

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

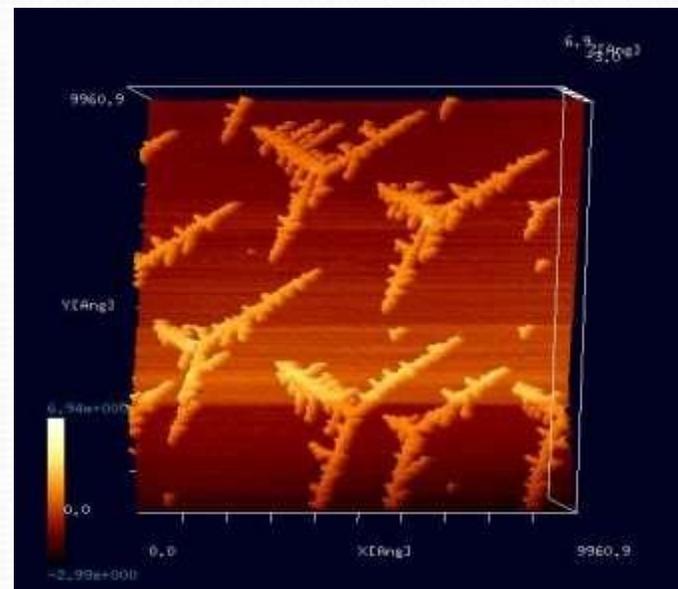
実験画像データの3D処理機能
世界主要STM装置メーカーのデータ出力形式を
直接読み込み可能
データ画像のデジタル補正機能、探針先端形状の推定機能、グラフィック機能全体の強化、etc



同一のウィンドウ上で、理論的シミュレーション結果と実験画像データを比較
ユーザー自身の目でモデル、パラメータの妥当性を確認可能
新たな物理的知見を得ることが期待できる

[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させたもの)

S. Ogura et al., Phys. Rev. B **73**, 125442 (2006); S. Ogura and K. Fukutani, J. Phys.: Condens. Matter **21** (2009)474210.]



SPMシミュレータソルバー全体像

実用開発者向き

研究者向き

ソルバー	機能	特徴
Analyzer	実験データの画像処理プロセッサ	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
SetModel	試料と探針の原子モデル作成	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
GeoAFM	幾何学法交互予測AFMシミュレーション	像解像度は原子尺度ではなく、メノ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
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、メノ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。
LiqAFM (tapping)	液中カンチレバー振動解析 粘弾性凝着系AFMシミュレータ	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。
CG	構造最適化AFMシミュレータ	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
MD	分子動力学AFMシミュレータ	古典力学法による原子モデルの分子動力学計算
DFTB	量子力学的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

