーボン・ナノチューブ、グラフェン・シートの形状データ作成にも対応しています



SetModel

探針・試料データ作成ソフト

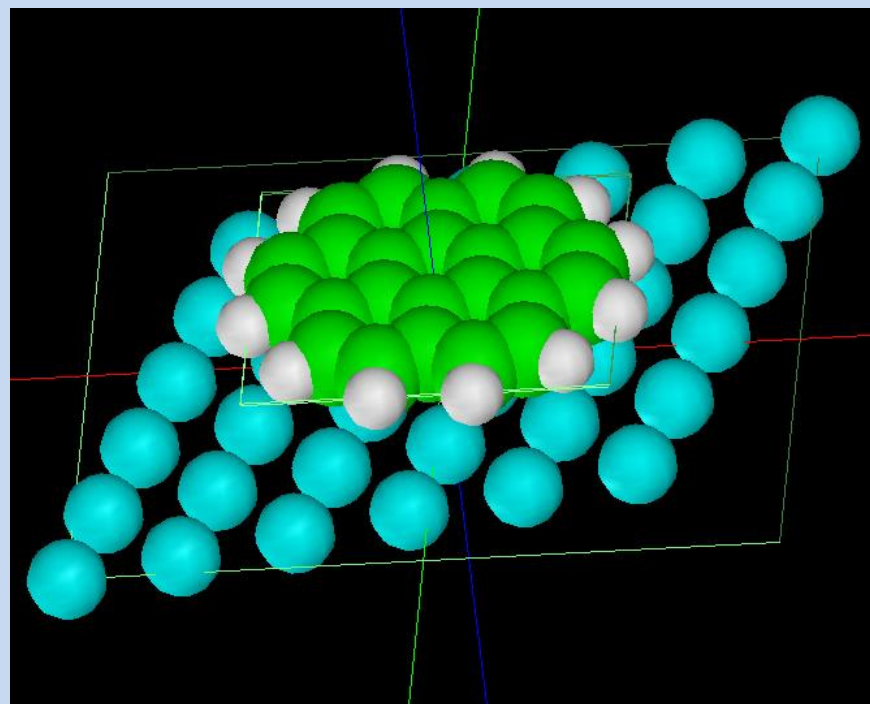
以下の市場への波及効果が期待できます

無機・有機半導体の構造データが手軽に作成できますので、デバイス関連の分野の研究者の方に、お使いいただけます

大学の研究室等のアカデミックな現場での、最先端のデバイス研究に、お役に立ちます

左の図は、Au(111)表面上にcoronene分子を置いた試料データを表しています  
→有機EL・有機半導体デバイス分野への応用が期待できます

触媒物質上に吸着した分子の形状データも簡単に作成できます  
→自動車関連の産業分野での応用が期待できます



# 原子モデリングツール

**特徴** 簡単な操作で、自由に結晶構造データが作成できます

**適用分野** 無機材料結晶構造、有機・無機半導体材料

ユーザーが求める半導体結晶薄膜等を、容易にモデル化します。出来上がったデータは、DFTB等のソルバーの探針・試料データとして使えます。充実したグラフィック・ユーザー・インターフェースにより、誰でも簡単に、すぐにでも使える点が特徴です。

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

従来のシミュレータと比較して、充実したGUIによる視覚に訴えるモデル化により、専門的な知識がなくとも、結晶構造を自由に作成可能  
面倒なシミュレーション初期データの作成の負担を、大幅に軽減



GeoAFM

高速相互予測AFMシミュレータ

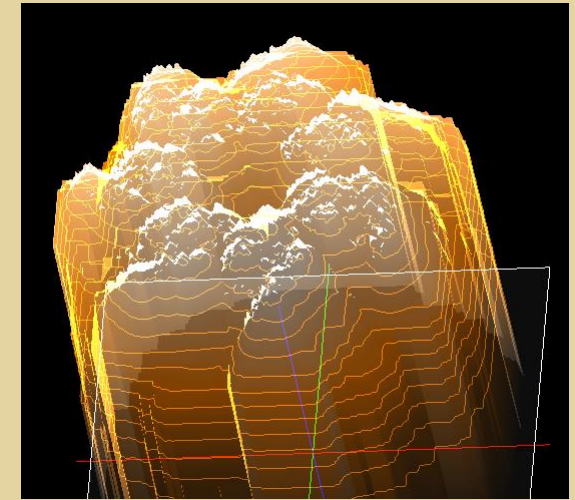
以下の機能をご用意しています

探針の3次元形状データ、試料表面の凹凸形状データ、測定AFM像データの3種類のデータのうち、2種類のデータを元にして残り1種類のデータを高速で予測することができます

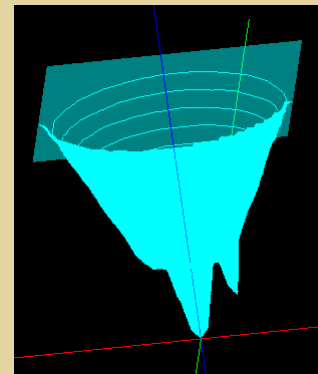
[ $\mu\text{m}$ ]オーダーのAFMシミュレーションに適しています

Protein Data Bankで提供される分子構造データに対応しています

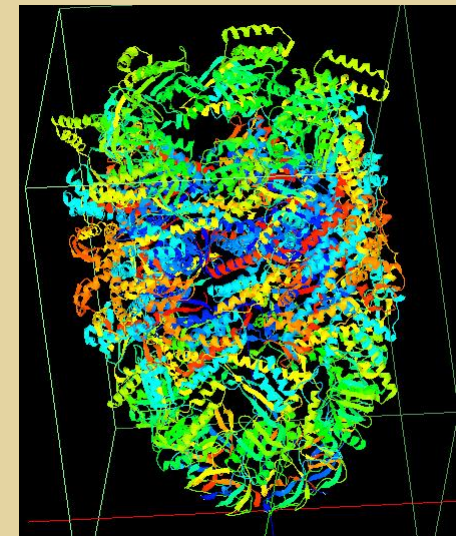
原子数が数千を超える高分子でも、1分以内の高速シミュレーションが可能です



測定AFM像データ



探針の3次元形状データ



試料表面の凹凸形状データ



GeoAFM

高速相互予測AFMシミュレータ

以下のイノベーションを実現します

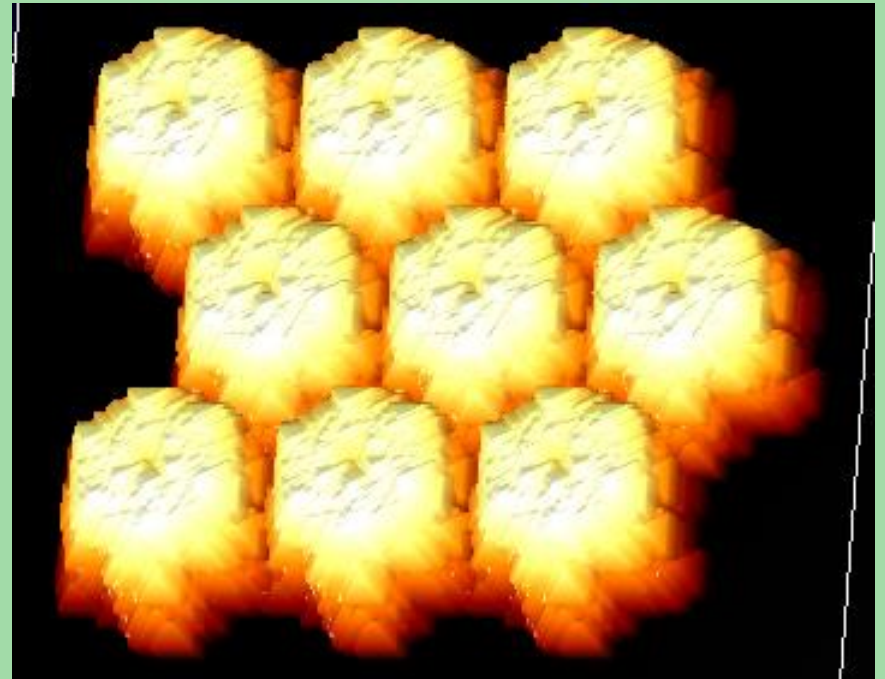
非常に高速(1分以内)でシミュレーション計算を行いますので、リアルタイムで実験と並行してシミュレータを使うことができます

半導体表面、高分子、バイオ・ソフトマテリアル等、適用分野を選びません

Protein Data Bankの分子形状データが取り扱えますので、バイオ関連材料のシミュレーションが得意です

複数の分子形状データを読み込んで、整列させることも可能です

左の図は、整列したコネクソン分子のAFMシミュレーション画像です



GeoAFM

高速相互予測AFMシミュレータ

以下の市場への波及効果が期待できます

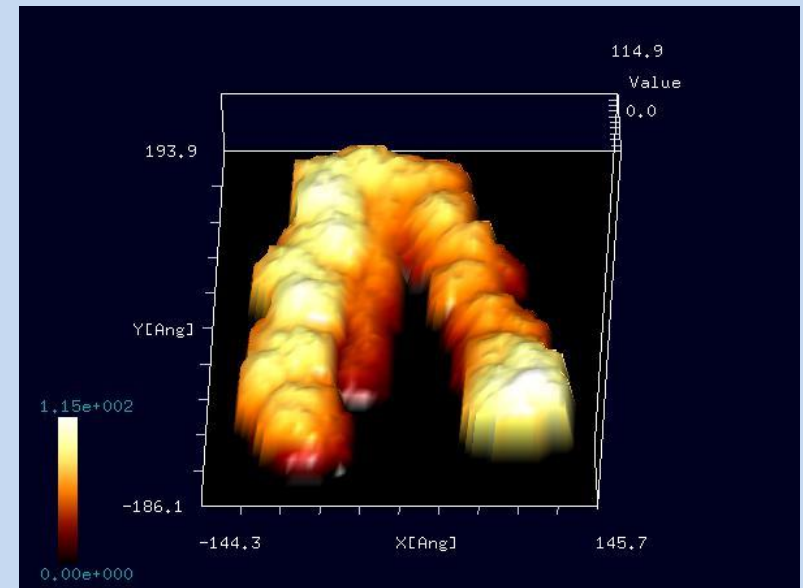
Protein Data Bankの分子形状データが使えるので、バイオ・ソフトマテリアル分野で、ご活用いただけます

半導体デバイスの表面形状のチェック等、デバイス関連の産業分野での利用が考えられます

左の図は、生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーションです

金沢大学理工研究域数物科学系の安藤 敏夫教授と古寺哲幸助教らの研究グループは、世界最高性能の高速原子間力顕微鏡を開発し、アクチンフィラメントに沿って動くミオシンV分子の振舞いを直接高解像撮影することに世界で初めて成功しました

GeoAFMは、この結果を良く再現しています  
高度にアカデミックな現場での使用に耐えます



## 特徴

極めて高速にAFMシミュレーション画像を生成します  
ミクロン・オーダーの試料のシミュレーションに適しています  
タンパク質、DNAなどの生体物質の液中AFM観察像をシミュレーションできます

## 適用分野

無機・有機材料全般、ナノマテリアル、有機ソフトマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス関連

探針形状データ、試料表面形状データ、AFM画像データのうち、任意の二つのデータから残り一つのデータを高速で計算します。ソフトマテリアル等の比較的大きな試料に対して威力を発揮します。計算時間は数分以下であり、シミュレーション結果を確認しながら実験を行うことが可能です。

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

従来のシミュレータと比較して、圧倒的に計算時間が短く、探針の欠損によるAFM画像のアーティファクト除去も思いのまま

## 推定計算時間

32bit版: 10秒

64bit版: 5秒

以下の機能をご用意しています

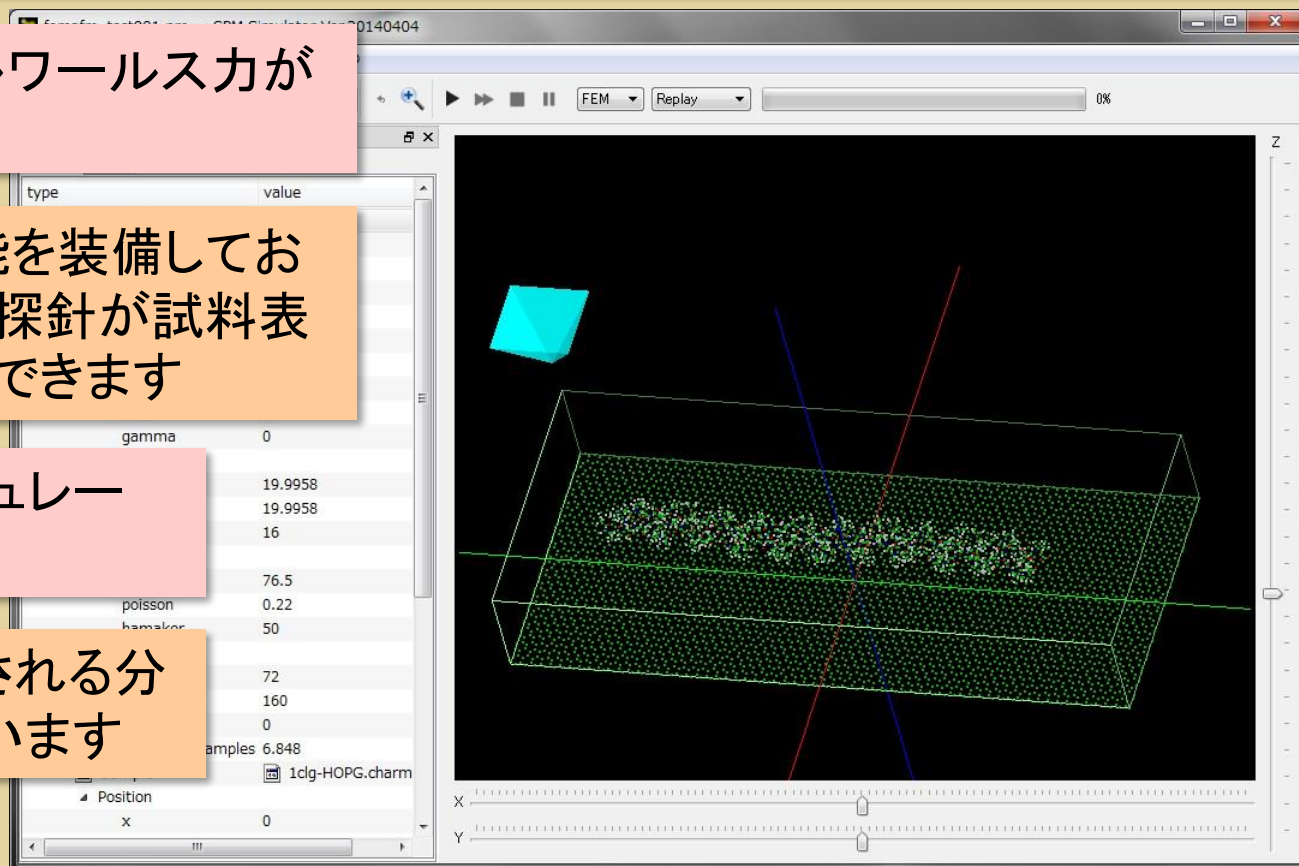
探針および試料を連続弾性体で近似し、有限要素法によって、それらの変形を考慮して、AFM像をシミュレーションします

