

## ダイジェスト版 世界初、SPM世界標準仕様シミュレータ、ユーザ各位とのコラボ拠点、ご案内

SPM開発でお世話になりました先生方・ユーザー様各位  
SPM活用、戦略的助走期間、必要の初心者ユーザー様各位  
配信、齟齬は、即時除去致します。

平素より皆様にはお世話になっております。

### Advanced Algorithm & Systems

#### ダイジェスト版 SPMシミュレーション需要分布 及び 現実的コラボ拠点

SPMシミュレータ・構成ソルバ/計算機能出力RANGEを「テーマ領域」としSPMシミュレーション需要分布を我々は市場として認識出来る。  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ApplicationField.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf)  
図中のバイオ・ソフトマテリアル、繊維状高分子、等が、「テーマ領域」を意味しSPMシミュレーション需要分布、を表示、このクリックより、計算事例をご覧ください。

これら計算事例は、既に200例以上のシミュレーション結果として、以下のホームページで公開しておりますが、それらを「テーマ領域」毎に分類したものです。  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/spm\\_case\\_examples.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/spm_case_examples.pdf)

実験データと、理論的シミュレーション結果とを比較し、新たな物理的知見を得ることを目的とした、世界初、標準仕様ソフトウェアです。

初心者にご案内をいただき、活用開始の自信お持ち頂く溜めの、可視化イメージ  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_prologue.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_prologue.pdf)  
SPMシミュレータの要素技術、ご覧ください  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet.pdf)  
統合化カタログ・SPMインベーター  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog.pdf)

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、

世界初 世界標準仕様・粘弾性接触解析機能(含む逆問題) & DFTB計算元素69種  
活用により、あらゆる(有機・無機)化合物のDFTB計算による、  
STM/STS、AFM、KPFMシミュレーション可能 及び  
▼「初心者」即・短期的に、専門家レベル活用にさせる、初心者ユーザ補助機能具備

[SPM初心者ユーザ補助機能]が、「SPMシミュレータ」と「SPMシミュレータ操作ナビシステム」に、組み込まれ、SPM初心者ユーザを支援します。  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/spm\\_simulator\\_help.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/spm_simulator_help.html)  
<https://www.aasri.jp/pub/spm/mail/mail20161102.html>

加えて、SPM初心者ユーザは即刻・短期間で、自立的に、AASRIへ質問・協議しながらOJT的に、下段、システムを活用頂き、専門家レベル活用実現

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  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM\\_operational\\_procedures\\_p34.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_operational_procedures_p34.pdf)  
「SPMシミュレータ操作ナビシステム」  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM\\_Simulator\\_assistant\\_top.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_assistant_top.htm)  
SPMシミュレータの使い方(説明・解説)  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm\\_howtouse.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm_howtouse.pdf)

#### 価格リスト及びライセンス契約関連内容

●ユーザー様の予算措置事情ございましたら、分割支払、工夫用意、あります。  
ご相談下さい。

Version Up追加、最新、ソルバ/機能・表/価格(据え置き/2016.4公開時点)対応、  
(1)LiqAFM(液中AFMシミュレータ)タッピング機能  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog.pdf#page=65](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog.pdf#page=65)  
(2)macroKPFM(巨視的KPFMシミュレータ)  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog.pdf#page=70](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog.pdf#page=70)  
(3)DFTBバンド構造計算実行手引書  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/usage\\_dftb\\_band.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/usage_dftb_band.pdf)  
(4)DFTBバンド構造計算結果はPHASE/0のプリプロセッサの役割を果たす  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/DFTB\\_BAND\\_PHASE0.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/DFTB_BAND_PHASE0.pdf)

#### SPMライセンス販売方針纏め

- ・初心者向けSPMシミュレータ補助機能完成度(充実度)は塚田先生 NIMS大野先生も、リリース承知、と思われておいでのご様子です。
- ・ソルバ「ばら売り」を追加し、価格には、SPMシミュレータDFTBソルバ用計算パラメータ・データベース構築費用(10%)を、標準元素 H, C, N, O, P, Si の使用料/年は無料の条件、にてDFTBに70% 以外の全ソルバに30%、程度含みます。  
標準元素以外のご使用ご希望のユーザー様にはご使用元素をご指定下さい。  
ご指定元素使用料見積書、を別途申し上げます。
- ・最新SPMソルバ表/機能=販売価格(据え置き/2016.4公開時点) ユーザ様にはご確認下さい
- ・Version Up後の「新規版と旧版」(下取り/価格差)交換方式採用
- ・ご意見頂けましたら(ご相談窓口の要領に添い)特典付きのご提案をさせて頂く用意があります。  
皆様のご意向、ご都合など、お気軽に何でもお申し越し下さい。

