

(無題)

産官学 SPMユーザー様  
bcc配信、齟齬は、即時除去致します。

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

(Navi0)

新規・核心的Info開示

2009・5 採択プレゼンデモ

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

統合化カタログ・SPMイノベーション

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_uc.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_uc.pdf)

・東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 塚田捷 教授、指定/作成の  
ソルバー/機能表

・LiqAFM(液中AFMシミュレータ)タッピング機能 & 逆問題等、計算機能/仕様網羅

●Price Down価格表、新規ご案内

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku\\_uc\\_new.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku_uc_new.pdf)

・DFTB69元素、お計算パラメーター開発費の価格への転嫁しない条件

・SPMシミュレータ販売価格リスト

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku\\_uc.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku_uc.pdf)

SPMシミュレータ導入・活用検討中のユーザ各位様

SPM装置据付現場に於いて、「実験-計算」画像比較型シミュレーション手法を適用  
する場合の「SPM実験画像担当者」と「SPMシミュレーション担当者」の役割のご案内

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。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ApplicationField.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/about\\_spm.html#search\\_examples](https://www.aasri.jp/pub/spm/about_spm.html#search_examples)

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検討

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_prologue.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_prologue.pdf)

人間は20兆個の細胞からなり、その細胞は20桁よりはヤヤ少ないが、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。

○「実験-計算」画像比較型シミュレーション手法

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm\\_further\\_improving\\_plan\\_20121004.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm_further_improving_plan_20121004.pdf)

○SPM実験装置の据付現場(サイト)での「実験-シミュレーション」画像比較を  
可能とさせる為には、SPM実験装置メーカー、販売代理店、様はSPMシミュレータを  
同梱(バンドル出荷)し、SPM実験装置が据付けられた、機側へ置いて下さい。

規則 URL

○実験データ読み込み機能(アナライザーの実験・計算画像比較に必要)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm\\_data\\_example.pdf](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 日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

○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シミュレータは同一のプラットフォーム上で「実験-計算」画像比較計算手法、が実現出来たので、見かけのSPM実験画像から、  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_p9.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_p9.pdf)  
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が達成されました。

○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出来たので、「実験-シミュレーション」画像比較型・(検討)画像を出力できます。実験 担当者 とシミュレーション担当者はこれ等比較画像情報の現実的歩み寄り限界を見定め実験画像精度向上を目指して下さい

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_uc.pdf#page=33](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_uc.pdf#page=33)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_uc.pdf#page=32](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_uc.pdf#page=32)

(無題)

- ・ DOC A(Y) SPMシミュレータ完成度 「新しい計算機能、初心者向け補助機能、一元化コンテンツ、SPMシミュレータ操作ナビシステム」活用法等
- ・ DOC B(Y) 5種類の「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (n) /新規市場出現」

□特別措置 無料計算機会提供 ご案内 ●無償供与ガイドライン(Navi7)参照

(Navi0)

新規・核心的Info開示

2009・5 採択プレゼンデモ

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

統合化カタログ・SPMイノベーター

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_uc.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_uc.pdf)

- ・東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 塚田捷 教授、指定/作成のソルバー/機能表
- ・LiqAFM(液中AFMシミュレータ)タッピング機能 & 逆問題等、計算機能/仕様網羅

●Price Down価格表、新規ご案内

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku\\_uc\\_new.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku_uc_new.pdf)

- ・DFTB69元素、お計算パラメーター開発費の価格への転嫁しない条件
- ・SPMシミュレータ販売価格リスト

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku\\_uc.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku_uc.pdf)

(Navi1)

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。

人間は20兆個の細胞からなり、その細胞は20桁よりはヤヤ少ないが、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シミュレータ適用可能領域、DOC A (Y)のDrasticな拡大が期待されます。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ApplicationField.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet.pdf)

世界初 SPM世界標準仕様/粘弾性接触解析 (含む逆問題) & 69種類のDFTB計算元素が使用可能となり、あらゆる (有機・無機) 化合物の粘弾性接触解析/「実験-計算」画像比較型のSTM/STS, AFM, KPFM計算が可能になり、計算項目範囲が格段に増加し、その数だけSPM装置が計算可能数だけ増え、SPMシミュレーション市場構築 が期待されます。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet.pdf)

