

産官学 SPM ユーザ様

皆様には平素より大変にお世話になっております。

Advanced Algorithm & Systems

AASは販売代理店ICC様 (ICC山口社長 瀬川様)とパートナー契約を締結致しまして、SPMシミュレーション・ユーザー各位様へのご支援・ご相談ACTIONを、下段デモ区分をお互いに共有の上、お役に立たせて頂けましたら、誠に嬉しい限りです。

「デモ区分 ○(ソルバ計算機能) □(SPMシミュレータ/Plat Form に具備したユーザ支援機能)▽ (Topics) 区分によるデモご覧ご希望各位、へのご案内です」

・下段のHPに掲載の文章のURLです。

<https://www.aasri.jp/pub/spm/mail/mail20170826.pdf>

添付、2点、実施のみで、OKとなります事、ご確認頂けましたら嬉しい限りです。

お訪ね時の、デモ Plan、ご案内 先ずは、テーマ・用途区分型の計算事例ご覧下さい

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

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

デモ区分 ○(ソルバ計算機能) □(SPM シミュレータ/Plat Form に具備したユーザ支援機能)▽ (Topics) 区分によるデモご覧ご希望各位、へのご案内です。

○動画事例

<https://www.aasri.jp/pub/news/SR/TEMPAVI3.MPG>

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/ICSPM24_LiqAFM_tapping_jp.pdf

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_for_each_application_20170811.pdf

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

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_presentation_20160606.pdf

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

○SPM シミュレータ (構成ソルバ計算実行機能)ご説明添付、走査型プローブ顕微鏡実験画像シミュレータ、参照

○SPM シミュレータ・ガイドブック

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 監修

["https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_guidebook_v016.pdf"](https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_guidebook_v016.pdf)

○SPM イノベータ (世界標準仕様シミュレータ)活用ご案内

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

初心者版 SPMシミュレーション 使用法/運用法 ガイドラインとして、

●担当業務実施に必要な視野・視点を紹介しています。

□SPM 実験目的?、から SPM 計算課題提案?、実験担当者、計算担当者、両者コラボ、に依る、SPM シミュレーション手法、新規追加機能

?SPM シミュレータ「実験-計算」画像比較型・計算事例追加候補添付、参照

?SPM 計算課題事例 添付、別事例で確認下さい

□SPM イノベーター Prolouge/業務環境スキーム、をご承知下さい

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

SPM シミュレータ・Plat Form ユーザ支援機能

[SPM 初心者ユーザ補助機能](1) (2) (3)、一元的運用による、シナジー効果の追求が求められる

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

□ライセンス販売契約 SPM 統合化カタログ ソルバ毎の計算機能説明、計算事例参照下さい

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

●カタログ組み込み、価格表、ご覧下さい。

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

▽Topics 表面

・広告原稿 表面科学学会 向け

・CDLVO 法

世界初 世界標準仕様/粘弾性接触解析機能/「実験-計算」画像比較型の計算機能のご紹介

(G)SPM 実験目的?、から SPM 計算課題提案?、実験担当者、計算担当者、両者コラボ、に依る、SPM シミュレーション手法、新規提案追加機能

?SPM シミュレータ「実験-計算」画像比較型・計算事例追加候補添付、参照

?SPM 計算課題事例 添付、別事例で確認下さい

(O)「実験-計算」画像比較型 SPM シミュレーション成立させる、実験データ読み込み機能 統合化カタログ・SPM イノベーター

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

Nanonis Bruker RHK Technology Unisoku JEOL PARK 島津 Omicron
Asylum Research Agilent Technologies 目立ハイテクサイエンス

・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
実験データ読み込み機能、ご認識頂き、活用ご検討願えれば幸いです。

(O) SPM ユーザは、煩雑な計算実行データ入力不要初期状態から、自身の PC にてシミュレーションを開始出来る、初心者でも可能な業務環境が提供される。

●「初心者の為の参考計算事例検索ページ」から、自分がやってみたいと思っているシミュレーション と類似した計算事例を、選ぶ事で、その実行画面をユーザ自身の PC から簡単に起動出来、計算実行データの準備・用意、入力作業を不要にさせる、ご提案は、大きな反響を頂いております。

下段、[SPM 初心者ユーザ補助機能]の(1)参照

●契約趣旨に添い、ユーザは、下段如き、SPM シミュレーション項目を通じて、活用下さい。

- ・SPM 専門家による購入前検証計算
- ・無償供与ガイドライン(仮称)実験・計算画像比較コラボ型 SPM シミュレータ購入契約締結)
- ・初心者が、[SPM 初心者ユーザ補助機能]を使用して SPM シミュレーション
- ・PHASE/0 のプリプロセッサとしての SPM シミュレータの連携活用
- ・SPM イノベーター活用 PROJECT 企画
- ・ユーザの研究テーマに対し、SPM 計算課題をご提案、協議、合意後実施

・上記(0) (00)を計算を業務支える土台とし、下段の計算が効果的に実行となる

(1) LiqAFM(液中 AFM シミュレータ)タッピング機能、および、逆問題

周波数シフト AFM 像、位相シフト AFM 像、及び、その逆問題を取扱ます。周波数シフト、位相シフトの観測値から、試料のヤング率等の物性値を推測することも可能です。

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog.pdf#page=65

・SPM ユーザー様向け説明資料、添付、同時比較参照下さい。

(2) macroKPFM(巨視的 KPFM シミュレータ)