探針・試料間はファンデルワールス力が働くと仮定します

粘弾性接触力学解析機能を装備しており、表面張力効果により、探針が試料表面に凝着する様子を再現できます

[ $\mu\text{m}$ ]オーダーのAFMシミュレーションに適しています

Protein Data Bankで提供される分子構造データに対応しています





FemAFM

連続弾性体AFMシミュレータ

以下のイノベーションを実現します

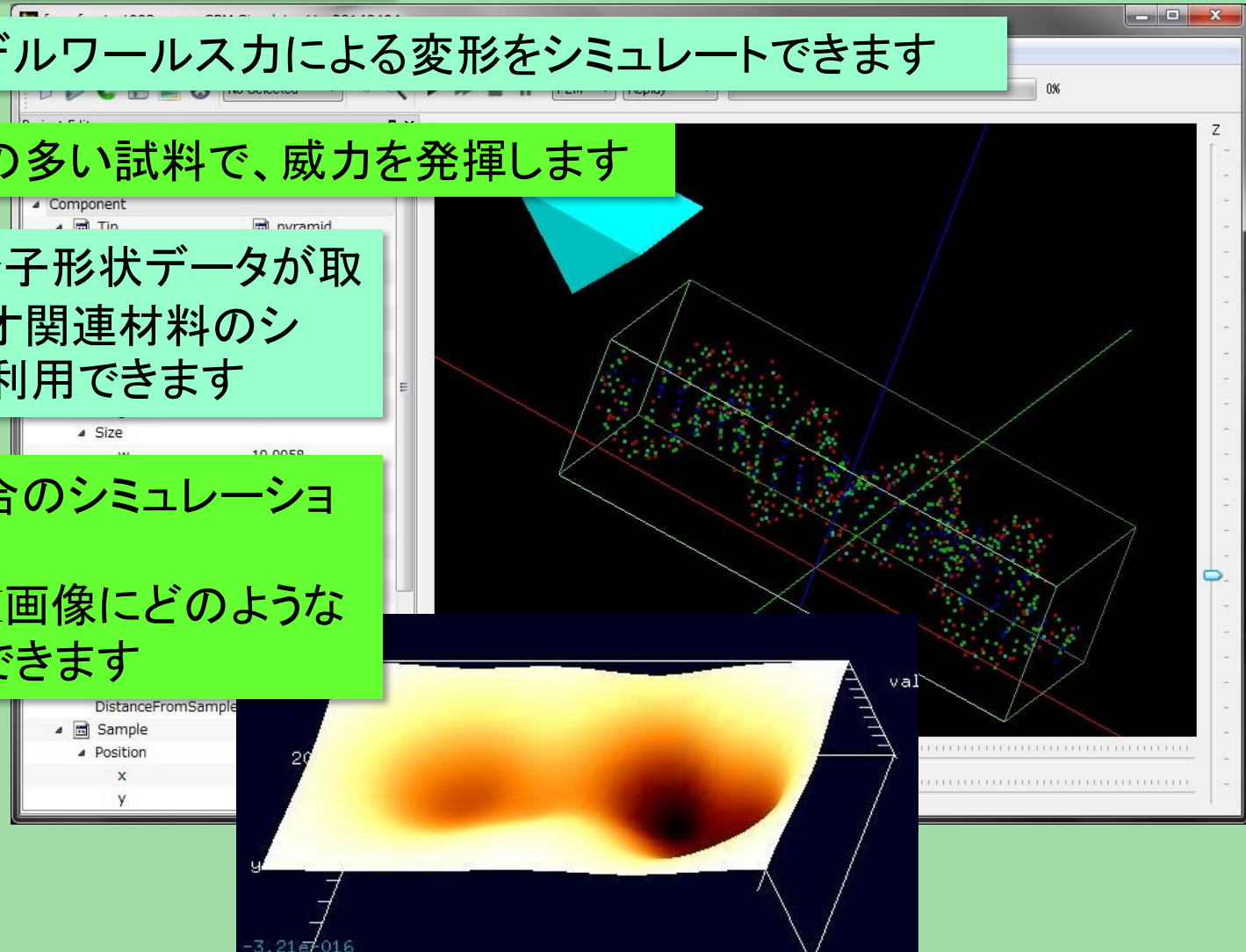
探針・試料の、ファンデルワールスカによる変形をシミュレートできます

高分子などの原子数の多い試料で、威力を発揮します

Protein Data Bankの分子形状データが取り扱えますので、バイオ関連材料のシミュレーションでも、ご利用できます

探針に欠損がある場合のシミュレーションも可能です

探針欠損により、AFM画像にどのような影響が出るかを確認できます



FemAFM

連続弾性体AFMシミュレータ

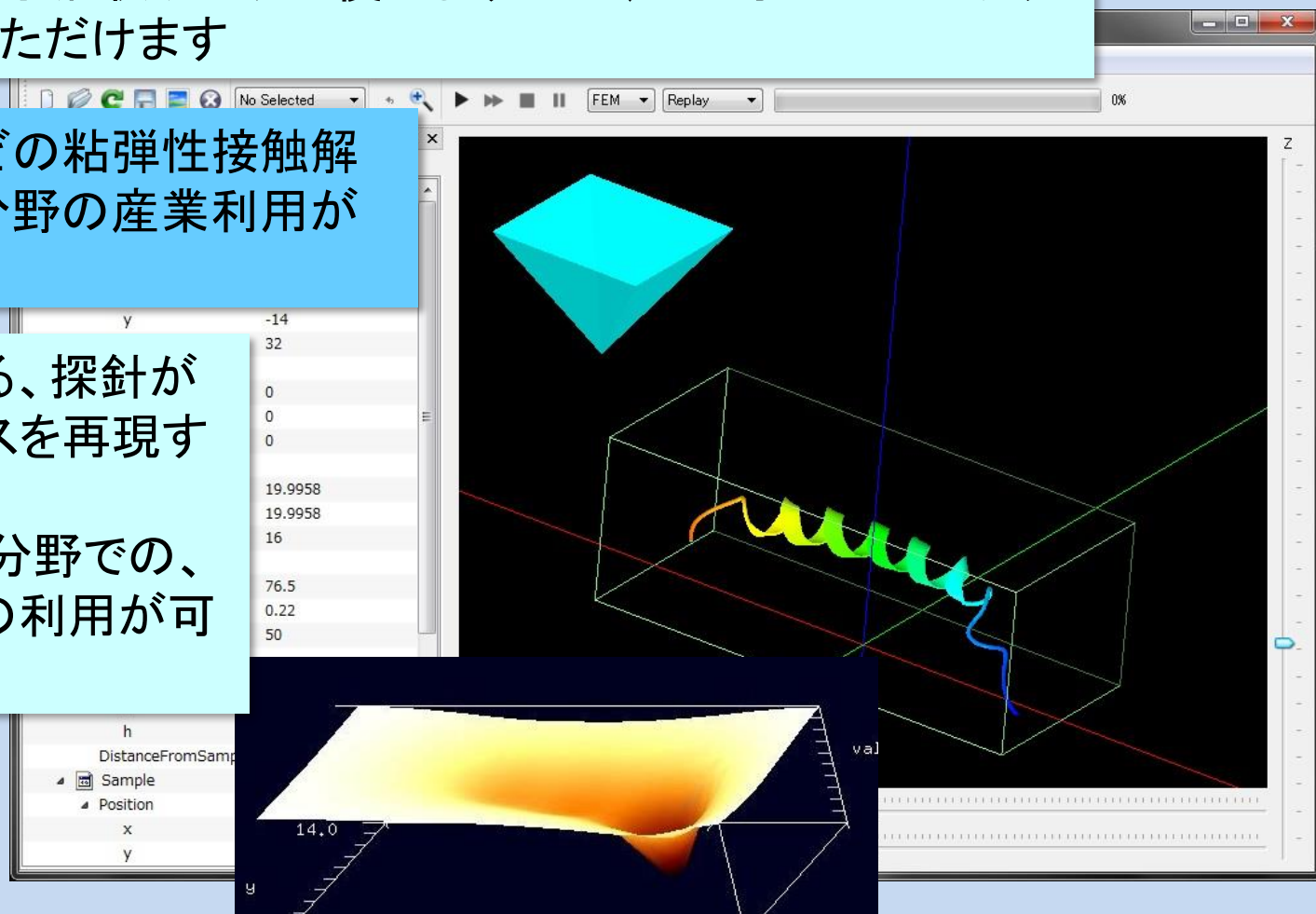
以下の市場への波及効果が期待できます

Protein Data Bankの分子形状データが使えるので、バイオ・ソフトマテリアル分野で、ご活用いただけます

表面がぬれたゴムなどの粘弾性接触解析が可能で、高分子分野の産業利用が想定できます

粘弾性接触力学による、探針が感じる力のヒステリシスを再現することが可能です

高分子の表面科学の分野での、アカデミックな研究での利用が可能です



## 特徴

探針・試料の弾性変形を考慮したAFMシミュレーションを実行します  
ミクロン・オーダーの試料のシミュレーションに適しています  
タンパク質、DNAなどの生体物質のAFM観察像をシミュレーションできます

## 適用分野

無機・有機材料全般、ナノマテリアル、有機ソフトマテリアル、化学、  
薬学、バイオサイエンス関連

探針・試料を連続弾性体と見なし、物質間でのファンデルワールス力を考慮して弾性方程式を有限要素法で解くことを特徴としています。ソフトマテリアル等のAFM像、周波数シフトAFM像をシミュレーションするのに適しています。試料に粘弾性がある場合も対応可能です。

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

従来のシミュレータと比較して、比較的マクロなスケールの系を取り扱っており、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

## 推定計算時間

32bit版: 45分

64bit版: 30分

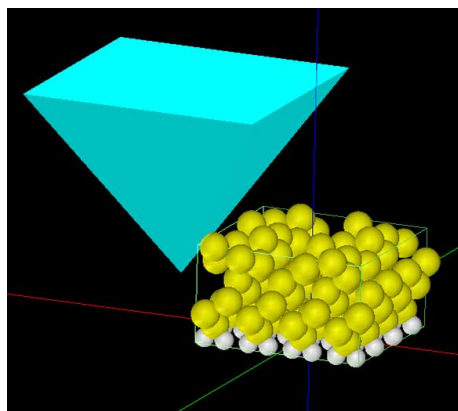
# 【FemAFM】粘弾性接触解析

FemAFM

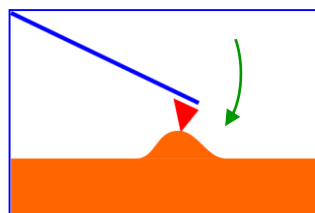
粘弾性接触解析モード

試料表面での探針の凝着をシミュレートできます

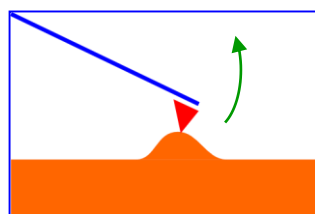
外力によってカンチレバーを一定の周波数で振動させる。探針を試料表面上のある一点に近付けた際の、探針が試料に接触した後、次に試料内部に押し込まれ、最後は引き返されて試料表面から離脱する直前までの、探針の振る舞いをシミュレートする。



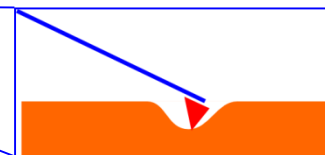
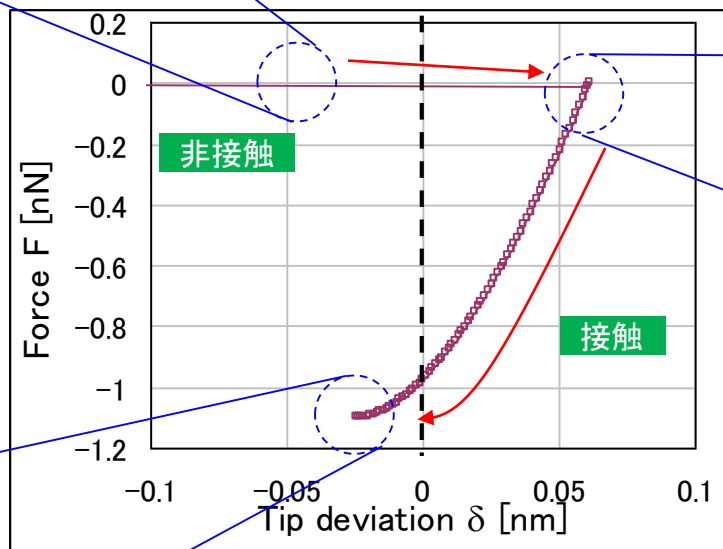
探針: ピラミッド型のSiO<sub>2</sub>  
試料: Si(001)



探針が試料に接した直後の状態



探針が試料から離脱する直前の状態



探針が試料内部に押し込まれた状態

探針が受ける力の向きは、鉛直方向上向きを正とする。

LiqAFM

## 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ

以下の機能をご用意しています

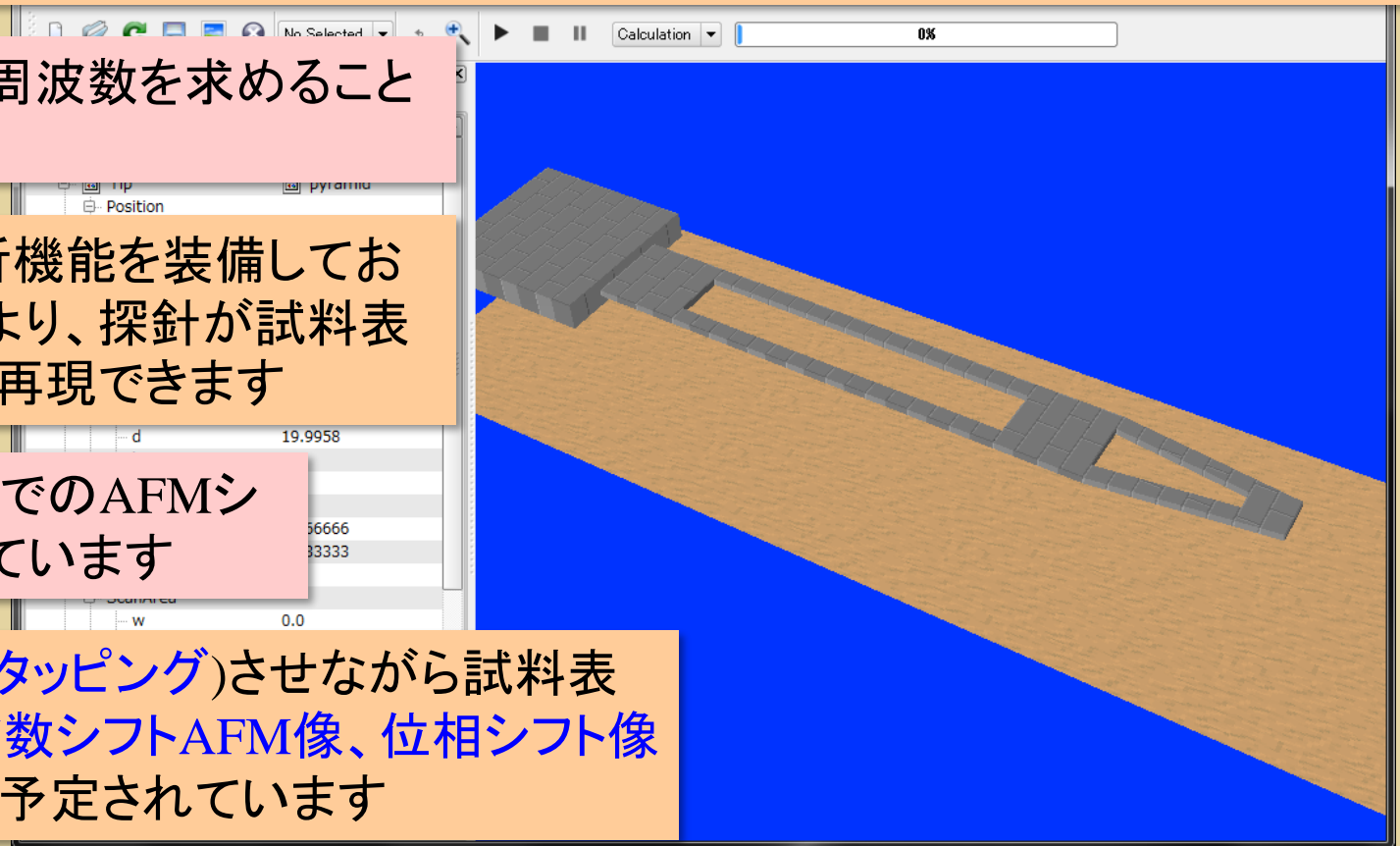
液体中のカンチレバーの動きを、弾性体モデルと流体力学とで数値計算シミュレーションします