ご相談窓口 弊社に質問から購入ご相談までメールを送る際は、「SPMシミュレータ操作ナビシステム」Webページからお願いします。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM\\_operational\\_procedures\\_p34.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_operational_procedures_p34.pdf)  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM\\_Simulator\\_assistant\\_top.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_assistant_top.htm)

質問、ご意見、ご相談、見積書相談、コンサル相談、購入申込、意向に對しまして、

協議の過程で適切なご返事を差し上げ、協議終了結果は「SPMシミュレータ操作ナビシステム」にて保持します

申込（必須内容確認）

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

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

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm\\_howtouse.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm_howtouse.pdf)

統合化カタログ・SPMイノベーター

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog.pdf)

産官学 SPMユーザー様

bcc配信、齟齬は、即時除去致します。

皆様には平素より大変にお世話になっております。

Advanced Algorithm & Systems

世界初、世界標準仕様SPMシミュレータ、

「ユーザ各位との相互補完的コラボ接点（n）」お届けします

次へ進みます。SPMシミュレータ特色から、専門家、経験者、初心者まで対応頂る「ユーザ各位との具体的コラボ接点（n）」をご提案申し上げます。

#### ●「ユーザ各位との現実的コラボ接点（1）」

「初心者の為の参考計算事例検索ページ」から、自分がやってみたいと思っているシミュレーションと類似した計算事例を、選ぶ事で、  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/search\\_examples/first\\_page.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/search_examples/first_page.html)  
<https://www.aasri.jp/pub/spm/mail/mail20170228.html>

その実行画面をユーザ自身のPCから簡単に起動出来、計算実行データの準備・用意、入力作業を不要にさせる、ご提案は、大きな反響を頂いております。

「ユーザお手元のPCですぐに、SPMシミュレータを起動して、画面上のアイコンを2回クリックするだけで、目的のシミュレーション計算が実行できます」を再度下段で、ご納得頂けましたら、嬉しい限りです。

具体的には、以下の手順となります。「初心者のための参考計算事例検索ページ」

▼([https://www.aasri.jp/pub/spm/search\\_examples/first\\_page.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/search_examples/first_page.html))において、「実用・開発者コース(企業)」を選んだとします。

次のページで、「興味のある分野ごとに計算事例を選びたい場合」を選択し、項目「SPMシミュレータ用途機能紹介資料[Part1: 高分子の単分子観察]をクリックしたとします。  
すると、次のページにジャンプします。  
▼[https://www.aasri.jp/pub/spm/search\\_examples/application\\_examples/polymer\\_single\\_molecule/SPM\\_simulator\\_application\\_examples\\_polymer](https://www.aasri.jp/pub/spm/search_examples/application_examples/polymer_single_molecule/SPM_simulator_application_examples_polymer);

このページでは、シミュレーション例と、それに対応する識別番号の表が示されています。

▼シミュレーション例の中から、自分の好みに合ったものを選び、その識別番号を調べます。

お手元のPCの、SPMシミュレータがインストールされたフォルダ内に、

SampleProjectという名のフォルダが収められています。

このSampleProjectフォルダ内に、識別番号の名前のサブフォルダが

保存されています。

その識別番号名のサブフォルダ内に、シミュレーション計算に必要な

すべての入力データが用意されています。

例えば、識別番号が、Analyzer\_ImageProcessing\_003aなら、

フォルダSampleProject/Analyzer/Analyzer\_ImageProcessing/Analyzer\_ImageProcessing\_003a

内に、必要なデータがそろえられています。

このように、「初心者のための参考計算事例検索ページ」をご覧に

なりながら、SPMシミュレータを操作することで、自分がやってみたい

計算事例を、シミュレータで実行できるようになっています。

#### ●「ユーザ各位との現実的コラボ接点（2）」

SPM関連分野の研究者の先生の皆様へ、

私共は、SPMシミュレータで、様々な材料の探針、試料の組み合わせ、様々な条件下でのシミュレーション計算例を蓄積し、これをお客様に、ご提供する活動を行っております。

