

SPMイノベータ(世界標準仕様シミュレータ)活用ご案内

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)

世界初の“2機能の活用”

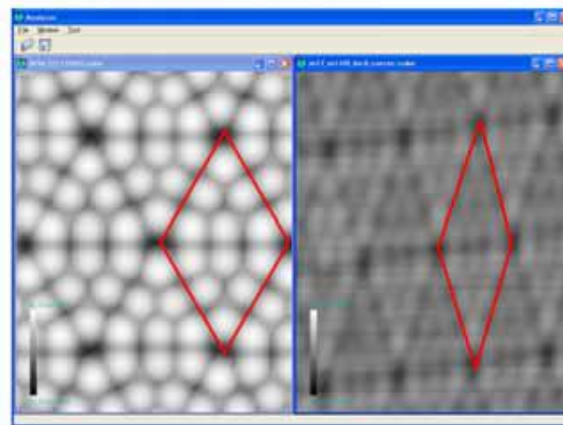
- SPM「実験－シミュレーション」画像比較機能
- 世界標準仕様・粘弾性接触解析機能
あらゆる(有機・無機)化合物のDFTB計算が可能

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

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)

Advanced Algorithm & Systems

SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ プロローグ



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

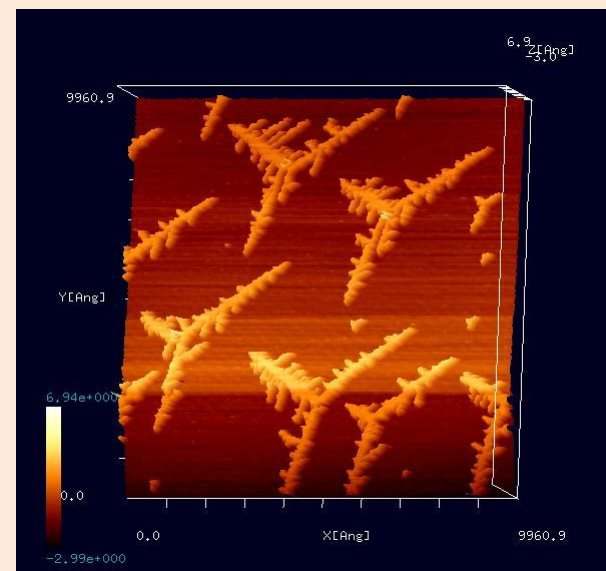
日常の実験・検査業務を強力にサポートします

- 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)

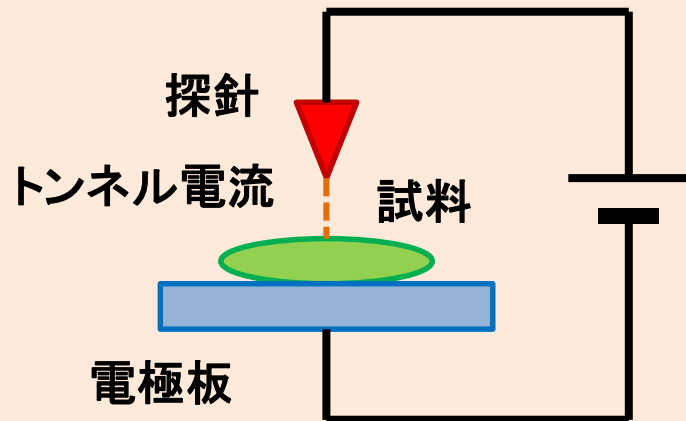
S. Ogura et al., Phys. Rev. B 73, 125442 (2006);

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?

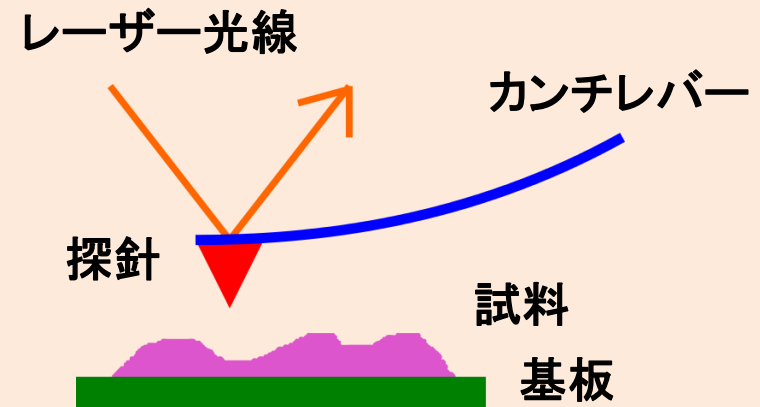
走査型トンネル顕微鏡



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力(原子間力)を検出する

原子レベルの画像が得られる(Åオーダー)

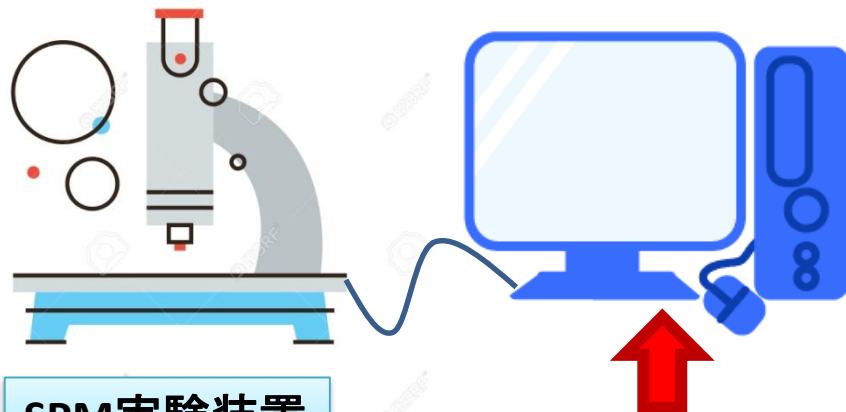
SPMシミュレータは、あらゆるSPM実験画像を理論シミュレーションします

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

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

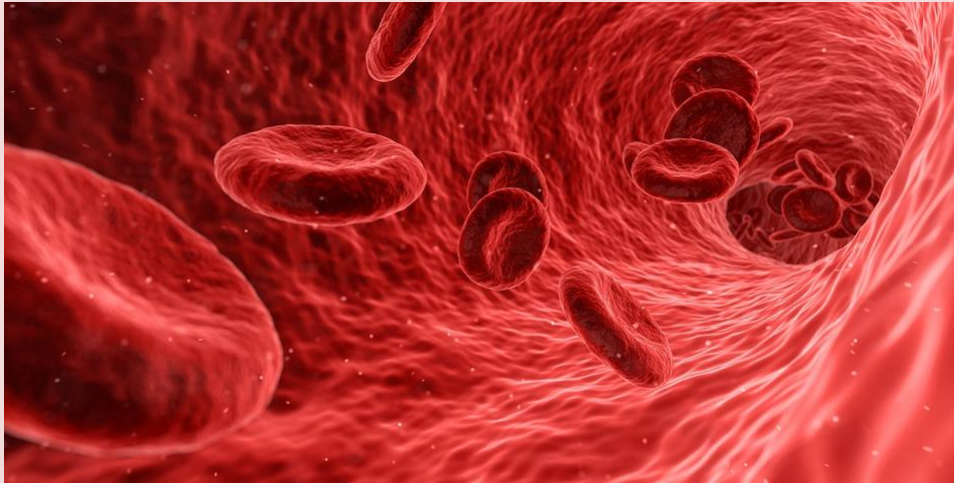
シミュレーション初心者でも、すぐに使える、充実のナビシステム

[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(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