カンチレバーの共鳴周波数を求めることができます

粘弾性接触力学解析機能を装備しており、表面張力効果により、探針が試料表面に凝着する様子を再現できます

[ $\mu\text{m}$ ]オーダーの液中でのAFMシミュレーションに適しています

カンチレバーを振動(タッピング)させながら試料表面をスキャンし、周波数シフトAFM像、位相シフト像を求める機能が追加予定されています





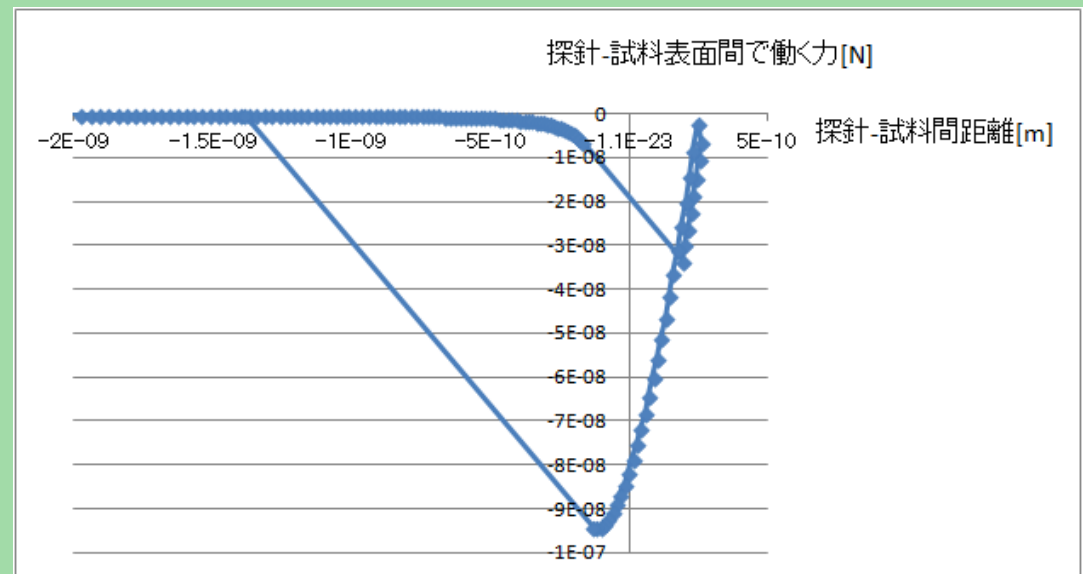
以下のイノベーションを実現します

液中環境でバイオ・ソフトマテリアルのAFMシミュレーションを行う際の、カンチレバーの様子をシミュレーションできます

多数孔のあいたような、複雑な形状のカンチレバーにも対応しています

粘弾性接触力学解析機能により、探針の受ける力のヒステリシスを再現します

カンチレバーのバネ定数を自由に調節でき、ソフトマテリアルを調べる際に使用する、軟らかいカンチレバーにも対応しています



LiqAFM

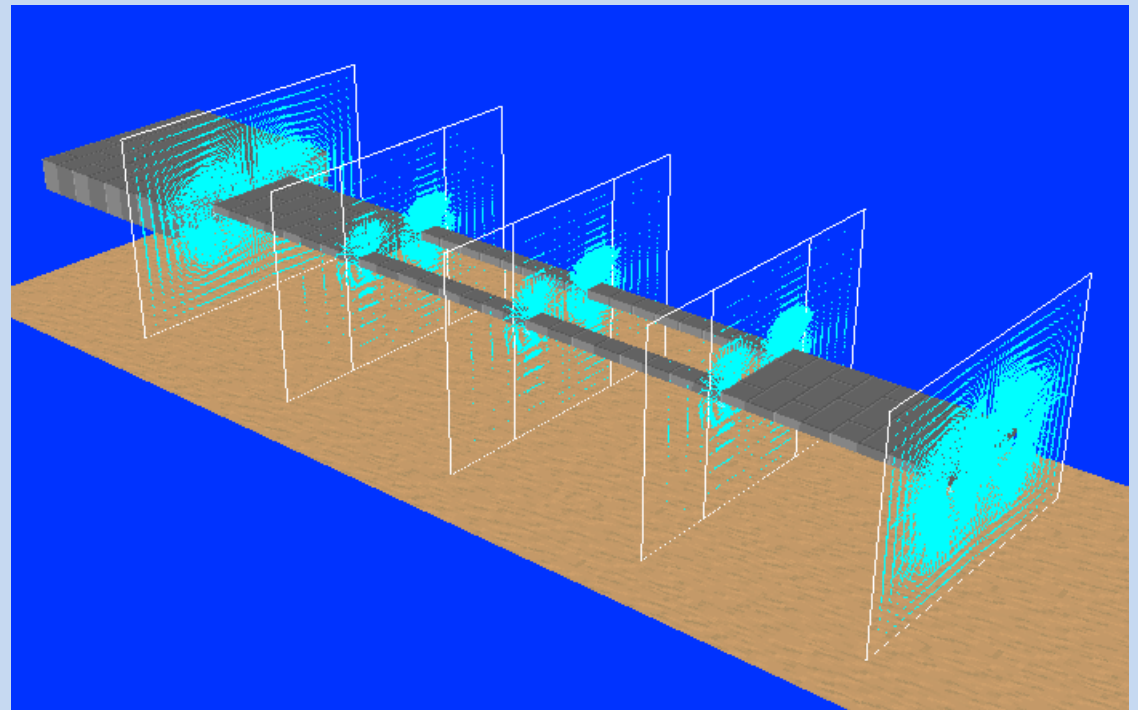
液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ

以下の市場への波及効果が期待できます

バイオ・ソフトマテリアルの産業分野で、ご活用いただけます

表面がぬれたゴムなどの粘弾性接触解析が可能で、高分子分野の産業利用が想定できます

ソフトマターのAFM実験では、バネ定数が小さく、大きく孔のあいたカンチレバーを使用することがあります  
そのような実験のシミュレーションにも対応しています  
高度な学術研究の場面においても、十分、利用可能です



# LiqAFMタッピング機能追加

2016.12. ICSPM24\_ハワイ応用物理学会ポスターセッション

## 液中環境下でのAFM(原子間力顕微鏡)における粘弾性 動力学の数値計算シミュレーション

高分子・ソフトマテリアル等の試料に対して、AFM周波数シフト像、位相シフト像を求めることができます。位相シフトの値は、探針－試料間のフォースカーブのヒステリシスを反映した物理量となっており、系の散逸の度合いを表しています。

## LiqAFMタッピング機能追加

周波数シフトと位相シフトの値から、試料のヤング率、表面張力、基板からの高さの、三種類のパラメータ値を逆算する機能が追加されました。パラメータ値を求める方法として、パラメータ空間内を大域的に探索する方法と、局所的に探索する方法の、二種類が用意されています。

## LiqAFMタッピング機能

適用分野: 高分子・ソフトマテリアル

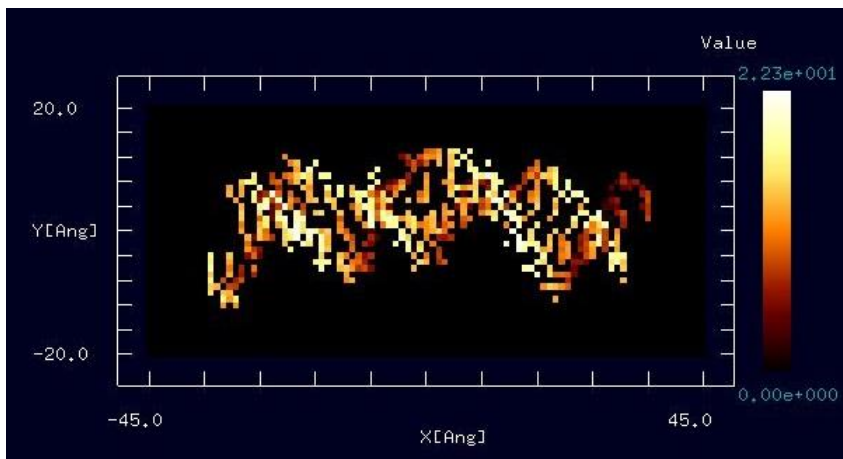
### AFM周波数シフト像、位相シフト像を求める機能

- 試料形状データからAFM周波数シフト像、位相シフト像を求めます
- 探針—試料間のフォースカーブにおいて、ヒステリシスを考慮します
- 粘弾性接触力学が、探針—試料間の相互作用に適用されます
- 探針が試料表面から離れているときは、van der Waals力が仮定されます
- 探針が試料表面に接触しているときは、JKR(Johnson, Kendall, and Roberts)モデルが仮定されます
- 探針—試料表面間の接触・離脱の状態遷移は確率モデルが適用されます

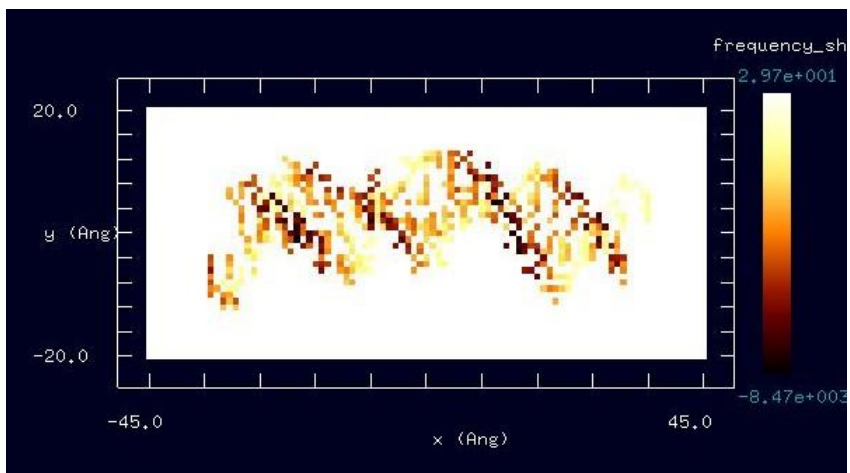
### 周波数シフト、位相シフトから物性値を逆算する機能(逆問題)

- 周波数シフト、位相シフトの観測値から、試料表面のヤング率、表面張力、試料表面の基板からの高さを求めることができます
- 物性値パラメータを逆算する際、最適なパラメータの組を大局的に求めるglobal modeと、局所的な最適解を求めるlocal modeの、二種類のモードが用意されています

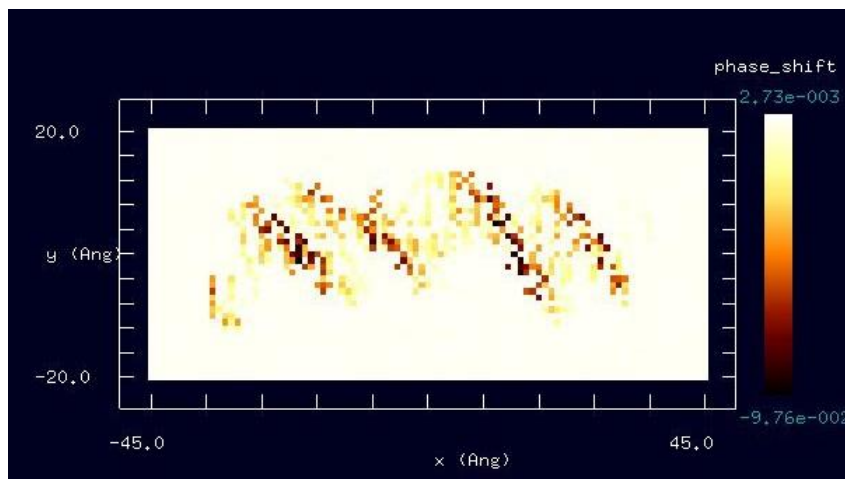
# 液中環境下でのDNA分子を試料としたシミュレーション



オリジナルのDNA分子像



周波数シフト像



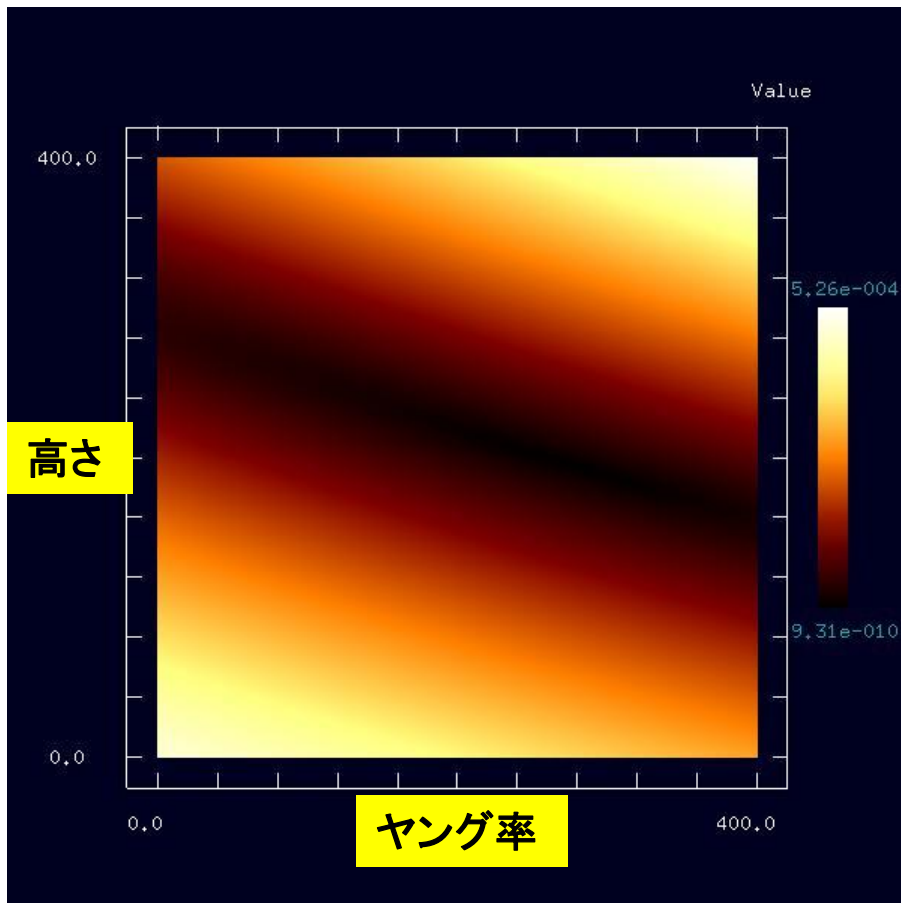
位相シフト像



## 逆問題へのアプローチ

与えられた周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率と、試料表面の基板からの高さを逆算する

ヤング率と高さの2種類のパラメータによる、周波数シフト、位相シフトのずれ関数値の分布



ヤング率と高さのパラメータ平面上に、  
ずれ関数をプロットしたグラフ  
ヤング率: 70.0~80.0[GPa]  
高さ: -0.05~0.05[nm]

ずれ関数値の最も小さい値を与えるパラメータ値の組み合わせが求める解

## 特徴

液体中のカンチレバーの動きを忠実にシミュレーションします  
ミクロン・オーダーの試料のシミュレーションに適しています  
粘弾性を持つ試料にも対応しています

## 適用分野

有機材料、ソフトマテリアル、化学、薬学、バイオサイエンス関連

液体中でのAFM測定をシミュレーションします。液体中でのカンチレバーの共振周波数、液体のカンチレバーに対する粘性の影響を調べるのに適しています。試料が粘弾性を持つ場合の、フォースカーブ等の計算も可能です。

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

従来のシミュレータと比較して、液体中の粘弾性物質の振る舞いを調べることが可能で、バイオ関連の実験系研究者に便利な機能を搭載

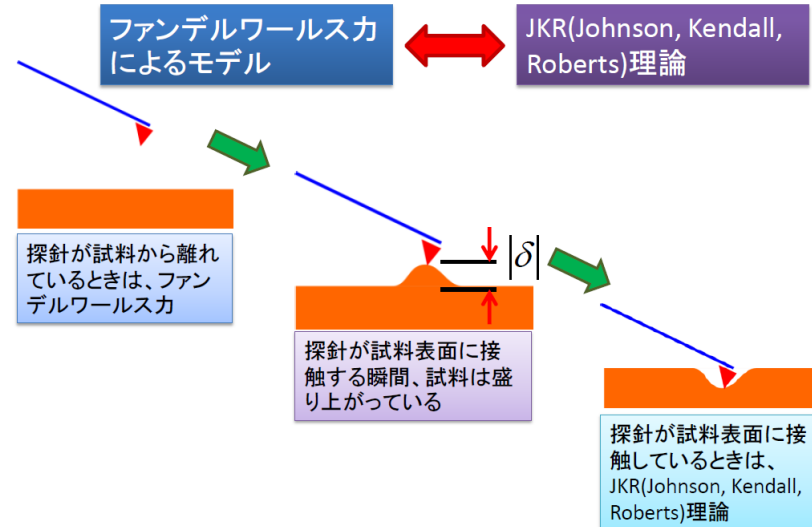
## 推定計算時間

32bit版: 45分

64bit版: 30分

# 【FemAFM / LiqAFM】粘弾性接触解析の計算原理(参考)

## 探針-試料間の粘弾性接触を記述するモデル



## ファンデルワールス力

探針先端部  $2R$   
試料表面  $d$

$$F \cong \frac{A}{12} \frac{D}{d^2}$$

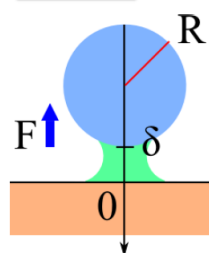
ただし、 $D = 2R$ ,  $A = \sqrt{H_1 H_2}$   
 $H_1, H_2$  : Hamaker定数

探針先端部 → 純粋な弾性体

試料 → 粘弾性の性質を持たせる → 表面張力の導入

→ JKR理論を使うことにする

## JKR理論



$F$  : 二つの固体の間に働く力(上向きを正)  
 $\delta$  : 二つの固体の間の距離(下向きを正)  
 $F = 4F_c (x^3 - x^{3/2})$   
 $\delta = \delta_0 (3x^2 - 2\sqrt{x})$   
 $x$  : 二つの固体の接触面積に比例する無次元量  
 $6^{-2/3} \leq x \leq 1$   
 $F_c = 3\pi\gamma R$  ( $\gamma$  : 試料の表面張力)

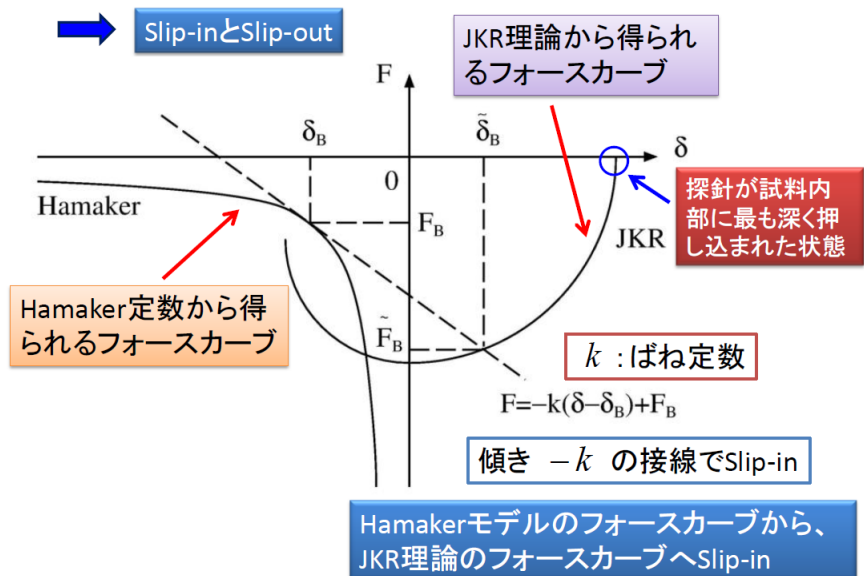
$$\delta_0 = \frac{a_0^2}{3R}, \quad a_0 = \left( \frac{9\pi\gamma R^2}{E^*} \right)^{1/3}, \quad \frac{1}{E^*} = \frac{1-\sigma_1^2}{E_1} + \frac{1-\sigma_2^2}{E_2}$$

