

産官学 DFTB 計算元素 27 種適用分野のユーザー様へ  
有機化合物系、有機半導体系、無機半導体系等、計算可能分野対象に  
様

平素、世界標準 SPM 開発 IF 開示、皆様には大変にお世話をお掛けしております。

Advanced Algorithm & Systems  
東陽テクニカ

日本表面科学会様、応用物理学会様、167 委員会様、  
東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センター様、他  
シンポジウム様から、計算事例/計算手法、発表要請を頂いています

実践のお試し計算/販売、申込ココ

[https://www.aasri.jp/pub/spm/appform/spmlicapp\\_20160112-1.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/appform/spmlicapp_20160112-1.php)

=====  
DFTB 元素 27 種 (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) が完成し、有機化合物系、有機半導体  
系、無機半導体系、金属系等、以下の材料・試料の STM、STS、AFM、KPFM シミュレ  
ーションが実行可能です。

- =====  
(a)Ge(ゲルマニウム)、Ga(ガリウム)、As(ヒ素)を含む半導体材料  
例えば、GaAs(ガリウムヒ素)、GaN(窒化ガリウム)の、STM、STS シミュレ  
ーションが可能となりました。
- (b)Mg(マグネシウム)、Cu(銅)を含む一般的な金属材料  
例えば、銅の金属基板上の有機半導体の、AFM シミュレーションが可能と  
なりました。
- (c)Ag(銀)、Bi(ビスマス)などの、やや特殊な金属材料  
例えば、Ag 結晶表面上におかれた Bi 原子層は、Rashba 効果を示すことが知  
られていますが、このような系の STM シミュレーションが可能となりました。
- (d)S(硫黄)、F(フッ素)、Cl(塩素)、Br(臭素)などを含む一般的な有機材料、  
および、有機半導体材料例えば、フタロシアニン銅錯体、テトラセン、  
ルブレン、テトラチアフルバレンとその誘導体などを、基板上に置いた  
系について、STM、AFM シミュレーションが可能です。  
トリス(8-キノリノラト)アルミニウム等の有機 EL 材料にも対応しています。
- (e)Na(ナトリウム)を含む試料  
例えば、Au 結晶表面上に、coronene などの有機材料と Na を配置した系の、  
STM シミュレーションが可能となりました。  
これにより、より一層、様々な種類の試料・材料の、STM、STS、AFM、  
KPFM シミュレーションが実行可能な環境が整いました

=====  
DFTB 計算可能元素 27 種 (69 種/H28)の DFTB 計算元素/パラ価格 (開発費) は[S  
PM シミュレータ契約価格] に含まれます。

- ・更に、平成 28 年度中に、下段、増強され、改定価格にて皆様にご案内予定  
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 B, 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

事例/指定 SPM 市場区分 (含む SPM 装置)

[http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/select\\_market\\_areas.pdf](http://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/select_market_areas.pdf)

---

株式会社 Advanced Algorithm & Systems

---

会社URL <https://www.aasri.jp/>

メールアドレス [spm@aasri.jp](mailto:spm@aasri.jp)

[r\\_k@aasri.jp](mailto:r_k@aasri.jp)