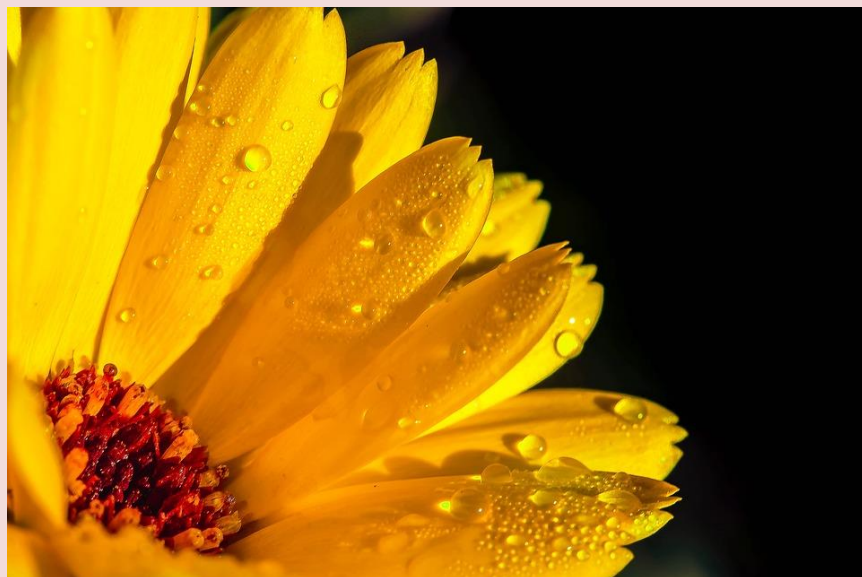


難病の特効薬を開発したい

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





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

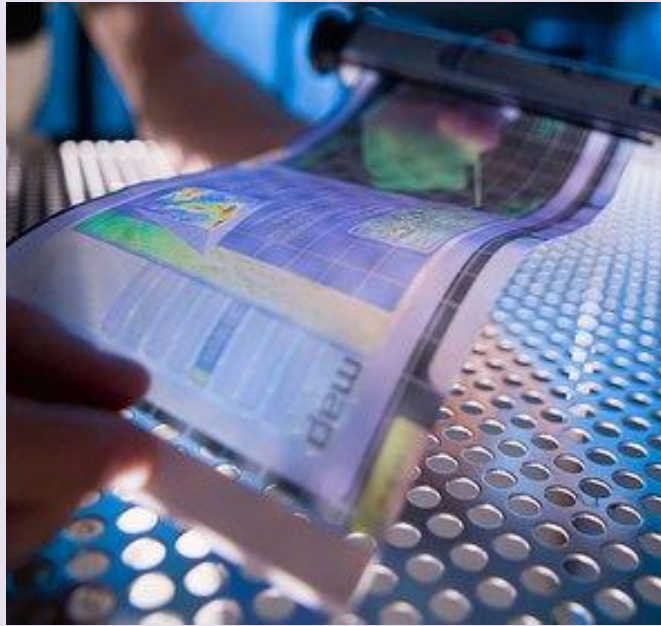
海水から真水を作る高機能をろ過膜を開発したい

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



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

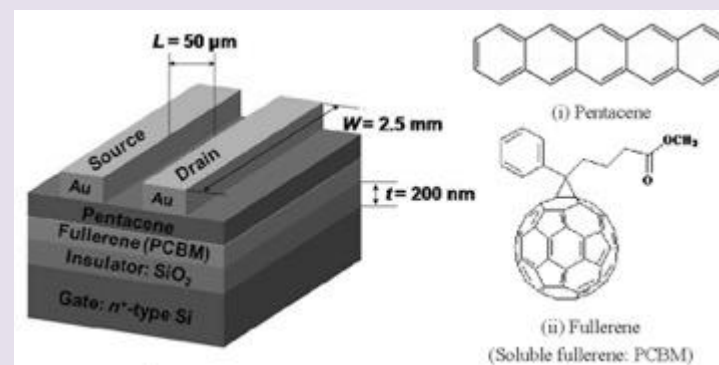
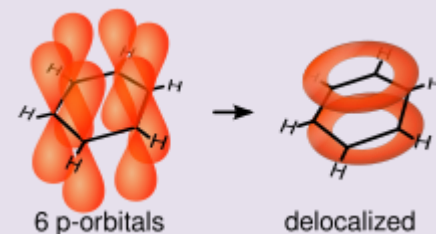
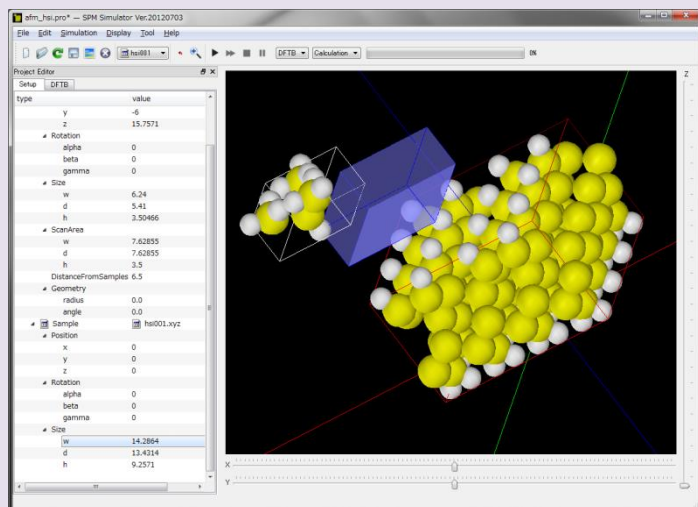
SPMシミュレータは、有機半導体分野での新素材開発を応援します

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



SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ

金属・無機半導体分野



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



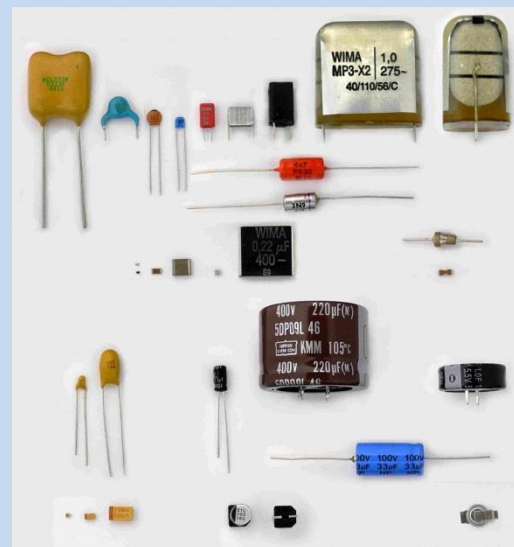
先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

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氣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
- 半導体薄膜の電氣的性質を調べたい



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

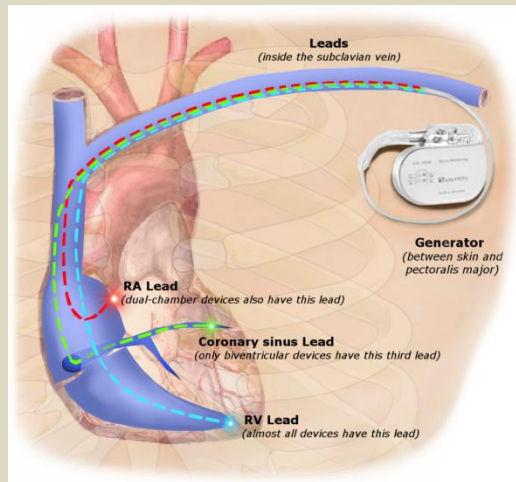


実験現場での様々なニーズにお応えします

- 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

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

世界初「実験—計算」画像比較型・SPM世界標準仕様、粘弾性接触解析 及び DFTB計算元素69種活用による、全ての(有機・無機)化合物の比較型シミュレーション事例です。

●テーマ領域の研究者 実用・開発者はクリックし比較型計算事例を確認下さい。

各研究テーマ

用途区分

バイオ・ソフトマテリアル

食品

製薬

化粧品

バイオ

合成ゴム

医療用品

繊維状高分子

繊維

化学合成

炭素素材

プラスチック

有機半導体

電子デバイス

有機EL

金属・無機半導体

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

触媒

自動車

化学プラント

リチウム電池・透明電極

バッテリー

液晶

SPMシミュレータはPHASE/0のプリプロセッサとして運用

「実測-計算」画像比較型のシミュレーション 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

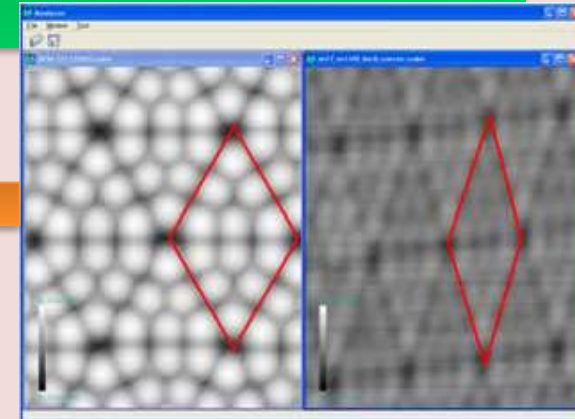
DFTBシミュレーションで69種類の元素
パラメータを完備することで、あらゆる無機・有機化合物のシミュレーションに対応

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

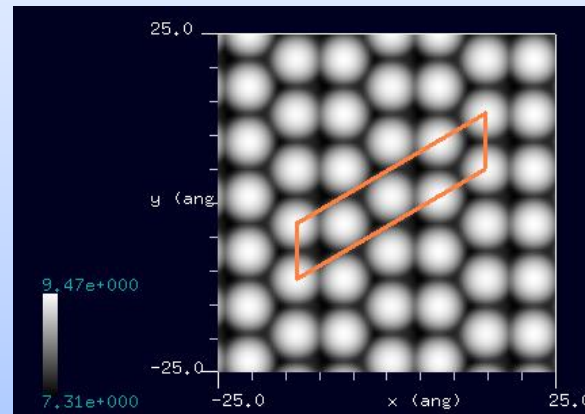
* PHASE/O:物質材料研究機構
で開発されたフリーの第一原理計算ソフトウェアです。

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

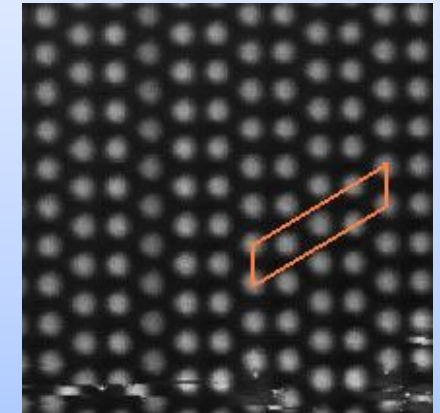
シミュレーション画像と実験画像データの比較を同一のプラットフォーム上で実現する



【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シミュレータ操作ナビシステム・併用型SPMシミュレーション手法