例えば、図中、研究テーマ (バイオ・ソフトマテリアル) 用途区分 (食品) に属するユーザ様には、DOC B(Y) 5種類の「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (n) 」の形でSPMシミュレーション (新規市場出現含む、自身所属部門業務効率化) が計算可能数だけ増えます。他の研究テーマ、用途区分に属するユーザ様、も全て同様です。

●SPMシミュレーション需要分布 DOC A(Y)+DOC B(Y)をご認識下さい

- ・DFTBソルバで69種類の元素が使えるようになったことに伴い、SPMシミュレーション可能な物質の組み合わせが、各段に増えました。無機・有機半導体、ソフトマテリアル等、ほぼ、あらゆる物質がシミュレーションの対象となります。透明電極、リチウム電池、触媒反応など、SPMシミュレータ活用場面が広がりました。ぜひ、皆様のご研究にお役立てください。

(Navi2)

SPMシミュレータの活用価値の更なる高度化、ユーザー様の信頼に繋げるには「実験-計算」画像比較型の計算事例の拡大実現が最重要と私達は考え、以下展開中です。

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・オーバービーク)理論によって解くソルバで電解溶液中の 分極した試料のKPFM像をシミュレーション可能、を2017年度完成予定です。

その上で、下段2視点、へ進みます。

- ・ある人の [DNA & 腸内環境/<過剰な、投薬、治療、検査>状況]算出ソフト
- ・宇宙医学分野、無重力下での実験にSPMシミュレーション手法適用

(Navi3)

「初心者へ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。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/search\\_examples/first\\_page.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/search_examples/first_page.html)

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

(無題)

- この事例は、専門知識を必須とする、「SPMシミュレータ」運用を初心者も可能とさせる、初心者ユーザ補助機能具備すべし、との弊社方針の象徴となります。即ち、初心者が使えるSPMシミュレータに仕上がっています。このAASの経営姿勢、をユーザー様にはご理解・ご認識頂けましたら、嬉しい限りです。

(Navi4) この方針に添い[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、初心者の専門家レベル活用を実現  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/spm\\_simulator\\_help.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/spm_simulator_help.html)  
<https://www.aasri.jp/pub/spm/mail/mail20161102.html>

(Navi5)

NIMS大野先生との連携成りは、PHASE/0のプリプロセッサとしてSPMシミュレータを使用することにより、PHASE/0のスーパーコンピュータの利用時間を短縮することができます。  
・AASは、大野先生が保有・管理されている、NIMSのPHASE/0（みずほ情報総研から販売中の物とは別物）を対象としており、既に、大野先生指示の材料系でPHASE/0で計算して、その結果を大野先生に提出しレビュー中、連携を支えるツール2017には実現の見通し。

(Navi6)

海外向け、「SPMシミュレータ」も対象と認識しており、海外向けも、国内同様に作成済みです。スイス等から引き合い多々あります。

(Navi7)

無償供与ガイドライン

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あり、人間は20兆個の細胞からなり、その細胞は20桁よりはヤヤ少ないが、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る特徴を生かして「実験一計算」画像比較型SPMシミュレーションを論じる事が出来る。

先生のSPMでの実験内容の中から、シミュレーションをやってみたら良いのではと思えるテーマ、コラボレーションのご相談/「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (n)/新規市場出現」に繋がる可能性含む、私どもにご指示頂けないでしょうか。

先生方皆様から頂いた実験データを元に、私どもは、様々な物理パラメータ値を、理論的シミュレーション技術を用いて推定しようと考えております。そして、このようにして得られた、実験結果と、理論解析結果をペアにして、データベースとして保存し、SPMシミュレータのユーザの皆様にご公開・有効活用頂ければと考えております。

実験データからの物理パラメータの逆算には、パラメータ最適化技術、フィッティング技術等が必要で、実験と理論の両方の寄与が求められます。先生方からご提供された実験データの内容を精査して、如何なパラメータ値逆算の為の新たなソフトウェアが必要かもしれません。先生の皆様から、「この物理パラメータを推定してほしい」といった、お声を頂ましたら、ソフトウェア開発は、さらに進めやすくなります。

