

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

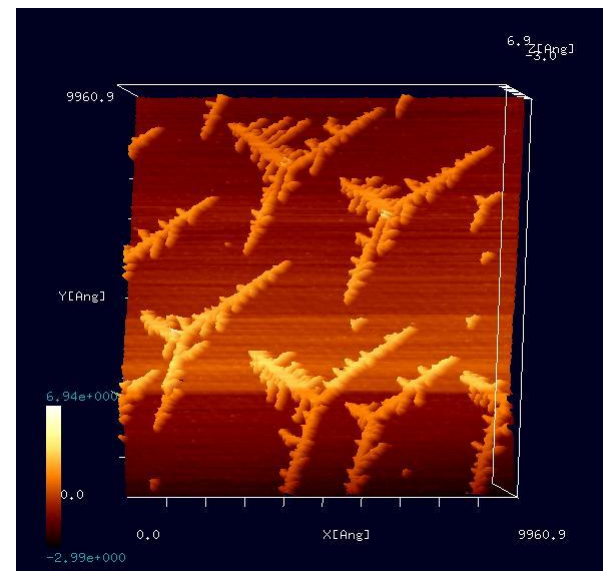


粘弾性接触力学の導入による、バイオ・ソフトマテリアル・シミュレーション(逆問題含む)への挑戦

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

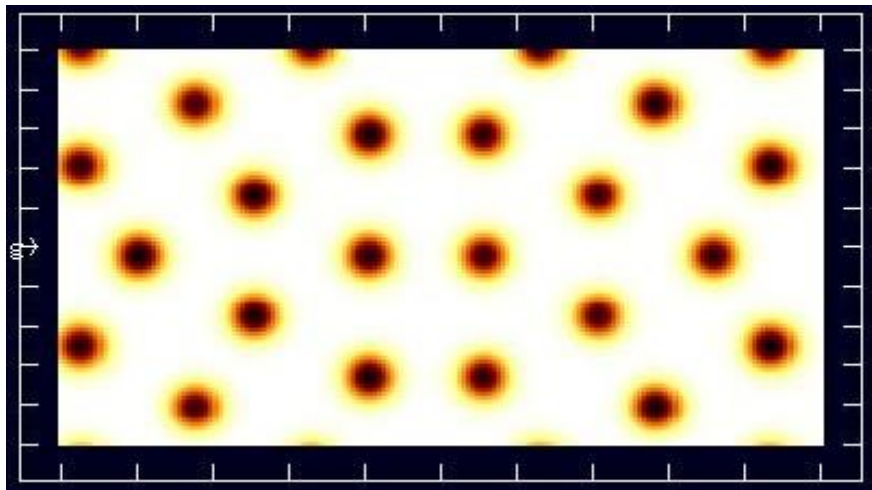
## 長期的な目標

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

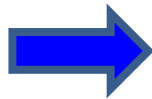
PHASE/0のプリプロセッサとしての利用が予定されています。  
PHASE/0はNIMS(物質材料研究機構)によって開発された、密度汎関数理論に基づいた第一原理分子動力学法計算のためのソフトウェアシステムです。  
SPMシミュレータのDFTBソルバとPHASE/0との連携で、より高速な密度汎関数法計算が期待できます。  
<https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/nsmail-311.pdf>