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

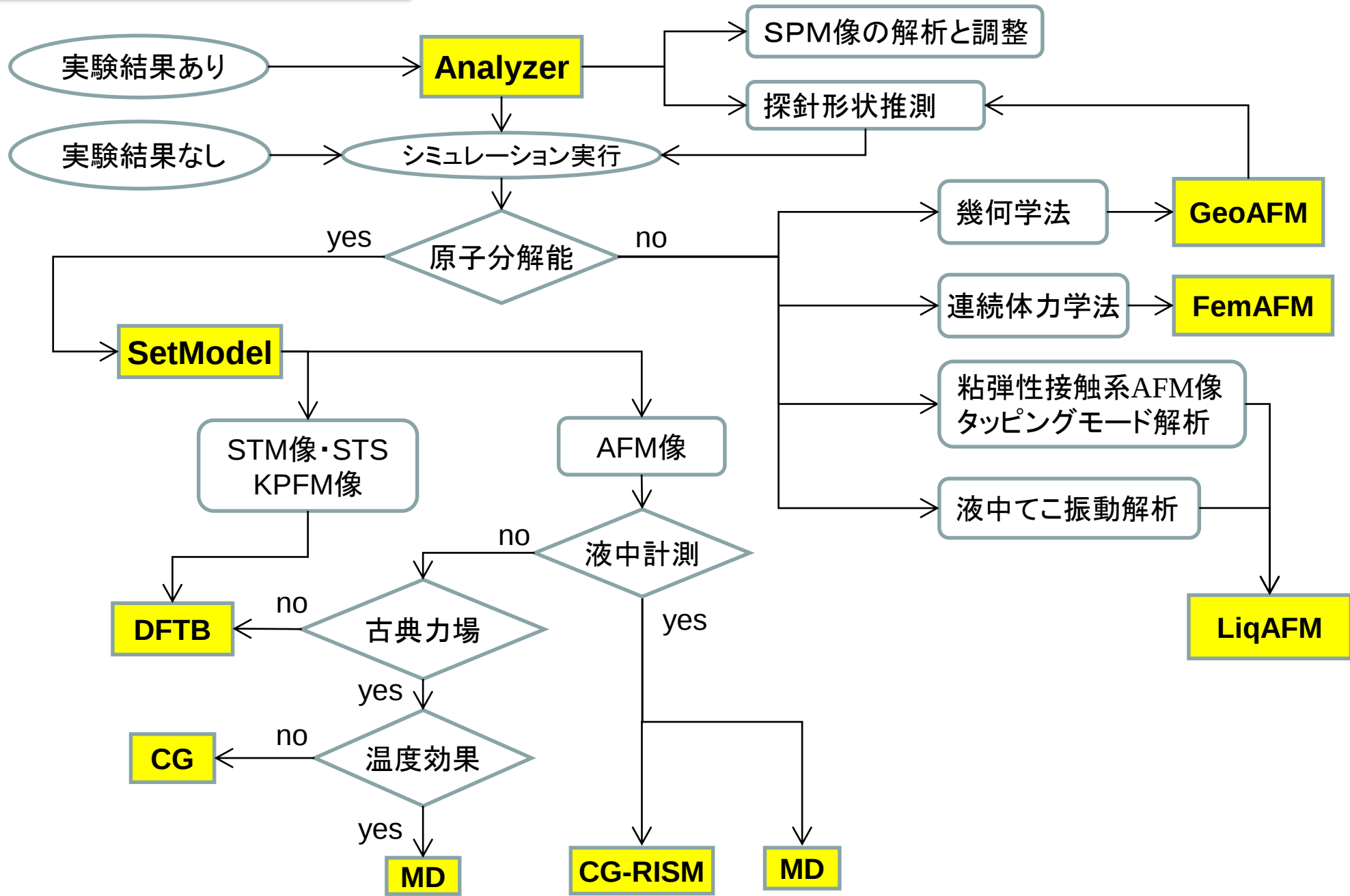
SPMシミュレータ操作ナビシステム→計算実行指示→8本ソルバから構成されるSPMシミュレータの稼働の過程は、SPM初心者ユーザ補助機能が「2システム」に具備されており、誰方にも容易にお使い頂けます。



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になります。

(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の間に相互補完的協議の結果、合意される



ソルバー	特徴	機能
Analyzer 実験データ画 像処理プロセッ サ	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	・探針構造推定機能 ・メーカー各社のSPM実験データの読み込み機能 ・画像データの傾斜補正機能 etc.
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	・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 ・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 ・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
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	・試料と探針から計測像を予測する機能 ・計測像と探針から試料形状を予測する機能 ・計測像と試料から探針形状を予測する機能 ・対象(コラーゲン、タンパク質分子)
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。	・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応 ・単振動加振・二重加振／多モードに対応 ・カンチレバーの共鳴曲線(真空中、大気中、液中)を 描く ・マルチコア並列計算機能 ・対象(コラーゲン、タンパク質分子)

LiqAFM (tapping) 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ	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。	・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応 ・単振動加振・二重加振／多モードに対応 ・カンチレバーの共鳴曲線(真空中、大気中、液中)を描く ・マルチコア並列計算機能 ・対象(コラーゲン、タンパク質分子)
CG 構造最適化 AFM像シミュレータ	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	・散逸像・周波数シフト像、フォースマップ等を計算 ・接触高さ、力一定のコンタクトモード像計算 ・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 ・対象(コラーゲン、タンパク質分子)
MD 分子動力学 AFM像シミュレータ	古典力学法による原子モデルの分子動力学計算	・フォースカーブの計算 ・三次元力場の計算、散逸像・周波数シフト像予測に対応 ・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 ・液中計算に伴う溶媒の分子動力学計算 ・対象(コラーゲン、タンパク質分子)
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 ・バンド構造計算 ・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)

統合型SPMシミュレータ購入契約体系・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	構成ソルバーマスメリット価格(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	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(マスメリット・ダウン適用)SPM価格(基準値)						学(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

ソルバ・レンタル		産官	学
		12	9
		12	9
		16	12
		20	15
		24	18
		24	18
		92	69
		200	150

レンタル料市場相場
(20±5)万円/ソルバ/年

SPMレンタル

Standard型		難 度	構成ソルバーマスメリット価格(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 学(マスメリット・ダウン適用)SPM価格 (基準値相当)			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) 産・官SPM価格 (基準値相当)	270万

ソルバ・レンタル		産官	学
		12	9
		12	9
		16	12
		20	15
		24	18
		24	18
		108	81

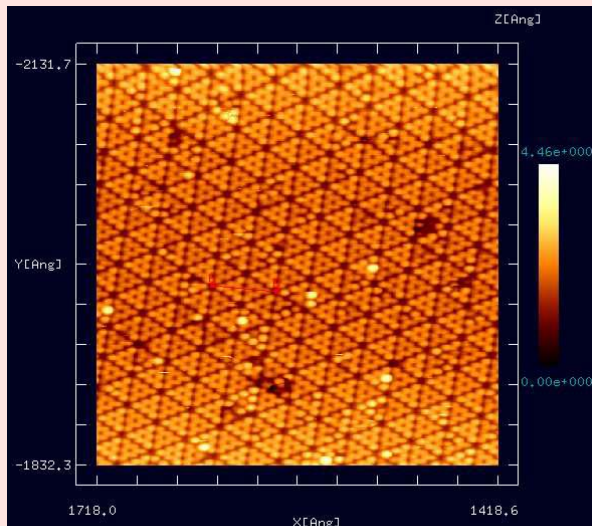
SPMシミュレータ 俯瞰

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

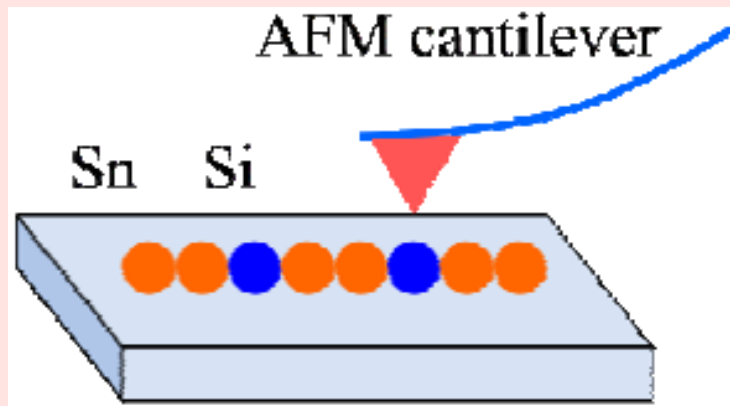
実験画像とシミュレーション画像を同一プラットフォーム上で比較可能とすることで、従来の見かけのSPM実験画像(何が見えているか不明)から、原子の真の配置を特定できる、**SPM実験画像処理手法イノベーション**達成しました。

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

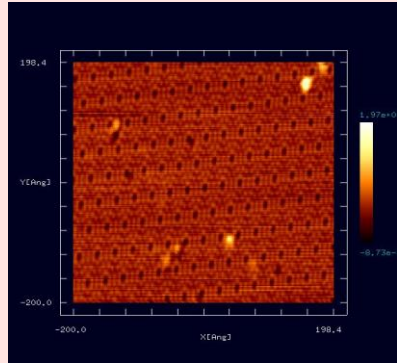
AFMによる、原子の移動、配置、
ナノ構造の組み立て

Advanced Algorithm & Systems

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)

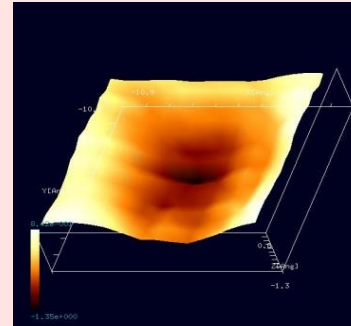
粘弾性試料と探針との接触力学シミュレーション(バイオ関連)



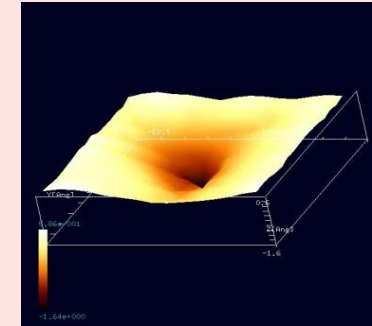
Si結晶表面AFM画像(東京大学生産技術研究所 福谷研究室提供)



複数の探針形状が
推定可能
どれが最適解か?



or



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

“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

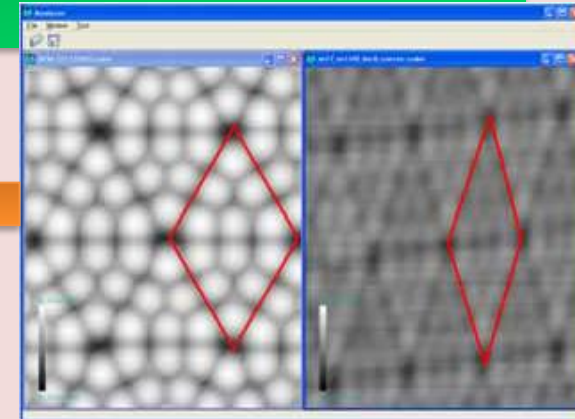
DFTBシミュレーションで69種類の元素
パラメータを完備することで、あらゆる無機・有機化合物のシミュレーションに対応

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

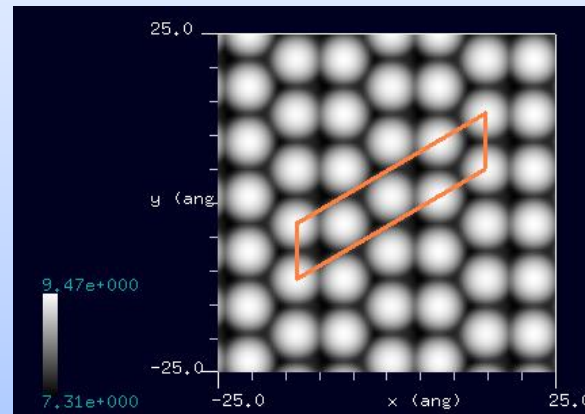
* PHASE/O:物質材料研究機構
で開発されたフリーの第一原理計算ソフトウェアです。