SPMユーザに依る、あらゆる（有機・無機）化合物の粘弾性接触解析/「実験一計算」画像比較型SPMシミュレーション結果が上段で定義されるデータベースに登録・パラメータ最適化技術、フィッティング技術等で処理・保存されユーザの皆様にご公開・有効活用頂事になります。

無償供与ガイドライン設定前提条件は、SPMユーザ、先生方が実施される、実験結果と理論解析結果を比較検証・処理・保存されユーザの皆様にご公開・有効活用へ賛同される方々、に無償供与を最優先と位置付け次は初心者、ビジネスの順と認識致します。

無償供与ガイドライン

SPMライセンス販売契約締結（？？？）が条件

?ご自身の実験結果をご提供頂き理論解析結果を比較検証コラボ可能な方々

- ・コラボ内容の見積書からSPMライセンス販売契約締結
- ・お試し計算 購入前の検証計算・使用法習得計算、3か月無料計算機会を2回（計6か月） 又は相当

?初心者（初心者ユーザ補助機能を使用出来る）

お試し計算 購入前の検証計算・使用法習得計算、3か月無料計算機会を2回（計6か月）

(無題)

?ビジネス次元

購入前の検証計算・使用法習得計算、3カ月無料計算機会を1回(計3カ月)

(Navi8)

SPMシミュレータ活用に関するご相談(情報収集、導入段階、購入入手契約、使用運用段階、計算結果の学会等への発表、に亘り、下段、ご相談窓口、からお願いさせていただきます。

ご相談窓口 弊社に質問から購入ご相談までメールを送る際は、「SPMシミュレータ操作ナビシステム」Webページからお願いします。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM\\_operational\\_procedures\\_p34.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_operational_procedures_p34.pdf)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM\\_Simulator\\_assistant\\_top.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_assistant_top.htm)

質問、ご意見、ご相談、見積書相談、コンサル相談、購入申込、意向に対しまして、協議の過程で適切なご返事を差し上げ、協議終了結果は「SPMシミュレータ操作ナビシステム」にて保持します

=====

DOC A (Y) SPMシミュレータ完成度 「新しい計算機能、初心者向け補助機能、一元化コンテンツ、SPMシミュレータ操作ナビシステム」活用法等

=====

世界初 世界標準仕様/粘弾性接触解析機能/「実験一計算」画像比較型の計算機能事例

●Version Up追加、最新、ソルバ/機能・表/価格(据え置き/2016.4公開時点、含む)

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

(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](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](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・オーバービーク)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。

(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](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/DFTB_BAND_PHASE0.pdf)

此处でユーザー様と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、計算パラメーター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>

?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](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)

(無題)

・ 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。

世界初 世界標準仕様/粘弾性接触解析/「実験—計算」画像比較型の活用/入手要領  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_prologue.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_prologue.pdf)

下段、[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

(1)「初心者のための参考計算事例検索ページ」から、自分がやってみたく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/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](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」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\\_simulator\\_application\\_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、自分がやってみたく計算事例を、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

[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/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](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](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](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

(無題)

- X [https://www.aasri.jp/pub/spm/about\\_spm.html#assistant](https://www.aasri.jp/pub/spm/about_spm.html#assistant)
- XX [https://www.aasri.jp/pub/spm/about\\_spm.html#contractconcept](https://www.aasri.jp/pub/spm/about_spm.html#contractconcept)

#### (4)実験とシミュレーションの画像比較型手法による計算事例の活用

X 公開発表要請へ対応されるSPMユーザ各位には、下段、ご参考方  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ApplicationField.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf)  
[http://www.aasri.jp/pub/spm/about\\_spm.html](http://www.aasri.jp/pub/spm/about_spm.html)  
<https://www.aasri.jp/>

ご相談窓口 弊社に質問から購入ご相談までメールを送る際は、  
「SPMシミュレータ操作ナビシステム」Webページからお願いします。  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM\\_operational\\_procedures\\_p34.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_operational_procedures_p34.pdf)  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM\\_Simulator\\_assistant\\_top.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_assistant_top.htm)  
質問、ご意見、ご相談、見積書相談、コンサル相談、購入申込、意向に対し  
まして、協議の過程で適切なご返事を差し上げ、協議終了結果は  
「SPMシミュレータ操作ナビシステム」にて保持します