## 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。(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

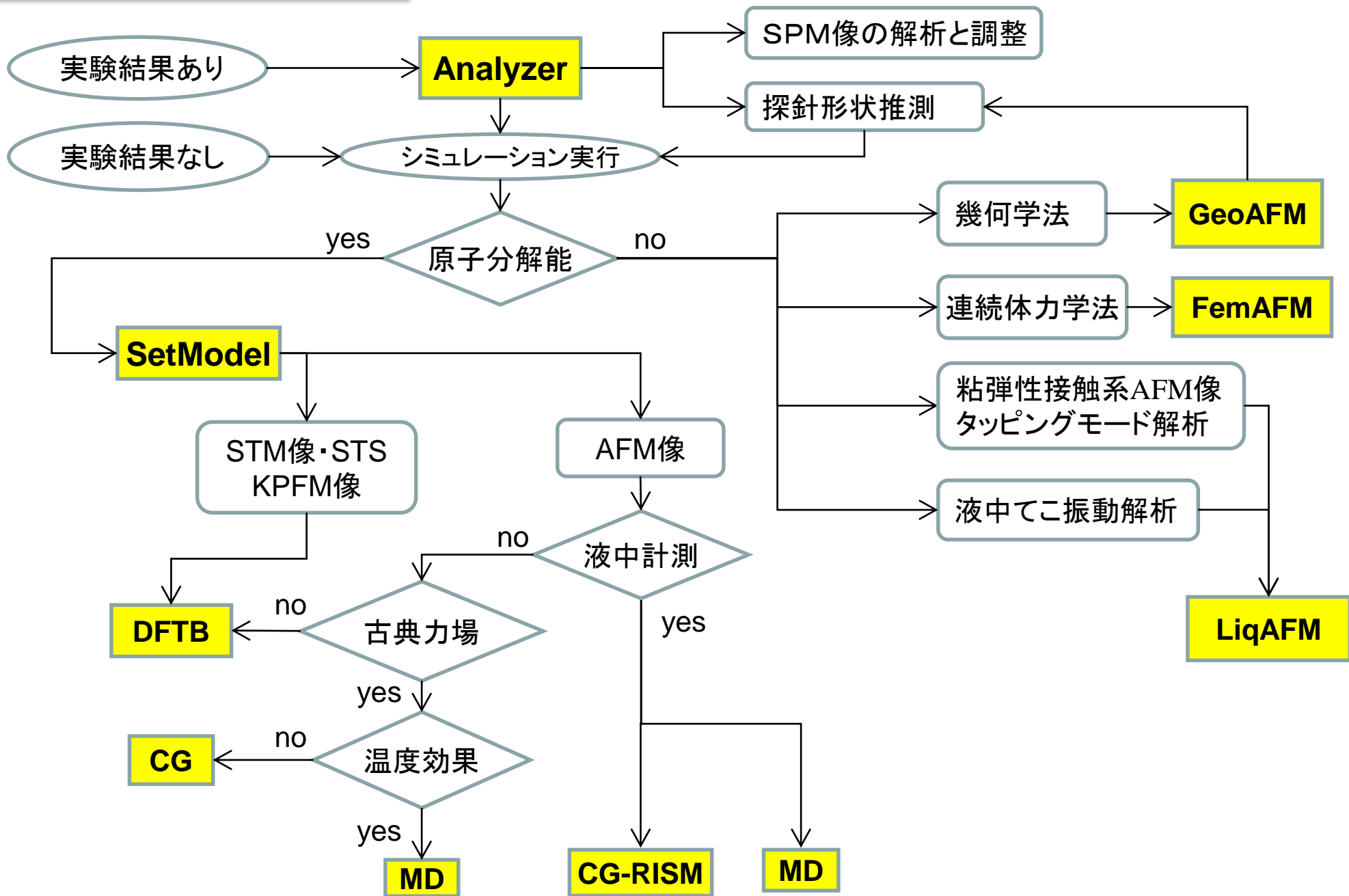
<p>CG 構造最適化AFM像シミュレータ</p>	<p>古典力学法による原子モデルの最適化計算 液中CG-RISM計算</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>・散逸像・周波数シフト像、フォースマップ等を計算</li> <li>・接触高さ、カー一定のコンタクトモード像計算</li> <li>・振幅一定、周波数シフト一定のダイナミックモード像計算</li> <li>・対象(コラーゲン、タンパク質分子)</li> </ul>
<p>MD 分子動力学AFM像シミュレータ</p>	<p>古典力学法による原子モデルの分子動力学計算</p>	<ul style="list-style-type: 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ー像を計算
- ・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

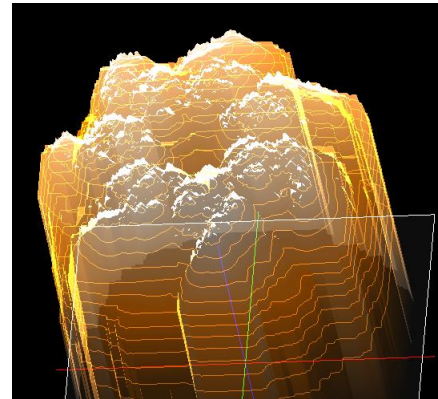
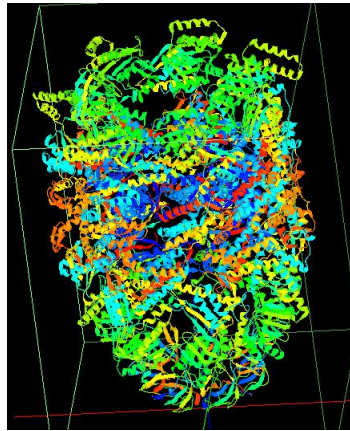
# バイオ・ソフトマテリアル分野でのAFMシミュレーションの展開