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

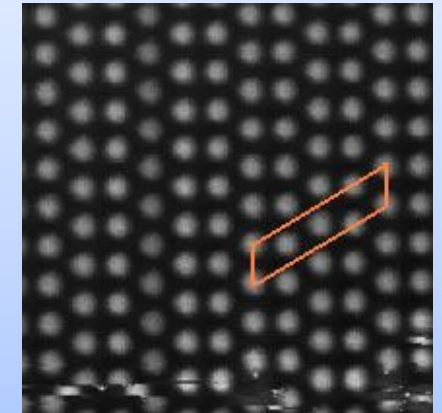
シミュレーション画像と実験画像データの比較を同一のプラットフォーム上で実現する



【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)

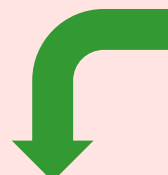
SPMシミュレータの使い方(説明・解説)

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になります。

(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の間に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

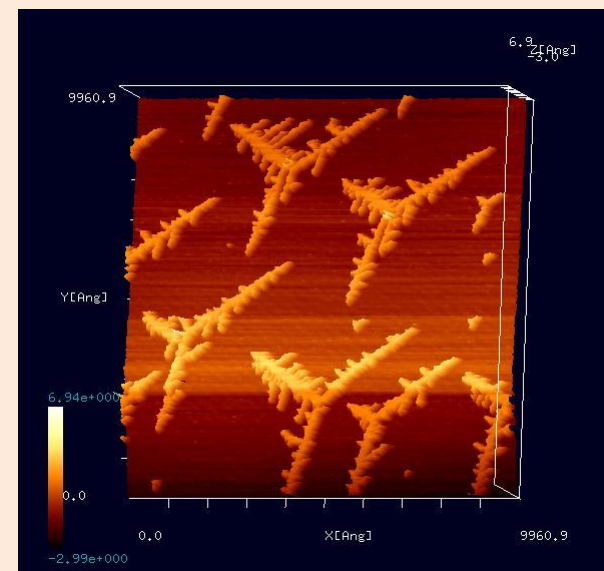
日常の実験・検査業務を強力にサポートします

- 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)

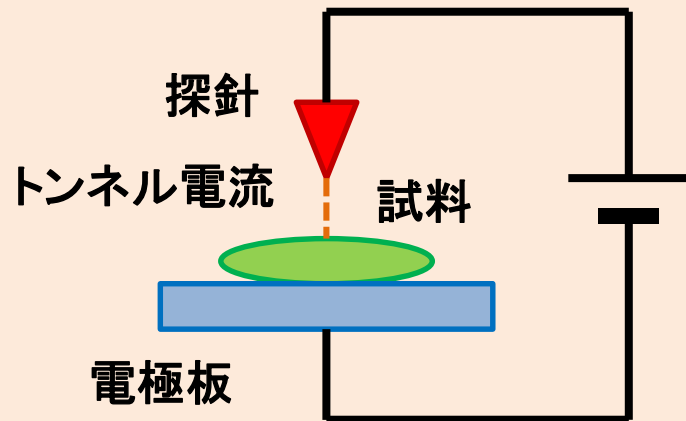
S. Ogura et al., Phys. Rev. B 73, 125442 (2006);

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?

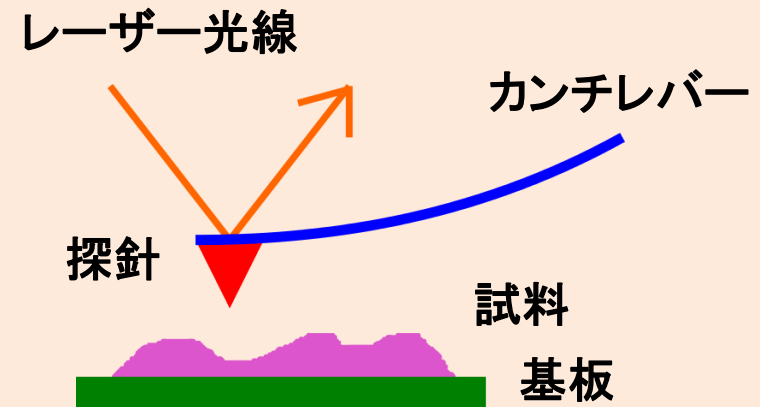
走査型トンネル顕微鏡



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力(原子間力)を検出する

原子レベルの画像が得られる(Åオーダー)

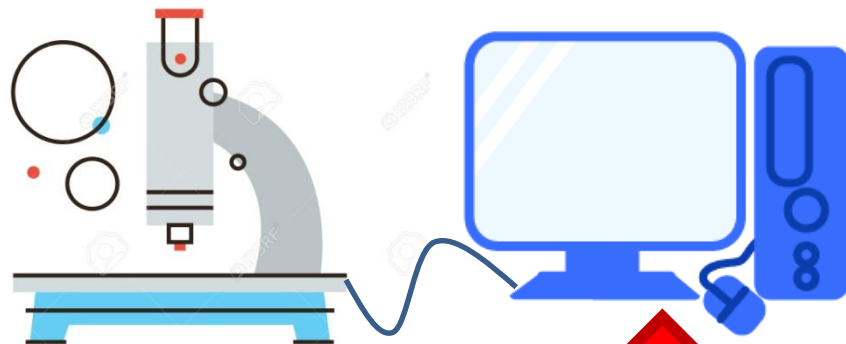
SPMシミュレータは、あらゆるSPM実験画像を理論シミュレーションします

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

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

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あります
- 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構成ソルバ別・計算機能毎・計算事例

SPM市場分野指定

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]

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

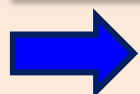
[自分が用意した探針・試料のデータを元に、シミュレーションを行いたいとお考えのユーザの方のためのページです]

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

研究プロセス初期段階

研究プロセス最終段階

DFTBで予備計算(短時間で数多くのシミュレーションを行う)

SPMシミュレータ/DFTBソルバ
による計算時間は
6分程度です(TiO₂の場合)

- DFTBは他の類似ソフトOpenMX等より
2倍以上高速です
- 初期データの準備も他の類似ソフトと
比較してDFTBの方がずっと簡単です

DFTBの結果から精密な
計算を行うべきものを抽出して改めてPHASE/0で
計算

DFTB計算データの予備活用
により、PHASE/0の計算時間
大幅削減

PHASE/0計算(時間かけて精度を高める)

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?

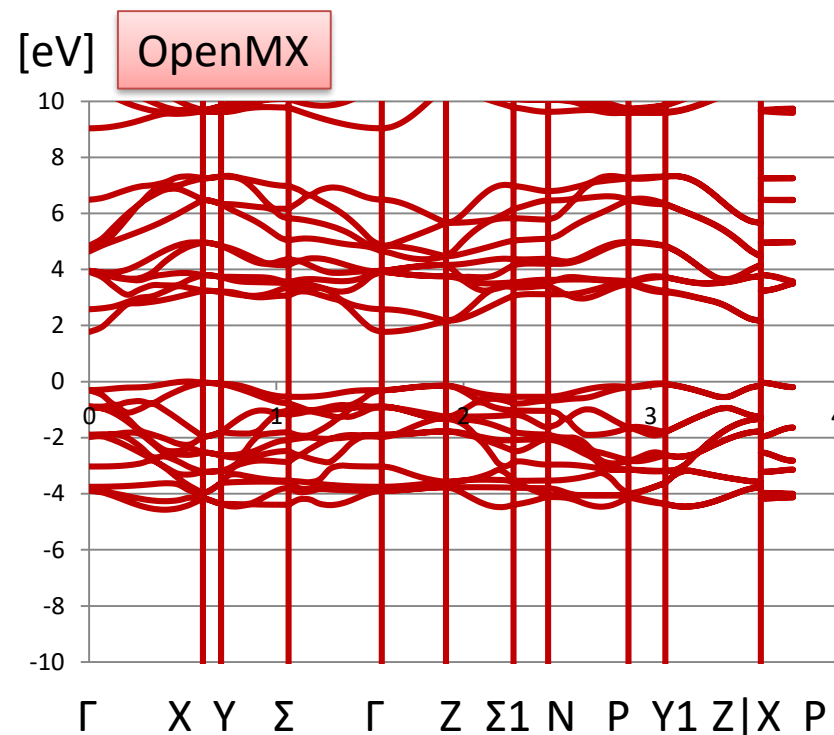
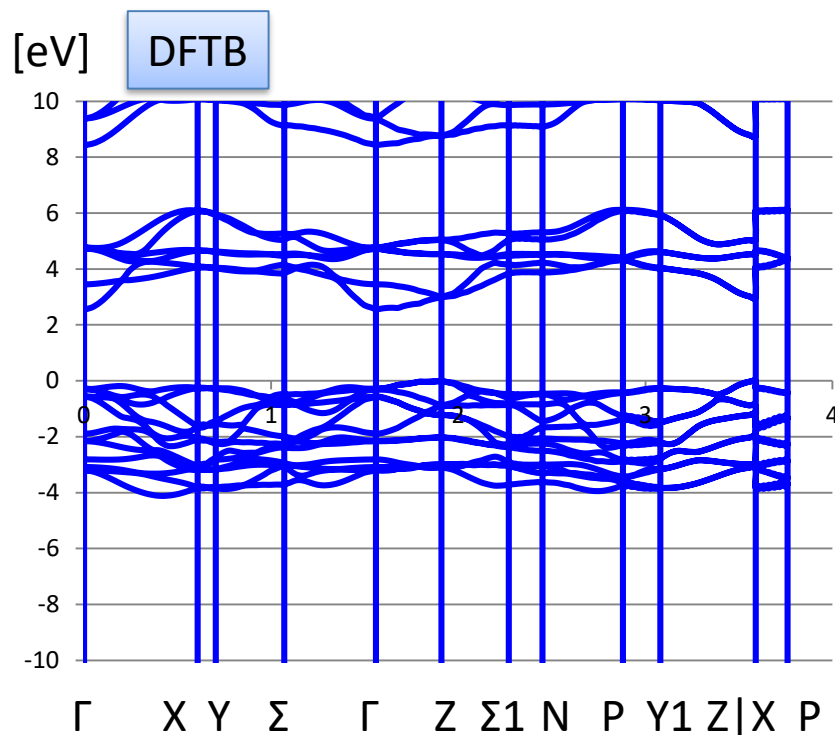
- ユーザは小規模なDFTB計算を高速で行えます
- ユーザは、DFTBソルバで得られるバンド図を参照して、PHASE/0の計算を行えます
- 調べようとしている化合物の第一原理によるバンド構造計算が、易しい問題か、難しい問題かが、DFTBソルバの結果を参照することで予測できます