#### XX SPMライセンス販売契約

- ユーザー様の予算措置事情ございましたら、分割支払、工夫用意、あります。  
お気軽にご相談、お申し越し下さい。

#### SPMシミュレータ販売価格リスト

<https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku.pdf#page=8>

- ・ソルバ「ばら売り」を追加し、価格には、SPMシミュレータDFTBソルバ用計算  
パラメータ・データベース構築費用 (10%)を、標準元素 H, C, N, O, P, Si の  
使用料/年は無料の条件、にてDFTBに70% 以外の全ソルバに30%、程度含みます。

標準元素以外のご使用ご希望のユーザー様にはご使用元素をご指定下さい。  
ご指定元素使用料見積書、を別途申し上げます。

- ・最新SPMソルバ表/機能＝販売価格 (据え置き/2016.4公開時点) ユーザ様には  
ご確認下さい

- ・Version Up後の「新規版と旧版」 (下取り/価格差) 交換方式採用

#### =====

#### DOC B (YY) 5種類の「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (n) /新規市場出現」

#### =====

世界初 世界標準仕様/粘弾性接触解析機能/「実験ー計算」画像比較型SPMシミュレータ  
適用時、「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (n) /新規市場出現」

- 「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (1) /新規市場出現」
- 「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (2) /新規市場出現」
- 「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (3) /新規市場出現」
- 「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (4) /新規市場出現」
- 「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (5) /新規市場出現」

#### ●「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (1) /新規市場出現」

「初心者の方の参考計算事例検索ページ」から、自分がやってみたくと思  
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/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。

下段で確認出来れば、幸いです。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_prologue.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_prologue.pdf)

#### ●「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (2) /新規市場出現」

SPM関連分野の研究者の先生の皆様へ、

私共は、SPMシミュレータで、様々な材料の探針、試料の組み合わせ、様々な条件下

(無題)

でのシミュレーション計算例を蓄積し、これをお客様に、ご提供する活動を行っております。

上段を踏まえて頂き、先生方へ上段コラボレーションのご相談です。  
できましたら、先生のSPMでの実験内容の中から、シミュレーションをやってみたら良いのではと思えるテーマを、私どもにご指示、お教え頂けないでしょうか。  
その上で、上記、コラボ実施となります。

先生方皆様から頂いた実験データを元に、私どもは、様々な物理パラメータ値を、理論的シミュレーション技術を用いて推定しようと考えております。  
そして、このようにして得られた、実験結果と、理論解析結果をペアにして、データベースとして保存し、SPMシミュレータのユーザの皆様へ開示・有効活用頂ければと考えております。

実験結果からのパラメータ値推定には、新たなソフトウェアが必要かもしれません。  
先生方からご提供された実験データの内容を精査して、如何なパラメータ値逆算の為のソフトウェアを開発すべきか、判断する必要があります。  
先生の皆様から、「この物理パラメータを推定してほしい」といった、お声を頂いたら、ソフトウェア開発は、さらに進めやすくなります。

実験データからの物理パラメータの逆算には、パラメータ最適化技術、フィッティング技術等が必要で、実験と理論の両方の寄与が求められます。

いわば、SPMに関する、実験とシミュレーションの、コラボレーションへの参加ご検討のお願いの本旨です。

私どものシミュレーション結果は、全て先生にお渡し致します。私どものシミュレーション技術を、先生のご自身の研究に役立たせて頂ければと考えております。

さらには、先生と私どもとの間のコラボレーション期間はSPMシミュレータを無償でお使い頂くものとして、以降の活用は、先生方のご意向に添わせて頂ければと考えております。お気軽にご意向お申し越し下さい。特典ご提案用意あります。

SPMシミュレータは、実験データと、理論的シミュレーション結果とを比較し、実験・シミュレーション画像比較型計算機能への新たな物理的知見を得ながら検証を致したいと思う次第です。

私どもは、ソフトウェアメーカーとして、SPMシミュレータの開発を続けてきましたが、実際のSPM実験に関する知識・ノウハウに欠けております。  
我々独自で実験データを準備することは不可能で、これまでも大学・公的研究機関・企業の研究者の方々からの、実験データのご提供に頼ってきた経緯があります。  
この機会に、SPM実験の専門家の先生との関係を構築することで、SPMシミュレータを、より実用的な、ユーザ様に信頼されるソフトに仕上げることができればと考えております。