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

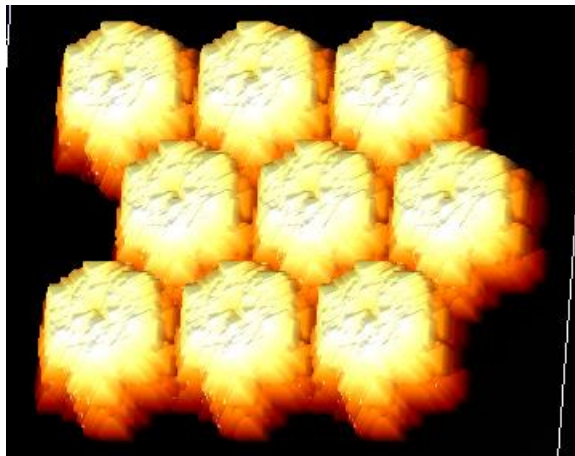
Protein Data Bankで提供される分子構造データに対応しています

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

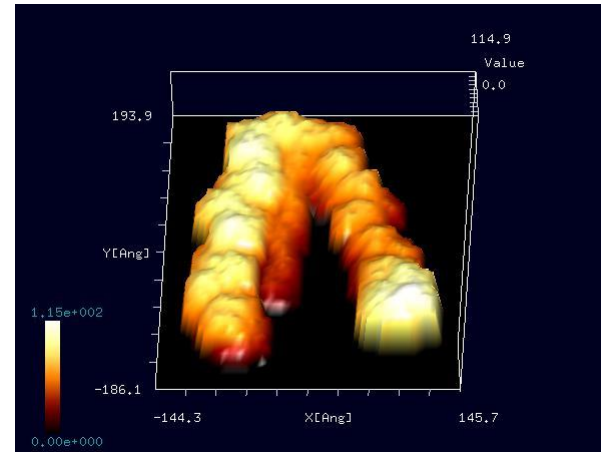
試料表面の凹凸  
形状データ



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

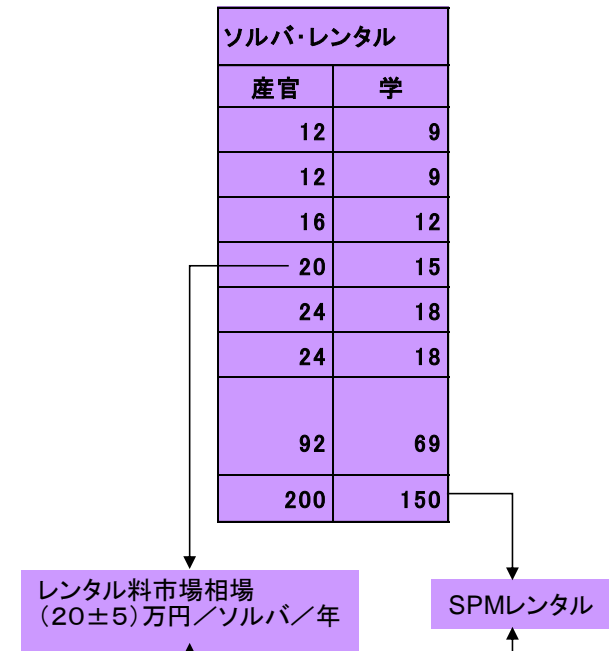
DFTB型: Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素27種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

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 ●	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(マスマリット・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 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(マスマリット・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

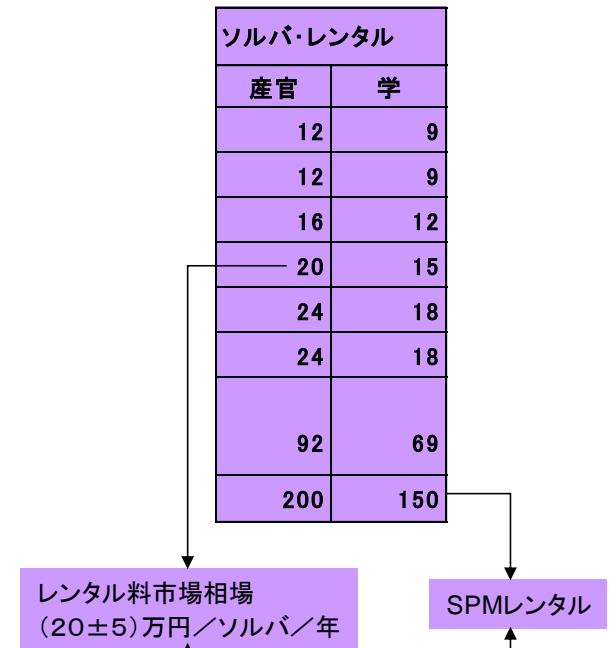
DFTB型 : Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素27種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です

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

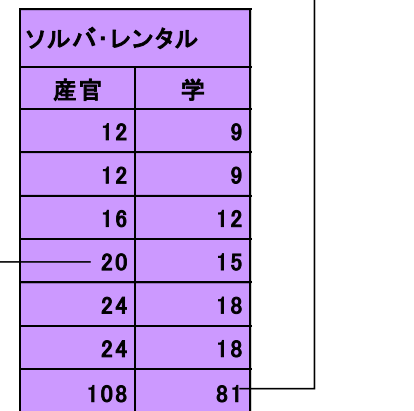
DFTB型 : Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素69種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です

# 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			500万			
学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格(基準値)			342.9万			500万			
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			270万		
学(アカデミック)への特別配慮 160/270			160.1万			270万		
学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格(基準値相当)			160.1万			270万		



## 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>