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(TiO_2)のバンド構造を計算した結果の比較

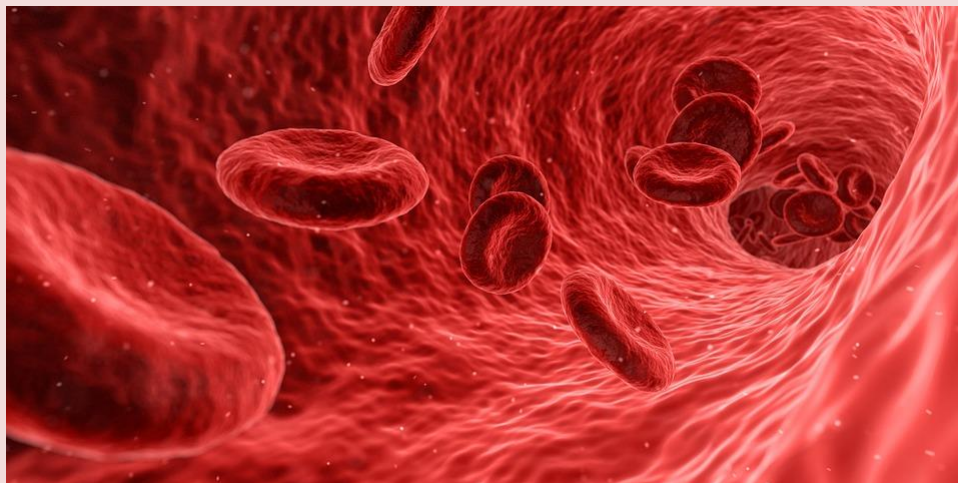


DFTBソルバは、本来、走査型プローブ顕微鏡画像のシミュレーションを行うためのソフトですが、計算途中の過程で密度汎関数法によるバンド構造計算を行います。このDFTBのバンド計算機能と、OpenMXによるバンド計算の結果を比較したのが上の図です。両者は良く一致していることが分かります。DFTBソルバは、バンド構造出力機能も備えています。

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

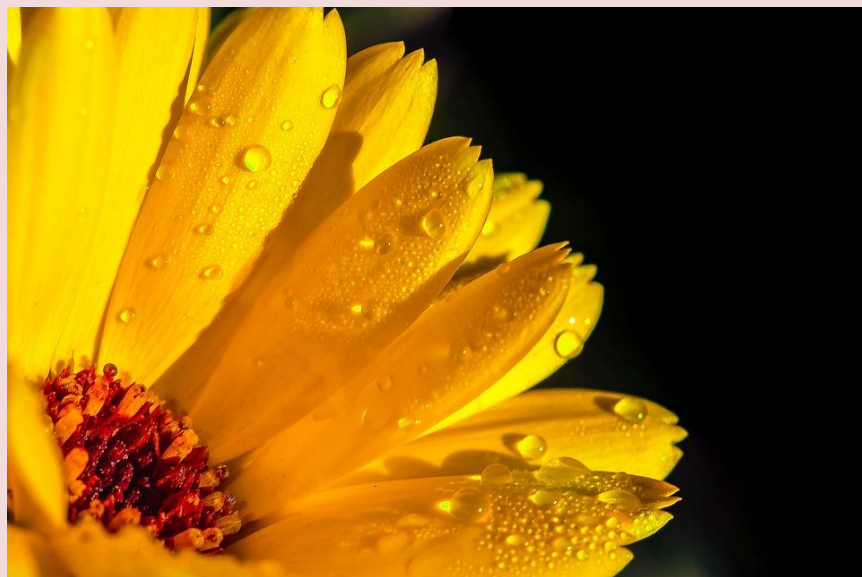


難病の特効薬を開発したい

安価なジェネリック医薬品を開発したい

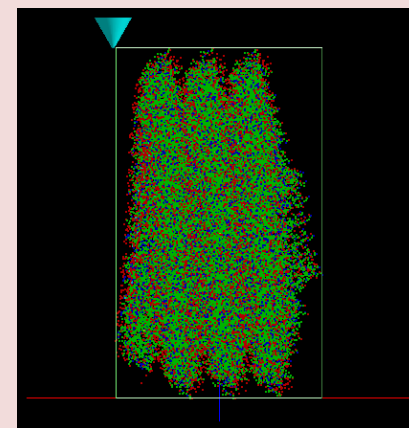
新食感の食品を作ってみたい

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

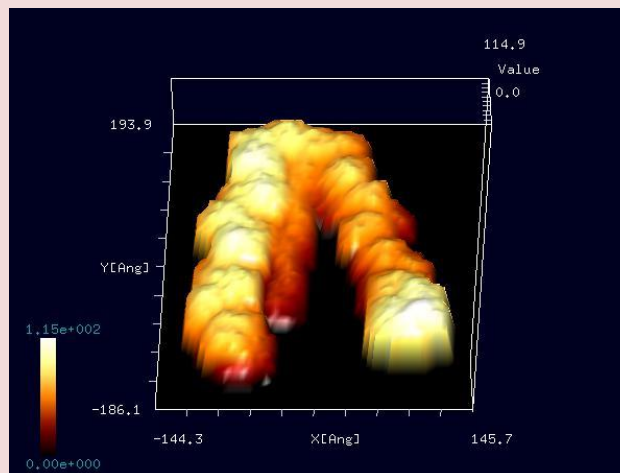
- 生理的溶液中のDNAの振る舞いを調べたい
- 高分子の粘性を調べたい
- 表面張力を伴う材料の界面を調べたい
- 巨大タンパク質の実験画像をシミュレーションしたい
- ゴム分子のような弾性を持つ材料の変形を調べたい
- 実験画像をデジタル処理したい



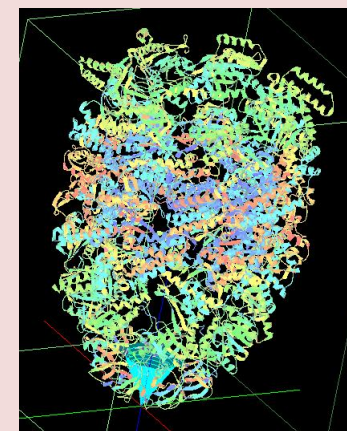
タバコモザイクウィルスのような原始的な生物でもシミュレーションが可能です

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

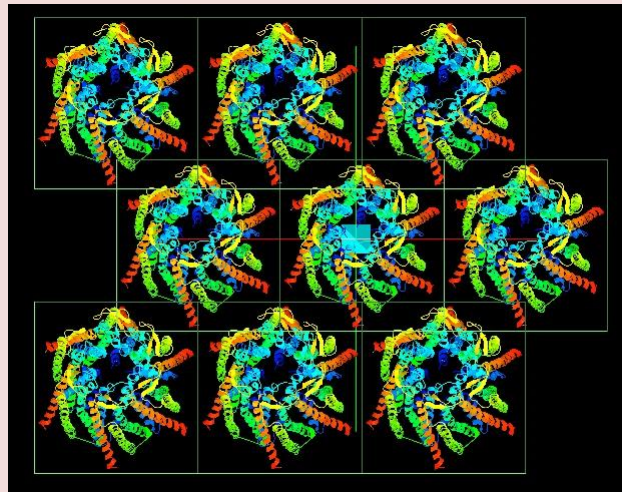


生体高分子ミオシンVの
AFM像シミュレーション

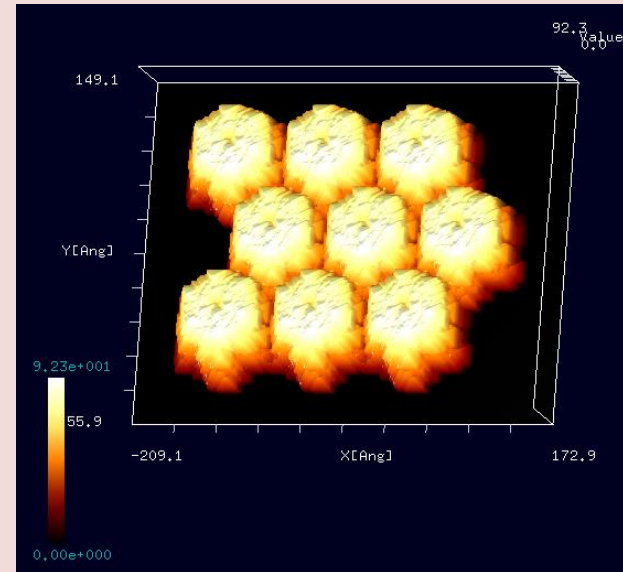
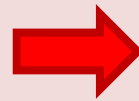