SPMシミュレータは、以下の8個のソルバの集合体です。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog.pdf)

- (1) Analyzer : 実験データ画像処理プロセッサ
- (2) GeoAFM : 高速相互予測AFMシミュレータ
- (3) FemAFM : 連続弾性体AFMシミュレータ
- (4) LiqAFM : 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ
- (5) CG, CG-RISM : 構造最適化AFM像シミュレータ
- (6) MD : 分子動力学AFM像シミュレータ
- (7) DFTB : 量子論的SPM像シミュレータ
- (8) SetModel : 原子モデリング・ツール

SPMシミュレータでできることは、以下の通りです。

- (a) 高分子・タンパク質・ソフトマテリアルのAFM像をシミュレートする。
- (b) SPM実験画像をデジタル処理する。
- (c) 高分子・タンパク質・ソフトマテリアルのAFM周波数シフト像・位相シフト像をシミュレートする。
- (d) 液中環境下での高分子のAFM像をシミュレートする。
- (e) 液中環境下でのカンチレバーの共鳴周波数を調べる。
- (f) AFM周波数シフト、位相シフトの値から、試料材料のヤング率・表面張力を推定する逆問題を調べる。
- (g) タンパク質・有機化合物に探針を押し付けた際のフォースカーブを求める。
- (h) 有機化合物をAFM観察した際の、分子構造の緩和による変形を見積もる。
- (i) オンゲストローム・オーダーでのSTM像をシミュレーションする。
- (j) 金属基板上に置かれた有機半導体のSTM, AFM像をシミュレートする。
- (k) 様々な無機・有機材料のバンド構造を調べる。

(無題)

上記以外にも、SPMシミュレータは様々な機能を持っております。

私どもは、高分子・ソフトマテリアル関連のAFM像シミュレーション技術に、力を注いできました。  
また、分子動力学法による分子構造の緩和計算、密度汎関数法による量子力学的計算に、強みを持っております。  
量子力学的密度汎関数法による計算では、69種類の元素パラメータをご用意しました。従って、ほぼ、あらゆる無機・有機材料に対応できます。

さらには、DFTB：量子論的SPM像シミュレータでは、STM、AFM像だけでなく、結晶材料のバンド構造を計算する機能を持っております。  
密度汎関数法を採用することにより、第一原理計算より高速で、シミュレーション可能です。  
計算結果も信頼できるレベルの近似となっております。  
3次元結晶だけでなく、2次元材料のバンド構造も計算可能です。

● 「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (3) /新規市場出現」

ユーザ様の「SPM」計算課題/モデリング構築ご支援・共有化、へ向けてユーザ様論文にアクセスして「SPM」計算課題をご提案します。

個人情報保護 企業秘密保護 尊重最優先姿勢

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_prologue.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_prologue.pdf)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM\\_operational\\_procedures\\_p34.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_operational_procedures_p34.pdf)

● 「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (4) /新規市場出現」

「実験—シミュレーション」画像比較型シミュレーション手法実現により、  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_prologue.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_prologue.pdf)  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ApplicationField.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf)  
従来の、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が達成されたので、SPM装置据付現場・SPM実験担当者の実験画像精度を向上させうる条件が出来た。

及び SPM実験装置メーカー、販売代理店、様等、SPMシミュレータを同梱（バンドル出荷）供給側に携わる方々には、「実験—シミュレーション」画像比較型シミュレーション手法に添う、実験画像作成ソフト使用へのご認識をお願い出来ましたら誠に嬉しい限りです。

- 1 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シミュレータは同一のプラットフォーム上で

「実験—シミュレーション」画像比較計算手法、が実現出来たので、  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_p9.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_p9.pdf)  
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が達成されました。

- 2 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出来たので、「実験—シミュレーション」画像比較型・(検討) 画像を出力できます。  
実験担当者とシミュレーション担当者はこれ等比較画像情報の現実的歩み寄り限界を見定め実験画像精度向上を目指して下さい

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_uc.pdf#page=33](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_uc.pdf#page=33)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_uc.pdf#page=32](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_uc.pdf#page=32)