$E_1, E_2$  : ヤング率  $\sigma_1, \sigma_2$  : ポアソン比

$a_0$  : 探針を粘弾性物質内部に押し込んだ際、凝着力と弾性反発力が相殺して、探針の試料から受ける力がゼロになる際の、接触面積

$a = a_0 x$  : 接触面積

## ファンデルワールス力によるモデルとJKR理論の間の転移



以下の機能をご用意しています

[ $\mu\text{m}$ ]から[ $\text{nm}$ ]オーダーの、任意の形状の試料に誘電率を指定して、KPFM像をシミュレーションすることができます

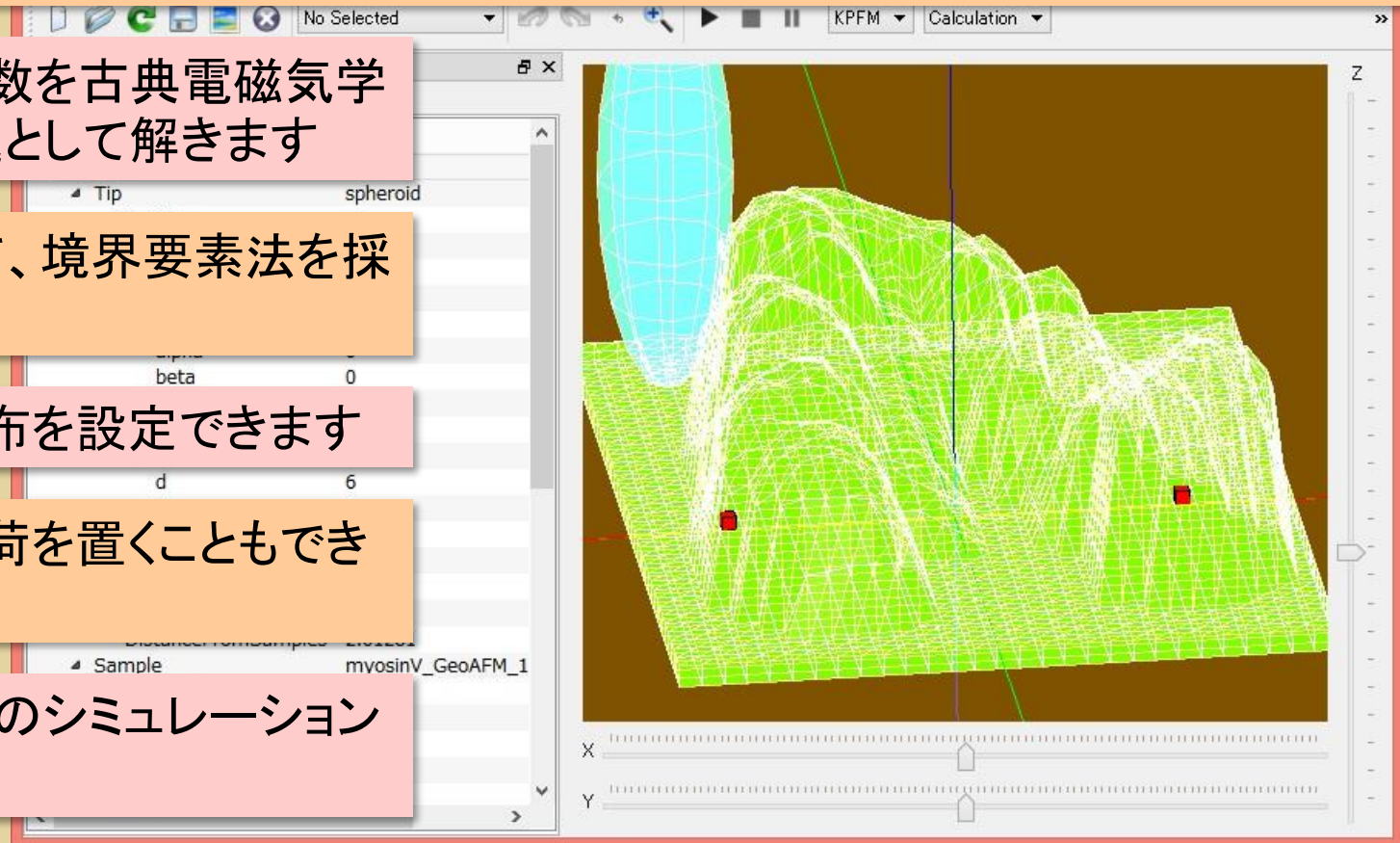
試料表面の仕事関数を古典電磁気学のポテンシャル問題として解きます

数値計算解法として、境界要素法を採用しています

試料表面に電荷分布を設定できます

任意の位置に点電荷を置くこともできます

[ $\text{\AA}$ ]オーダーの試料のシミュレーションはできません



macroKPFM

巨視的KPFMシミュレータ

以下のイノベーションを実現します

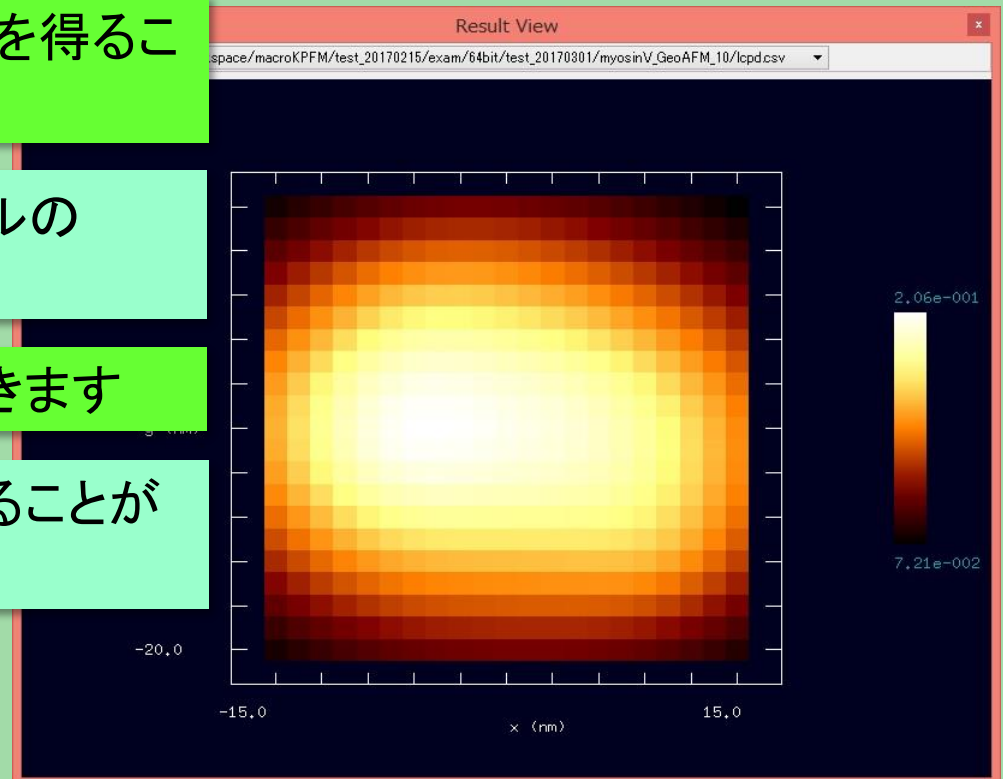
誘電率を持った高分子・ソフトマテリアルのKPFM像が簡単にシミュレーションできます

例えば、帯電したトナー粒子のKPFM像を得ることができます

表面電荷分布を設定したソフトマテリアルのKPFM像を得ることができます

探針が試料表面から受ける力も算出できます

電離分極した高分子のKPFM像を調べることができます





macroKPFM

巨視的KPFMシミュレータ

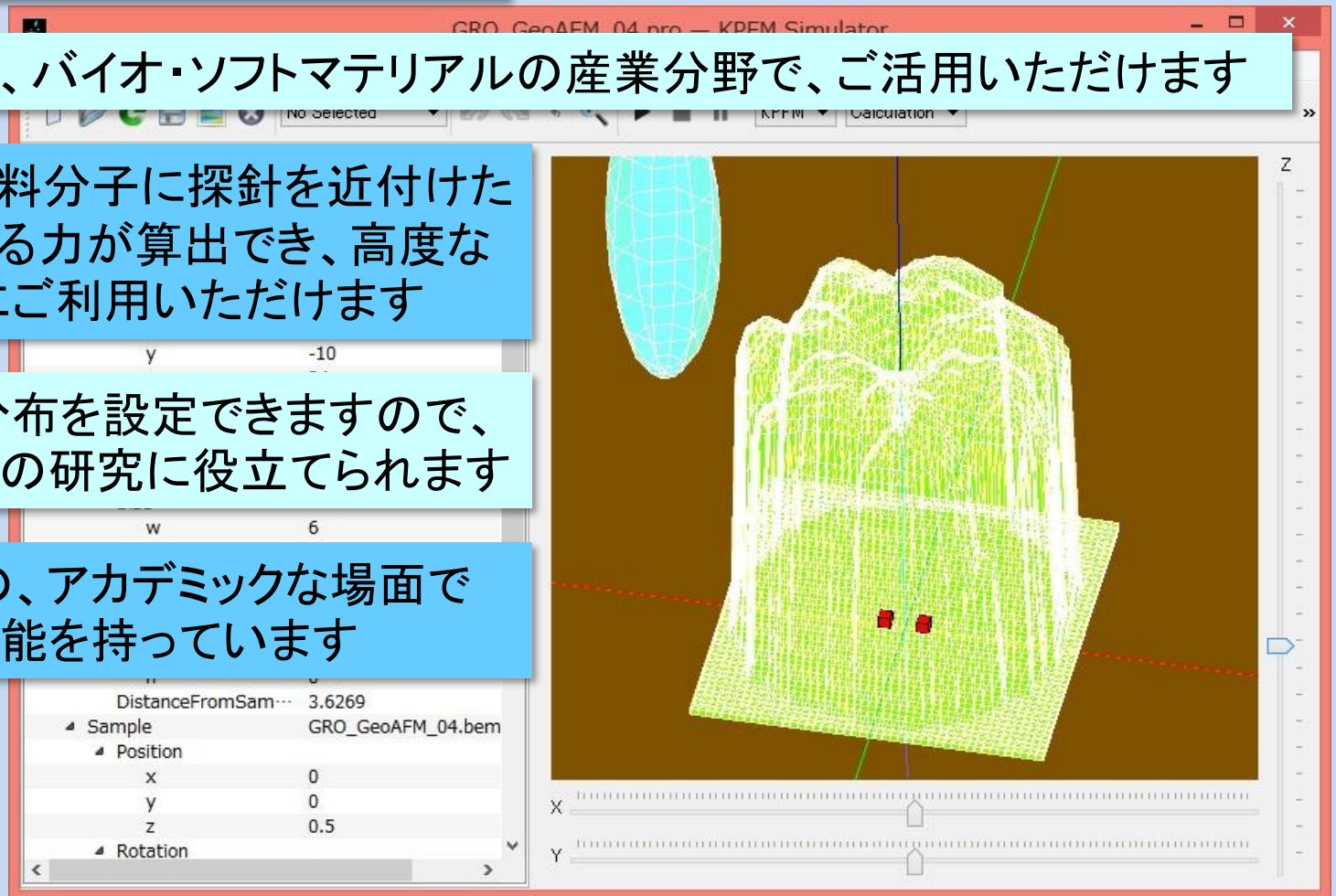
以下の市場への波及効果が期待できます

有機化学、高分子、バイオ・ソフトマテリアルの産業分野で、ご活用いただけます

誘電率を持った試料分子に探針を近付けた際の、探針が受ける力が算出でき、高度な高分子関連研究にご利用いただけます

試料表面に電荷分布を設定できますので、電離分極した材料の研究に役立てられます

大学の研究室等の、アカデミックな場面での使用に耐える性能を持っています



CG 構造最適化AFM像シミュレータ

CG-RISM 原子スケール液中AFM像シミュレータ

以下の機能をご用意しています

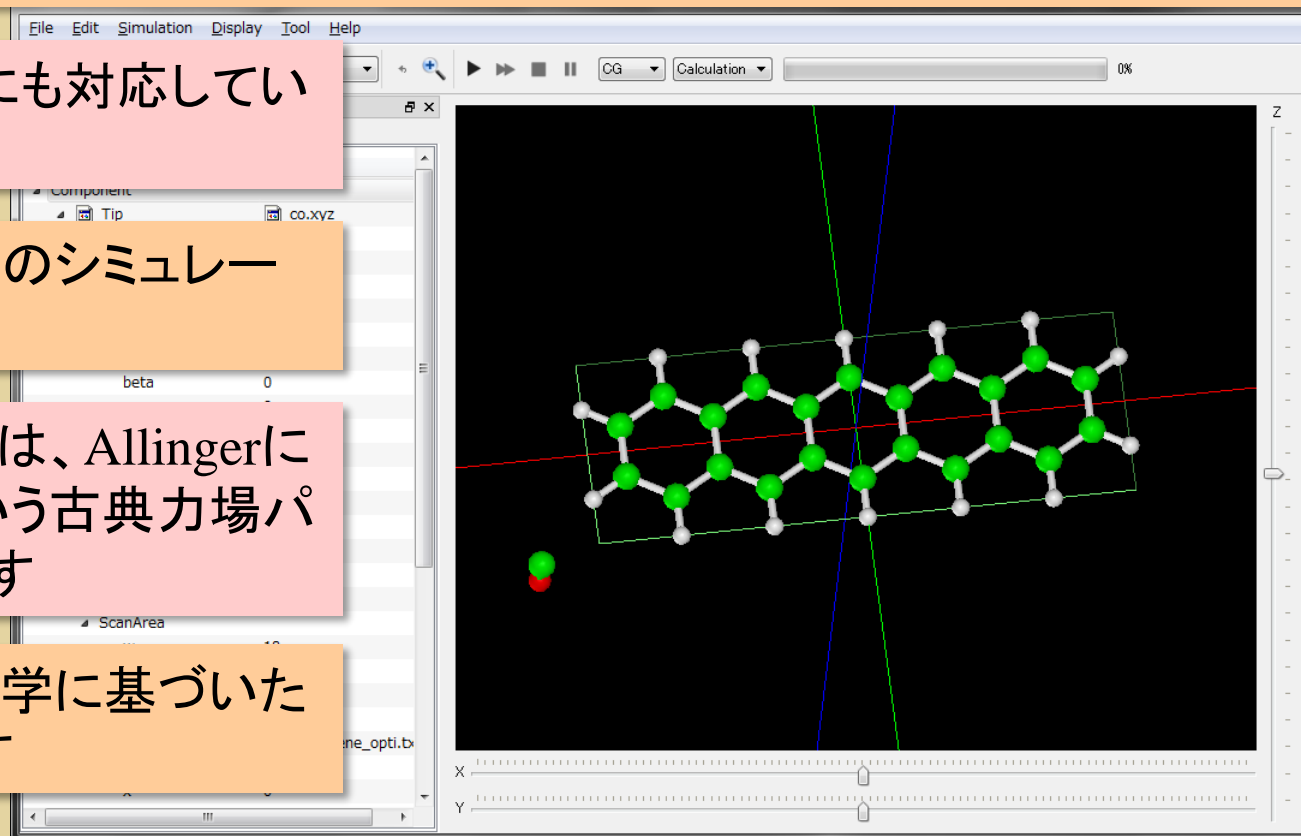
分子がエネルギー的に安定となる原子配置を探索し、最適な分子構造を決定し、そのAFM像をシミュレーションします

水中でのシミュレーションにも対応しています

有機分子の[Å]オーダーでのシミュレーションに適しています

分子の最適構造の探索には、Allingerによって開発されたMM3という古典力場パラメータが用いられています

量子力学ではなく、古典力学に基づいた計算手法を利用しています



CG 構造最適化AFM像シミュレータ

CG-RISM 原子スケール液中AFM像シミュレータ

以下のイノベーションを実現します

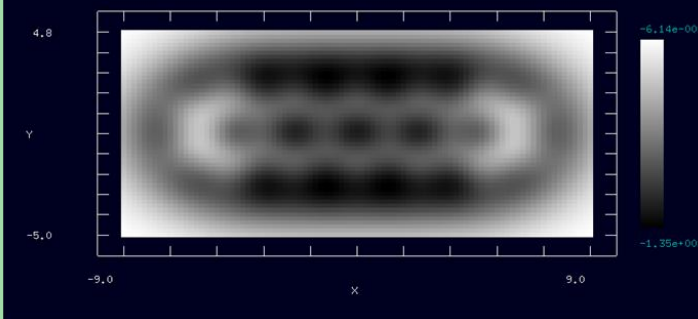
有機半導体分子のような、有機材料の分子レベルでの、AFMシミュレーションが可能となります