SPM実験専門家であられる先生方と弊社で「実験—計算」画像比較型SPMシミュレーション手法の検証・評価、を公開実施し、ユーザー様に分析的にご認識頂ければ幸いです。

コラボ期間中はSPMシミュレータは先生方へ無償供与される条件、でSPM実験の主体として参加頂き、「実験—計算」画像比較型SPMシミュレーション計算の過程を弊社と共有頂き、ユーザーに公開し認知を受ける、要領を想定しております。

コラボへの、研究者の先生の皆様にご参加ご検討お願い申し上げます、次第です。

以下にコラボ条件、要領を明示致します。宜しくご検討頂ければ幸いです。

SPMシミュレータ・構成ソルバ/計算機能出力RANGEを「テーマ領域」としSPMシミュレーション需要分布を我々は市場として認識出来る。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ApplicationField.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf)

図中のバイオ・ソフトマテリアル、繊維状高分子、等が、「テーマ領域」を意味しSPMシミュレーション需要分布、を表示、このクリックより、計算事例をご覧頂ます。

これら計算事例は、既に200例以上のシミュレーション結果として、以下のホームページで公開しておりますが、それらを「テーマ領域」毎に分類したものです。

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/spm\\_case\\_examples.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/spm_case_examples.pdf)

実験データと、理論的シミュレーション結果とを比較し、新たな物理的知見を得ることを目的とした、世界初、標準仕様ソフトウェアです。

初心者にはツボをに納得頂き、活用開始の自信お持ち頂く溜めの、可視化イメージ  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_prologue.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_prologue.pdf)  
SPMシミュレータの要素技術、ご覧頂けます  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet.pdf)  
統合化カタログ・SPMイノベーター  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog.pdf)

上段を踏まえて頂き、先生方へ上段コラボレーションのご相談です。  
できましたら、先生のSPMでの実験内容の中から、シミュレーションをやってみたら  
良いのではと思えるテーマを、私どもにご指示、お教え頂けないでしょうか。  
その上で、上記、コラボ実施となります。

先生方皆様から頂いた実験データを元に、私どもは、様々な物理パラメータ値を、  
理論的シミュレーション技術を用いて推定しようと考えております。  
そして、このようにして得られた、実験結果と、理論解析結果をペアにして、  
データベースとして保存し、SPMシミュレータのユーザの皆様へ開示・有効活用  
頂ければと考えております。

実験結果からのパラメータ値推定には、新たなソフトウェアが必要かもしれません。  
先生方からご提供された実験データの内容を精査して、如何なパラメータ値逆算  
のためのソフトウェアを開発すべきか、判断する必要があります。  
先生の皆様から、「この物理パラメータを推定してほしい」といった、お声を頂  
きましたら、ソフトウェア開発は、さらに進めやすくなります。

実験データからの物理パラメータの逆算には、パラメータ最適化技術、フィッテ  
ィング技術等が必要で、実験と理論の両方の寄与が求められます。

いわば、SPMに関する、実験とシミュレーションの、コラボレーションへの参加  
ご検討のお願いの本旨です。  
私どものシミュレーション結果は、全て先生にお渡し致します。私どものシミュ  
レーション技術を、先生のご自身の研究に役立たせて頂ければと考えております。

さらには、先生と私どもとの間のコラボレーション期間はSPMシミュレータを無償  
でお使い頂くものとして、以降の活用は、先生方のご意向に添わせて頂ければと  
考えております。お気軽にご意向お申し越し下さい。特典ご提案用意あります。

SPMシミュレータは、実験データと、理論的シミュレーション結果とを比較し、  
実験・シミュレーション画像比較型計算機能への新たな物理的知見を得ながら  
検証を致したいと思う次第です。

私どもは、ソフトウェアメーカーとして、SPMシミュレータの開発を続けて  
きましたが、実際のSPM実験に関する知識・ノウハウに欠けております。  
我々独自で実験データを準備することは不可能で、これまでも大学・公的研究機関・  
企業の研究者の方々からの、実験データのご提供に頼ってきた経緯があります。  
この機会に、SPM実験の専門家の先生との関係を構築することで、  
SPMシミュレータを、より実用的な、ユーザ様に信頼されるソフトに仕上げることが  
できればと考えております。

SPMシミュレータは、以下の8個のソルバの集合体です。  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog.pdf)