原子数が数万個の巨大タンパク質でもシミュレーションが可能です

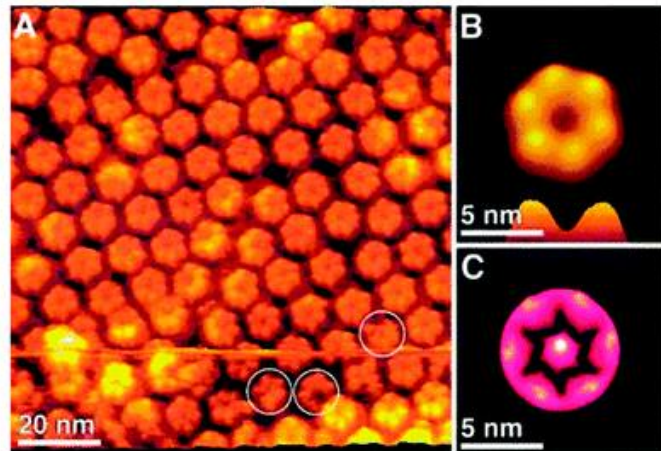
整列したコネクソンのAFM(原子間力顕微鏡)シミュレーション画像
(connexon:タンパク質の複合体で細胞間のチャンネルの働きをする)



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

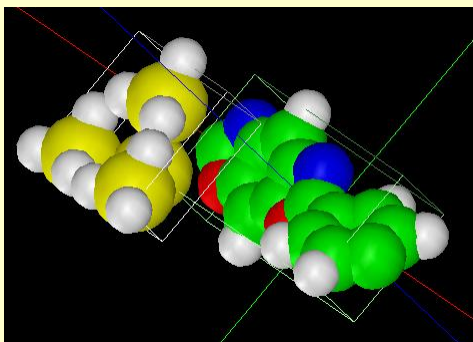
海水から真水を作る高機能をろ過膜を開発したい

人体に安全な人工血管を作りたい

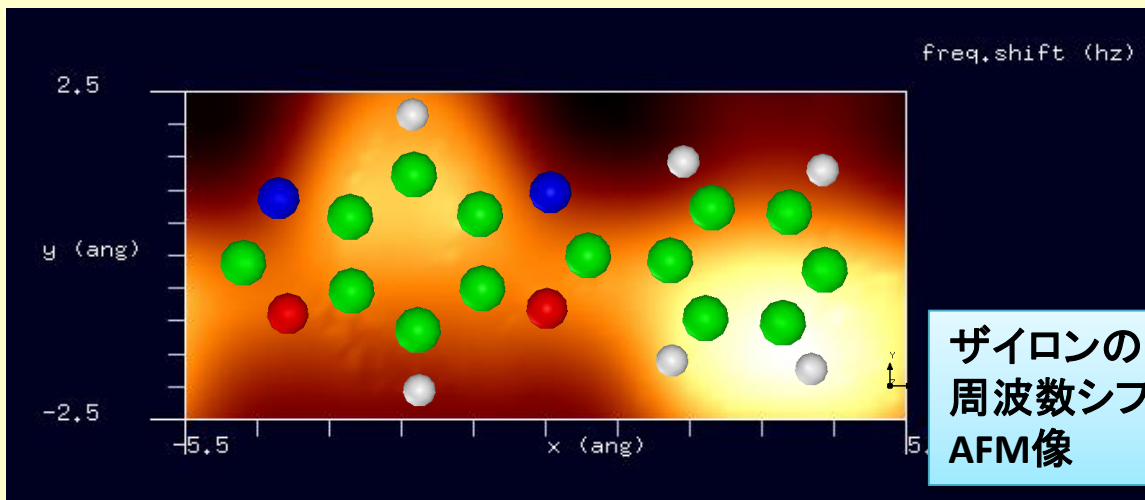


実験現場での様々なニーズにお応えします

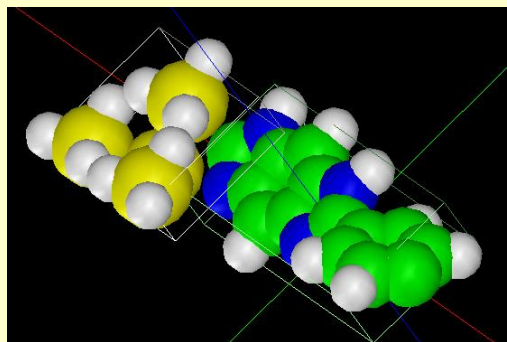
- AFM(原子間力顕微鏡)測定によって得られた実験画像が真の分子形状を反映しているか確かめたい
- AFM測定で繊維分子に探針を押し付けたときの変形を調べたい
- 探針が受ける試料からの反発力を見積もりたい
- 高分子の緩和過程による変形を調べたい



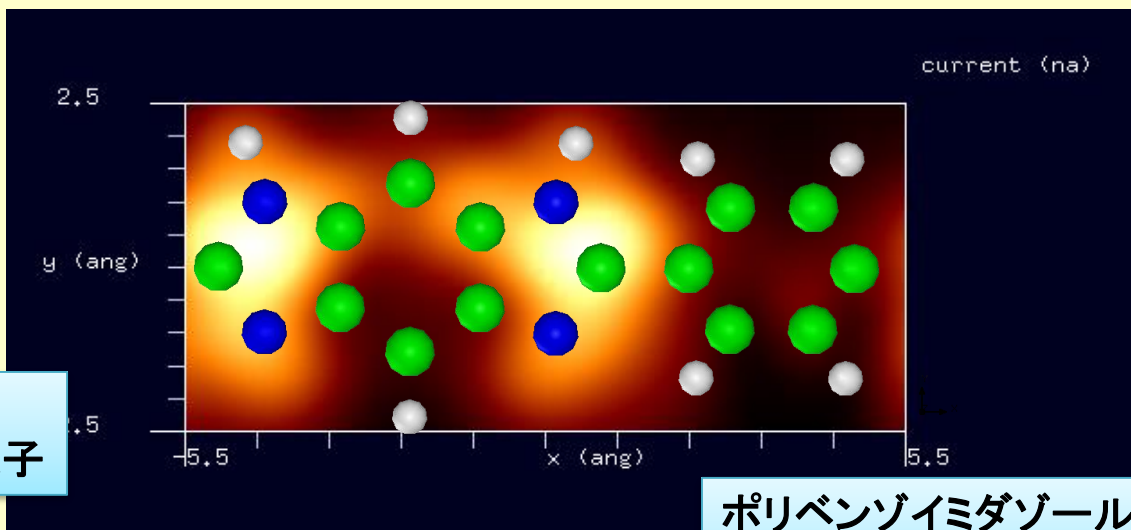
合成繊維ザイロン(Zylon)に
シリコン探針を近づけた様子



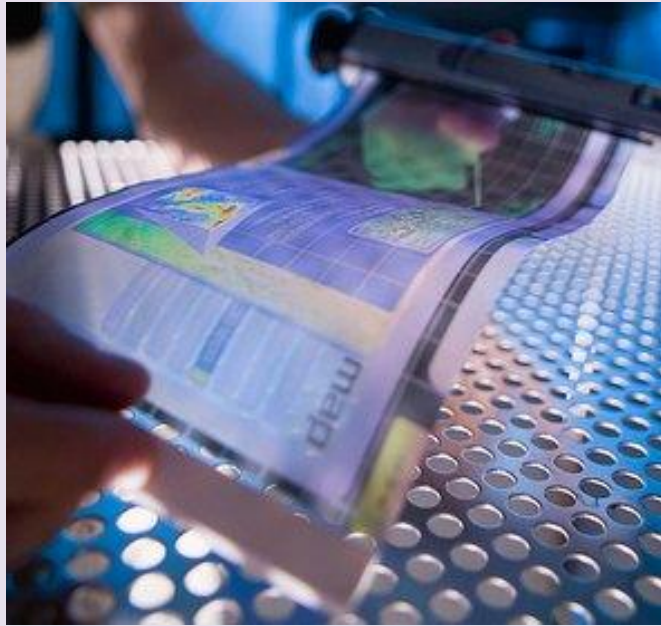
ザイロンの
周波数シフト
AFM像



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

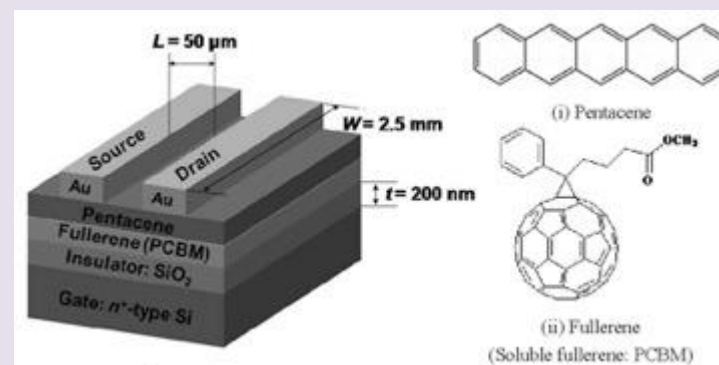
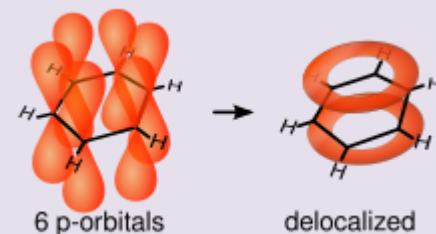
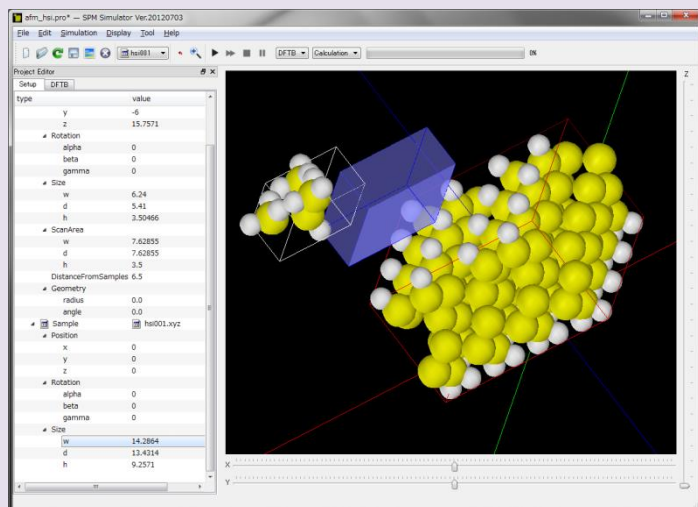
SPMシミュレータは、有機半導体分野での新素材開発を応援します