水中でのAFM観察にも対応しており、DNA等のバイオ関連分子の観察にも適しています

カーボン・ナノチューブ、グラフェン・シート、ダイヤモンド探針といった、新素材の分析にもご利用いただけます

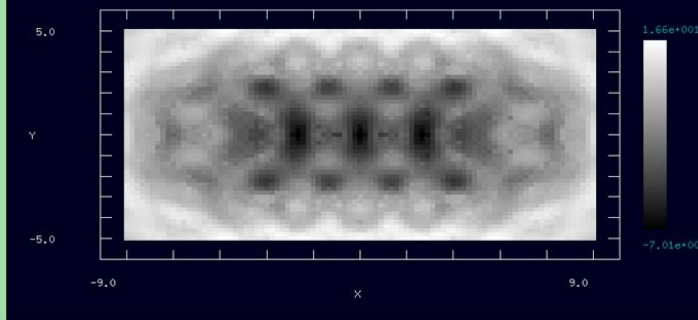
探針を、有機材料分子に押し付けた時の、フォースカーブのヒステリシスも、シミュレーション可能です

真空中:  $\Delta f < 0$



真空中でのペンタセン分子の周波数シフトAFM像

水中:  $\Delta f \geq 0$



水中でのペンタセン分子の周波数シフトAFM像

CG 構造最適化AFM像シミュレータ

CG-RISM 原子スケール液中AFM像シミュレータ

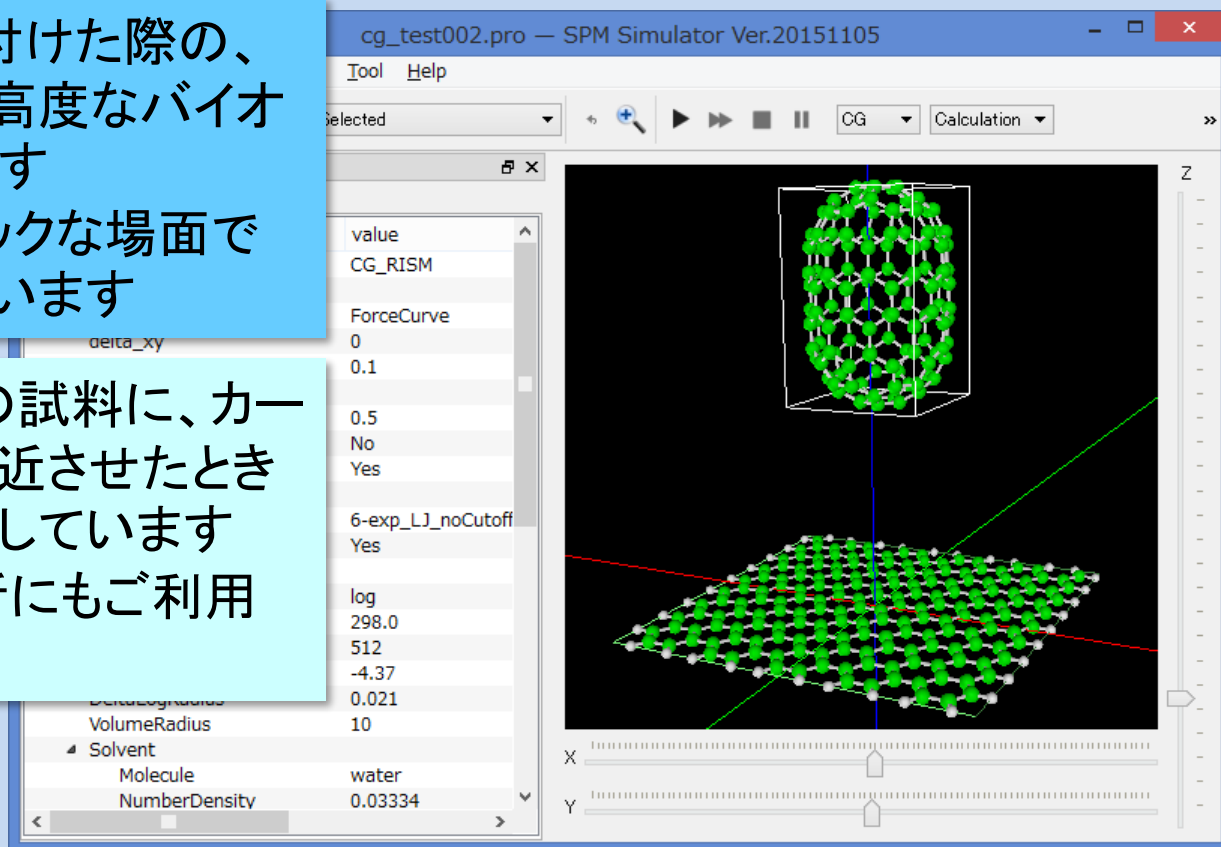
以下の市場への波及効果が期待できます

有機化学、高分子、バイオ・ソフトマテリアルの産業分野で、ご活用いただけます

タンパク質分子を探針で押し付けた際の、試料分子の変形も追跡でき、高度なバイオ関連研究にご利用いただけます

大学の研究室等の、アカデミックな場面での使用に耐える性能を持っています

左の図は、グラフェン・シートの試料に、カーボン・ナノチューブの探針を接近させたときのシミュレーションの様子を示しています  
このように、新しい材料の分析にもご利用いただけます



CG

特徴

分子構造のエネルギー最適化によりAFMシミュレーションを実行します  
分子オーダーのシミュレーションに適しています  
生体高分子のAFM周波数シフト像がシミュレーション可能です

適用分野

有機・無機分子材料、生体高分子、タンパク質

分子がエネルギー的に安定になる原子配置を探索し、分子構造を決定する計算を行います。高分子のAFM周波数シフト像を計算する等、比較的大きなスケールの試料を調べるのに適しています。

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

従来のシミュレータと比較して、古典的な力場パラメータの考え方の導入により、探針との相互作用による試料分子の構造変化を原子スケールで予測

推定計算時間

32bit版: 90分

64bit版: 60分



MD

## 分子動力学AFM像シミュレータ

以下の機能をご用意しています

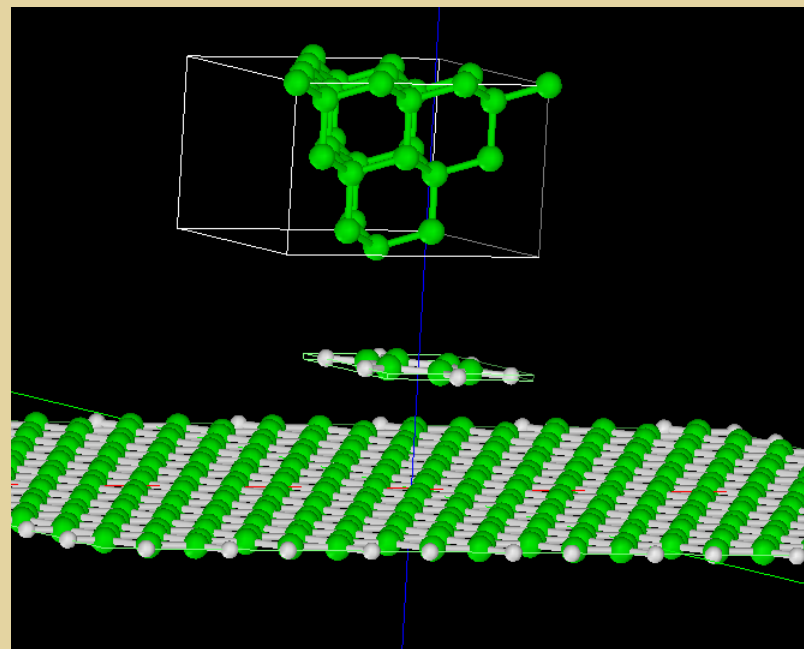
分子中のすべての原子について、ニュートン運動方程式を設定し、その連立微分方程式を解くことによって、系の時間変化を求めます

AFM周波数シフト像や、フォースカーブを求めることができます

分子内の原子の配置の時間変化を追跡し、系の緩和現象を調べることが可能です

特定の原子は固定し、他の残りの原子の構造緩和を追跡することも可能です

有機分子の[Å]オーダーでのシミュレーションに適しています



MD

## 分子動力学AFM像シミュレータ

以下のイノベーションを実現します

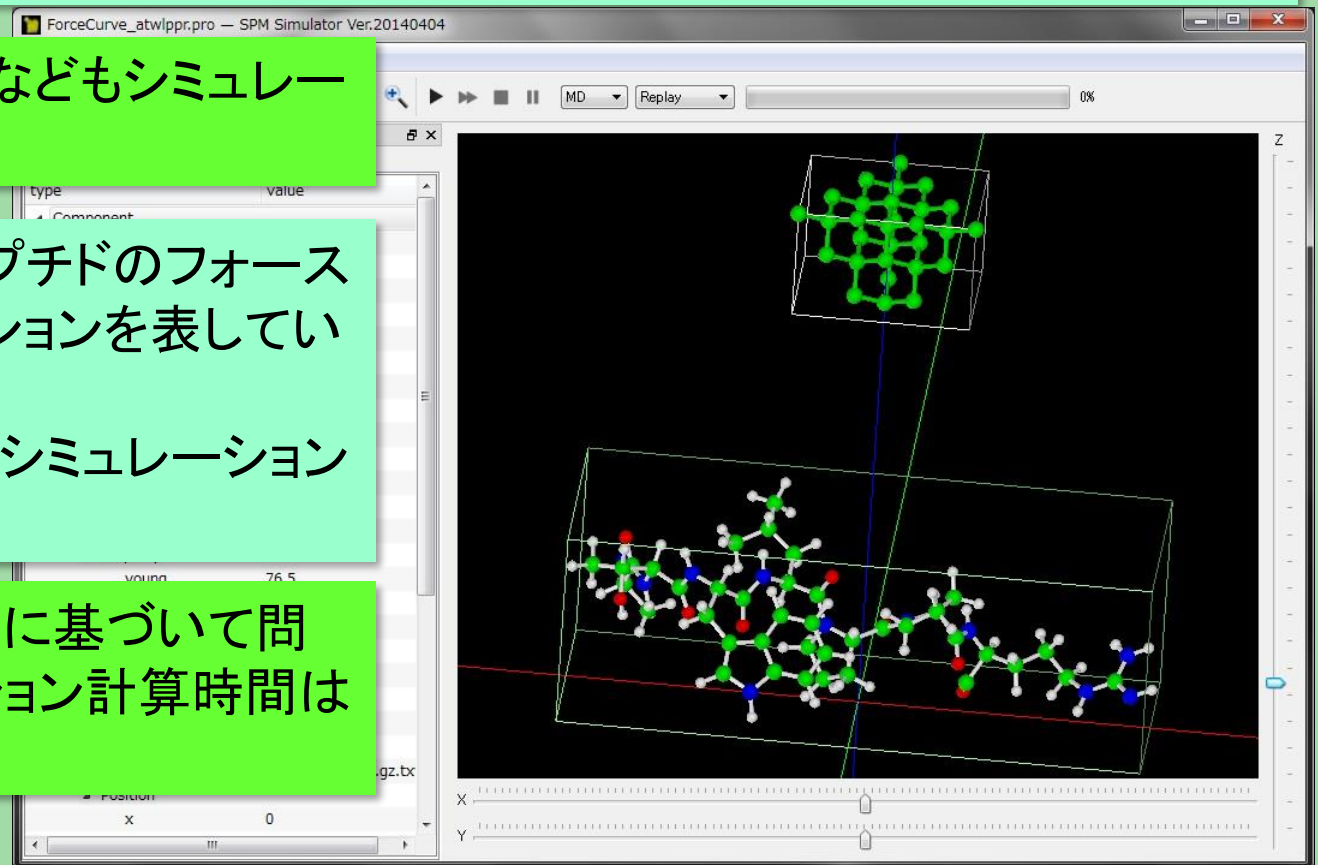
一般的な有機分子から、バイオ関連の高分子まで、幅広いAFMシミュレーションが可能です

有機半導体・有機EL分子などもシミュレーション可能です

左の図は、抗血管新生ペプチドのフォースカーブを求めるシミュレーションを表しています

このように、生体高分子のシミュレーションも十分可能です

量子論ではなく、古典力学に基づいて問題を解くため、シミュレーション計算時間は比較的短くて済みます



MD

## 分子動力学AFM像シミュレータ

以下の市場への波及効果が期待できます

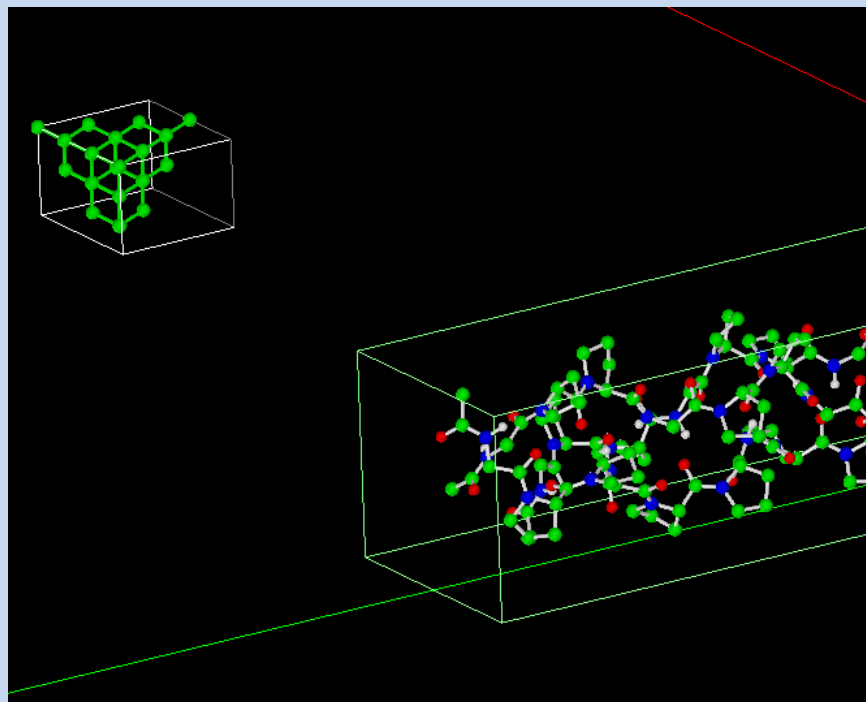
有機化学、高分子、バイオ・ソフトマテリアルの産業分野で、ご利用いただけます

有機分子の構造緩和計算等の、技術的に高度なシミュレーションが可能で、大学の研究室等のアカデミックな現場でも、十分、ご利用いただけます

フォースカーブの計算にも威力を発揮します

太いカーボン・ナノチューブの内部に、細いカーボン・ナノチューブを差し込む、といった新素材のシミュレーションにも対応しています

マテリアル関連産業で威力を発揮することが予想されます



MD

特徴

分子動力学法によりAFMシミュレーションを実行します  
分子オーダーのシミュレーションに適しています  
生体高分子のAFMフォースカーブがシミュレーション可能です

適用分野

有機・無機分子材料、生体高分子、タンパク質

分子を構成する全ての原子を多体系と見なして、連立ニュートン方程式を解くことにより、系の時間変化をシミュレートします。探針を分子試料に押し込んだ際のフォースカーブを得る等の計算に適しています。