- 3 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：AFMによる、原子・分子を寄せ集めて、原子の移動、配置させ、ナノ構造体を組み立てる

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_uc.pdf#page=31](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_uc.pdf#page=31)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_p1.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_p1.pdf)

● 「ユーザ各位との現実的コラボ接点 (5) /新規市場出現」

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、助走開始ご案内

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](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/DFTB_BAND_PHASE0.pdf)

(無題)

今後、東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 特任教授 塚田捷先生 と物質・材料研究機構 大野隆央先生との間で検討されていく事が決まりました。

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。

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。

詳しくは、以下のホームページをご参照ください。

<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/event/event.php?id=77>

<https://azuma.nims.go.jp/events/semi2015/semi20160119>

もともと、SPMシミュレータには、

DFTB(密度汎関数法に基づく強結合法)ソルバが含まれています。

このDFTBソルバによって、あらかじめ、いくつかの物理量を近似的に計算し、その結果をデータ変換して、PHASE/0システムの入力データとすることにより、PHASE/0の計算の高速化・高機能化が期待できます。

詳しくは、以下のホームページをご参照ください。

<https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/nsmail-311.pdf>

[https://www.aasri.jp/pub/spm/test/actual-calc\\_comparison\\_commentary.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/test/actual-calc_comparison_commentary.pdf)

SPMシミュレータとPHASE/0との連携により、具体的には、以下の相乗効果が生まれると考えられます。

PHASE/0のプリプロセッサとしてSPMシミュレータを使用することにより、PHASE/0の計算時間を短縮することが可能です。これにより、スーパーコンピュータの利用時間を短縮することができます。

現時点で、SPMシミュレータのDFTBソルバが取り扱える元素は、以下の27種となっております。

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

これにより、無機・有機化合物、無機・有機半導体、金属等、様々な物質を調べることが可能となりました。

幅広い分野の方々に、STM、STS、AFM、KPFMシミュレーションをして頂ける環境が整いつつあります。

これによるDFTB計算増加数だけPHASE/0に入力する事でPHASE/0計算数を増加させる、効果があります。

DFTBの必要とするシミュレーション計算時間は、おおよそ以下の通りとなっております。

STMシミュレーション：原子数140個程度で約9分

AFMシミュレーション：原子数140個程度で約170分

KPFMシミュレーション：原子数130個程度で約440分

なお、AFM・KPFMのシミュレーション計算時間を短縮するためのバージョンアップ作業が現在進行中で、

合計で、69種類のDFTB計算元素が使用可能となり、平成28年度から、あらゆる種類の元素化合物がシミュレーション計算可能となりました。

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, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb

半金属 Se, Sb, Te

アルカリ金属 Li, 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 Um

Dear SPM (Scanning Probe Microscope) users:

We are very happy to inform you that

we have just started a new sales promotion campaign for the SPM simulator.

The SPM simulator is a set of various theoretical simulators that examine SPM images with numerical calculations.

We collect detailed information about the SPM simulator in the following web page. Please notify the SPM Simulator

(無題)

Price List on this page:

[https://www.aasri.jp/pub/spm/en/about\\_spm\\_eng.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/en/about_spm_eng.html)

We offer you concrete examples of numerical simulations performed with the SPM simulator in the following web page:

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/CaseExamplesofCalculation\\_eng.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/CaseExamplesofCalculation_eng.pdf)

We prepare a navigation system with which you can learn how to use the SPM simulator in the following web page:

[https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant\\_eng/SPM\\_Simulator\\_assistant\\_top.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant_eng/SPM_Simulator_assistant_top.htm)

---

特別措置 無料計算機会提供 ご案内

特別措置 SPM購入前 検証目的無料計算機会 (自主的 支援)ご提供 ご案内

SPMに不慣れな方々、強い活用意図有す「初心者」ユーザ方々、購入前の検証計算を検討中の方々、活用助走段階におられる方々、対象

- ・公開中210計算済事例の中から、自分がやってみたいシミュレーション計算と似た例を探して頂き、その計算例の入力データを編集 (ヤング率、ポアソン比等の物性値の変更) すれば、自分の好みに合ったシミュレーションができる仕組みをご提供します。
- ・必要な場合は、「SPM」計算課題を貴方様とAASRIで共有化、ご支援致します。
- ・SPMシミュレータの活用は、初心者、不慣れな、誰方でも簡単にご使用頂ける「SPM初心者ユーザ補助機能」が具備されています。以上?支給コンテンツ参照
- ・購入前の検証計算・使用法習得計算を、3カ月無料計算機会を2回 (計6カ月) でご自身で実施頂き、必要なら支援の用意、結果を両方で評価し、購入契約頂く、ご案内です。?参照

