

# “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

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/0: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/0のプリプロセッサとしても運用可能です

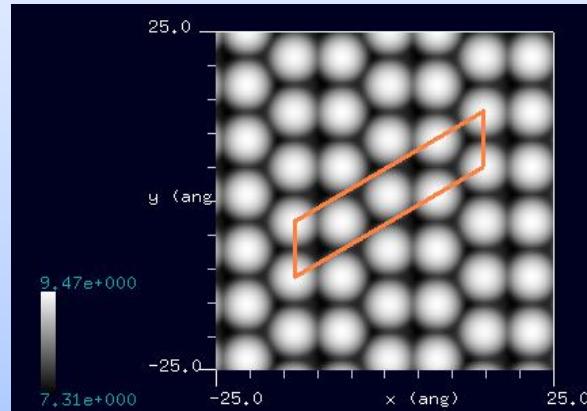
実験画像データの3D処理機能

世界主要SPMメーカーのデータを直接読み込み可能

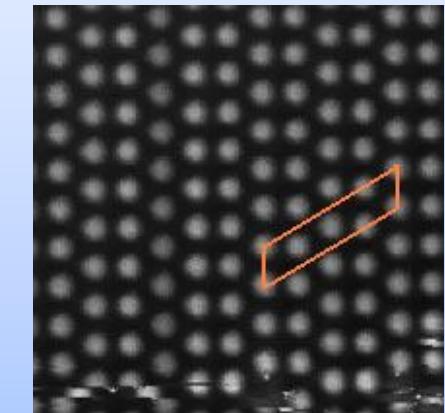
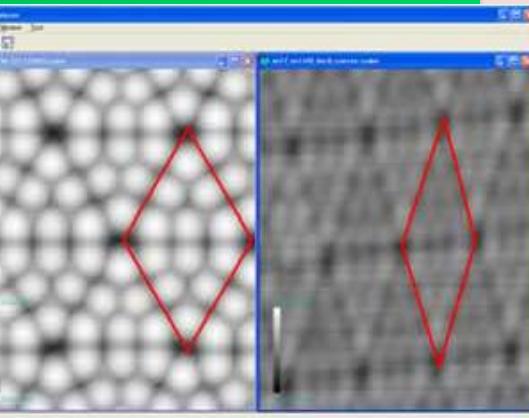
データ画像のデジタル補正機能、探針先端形状の推定機能、  
グラフィック機能全体の強化、etc

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

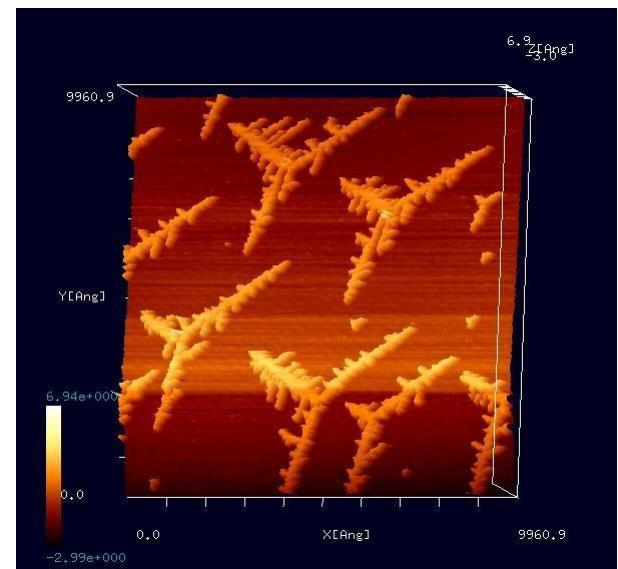
DFTBシミュレーションで69種類の元素パラメータを完備することにより、あらゆる無機・有機化合物のシミュレーションに対応

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

高分子の粘弹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

## 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

ユーザ様に、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

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

DFTB型

バイオ・ソフトマテリアル向け

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。

無機・有機材料向け

## 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

# 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、戦略的コラボと一緒にの方々には、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) 粘弹性接触解析機能組込/DFTB元素27種使用可能!「実験一計算」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>