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

従来のシミュレータと比較して、分子動力学法で原子・分子多体系を取り扱えるシミュレータとしては、最も軽量で、実験家ユーザーに負担を与えません

推定計算時間

32bit版 : 60分

64bit版 : 40分

DFTB

## 量子論的SPM像シミュレータ

以下の機能をご用意しています

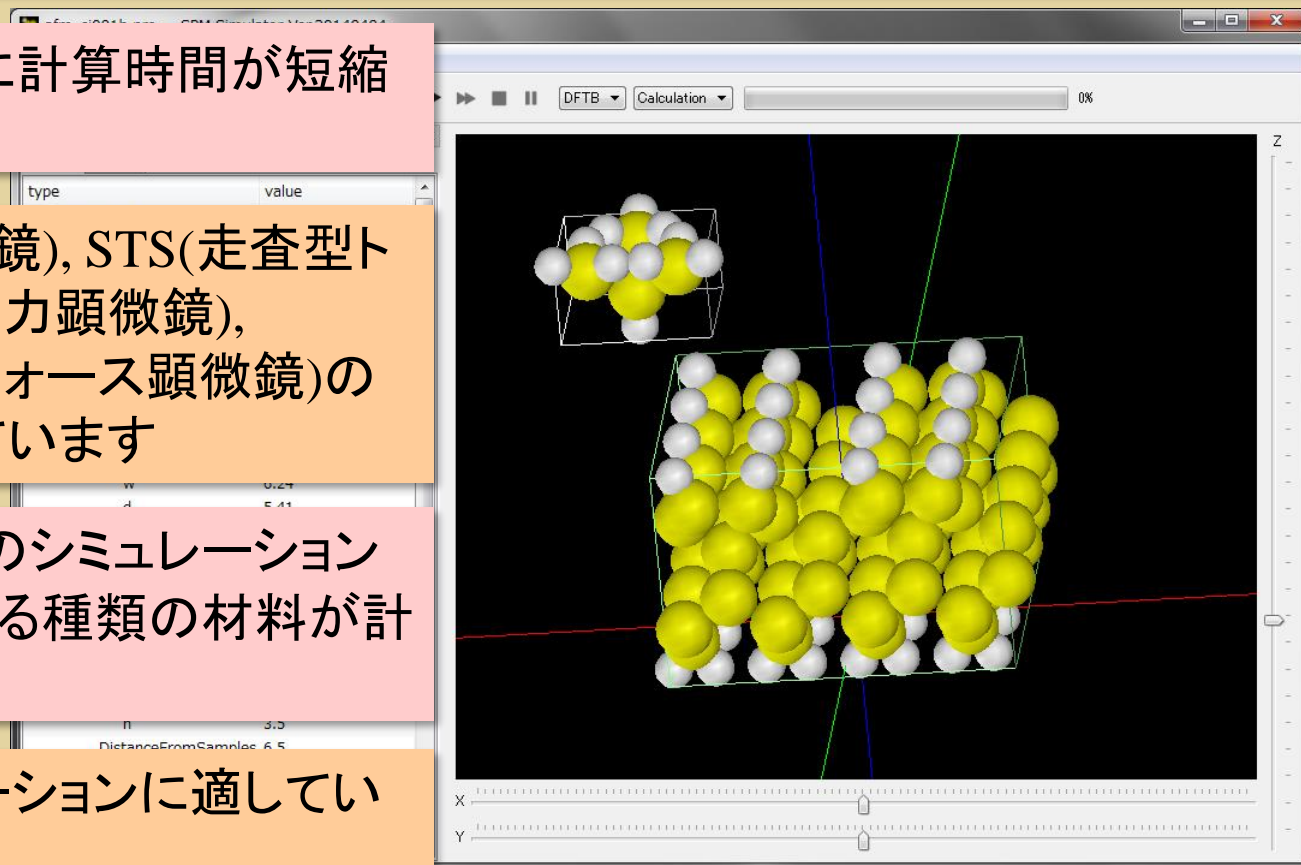
密度汎関数理論に基づく強束縛計算法と呼ばれる、量子力学的な手法を採用して、シミュレーション計算を行います

第一原理計算よりも大幅に計算時間が短縮されています

STM(走査型トンネル顕微鏡), STS(走査型トンネル分光), AFM(原子間力顕微鏡), KPFM(ケルビンプローブフォース顕微鏡)のシミュレーションに対応しています

69種類の元素を使った系のシミュレーションが可能で、事実上、あらゆる種類の材料が計算できます

[Å]オーダーでのシミュレーションに適しています





DFTB

## 量子論的SPM像シミュレータ

以下のイノベーションを実現します

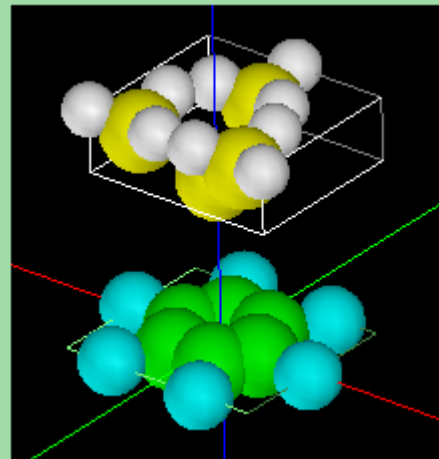
69種類の元素が使用可能なので、あらゆる、無機・有機材料のシミュレーションが可能です

化合物結晶のエネルギー・バンド構造を調べる機能も付いています

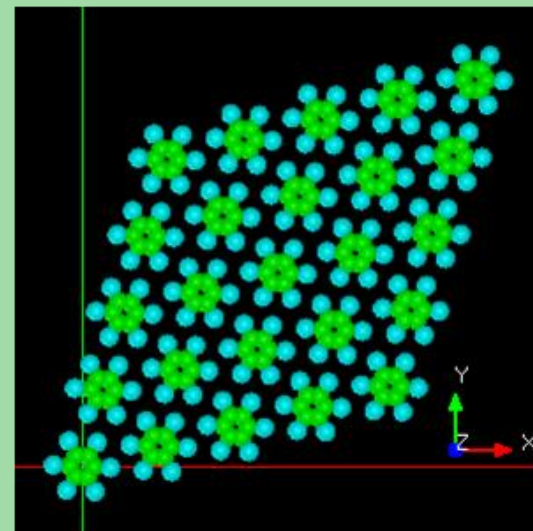
計算手法として密度汎関数法を採用しており、短時間で高い精度の計算結果が得られます

STMシミュレーションにおいて、高さ一定モードと、トンネル電流値一定モードが用意されています

周期的境界条件を考慮したシミュレーションが実行可能です



$C_6Br_6$ に水素終端されたシリコン探針を近付けた様子



周期的境界条件によって得られた $C_6Br_6$ モノレイヤー

DFTB

## 量子論的SPM像シミュレータ

以下の市場への波及効果が期待できます

有機・無機半導体等のデバイス産業分野で、ご活用いただけます

無機・有機半導体、あらゆる金属表面のSTM, AFMシミュレーションが可能で、大学の研究室等のアカデミックな現場でも、十分、ご利用いただけます

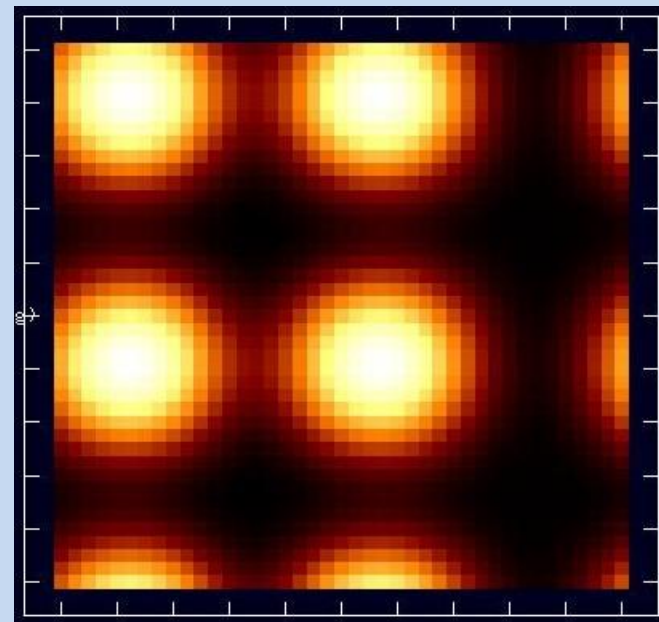
一般的な有機分子のAFM, KPFMシミュレーションにも、ご利用いただけます

バンド構造計算機能をご利用いただけます

一般的な物性理論研究の補助ツールとしてお使いいただけます

触媒表面上の分子のSTM, AFMシミュレーションが可能で、自動車関連分野での使用が期待できます

産・官・学の垣根を越えて、あらゆる研究現場で、有効にご利用いただけます



## 特徴

表面構造のSTM, STS, AFM, KPFMシミュレーションを実行します  
ナノオーダーの試料のシミュレーションに適しています

## 適用分野

有機・無機材料

量子力学的な計算により、トンネル電流(STM)、トンネル電流分光(STS)、接触電位差像(KPFM)等をシミュレートします。密度汎関数法と呼ばれる近似法を採用することにより、計算時間・メモリ消費を抑えている点に特徴があります。半導体結晶薄膜等のマイクロな試料を調べるのに適しています。

## 量子論的SPM像シミュレータ

## 量子論

マイクロな原子・分子レベルでのAFM  
周波数シフト像  
トンネル電流分光(STS)  
STMトンネル電流像・KPFM像

Si, W, Pt, Au, Ti, Al, Ruの7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

従来のシミュレータと比較して、第一原理計算によるシミュレーションと比較しても、見劣りしない計算結果を、短時間で得ることが可能  
実験家のための量子論的シミュレータと言えます

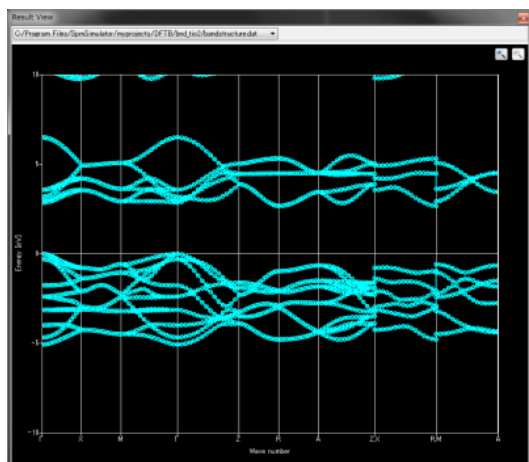
## 推定計算時間

32bit版: 160分    64bit版: 120分

# バンド構造計算機能

## DFTBにバンド構造計算機能が追加されました

- Windowsパソコン上で、簡単に計算ができます。(必要なパラメータを入力するのに必要な時間は平均で約4分です。)
- 69種類の元素に対応しており、事実上、あらゆる無機・有機化合物が計算可能です。
- 直観的で分かり易いグラフィック・ユーザ・インターフェース(GUI)を用意しましたので、シミュレーション計算に関して初心者の方でも、すぐに使えます。
- 密度汎関数強結合法を計算原理として採用しており、計算時間が非常に短く、計算結果も信頼できます。
- 3次元結晶だけでなく、2次元構造の材料のバンド計算にも対応しています。



最終的には、左図のような形で計算されたバンド構造が表示されます(TiO<sub>2</sub>の例を示しています)

VASP形式またはCIF形式ファイルをお持ちの方は、設定データをそのまま使えます。(VASPとは、ウィーン大学が提供している第一原理計算パッケージです。)

調べたい物質の結晶構造データを作成するソフトウェアとしてSetModelが使えます。SetModelでは、結晶構造データを入力するだけです。

## DFTBソルバのバンド構造計算機能は、PHASE/0の利用をバックアップします

- PHASE/0は物質・材料研究機構で開発された第一原理計算ソフトです。
- DFTBソルバでバンド構造計算を予備的に行い、その結果を踏まえて、PHASE/0の計算に移行することができます。
- DFTBでの結果を見て、計算対象となる物質のバンド構造計算が難しいか簡単か予想することができます。

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**商用ソフトウェアです

理論的計算シミュレータ機能  
有限要素法、分子動力学法、密度汎関数法に基づく強結合法(DFTB法)の採用

実験画像データの3D処理機能  
世界主要SPMメーカーのデータを**直接読み込み可能**  
データ画像のデジタル補正機能、探針先端形状の推定機能、グラフィック機能全体の強化、etc

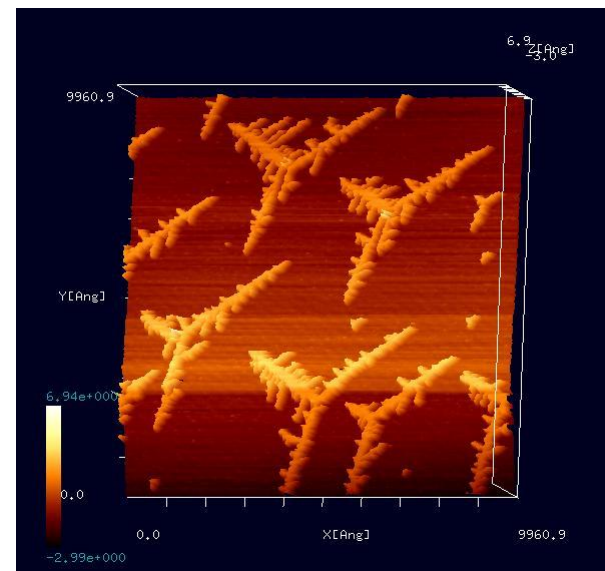


粘弾性接触力学の導入による、バイオ・ソフトマテリアル・シミュレーション(逆問題含む)への挑戦

DFTBシミュレーションで69種類の元素パラメータを完備することにより、あらゆる無機・有機化合物のシミュレーションに対応

SPM実験画像とシミュレーション画像の比較機能の実装により、試料表面の原子の真の状態を特定可能

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





# SPMシミュレータの新機軸・イノベーション コンセプト

主な対象となるユーザ:SPM実験研究者全般  
一部の理論研究者(分子動力学法、DFTB法)

近似的なシミュレーション結果を実験研究者に短時間で提供することが目的

計算時間が長くかかる厳密なシミュレーション結果を出すことを目的としていない

実験研究者が手軽に使えるツールを目指す

高分子の粘弾性接触力学解析機能などを用意し、ソフトマテリアル・バイオ関連分野の研究者にも利用して頂けるソフトを目指している

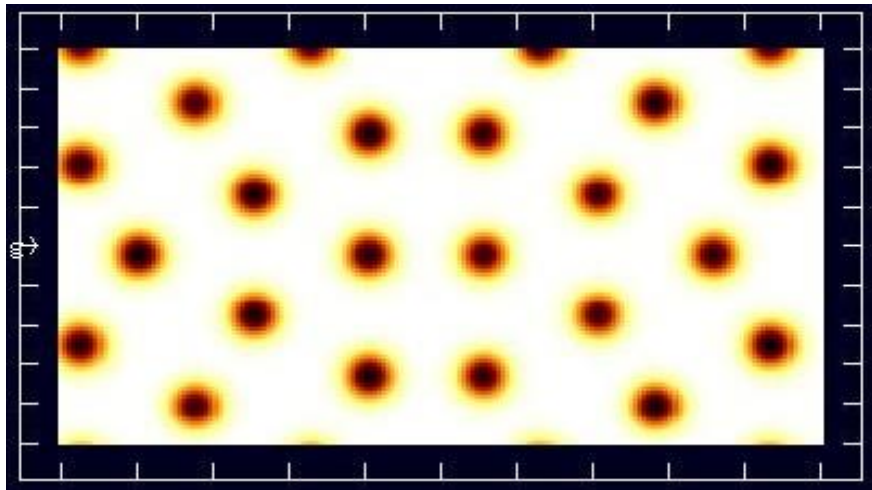
## 長期的な目標

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

SPMシミュレータの導入は、研究・開発業務活動において、以下のメリットをSPMユーザー様に提供します。このメリットはSPMシミュレータ価格に含まれます。

## DFTBソルバ

SPMシミュレータは走査型プローブ顕微鏡実験画像をシミュレートするためのソフトです。SPMシミュレータは、複数のソルバの集合体であり、シミュレーションの用途・目的に応じてソルバを使い分けるようになっていています。なかでも、DFTBソルバは、密度汎関数法強結合法という解法を採用しており、量子力学的なシミュレーション計算を行う点に特徴があります。



DFTBソルバによる、Si(111)表面  
(7×7)DAS構造のSTM(走査型トンネル顕  
微鏡)画像のシミュレーション結果

DFTBソルバは、実験が専門の研究者でも気軽に理論シミュレーションが行えるように設計されています。特に、大胆な近似法を採用することで計算時間を大幅に短縮しており、実験作業と並行してシミュレーションが行えるように配慮されています。

このように、DFTBソルバは計算精度を犠牲にしている面があるのですが、それでも、一般的な第一原理計算ソフトによる電子状態シミュレーションの計算精度と比較して、遜色のない性能を持っています。この点について、次のページでベンチマークテストの結果を紹介致します。

- FemAFM, LiqAFMには粘弾性接触機能が組み込まれており、ソフトマテリアルの解析において威力を発揮します
- DFTB(密度汎関数法)のソルバでは、平成28年9月に69種類の元素パラメータが完了しました。有機化合物系、有機半導体系、無機半導体系、金属系等の[密度汎関数法に基づく強結合法(第一原理計算)]DFTB計算時間[2時間以内]程度で、実行可能になります。
- 単なる理論シミュレーションにとどまらず、実験画像データとの比較、デジタル画像処理が可能となります

- SPM初心者ユーザ補助機能 組み込み完了、SPMシミュレータ操作ナビシステム (ユーザの使用支援コンサル指示・工数・契約見積書) SPMガイドブック マニュアルリストと活用ガイダンス が、計算実行(ツール)環境を与えるので、SPM初心者、不慣れな方々もユーザ支援コンサル指示(GO/STOP)に添い、OJT的・自立的に「SPMシミュレータ併用型・SPMシミュレーション手法」に参加できます。

SPM計算課題共有化・購入前SPM無償供与/性能検証・使用法習得計算の機会提供・評価付き・SPMライセンス買取契約手法、をご提案させていただきます。

SPM計算課題共有化, 購入前検証計算, SPM自立的(OJT的)計算実行可能者 として販売契約

PHASE/0のプリプロセッサとしての利用が予定されています。

PHASE/0はNIMS(物質材料研究機構)によって開発された、密度汎関数理論に基づいた第一原理分子動力学法計算のためのソフトウェアシステムです。

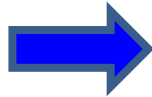
SPMシミュレータのDFTBソルバとPHASE/0との連携で、より高速な密度汎関数法計算が期待できます。<https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/nsmail-311.pdf>