?お試し計算 購入前の検証計算・使用法習得計算、ご自身実施のユーザ様には、特別措置・公開中の200件計算事例 (計算実績データ) 及び SPMガイドブック・マニュアル類、コンテンツ等、以下を無料支給致し、計算に供します。

- ・公開中の200件計算事例 (計算実績データ) をフリーに無料でご使用頂けます。
- ・自分がやってみたいシミュレーション計算と似た例を探してください。その計算例の入力データを編集 (ヤング率、ポアソン比等の物性値の変更) すれば、自分の好みに合ったシミュレーション計算ができる仕組み、ご提供です

- ・SPMユーザー様の「SPM」計算課題をAASRIと協議作成し、共有化します。  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM\\_operational\\_procedures\\_p34.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_operational_procedures_p34.pdf)

- ・[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初心者ユーザも即時活用出来ます。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/spm\\_simulator\\_help.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/spm_simulator_help.html)

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

- ・[計算事例用Projectファイル・ダウンロードページ]  
弊社で蓄積した、SPMシミュレータの計算例を集めたWebページです。各計算例の入力データ、計算結果を紹介したPowerPointファイル等が集められています。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/project\\_samples\\_top.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/project_samples_top.htm)

自分がやってみたいシミュレーション計算と似た例を探してください。その計算例の入力データ、ヤング率、ポアソン比等の物性値を変更する編集作業を行えば、自分の好みに合ったシミュレーションができる仕組みです。

- ・[調べたい探針・試料の形状データをお持ちのユーザの方のためのページ]  
既に、シミュレーションしたい試料の形状データを持っている方のためのWebページです。  
手持ちの形状データを、どのようにしてシミュレーション・ソルバに入力データとして与えるかを、説明するWebページです。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/spm\\_second\\_step\\_user/spm\\_second\\_step\\_user\\_top.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/spm_second_step_user/spm_second_step_user_top.htm)

?購入前の検証計算・使用法習得計算、の無料計算機会ご提供、ご案内

▽第一回目 3カ月無料計算機会ご提供

(無題)

- ・活用希望されるユーザー様、ご自身による「無料お試し計算」に相当する購入前  
[検証計算/使用法習得計算]
- ・無償供与期間 3カ月、活用希望されるユーザー様は無料で計算可能
- ・申込から3カ月後に自動的にSPMシミュレータの使用不可能化処理
- ・申込

[http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPMsimulator\\_beginner\\_assistant\\_manual\\_pamphlet.pdf](http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPMsimulator_beginner_assistant_manual_pamphlet.pdf)

- ・作業環境サポート等、?の支給、参照下さい

▽第二回目 3カ月無料計算機会ご提供

- ・活用希望されるユーザー様、ご自身による「無料お試し計算」に相当する購入前  
[検証計算/使用法習得計算]
- ・無償供与期間 3カ月、活用希望されるユーザー様は無料で計算可能
- ・申込から3カ月後に自動的にSPMシミュレータの使用不可能化処理
- ・申込

[http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPMsimulator\\_beginner\\_assistant\\_manual\\_pamphlet.pdf](http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPMsimulator_beginner_assistant_manual_pamphlet.pdf)

- ・作業環境サポート等、?の支給、参照下さい

▼活用希望ユーザーとAASRIが評価・購入決定まで検証繰返す

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM\\_operational\\_procedures\\_p34.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_operational_procedures_p34.pdf)

▽第三回目 有償供与

- ・活用希望されるユーザー様、ご自身による、恒常活用段階
- ・有償供与期間 Nカ月
- ・ソルバ「ばら売り」価格表・選択条件、SPMイノベーター 及び 申込

<https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/kakaku.pdf#page=8>

[https://www.aasri.jp/pub/spm/appform/spmlcapp\\_popular.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/appform/spmlcapp_popular.php)