

# SPM計算課題(ユーザー各位とAdvanced Algorithm & Systems間で共有する)取り扱い

産官学 SPMユーザの皆様

XXXXXX様

---

弊社でXXXXXX様のご研究内容を調べさせて頂きましたところ、以下のトピックスに興味をお持ちとお見受け致しました。

(a)High-k/SiO<sub>2</sub>酸化物のヘテロ界面がフラットバンド電圧シフトへ及ぼす影響

(b)原子層堆積法で作製した金属酸化物薄膜の電子デバイスへの展開

「SPMシミュレータ」には、量子力学的解法を行うソルバとして、DFTBが用意されています。

半導体デバイスや、無機・有機材料に関して表面・界面の様子を調べ、STM観察等のシミュレーションを実現するには、このDFTBソルバが最適です。

また、DFTBソルバは、SPMのシミュレーションだけでなく、バンド構造計算等もオプションで実行可能となっております。従いまして、半導体、無機・有機材料の物性的性質を予測するシミュレーションも実行可能です。

将来的には、スピン偏極STMにも機能を拡張する予定でおります。

さらには、「SPMシミュレータ」には、分子動力学法、量子力学的密度汎関数法等の様々な解法による、AFMシミュレータがバンドルされています。

様々な有機・無機化合物のAFMシミュレーションにも対応可能です。

特に、DFTB(密度汎関数強結合)法によるシミュレーションでは、各元素の原子間相互作用パラメータを準備することが重要と見なされています。

DFTB計算に必要な原子間相互作用パラメータは、限られた種類の元素しか一般に出回っていないのが現状です。ですが、弊社では、以下の27種類の元素のパラメータが準備され、計算可能となっております。

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

また、2016年末には、以下の元素パラメータが追加され、合計69種類の元素が使用可能となる予定です。

---

突然のメールで、失礼致します。

私は、株式会社Advanced Algorithm & Systemsの、YYYYYYと申します。

弊社が、開発・販売させて頂いております、「SPMシミュレータ」を御紹介させて頂くため、このメールをお送りする次第です。

なお、「SPMシミュレータ」の情報は、以下のホームページからご覧になれます。

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

弊社、株式会社Advanced Algorithm & Systemsの情報は、以下のホームページからご覧になれます。

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

弊社の開発する「SPMシミュレータ」は、SPM(走査型プローブ顕微鏡)の測定をシミュレートする、従来にない新しいコンセプトのソフトウェアで、以下の機能を有します。

- (1)DFTB(密度汎関数強結合)法による、STM(走査型トンネル顕微鏡)、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
- (2)分子動力学法による、AFMのシミュレーション
- (3)有限要素法による、探針・試料の変形を考慮したAFMシミュレーション
- (4)液中環境下でのAFMシミュレーション
- (5)SPM実験画像データのデジタル処理

弊社でXXXXXX様のご研究内容を調べさせて頂きましたところ、XXXXXX様は、以下のトピックスに興味をお持ちとお見受け致しました。

- (a)High-k/SiO<sub>2</sub>酸化物のヘテロ界面がフラットバンド電圧シフトへ及ぼす影響
- (b)原子層堆積法で作製した金属酸化物薄膜の電子デバイスへの展開

「SPMシミュレータ」には、量子力学的解法を行うソルバとして、DFTBが用意されています。

半導体デバイスや、無機・有機材料に関して表面・界面の様子を調べ、STM観察等のシミュレーションを実現するには、このDFTBソルバが最適です。

また、DFTBソルバは、SPMのシミュレーションだけでなく、バンド構造計算等もオプションで実行可能となっております。

従いまして、半導体、無機・有機材料の物性的性質を予測するシミュレーションも実行可能です。

将来的には、スピン偏極STMにも機能を拡張する予定でおります。

さらには、「SPMシミュレータ」には、分子動力学法、量子力学的密度汎関数法等の様々な解法による、AFMシミュレータがバンドルされています。

様々な有機・無機化合物のAFMシミュレーションにも対応可能です。

特に、DFTB(密度汎関数強結合)法によるシミュレーションでは、各元素の原子間相互作用パラメータを準備することが重要と見なされています。

DFTB計算に必要な原子間相互作用パラメータは、限られた種類の元素しか一般に出回っていないのが現状です。

ですが、弊社では、以下の27種類の元素のパラメータが準備され、計算可能となっております。

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

また、2016年末には、以下の元素パラメータが追加され、合計69種類の元素が使用可能となる予定です。

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:	U

ですので、ほぼあらゆる種類の化合物に関して、密度汎関数法で、STM, STS, AFM, KPFMシミュレーションが可能となります。

さらには、DFTBの原子間相互作用計算パラメータを販売することも可能です。

一度、こちらからお伺いして、SPMシミュレータのデモ等を、XXXXXX様の目の前で実演する機会を頂ければと、希望しております。

また、弊社は、株式会社東陽テクニカ様と共催で、SPMシミュレータの使用方法を紹介・説明するセミナーを、定期的を開催する予定でおります。

こちらに参加して頂けましたら、SPMシミュレータの詳しい機能紹介をさせて頂くことも可能です。

もし、興味がおありでしたら、弊社まで、御気軽にメール等でお問い合わせ頂けましたら幸いです。

以上、よろしくお願い申し上げます。