## ソフトウェアのコンセプト

「実験－理論計算」画像比較型SPMシミュレーションを実現

粘弾性接触解析を取り入れたバイオ・ソフトマテリアル材料分析

DFTB計算において69種類の元素を用意し、あらゆる無機・有機化合物に対応



AFM、KPFM、STM/STS、バンド構造計算

応用範囲は、さらに、広がりつつあります

## ソフトウェアの適用条件

ユーザーに、どのソフトウェアを使用頂くか、選択の着眼を申し上げます。

## バイオ・ソフトマテリアル分野のユーザーからの視点

粘弾性接触解析を行いたい

探針のタッピング(tapping)を再現したい

## 半導体デバイス分野のユーザーからの視点

量子力学的な解析(密度汎関数法、DFTB)を行いたい

69種類の元素を組み合わせた様々な有機・無機材料を調べたい



新規分野でのSPMシミュレータの利用を加速します

ソルバー	特徴	機能
Analyzer 実験データ画像処理プロセス	シミュレーションの前処理 実験データを補正して計算用入力へ変換する。探針形状の予測と形状効果を補正する	<ul style="list-style-type: none"> <li>・探針構造推定機能</li> <li>・メーカー各社のSPM実験データの読み込み機能</li> <li>・画像データの傾斜補正機能 etc.</li> </ul>
SetModel 原子モデリングツール	シミュレーションの前処理 探針と試料の原子構造モデルを作成	<ul style="list-style-type: none"> <li>・半導体薄膜等の結晶性の周期構造を持ったモデルを作成する機能</li> <li>・個々の原子を操作して欠陥・不純物や探針構造を作成する機能</li> <li>・他のソフトでモデリングした構造の読み込みや、終端に水素を付加する機能</li> </ul>
GeoAFM 高速相互予測AFMシミュレータ	像解像度は原子尺度ではなく、メゾからマクロスケールでのシミュレーション。精密でないが、試料構造・探針構造・AFM像の二つから、残りを高速で予測する。液中・大気中・ソフトマター全てに対応する。近似的ではあるが実用的	<ul style="list-style-type: none"> <li>・試料と探針から計測像を予測する機能</li> <li>・計測像と探針から試料形状を予測する機能</li> <li>・計測像と試料から探針形状を予測する機能</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> </ul>
FemAFM 連続弾性体AFMシミュレータ	試料および探針の弾性変形を考慮して、メゾからマクロスケールの像解像度でAFMイメージを計算する。GeoAFMとの併用、あるいはLiqAFM(tapping)との併用で活用する。	<ul style="list-style-type: none"> <li>・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応</li> <li>・単振動加振・二重加振／多モードに対応</li> <li>・カンチレバーの共鳴曲線(真空中、大気中、液中)を描く</li> <li>・マルチコア並列計算機能</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> </ul>

実用・開発者向き



実用・開発者向き

<p>LiqAFM (tapping) 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ</p>	<p>液中のカンチレバー振動を考慮しつつ、ソフトマターおよび粘弾性凝着系のタッピングモードシミュレーションを行うことができる。単振子に射影した計算では、標準理論を用いると効率的である。適用領域は(液中)ソフトマター、高分子など広範囲であり、使いやすくニーズは高いと思われる。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応</li> <li>・単振動加振・二重加振／多モードに対応</li> <li>・カンチレバーの共鳴曲線(真空中、大気中、液中)を描く</li> <li>・マルチコア並列計算機能</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> <li>・逆問題解析機能が追加された。これにより、AFM周波数シフト、位相シフトの値から、試料のヤング率、表面張力、高さ情報が逆算できるようになった。<a href="#">(参考資料)</a></li> </ul>
<p>macroKPFM 巨視的KPFM像シミュレータ (2017年3月頃リリース見通し)</p>	<p>KPFM像シミュレーションを、<math>\mu\text{m}</math>から<math>\text{nm}</math>のオーダーで行う。境界要素法を用いて、古典電磁気学のポテンシャル問題を解くことに相当する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・任意の形状の誘電体を試料として設定可能</li> <li>・試料表面に電荷の分布を指定可能</li> <li>・任意の位置の電荷を置くことができる</li> <li>対象(高分子、トナー粒子)</li> </ul>

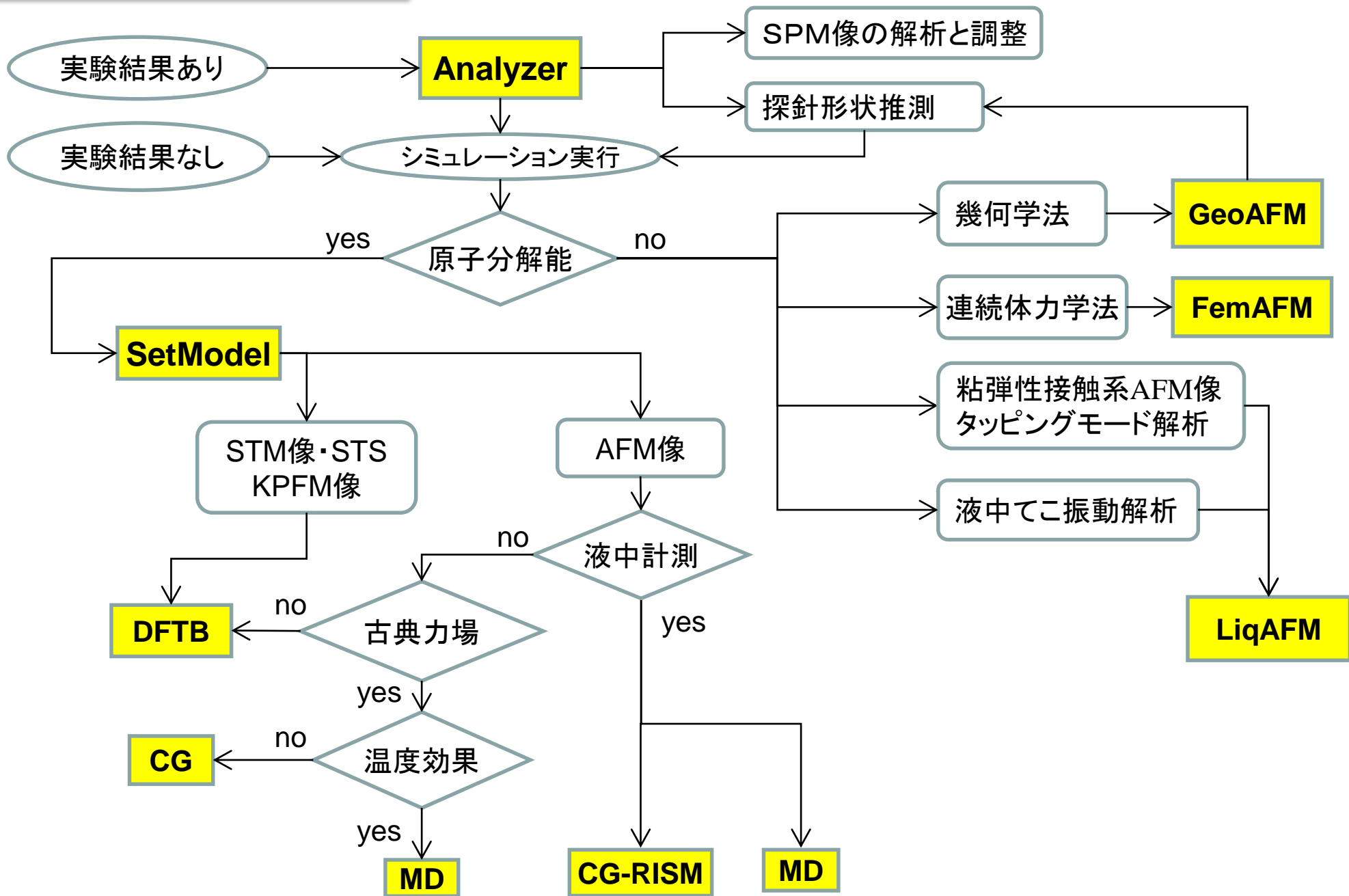
研究者向き

<p>CG 構造最適化AFM像シミュレータ</p>	<p>古典力学法による原子モデルの最適化計算 液中CG-RISM計算</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・散逸像・周波数シフト像、フォースマップ等を計算</li> <li>・接触高さ、カー一定のコンタクトモード像計算</li> <li>・振幅一定、周波数シフト一定のダイナミックモード像計算</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> </ul>
<p>MD 分子動力学AFM像シミュレータ</p>	<p>古典力学法による原子モデルの分子動力学計算</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・フォースカーブの計算</li> <li>・三次元力場の計算、散逸像・周波数シフト像予測に対応</li> <li>・AFM探針－測定試料間の相互作用に伴う試料の動的変形挙動を予測計算</li> <li>・液中計算に伴う溶媒の分子動力学計算</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> </ul>

## DFTB 量子論的SPM 像シミュレータ

量子力学計算による探針力とトンネル電流の計算 STM/STS, AFM, KPFMに対応 KPFMはより実用的に拡張したい

- ・AFM像: 力、周波数シフト分布を計算
- ・STM像: 高さ一定モードのトンネル電流像を計算
- ・STM像: 電流一定モードのトポグラフィ像を計算
- ・KPFM像: 局所接触電位差分布を計算
- ・多重極静電力、軌道混成力の計算可(KPFM)
- ・分子修飾探針の影響を考慮可(STM)
- ・対象(半導体ドーパント)
- ・バンド構造計算機能が追加された。PHASE/0との連携運用も視野に入れている。[\(参考資料\)](#)



## SPMシミュレータDFTBソルバ用計算パラメータ・データベース構築

一般に流通しているDFTBソルバでは、通常、原子間相互作用パラメータを提供しません

一方、

Advanced Algorithm & Systemsでは、SPMシミュレータのDFTBソルバにおいて、原子間相互作用パラメータを、**[区分1]:12元素、[区分2]:27元素、[区分3]:69元素**(平成28年9月完成)の条件でご提供の方針です

**区分1:12元素**      H, C, N, O, P, Al, Si, Ti, Ru, W, Pt, Au

**区分2:27元素**      S, F, Cl, Br, I, Ge, Ga, As, Na, Ag, Bi, Mg, Cu, Li, B

**区分3:69元素**

遷移金属 V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zr, Nb, Mo, Tc, Re, Rh, Pd, Ir, Y, Sc

ランタノイド系      La, Ce, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb

半金属      Se, Sb, Te

アルカリ金属      K, Cs, Rb

アルカリ土類金属      Ca, Ba, Sr

卑金属      Be, Zn, In, Sn, Cd, Hg, Pb

アクチノイド系      U

これにより、ほぼ全ての、無機・有機化合物のDFTB計算による、STM/STS, AFM, KPFMシミュレーションが可能となります

# DFTB原子間作用パラメータ preliminary DB 開発状況(完了)

DFTB計算 使用可能元素 (2015/12/25更新)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	H																	He
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	*1	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Fr	Ra	*2	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	113	Fl	115	Lv	117	118

*1 ランタノイド	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
*2 アクチノイド	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

27元素 使用可能 (2015/09/26)

	12 H, C, N, O, Al, Si, P, Ti, Ru, W, Pt, Au
	15 Li, B, F, Na, Mg, S, Cl, Cu, Ga, Ge, As, Br, Ag, I, Bi

32元素 追加開発

	17 Sc, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zn, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Rh, Pd, Re, Ir (遷移金属)
	8 La, Ce, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm (ランタノイド)
	4 Se, In, Sb, Te (半金属)
	3 K, Rb, Cs (アルカリ金属)

10元素追加

	10 Be, Ca, Sr, Ba, Cd, Sn, Hg, Pb, Yb, U
--	--

2016年9月  
までに  
69元素完了



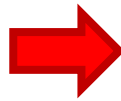
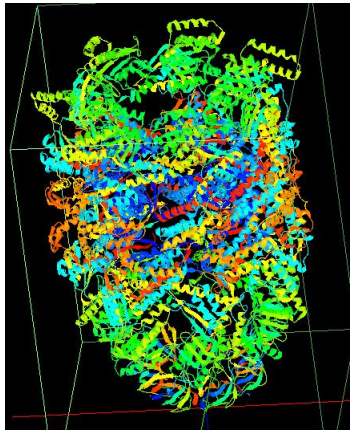
# バイオ・ソフトマテリアル分野でのAFMシミュレーションの展開

[ $\mu\text{m}$ ]オーダーのAFMシミュレーションに適しています

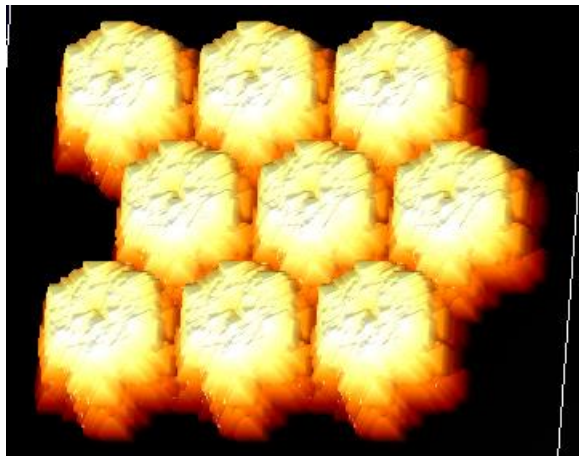
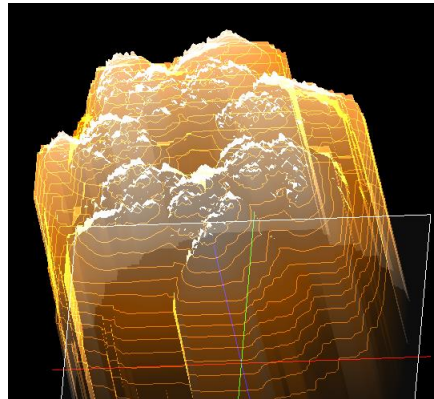
Protein Data Bankで提供される分子構造データに対応しています

原子数が数千を超える高分子でも、1分以内の高速シミュレーションが可能です

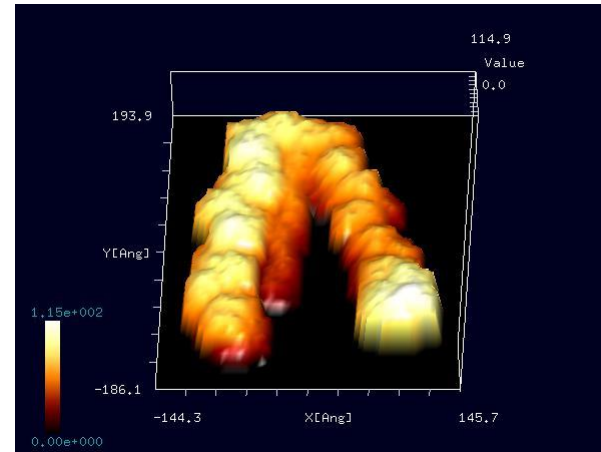
試料表面の凹凸  
形状データ



測定AFM像データ



整列したコネクソン分子のAFMシミュレーション画像



生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション

販売形態

ライセンス買取契約

レンタル契約

統合型セット

Standard型

DFTBを除くすべてのソルバのセットです

バイオ・ソフトマテリアル向け

Professional型

DFTBを含むすべてのソルバのセットです  
元素の種類を12、27、69種類と選べます

あらゆる材料分野向け

構成ソルバ型セット

構成ソルバと、Analyzer、SetModelの組み合わせセットです

GeoAFM型

FemAFM型

LiqAFM型

CG型

MD型

バイオ・ソフトマテリアル向け

DFTB型

元素の種類を12、27、69種類と選べます

無機・有機材料向け

ソフトウェアはCD-ROMの形で郵送されます。

ライセンスファイルを発行することで管理を行っています。メンテナンス費用、レンタル料が支払われない場合、ライセンスファイルが期限切れとなり、ソフトは使用不可能となります。

## 各販売セットの特徴

### Standard型

### 統合型セット

- DFTB以外のすべてのソルバを含んでいます
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- Protein Data Bankで提供されている分子構造データに対応しています
- 探針と試料の表面張力による凝着等の粘弾性接触力学を調べることができます
- 分子動力学法を使って、探針を試料に押し込んだときの変形を再現できます
- 試料の緩和現象による変形を調べることができます

### Professional型

### 統合型セット

- すべてのソルバを含んでいます(DFTBも含みます)
- バイオ・ソフトマテリアルに加えて、無機・有機半導体等のあらゆる化合物を調べることができます
- 量子力学的ソルバDFTBで使用可能な元素の種類を、12、27、69種類の中から選べます
- 使用可能な元素が合計69種類と多いため、事実上、あらゆる化合物が調べられます
- STM、STS、AFM、KPFMのシミュレーションが可能です
- 試料化合物のバンド構造を計算する機能が付いています
- 第一原理計算ソフトPHASE/0のプリプロセッサ(入力データ準備)機能が付いています

## GeoAFM型

## 構成ソルバセット

- GeoAFM、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- Protein Data Bankで提供されている分子構造データに対応しています
- 計算時間は約1分弱で非常に高速で動作します

## FemAFM型

## 構成ソルバセット

- FemAFM、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- 有限要素法により、探針、試料の変形を調べることができます
- 探針と試料の表面張力による凝着等の粘弾性接触力学を調べることができます
- 周波数シフトAFM像もシミュレーション可能です

## LiqAFM型

## 構成ソルバセット

- LiqAFM、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- 液中環境下でのカンチレバーの振動を解析できます
- 探針と試料の表面張力による凝着等の粘弾性接触力学を調べることができます
- 周波数シフト・位相シフトAFM像もシミュレーション可能です