誘電体を試料とした、ミクロン・オーダーの KPFM 像がシミュレートできます。

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog.pdf#page=70

(3) DFTB バンド構造計算実行手引書

あらゆる化合物のバンド構造が計算できます。

密度汎関数法で計算しているので、高速です。

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

(4) 今後は、さらに、以下のようなマクロスケールのシミュレータを開発予定。

マクロ KPFM シミュレータ、電解液中における探針・試料間力を DLVO (デリャーギン・ランダウ・フェルウェー・オーバーピーク)理論によって解くソルバ電解溶液中の分極した試料の KPFM 像をシミュレートできます。

● DLVO 理論による液中 AFM シミュレータ 添付、参照下さい。

(5) 注意 (7)にリンク

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 PHASE/0 で本格的に計算する前の、予備計算が実行可能です。

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

此処でユーザー様と AAS の間で共有すべき留意点があります。

(6) DFTB 計算元素 69 種の計算パラメーターは暗号化されており、ユーザの方が、計算パラメータの情報を取り出す事はできない様にプログラムされている。
ユーザの方が、DFTB ソルバで、化合物のバンド構造を計算する際、原子間相互作用パラメータ(計算パラメータ)を、直接目にすることはありません。

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

●計算パラメータファイルの作成手順

"https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/20130401mk_param.pdf"

"https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/DFTBparameter_making_v1.2.pdf"

?69 種の計算パラメーターは標準扱いとし、その開発費は販売価格へ転嫁しない

?69 種以外の客先指定の計算パラメーターは、見積扱い、とし開発費は契約価格に含まれます。

(7) PHASE/0 のプリプロセッサとしての SPM シミュレータの連携活用

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

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

PHASE/0 の計算時間を短縮するために、SPMシミュレータの DFTBソルバを、前処理計算のための、プリプロセッサとして活用する方法をご提供します。

具体的には、PHASE/0 で使用する二つの初期データファイル、

- initial_wavefunctions(初期波動関数)
- initial_charge_density(初期電荷密度)

を、SPM シミュレータの DFTB ソルバで、あらかじめ計算して用意することにより、PHASE/0 の繰り返し計算回数を減少させ、解の収束の高速化を実現する予定です。

?SPM ガイドブック 塚田先生監修下で作成

"https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_guidebook_v016.pdf"

?マニュアルリストと活用ガイダンス

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

- SPM ガイドブックと対になるマニュアル類全部

[SPM 初心者ユーザ補助機能](1) (2) (3)、一元的運用による、

シナジー効果の追求が求められる

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

(1)「初心者の為の参考計算事例検索ページ」から、自分がやってみたいと思
っているシミュレーション と類似した計算事例を、選ぶ事で、

https://www.aasri.jp/pub/spm/search_examples/first_page.html

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

その実行画面をユーザ自身の PC から簡単に起動出来、計算実行データの準備・用意、入力作業を不要に
させる、ご提案は、大きな反響を頂いております。

「ユーザお手元の PC ですぐに、SPM シミュレータを起動して、画
面上のアイコンを 2 回クリック するだけで、目的のシミュレーショ
ン計算が実行で
きます」を再度下段で、ご納得頂けましたら、嬉しい限りです。

具体的には、以下の手順となります。「初心者のための参考計算事例検索



(https://www.aasri.jp/pub/spm/search_examples/first_page.html)にページ」において、「実用・開発者コース(企
業)」を選んだとします。

次のページで、「興味のある分野ごとに計算事例を選びたい場合
J」を選択し、項目「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]をクリックしたとします。すると、次のペー
ジにジャンプします。



[https://www.aasri.jp/pub/spm/search_examples/application_examples/polymer_single_molecule/SPM_s
imulator_a pplication_examples_polymer_single_molecule_v06_2.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/search_examples/application_examples/polymer_single_molecule/SPM_simulator_application_examples_polymer_single_molecule_v06_2.html)

このページでは、シミュレーション例と、それに対応する識別番号の表が
示されています。

▼シミュレーション例の中から、自分の好みに合ったものを選び、
その識別番号を調べます。

お手元の PC の、SPM シミュレータがインストールされたフォルダ内に、
SampleProject という名のフォルダが収められています。

この SampleProject フォルダ内に、識別番号の名前のサブ
フォルダが保存されています。

その識別番号名のサブフォルダ内に、シミュレーション計算に必要な
なすべての 入力データが用意されています。

例えば、識別番号が、Analyzer_ImageProcessing_003a なら、
フォルダ SampleProject/Analyzer/Analyzer_ImageProcessing/Analyzer_ImageProcessing_003a
内に、必要なデータがそろえられています。

このように、「初心者のための参考計算事例検索ページ」をご覧になりながら、

SPM シミュレータを操作することで、自分がやってみたい計算事例を、シミュレータで実行できるようになっています。

(2)「初心者」即・短期的に、専門家レベル活用可能にさせる、初心者ユーザ補助 機能具備

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

[SPM 初心者ユーザ補助機能]が、「SPM シミュレータ」と「SPM シミュレータ操作ナビシステム」に、組み込まれ、SPM 初心者ユーザを支援します。

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

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

加えて、SPM 初心者ユーザは即刻・短期間で、自立的に、AASRI へ質問・協議しながら OJT 的に、下段、システムを活用頂き、専門家レベル活用実現

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

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_operational_procedures_p34.pdf

「SPM 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

SPM シミュレータの使い方(説明・解説)

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

(3)初心者が、SPM シミュレータ即時運用を可能とする「SPM シミュレータ操作ナビシステム」の導入

X https://www.aasri.jp/pub/spm/about_spm.html#assistant

XX https://www.aasri.jp/pub/spm/about_spm.html#contractconcept

株式会社 アドバンストアルゴリズム&システムズ

会社URL <https://www.aasri.jp/>

メールアドレス r_k@asri.jp