創造性にあふれた社会の実現のお手伝いをします

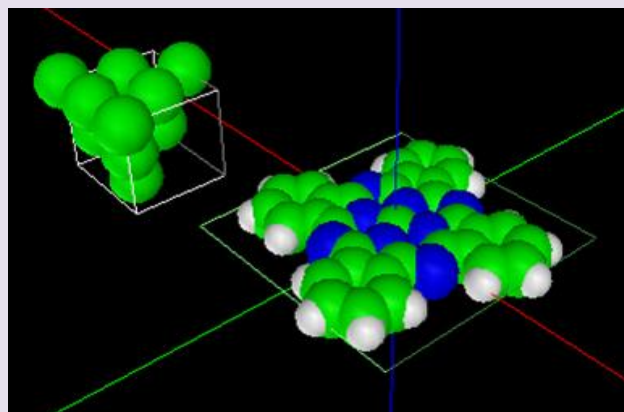


実験現場での様々なニーズにお応えします

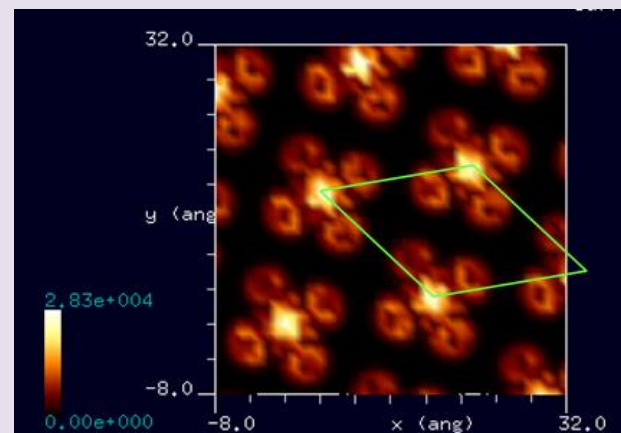
- 実験画像とシミュレーション画像を比較したい
- 有機半導体の電気的な性質を調べたい
- ドープによる効果を調べたい
- 状態密度の分布について調べたい
- 接触電位差について調べたい



銅フタロシアニンのトンネル電流像シミュレート

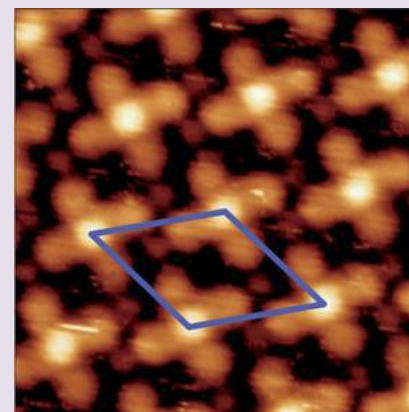


分子構造データ



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

金属・無機半導体分野



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



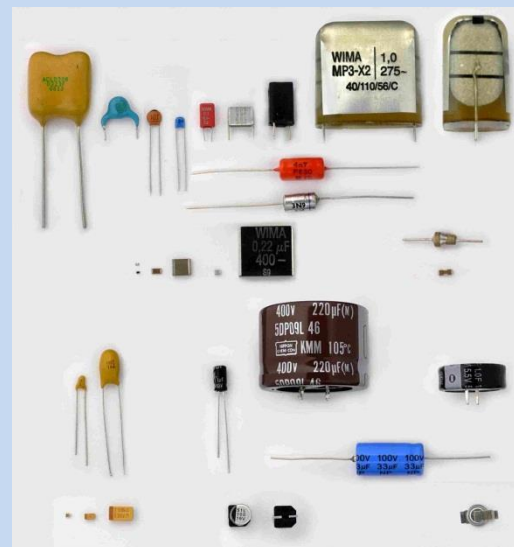
先端科学シミュレーションで、こんな未来を実現します

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

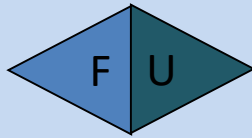
太陽電池の開発を通して、エネルギー問題に取り組みたい



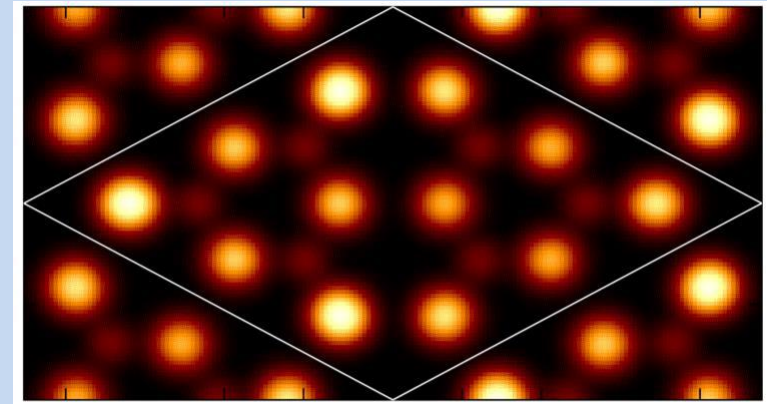
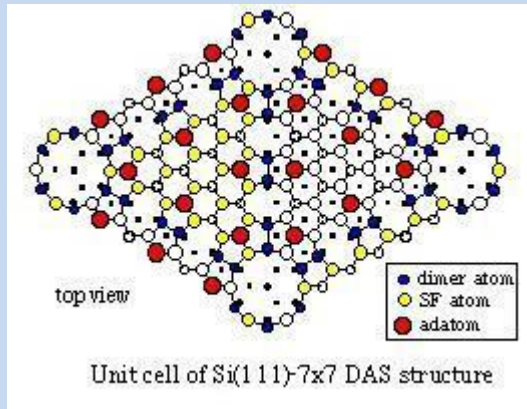
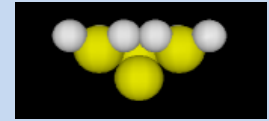
実験現場での様々なニーズにお応えします

- 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氣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
- 半導体薄膜の電氣的性質を調べたい

Si(111)-7x7 DAS構造のSTM画像

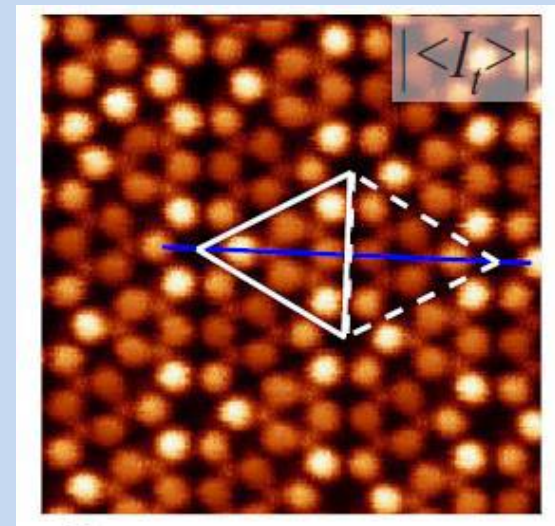


STMシミュレーション
シリコン探針、高さ 4.0 Å



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

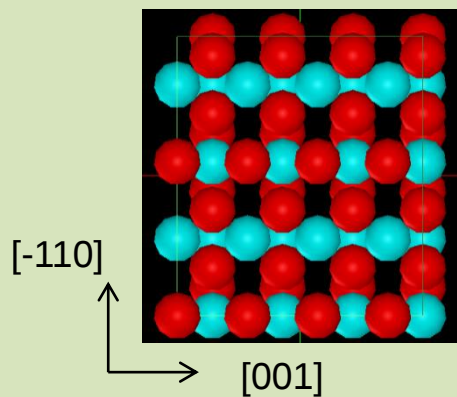
触媒開発でエコロジーに貢献したい

光触媒を環境浄化に役立てたい

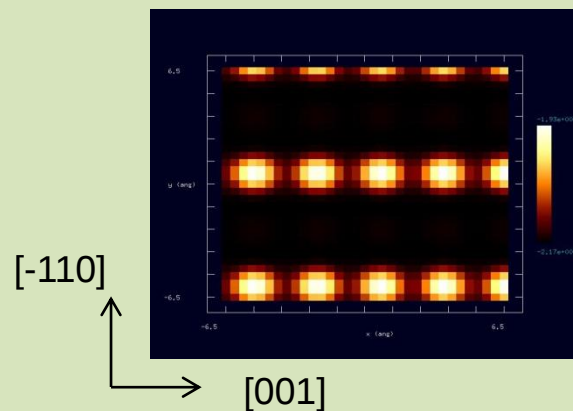


実験現場での様々なニーズにお応えします

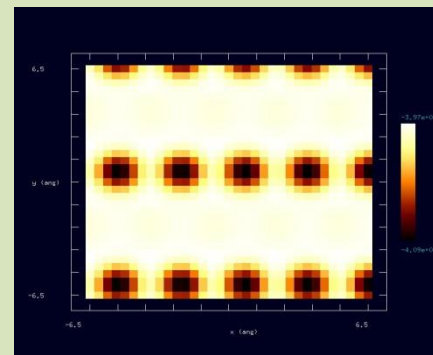
- STM(走査型トンネル顕微鏡)測定によって触媒表面に吸着した分子の様子を調べたい
- 触媒表面の分子が吸着する位置を特定したい
- 触媒表面で単位面積あたりに吸着する分子の個数を求めたい
- 触媒表面に吸着した分子の安定性を調べたい