## CG型

## 構成ソルバセット

- CG、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- エネルギー的に安定な分子構造を探索し、緩和現象を再現します
- 探針の感じるフォースカーブを求めることができます

## MD型

## 構成ソルバセット

- MD、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル分野のAFMに関する研究に適しています
- 分子動力学法により、試料の変形を調べることができます
- 探針の感じるフォースカーブを求めることができます

## DFTB型

## 構成ソルバセット

- DFTB、Analyzer、SetModelの三つのソルバのセットです
- バイオ・ソフトマテリアル、無機・有機半導体等、あらゆる材料研究分野でご利用できます
- 量子力学的ソルバDFTBで使用可能な元素の種類を、12、27、69種類の中から選べます
- 使用可能な元素が合計69種類と多いため、事実上、あらゆる化合物が調べられます
- STM、STS、AFM、KPFMのシミュレーションが可能です
- 試料化合物のバンド構造を計算する機能が付いています
- 第一原理計算ソフトPHASE/0のプリプロセッサ(入力データ準備)機能が付いています



## 統合型SPMシミュレータ購入契約体系・価格(DFTB69元素・標準装備)

Standard 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	160万(注)	270万
	メンテナンス費用	30万/年(注)	40万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	81万/年	108万/年
	4年目以降	40万/年	60万/年

**Standard型**: DFTB以外のすべてのソルバが含まれています  
**バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です**

(注)学術機関による買い取り契約の場合、初年度は合計190万円の支払いとなります。

Professional 型	DFTB 12元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	210万	350万
	メンテナンス費用	30万/年	48万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	90万/年	120万/年
	4年目以降	50万/年	70万/年

**Professional型**: すべてのソルバと、DFTBでの12種類の元素が含まれています  
**あらゆる材料分野でご利用できます(2017/7改正、DFTB69元素標準装備・価格転嫁無し)**

## 統合型SPMシミュレータ購入契約体系・価格

Professional 型	DFTB 27元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	210万	350万
	メンテナンス費用	30万/年	48万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	90万/年	120万/年
	4年目以降	50万/年	70万/年

**Professional型: すべてのソルバと、DFTBでの27種類の元素が含まれています  
あらゆる材料分野でご利用できます(2017/7改正、DFTB69元素標準装備・価格転嫁無し)**

Professional 型	DFTB 69元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	210万	350万
	メンテナンス費用	30万/年	48万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	90万/年	120万/年
	4年目以降	50万/年	70万/年

**Professional型: すべてのソルバと、DFTBでの69種類の元素が含まれています  
あらゆる材料分野でご利用できます(2017/7改正、DFTB69元素標準装備・価格転嫁無し)**

## SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

GeoAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	140万	160万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	50万/年	70万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

**GeoAFM型** : Analyzer、SetModel、GeoAFMの3本セットです  
**バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)**

FemAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	140万	180万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	50万/年	70万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

**FemAFM型** : Analyzer、SetModel、FemAFMの3本セットです  
**バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)**

## SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

LiqAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	150万	190万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	50万/年	70万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

LiqAFM型: Analyzer、SetModel、LiqAFMの3本セットです  
 バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

CG 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	150万	190万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	50万/年	70万/年
	4年目以降	55万/年	65万/年

CG型: Analyzer、SetModel、CGの3本セットです  
 バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

## SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

MD 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	150万	190万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	50万/年	70万/年
	4年目以降	55万/年	65万/年

MD型: Analyzer、SetModel、MDの3本セットです  
 バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

DFTB 型	DFTB 12元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	60万/年	80万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

DFTB型: Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素12種類の場合の価格です。  
 半導体等の無機・有機材料分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)



## SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

DFTB 型	DFTB 27元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	80万/年	100万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

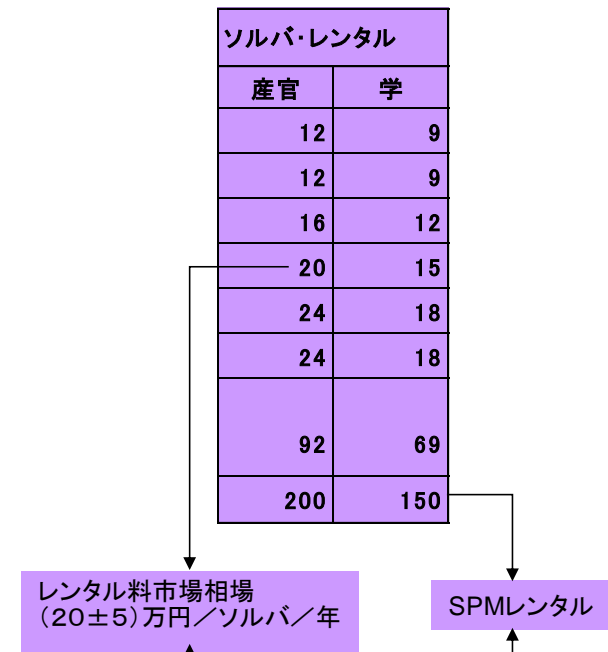
DFTB型 : Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素27種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

DFTB 型	DFTB 69元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	60万/年	80万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

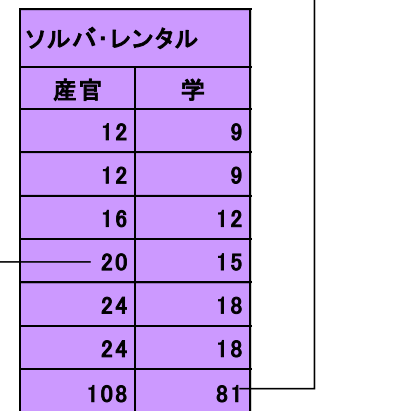
DFTB型 : Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素69種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

# SPMシミュレータ構成ソルバ(7本)の価格(買取・レンタル)の設定

Professional型		難度	構成ソルバ・マスメリット価格(買取)							
			7	6	5	4 ●	3	2	1	
Analyzer	実験データ画像処理プロセッサ	0.60	20.6万	22.1万	23.7万	25.3万	26.9万	28.4万	30万	
GeoAFM	高速相互予測AFMシミュレータ	0.60	20.6万	22.1万	23.7万	25.3万	26.9万	28.4万	30万	
FemAFM	連続弾性体AFMシミュレータ ●	0.80	27.4万	29.5万	31.6万	33.7万 ●	35.8万	37.9万	40万	
LiqAFM	液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ	1.00	34.3万	36.9万	39.5万	42.1万	44.8万	47.4万	50万	
CG	構造最適化AFM像シミュレータ ●	1.20	41.1万	44.3万	47.4万	50.6万 ●	53.7万	56.9万	60万	
MD	分子動力学AFM像シミュレータ ●	1.20	41.1万	44.3万	47.4万	50.6万 ●	53.7万	56.9万	60万	
DFTB	量子論的SPM像シミュレータ ●	1.60	54.8万	59万	63.2万	67.3万 ●	71.6万	75.8万	80万	
構成ソルバ7本毎の設定価格の総和 学(マスメリット・ダウン適用)SPM価格(基準値) 学(アカデミック)への特別配慮 239.9/350			239.9万	構成ソルバ7本毎の設定価格の総和 (市場相場に遜色なし) 産・官SPM価格(基準値)			350万			
			<b>239.9万</b>				<b>350万</b>			



Standard型		難度	構成ソルバ・マスメリット価格(買取)						
			6	5	4	3 ▲	2	1	
Analyzer	実験データ画像処理プロセッサ	0.60	17.8万	20.2万	22.7万	25.1万	27.6万	30万	
GeoAFM	高速相互予測AFMシミュレータ ▲	0.60	17.8万	20.2万	22.7万	25.1万 ▲	27.6万	30万	
FemAFM	連続弾性体AFMシミュレータ	0.80	23.7万	27.0万	30.2万	33.5万	36.7万	40万	
LiqAFM	液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ ▲	1.00	29.6万	33.7万	37.8万	41.9万 ▲	45.9万	50万	
CG	構造最適化AFM像シミュレータ	1.20	35.6万	40.4万	45.3万	50.2万	55.1万	60万	
MD	分子動力学AFM像シミュレータ ▲	1.20	35.6万	40.4万	45.3万	50.2万 ▲	55.1万	60万	
構成ソルバ6本毎の設定価格の総和 学(アカデミック)への特別配慮 160/270			160.1万	構成ソルバ6本毎の設定価格の総和 (市場相場に遜色なし)			270万		
学(マスメリット・ダウン適用)SPM価格 (基準値相当)				産・官SPM価格 (基準値相当)					



統合型SPMシミュレータ購入契約体系・価格(非正規版(DLVO追加、DFTB111元素へ追加後まで、参考価格))

Standard 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	160万	270万
	メンテナンス費用	30万/年	40万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	81万/年	108万/年
	4年目以降	40万/年	60万/年

Standard型: DFTB以外のすべてのソルバが含まれています  
 バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です

(注)学術機関による買い取り契約の場合、初年度は合計190万円の支払いとなります。

Professional 型	DFTB 12元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	210万	350万
	メンテナンス費用	30万/年	48万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	90万/年	120万/年
	4年目以降	50万/年	70万/年

Professional型: すべてのソルバと、DFTBでの12種類の元素が含まれています  
 あらゆる材料分野でご利用できます

## 統合型SPMシミュレータ購入契約体系・価格

Professional 型	DFTB 27元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	270万	450万
	メンテナンス費用	50万/年	60万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	100万/年	140万/年
	4年目以降	65万/年	80万/年

**Professional型**: すべてのソルバと、DFTBでの27種類の元素が含まれています  
あらゆる材料分野でご利用できます

Professional 型	DFTB 69元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	343万	500万
	メンテナンス費用	50万/年	60万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	150万/年	200万/年
	4年目以降	65万/年	80万/年

**Professional型**: すべてのソルバと、DFTBでの69種類の元素が含まれています  
あらゆる材料分野でご利用できます

## SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

GeoAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	168万	210万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	72万/年	90万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

**GeoAFM型** : Analyzer、SetModel、GeoAFMの3本セットです  
**バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です**

FemAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	184万	230万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	80万/年	100万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

**FemAFM型** : Analyzer、SetModel、FemAFMの3本セットです  
**バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です**



## SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

LiqAFM 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	88万/年	110万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

**LiqAFM型**: Analyzer、SetModel、LiqAFMの3本セットです  
**バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です**

CG 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	88万/年	110万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

**CG型**: Analyzer、SetModel、CGの3本セットです  
**バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です**

## SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

MD 型		学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	200万	250万
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	88万/年	110万/年
	4年目以降	45万/年	55万/年

**MD型: Analyzer、SetModel、MDの3本セットです  
バイオ・ソフトマテリアル分野に最適です**

DFTB 型	DFTB 12元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	264万 + 指定元素使用料	330万 + 指定元素使用料
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	72万/年	90万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

**DFTB型: Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素12種類の場合の価格です。  
半導体等の無機・有機材料分野に最適です**

## SPMシミュレータ構成ソルバ購入契約体系・価格

DFTB 型	DFTB 27元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	264万 + 指定元素使用料	330万 + 指定元素使用料
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	80万/年	100万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

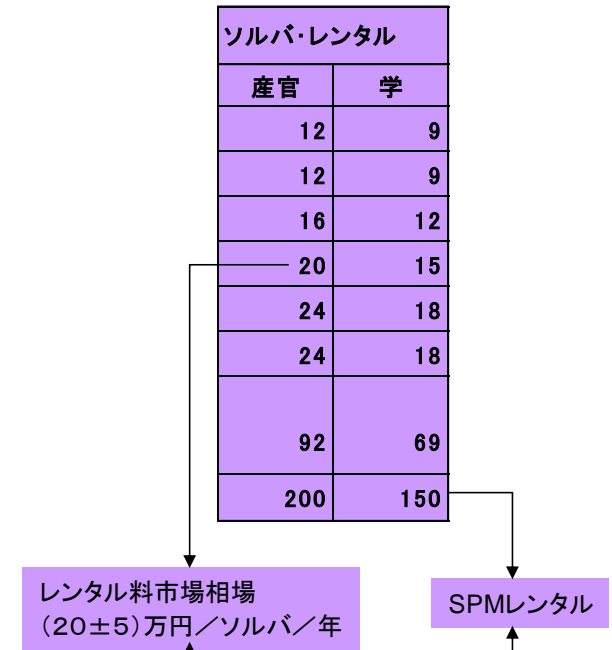
DFTB型 : Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素27種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です

DFTB 型	DFTB 69元素	学	産・官
ライセンス買取契約	初年度買い取り価格	264万 + 指定元素使用料	330万 + 指定元素使用料
	メンテナンス費用	35万/年	35万/年
レンタル契約	初年度、2年目、3年目	88万/年	110万/年
	4年目以降	48万/年	60万/年

DFTB型 : Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素69種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です

# SPMシミュレータ構成ソルバ(7本)の価格(買取・レンタル)の設定

Professional型		難度	構成ソルバ・マスマリット価格(買取)							
			7	6	5	4 ●	3	2	1	
Analyzer	実験データ画像処理プロセッサ	0.60	20.6万	22.1万	23.7万	25.3万	26.9万	28.4万	30万	
GeoAFM	高速相互予測AFMシミュレータ	0.60	20.6万	22.1万	23.7万	25.3万	26.9万	28.4万	30万	
FemAFM	連続弾性体AFMシミュレータ ●	0.80	27.4万	29.5万	31.6万	33.7万 ●	35.8万	37.9万	40万	
LiqAFM	液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ	1.00	34.3万	36.9万	39.5万	42.1万	44.8万	47.4万	50万	
CG	構造最適化AFM像シミュレータ ●	1.20	41.1万	44.3万	47.4万	50.6万 ●	53.7万	56.9万	60万	
MD	分子動力学AFM像シミュレータ ●	1.20	41.1万	44.3万	47.4万	50.6万 ●	53.7万	56.9万	60万	
DFTB	量子論的SPM像シミュレータ ●	4.60	157.7万	169.8万	181.8万	193.9万 ●	205.9万	218万	230万	
構成ソルバ7本毎の設定価格の総和			→ 342.9万				構成ソルバ7本毎の設定価格の総和 → 500万			
学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格(基準値)							(市場相場に遜色なし) 産・官SPM価格(基準値)			
学(アカデミック)への特別配慮 342.9/500			342.9万				500万			



Standard型		難度	構成ソルバ・マスマリット価格(買取)					
			6	5	4	3 ▲	2	1
Analyzer	実験データ画像処理プロセッサ	0.60	17.8万	20.2万	22.7万	25.1万	27.6万	30万
GeoAFM	高速相互予測AFMシミュレータ ▲	0.60	17.8万	20.2万	22.7万	25.1万 ▲	27.6万	30万
FemAFM	連続弾性体AFMシミュレータ	0.80	23.7万	27.0万	30.2万	33.5万	36.7万	40万
LiqAFM	液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ ▲	1.00	29.6万	33.7万	37.8万	41.9万 ▲	45.9万	50万
CG	構造最適化AFM像シミュレータ	1.20	35.6万	40.4万	45.3万	50.2万	55.1万	60万
MD	分子動力学AFM像シミュレータ ▲	1.20	35.6万	40.4万	45.3万	50.2万 ▲	55.1万	60万
構成ソルバ6本毎の設定価格の総和			→ 160.1万			構成ソルバ6本毎の設定価格の総和 → 270万		
学(アカデミック)への特別配慮 160/270						(市場相場に遜色なし) 産・官SPM価格(基準値相当)		
学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格(基準値相当)						学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格(基準値相当)		



## ユーザ様の意見を拝聴させて頂く、特別措置として、 販売契約以外、取引形態の弾力的運用のご案内

- DFTB計算元素種類を削減することで、価格ダウンご提案。
- SPM実験装置メーカー様、販売代理店様、戦略的コラボご一緒の方々には、業務提携次元での価格ダウン、ご提案。
- レンタル契約適用時には、レンタル料単金／月を下げ、レンタル契約期間を延ばし、初期支払いを軽くする。
- SPMシミュレーションでのカスタマイズ開発、シミュレーション委託、コンサル委託等、別立単金で見積書、申し上げます。

- 1) SPM導入前に、SPMシミュレータ実技習得の為に計算を体験希望の方へ
- 2) SPMユーザーの皆様がご研究されている、材料・試料の系につき、計算要望テーマの計算結果/自身で計算をご希望の方々
- 3) 購入前にSPMシミュレー機能を検証したいの方々へ  
各位の計算テーマを、お試しとして計算してみて、或は計算に携わり、その結果を見て頂き、ソルバ製品の性能を評価頂けるコンサル致します。
- 4) SPMユーザーの皆様が研究/担当されている、材料・試料の系につき、計算要望テーマの計算の委託ご希望の方々
- 5) 粘弾性接触解析機能組込/DFTB元素27種使用可能I/「実験—計算」画像比較型SPMシミュレータへのコンサルテーション委託  
計算実行可視化マニュアル相当・SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ操作支援システム、が示す運用手順に従う条件に立ち、  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM\\_Simulator\\_assistant\\_top.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_assistant_top.htm)  
初心者から非専門家まで、参加者は「独力で計算実行工程を誰でもOJT的に完了させる手法」を獲得可能となります。
- 6) PHASEシステムソフトウェア ユーザーの皆様  
<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/event/event.php?id=77>  
<https://azuma.nims.go.jp/events/semi2015/semi20160119>