- (1) Analyzer : 実験データ画像処理プロセッサ
- (2) GeoAFM : 高速相互予測AFMシミュレータ
- (3) FemAFM : 連続弾性体AFMシミュレータ
- (4) LiqAFM : 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ
- (5) CG, CG-RISM : 構造最適化AFM像シミュレータ
- (6) MD : 分子動力学AFM像シミュレータ
- (7) DFTB : 量子論的SPM像シミュレータ
- (8) SetModel : 原子モデリング・ツール

SPMシミュレータでできることは、以下の通りです。

- (a) 高分子・タンパク質・ソフトマテリアルのAFM像をシミュレートする。
- (b) SPM実験画像をデジタル処理する。
- (c) 高分子・タンパク質・ソフトマテリアルのAFM周波数シフト像・位相シフト像  
をシミュレートする。
- (d) 液中環境下での高分子のAFM像をシミュレートする。
- (e) 液中環境下でのカンチレバーの共鳴周波数を調べる。
- (f) AFM周波数シフト、位相シフトの値から、試料材料のヤング率・表面張力を推  
定する逆問題を調べる。
- (g) タンパク質・有機化合物に探針を押し付けた際のフォースカーブを求める。
- (h) 有機化合物をAFM観察した際の、分子構造の緩和による変形を見積もる。
- (i) オングストローム・オーダーでのSTM像をシミュレーションする。
- (j) 金属基板上に置かれた有機半導体のSTM, AFM像をシミュレートする。
- (k) 様々な無機・有機材料のバンド構造を調べる。

上記以外にも、SPMシミュレータは様々な機能を持っております。

私どもは、高分子・ソフトマテリアル関連のAFM像シミュレーション技術に、  
力を注いできました。  
また、分子動力学法による分子構造の緩和計算、密度汎関数法による量子力学的  
計算に、強みを持っております。  
量子力学的密度汎関数法による計算では、69種類の元素パラメータを  
ご用意しました。従って、ほぼ、あらゆる無機・有機材料に対応できます。

さらには、DFTB : 量子論的SPM像シミュレータでは、STM, AFM像だけでなく、  
結晶材料のバンド構造を計算する機能を持っております。  
密度汎関数法を採用することにより、第一原理計算より高速で、  
シミュレーション可能です。  
計算結果も信頼できるレベルの近似となっております。  
3次元結晶だけでなく、2次元材料のバンド構造も計算可能です。

SPMシミュレータの入手お申し込みは以下よりお願いします。

ご相談窓口 弊社に質問から購入ご相談までメールを送る際は、  
「SPMシミュレータ操作ナビシステム」Webページからお願いします。  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM\\_operational\\_procedures\\_p34.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_operational_procedures_p34.pdf)  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM\\_Simulator\\_assistant\\_top.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_assistant_top.htm)  
質問、ご意見、ご相談、見積書相談、コンサル相談、購入申込、意向に対し  
まして、協議の過程で適切なご返事を差し上げ、協議終了結果は  
「SPMシミュレータ操作ナビシステム」にて保持します

申込 (必須内容確認)

[http://www.aasri.jp/pub/spm/appform/spmlicapp\\_20160112-1.php](http://www.aasri.jp/pub/spm/appform/spmlicapp_20160112-1.php)  
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  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm\\_howtouse.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/spm_howtouse.pdf)  
統合化カタログ・SPMイノベーター  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog.pdf)

SPMに関する、実験とシミュレーションの、コラボレーションへ主体的ご参加  
お考え頂ければ幸いです。  
以上、よろしくお願い申し上げます。

株式会社Advanced Algorithm & Systems

<https://www.aasri.jp>

〒150-0013

東京都渋谷区恵比寿1-13-6恵比寿ISビル7F

TEL: 03-3447-5501

FAX: 03-3447-4100

「ユーザ各位との現実的コラボ接続 (3)」

ユーザ様の「SPM」計算課題/モデリング構築ご支援・共有化、へ向けて  
ユーザ様論文にアクセスして「SPM」計算課題をご提案します。  
個人情報保護 企業秘密保護 尊重最優先姿勢

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM\\_operational\\_procedures\\_p34.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/SPM_operational_procedures_p34.pdf)

●「ユーザ各位との現実的コラボ接続 (4)」

「実験-シミュレーション」画像比較型シミュレーション手法実現により、  
[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ApplicationField.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf)  
従来の、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が達成されたので、SPM装置据付現場・SPM実験  
担当者の実験画像精度を向上させようの条件が出た。