光触媒TiO₂

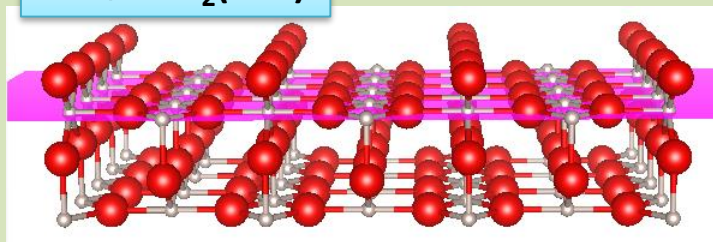


周波数シフトAFM像

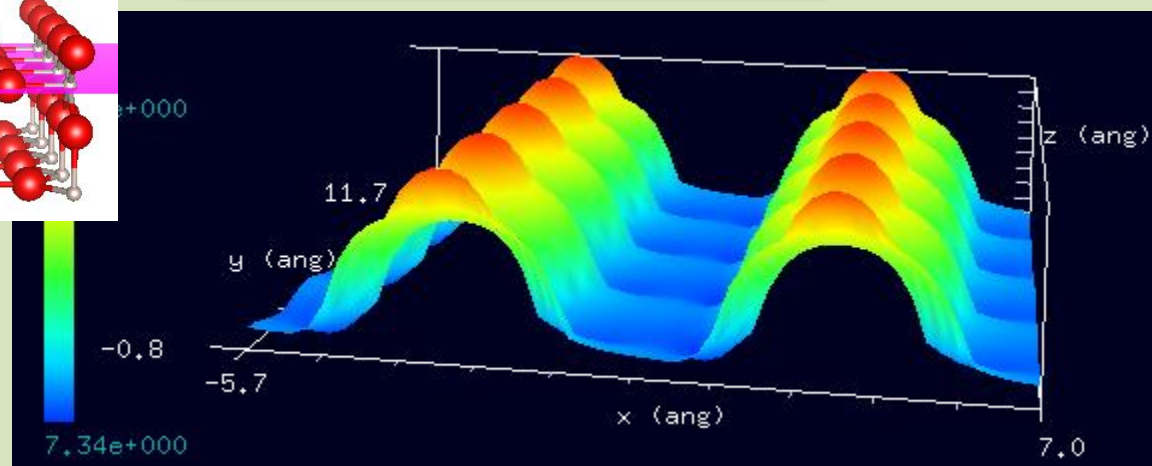


KPFM像

触媒RuO₂(110)

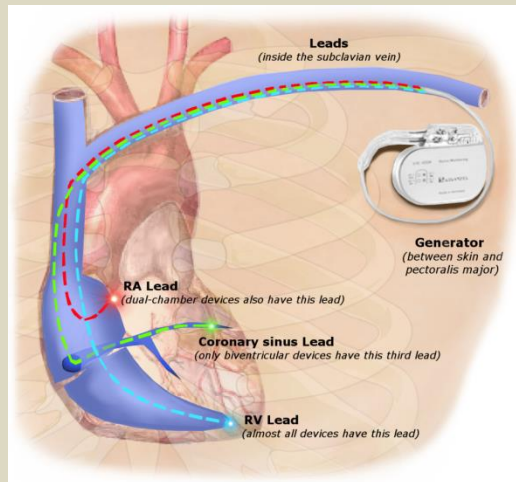


トンネル電流値0.46 nAのSTM像



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

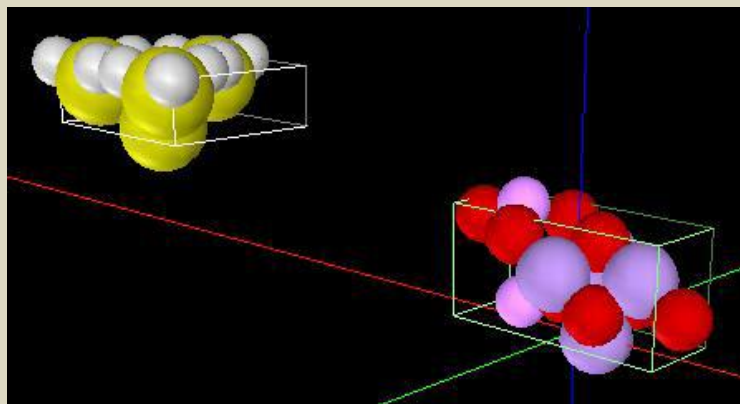
電気自動車の開発に役に立てたい



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

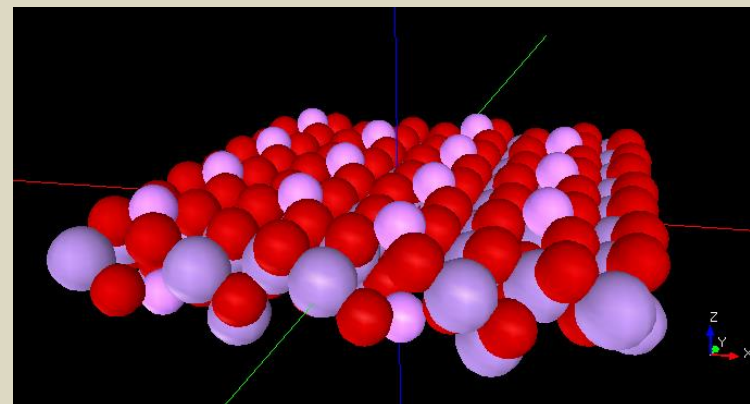
リチウムイオン電池の正極活物質 LiMn_2O_4 粒子のSTM画像



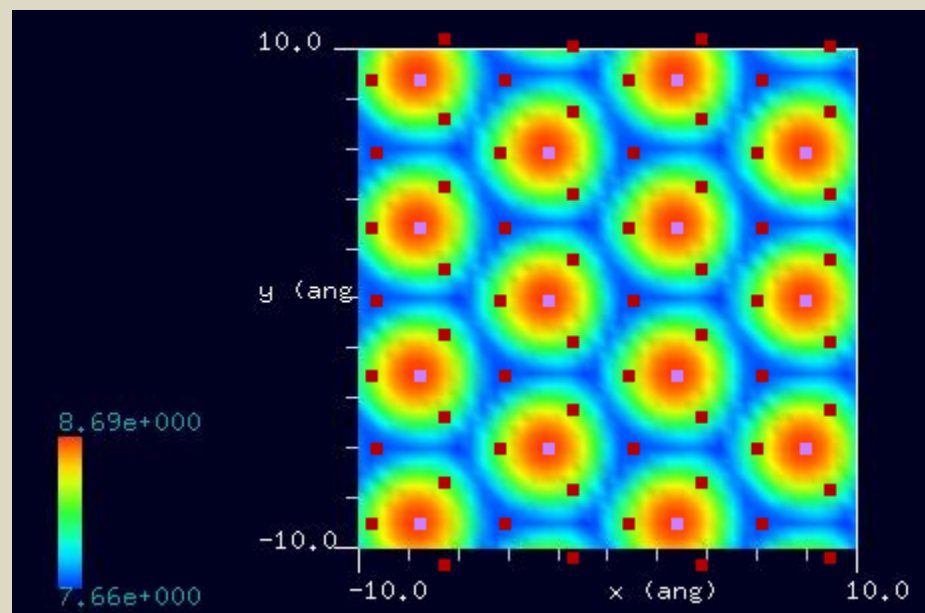
●: 酸素、●: リチウム、
●: マンガン、
●: シリコン、●: 水素

探針: Si_4H_9 探針
試料: LiMn_2O_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「実験—計算」画像比較型・SPM世界標準仕様、粘弾性接触解析 及び DFTB計算元素69種活用による、全ての(有機・無機)化合物の比較型シミュレーション事例です。

●テーマ領域の研究者 実用・開発者はクリックし比較型計算事例を確認下さい。

各研究テーマ

用途区分

バイオ・ソフトマテリアル

食品

製薬

化粧品

バイオ

合成ゴム

医療用品

繊維状高分子

繊維

化学合成

炭素素材

プラスチック

有機半導体

電子デバイス

有機EL

金属・無機半導体

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

触媒

自動車

化学プラント

リチウム電池・透明電極

バッテリー

液晶

SPMシミュレータはPHASE/0のプリプロセッサとして運用

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

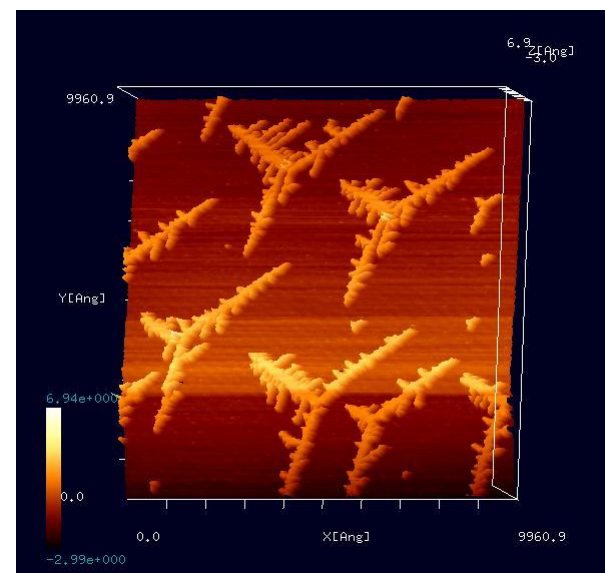


粘弾性接触力学の導入による、バイオ・ソフトマテリアル・シミュレーション(逆問題含む)への挑戦

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

計算時間が長くな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

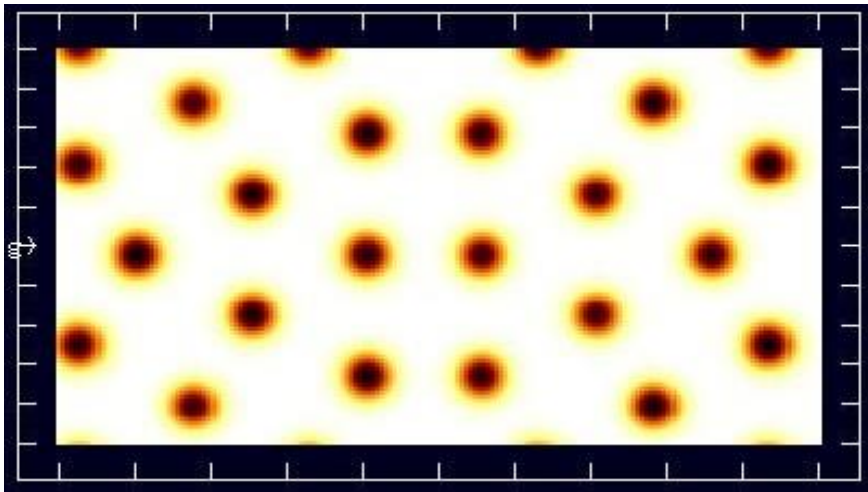
長期的な目標

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>