

SPMシミュレータの利用が見込める産業分野

1. 化学・ゴム・プラスチック関連分野
2. 繊維関連分野
3. 自動車関連分野
4. エレクトロニクス関連分野
5. 食品医療・その他

AFMシミュレーション(μm オーダー)

バイオ・ソフトマテリアル

製薬

繊維

食品

化粧品

AFMシミュレーション(\AA オーダー)

化学合成

高分子・ゴム

炭素素材

STMシミュレーション(\AA オーダー)

無機半導体製造

有機半導体

金属材料

各種電子デバイス

スピン偏極STMシミュレーション機能(\AA オーダー)の開発が逐次開始予定

ハードディスクをはじめとする磁気デバイス

粘弾性接触解析機能、および、DFTB元素69種類が適用可能なDFTB計算機能を組み込み、[SPM実験画像-シミュレーション画像]の比較を行うための統合化GUIを備えた、SPMシミュレータが、9月30日からリリース開始しました。HP TOP画面 各種お申込ご覧下さい。

弊社のSPMシミュレータでは、特に、DFTB(密度汎関数強結合)法に基づく、量子力学的効果を考慮したソルバが、目玉となっております。これにより、Åオーダーの世界での、[SPM実験画像-シミュレーション画像]比較が手軽に行え、新しい物理的・化学的知見を得るSPMシミュレータをご提供させて頂きます。

- ① 今後は、量子力学的な理論計算方法である密度汎関数強結合(DFTB)法において、69種類のDFTB元素が使えることになり、STM、STS、AFM、KPFMシミュレーションが可能となり、事実上あらゆる種類の無機・有機化合物のシミュレーションが可能と成ります。

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/case_examples_ELEC_DFTB.pdf

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_presentation_20160624.pdf

- ② 一方、SPM実験装置に、粘弾性接触解析機能、および、69種類のDFTB元素がDFTB計算されますと、あらゆる種類の無機・有機化合物のSPM実験の効果的データ解析が、様々な産業分野において、実現され、SPM実験のデータ解析可能、となり、SPM実験装置ユーザにおかれましては、[SPM実験画像-シミュレーション画像]比較が、簡単に実行できる環境が整うこととなります。

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/SPM_20160803.pdf

DFTB計算元素69種完成後、SPMシミュレーション利用が見込まれる市場分野は

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/industry_sector.pdf

事実上あらゆる種類の無機・有機化合物を扱う、バイオ・ソフトマテリアル、製薬、繊維、食品、化学合成 高分子・ゴム、炭素素材、無機半導体製造、有機半導体、金属材料、各種電子デバイス等の様々な分野となりますが、「粘弾性接触解析機能、および、69種類の元素が適用可能なDFTB計算機能を組み込んだSPMシミュレータ」の活用が見込まれる訳ですが、SPMユーザー各位とのコラボ、共同で学会発表等を行えれば誠に幸運と考えております。

- ③ 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、その他各種のシンポジウム様から、SPMシミュレータ計算事例に関する発表/展示の要請を Advanced Algorithm &

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/spm_case_examples.pdf

Systemsは頂いておりますが、SPM「計算課題」お持ちの、実際の研究に携わるSPMユーザー各位様の自発的ご参加による、発表・講演が実現されましたら、弊社開発者一同は嬉しい限りです。

- ・上記研究会のオルガナイザーをされている先生方
- ・産・官・学の分野でのSPMユーザであり、あらゆる種類の無機・有機化合物のシミュレーションに興味をお持ちの方
- ・弊社のSPMシミュレータ普及ビジネスに関してコラボレーションが可能な方
- ・Advanced Algorithm & Systemsも計算結果発表に参加の機会に恵まれましたら、誠に有難く存じます。
- ・更には、自発的に、発表・講演に参加される方々に、[SPM実験画像-シミュレーション画像]比較を可能とする統合化されたGUIをご利用頂きます。

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/SPM_20160803.pdf

④PHASE/0のプリプロセッサとしてのSPMシミュレータの連携活用、ご案内

今後、東北大学 原子分子材料科学高等研究機構 特任教授 塚田捷先生 と物質・材料研究機構 大野隆央先生との間で検討されていく事が決まりました。

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。詳しくは、以下のホームページをご参照ください。

<https://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/event/event.php?id=77>

もともと、SPMシミュレータには、DFTB(密度汎関数法に基づく強結合法)ソルバが含まれています。このDFTBソルバによって、あらかじめ、いくつかの物理量を近似的に計算し、その結果をデータ変換して、PHASE/0システムの入力データとすることにより、PHASE/0の計算の高速化・高機能化が期待できます。詳しくは、以下のホームページをご参照ください。

<https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/nsmail-311.pdf>

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_presentation_20160624.pdf

SPMシミュレータとPHASE/0との連携により、具体的には、以下の相乗効果が生まれると考えられます。

PHASE/0のプリプロセッサとしてSPMシミュレータを使用することにより、PHASE/0の計算時間を短縮することが可能です。これにより、スーパーコンピュータの利用時間を短縮することができます。

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