及び SPM実験装置メーカー、販売代理店、様等、SPMシミュレータを同梱  
(バンドル出荷) 供給側に携わる方々には、「実験-シミュレーション」  
画像比較型シミュレーション手法に添う、実験画像作成ソフト使用への  
ご認識をお願い出来ましたら誠に嬉しい限りです。

1 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シミュレータは同一のプラットフォーム上で

「実験-シミュレーション」画像比較計算手法、が実現出来たので、

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_p9.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_p9.pdf)

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が達成されました。

2 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  
フォーム上で実現出来たので、「実験-シミュレーション」画像比較型・  
(検討) 画像を出力できます。

実験担当者としてシミュレーション担当者はこれ等比較画像情報の現実的

歩み寄り限界を見定め実験画像精度向上を目指して下さい

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_uc.pdf#page=33](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_uc.pdf#page=33)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_uc.pdf#page=32](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_uc.pdf#page=32)

3 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：AFMによる、原子・分子を寄せ集めて、原子の移動、配置

させ、ナノ構造体を組み立てる

URL TOPページ 研究課題 メクラ 明ける

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM\\_ImagePamphlet\\_uc.pdf#page=31](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ImagePamphlet_uc.pdf#page=31)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated\\_catalog\\_pi.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_pi.pdf)

●「ユーザ各位との現実的コラボ接続 (5)」

PHASE/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、助走開始  
ご案内

DFTBバンド構造計算結果はPHASE/0のプリプロセッサの役割を果たす

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/DFTB\\_BAND\\_PHASE0.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/DFTB_BAND_PHASE0.pdf)

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。

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。

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。

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

<https://azuma.nims.go.jp/events/semi2015/semi20160119>

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/test/actual-calc-comparison-commentary.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。

現時点で、SPMシミュレータのDFTBソルバが取り扱える元素は、以下の27種となっており、  
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  
これにより、無機・有機化合物、無機・有機半導体、金属等、様々な物質を調べることが可能となりました。  
幅広い分野の方々に、STM、STS、AFM、KPFMシミュレーションをして頂ける環境が整いつつあります。  
此れによるDFTB計算増加数だけPHASE/0に入力する事でPHASE/0計算数を増加させる、効果があります。

DFTBの必要とするシミュレーション計算時間は、おおよそ以下の通りとなっております。

STMシミュレーション：原子数140個程度で約9分  
AFMシミュレーション：原子数140個程度で約170分  
KPFMシミュレーション：原子数130個程度で約440分  
なお、AFM・KPFMのシミュレーション計算時間を短縮するためのバージョンアップ作業が現在進行中で、

今年の9月頃には、大幅な改善が見込まれています。

DFTBに使用される原子間相互作用パラメータの開発費は、SPMシミュレータ契約価格に含まれます。

更には、購入時には、SPMシミュレータに同梱支給（業界では、AA&Sのみ可能と自負致します）が販売条件です。

ご注意

- ・原子間相互作用パラメータには暗号化処理が施され、未使用時には暗号顕在化状態にあります。ご注意ください

さらに、平成28年度中に、DFTBソルバの取り扱える元素として、以下の42種類の元素が加わります。

(合計で、69種類の元素が使用可能となります。)

これにより、平成28年度ほぼあらゆる種類の元素化合物がシミュレーション計算可能となりました。

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 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 Um

Dear SPM (Scanning Probe Microscope) users:

We are very happy to inform you that we have just started a new sales promotion campaign for the SPM simulator. The SPM simulator is a set of various theoretical simulators that examine SPM images with numerical calculations.

We collect detailed information about the SPM simulator in the following web page. Please notify the SPM Simulator Price List on this page:

[https://www.aasri.jp/pub/spm/en/about\\_spm\\_eng.html](https://www.aasri.jp/pub/spm/en/about_spm_eng.html)

We offer you concrete examples of numerical simulations performed with the SPM simulator in the following web page:

[https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/CaseExamplesofCalculation\\_eng.pdf](https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/CaseExamplesofCalculation_eng.pdf)

We prepare a navigation system with which you can learn how to use the SPM simulator in the following web page:

[https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant\\_eng/SPM\\_Simulator\\_assistant\\_top.htm](https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant_eng/SPM_Simulator_assistant_top.htm)