Analyzer

実験データ画像
処理プロセッサ

- SPMメーカー各社の実験装置から出力される実験データの直接読み込み
- 探針形状予測と探針形状効果補正
- 実験・シミュレーションデータ画像の比較

SetModel

原子モデリングツール

- シミュレーションの前処理
- 試料・探針の原子構造モデル(形状データ)を作成

古典論

GeoAFM

高速相互予測
AFMシミュレータ

- ナノ構造半導体デバイス、(生体)高分子化合物
- 像解像度は原子尺度ではなく、メゾからマクロスケール

FemAFM

連続弾性体AFM
シミュレータ

- ナノ構造半導体デバイス、(生体)高分子化合物
- 像解像度はメゾからマクロスケール
- 試料および探針の弾性変形を考慮

LiqAFM

液中ソフトマテリア
ルAFMシミュレータ

- 高分子化合物・生体分子
- 液中のカンチレバー振動解析
- 粘弾性凝着系のタッピングモードシミュレーション

CG

構造最適化AFM
像シミュレータ

- 有機低分子・無機物質
- 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

MD

分子動力学AFM
像シミュレータ

- 有機低分子・無機物質
- 古典力学法による原子モデルの分子動力学計算

量子論

DFTB

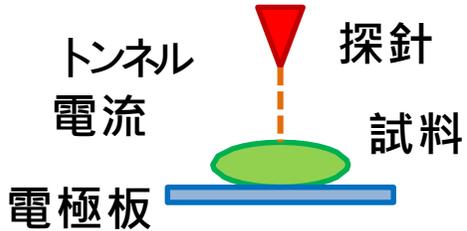
量子論的SPM像
シミュレータ

- ミクロな原子・分子レベルでのSTM/STS, AFM, KPFM
- 量子力学計算による探針力とトンネル電流の計算

用語解説

STM (Scanning Tunneling Microscope): 走査型トンネル顕微鏡

半導体物性



探針・試料間に電圧をかけてトンネル電流を発生させる
トンネル電流値は探針・試料間の距離に敏感に反応する
→トンネル電流値から距離の情報が得られる

STS (Scanning Tunneling Spectroscopy): 走査型トンネル分光法

物質表面の原子・電子状態を観察

AFM (Atomic Force Microscope): 原子間力顕微鏡

ソフトマテリアル・バイオ

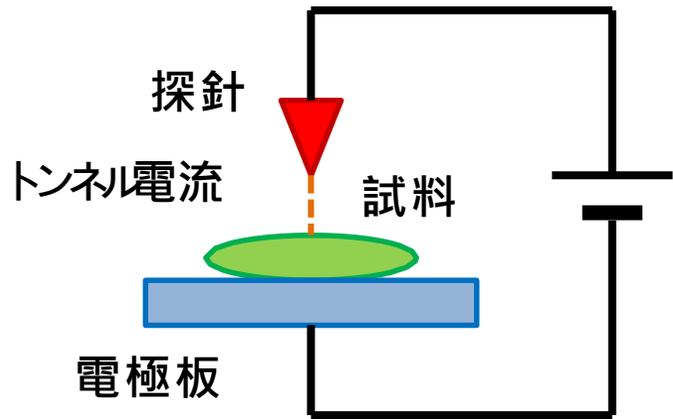


探針・試料間に働くファンデルワールス力(原子間力)の大きさによって、カンチレバーはバネのように曲がる
→カンチレバーのたわみ具合で、原子間力の大きさの情報が得られる

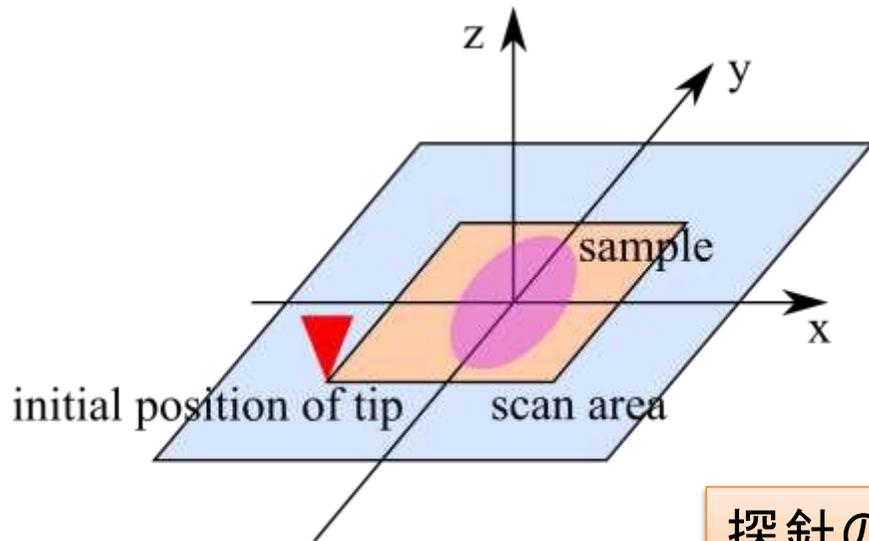
KPFM (Kelvin Probe Force Microscope): ケルビンプローブフォース顕微鏡

物質表面の仕事関数を観察

走査型トンネル顕微鏡(STM)の仕組み



- 探針・電極間に電圧を印可する
- 探針・試料表面間の距離を数 Å とする
- 探針・試料表面間にトンネル電流が発生する
- 試料表面を探針で走査する



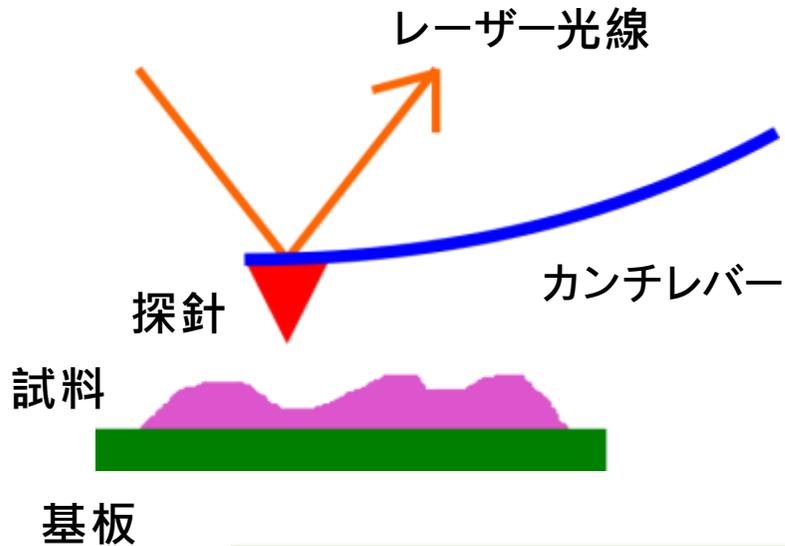
[高さ一定モード]

探針の基板からの高さを固定しながら試料表面を走査し、トンネル電流の値によって、試料表面の凹凸を推定する
[トンネル電流値一定モード]

トンネル電流値が一定となるように、探針の高さを調節しながら試料表面を走査し、探針の高さで試料表面の凹凸を推定する

探針の位置の調節はピエゾ素子等を使って行われ、Åオーダーの精度が可能

原子間力顕微鏡(AFM)の仕組み



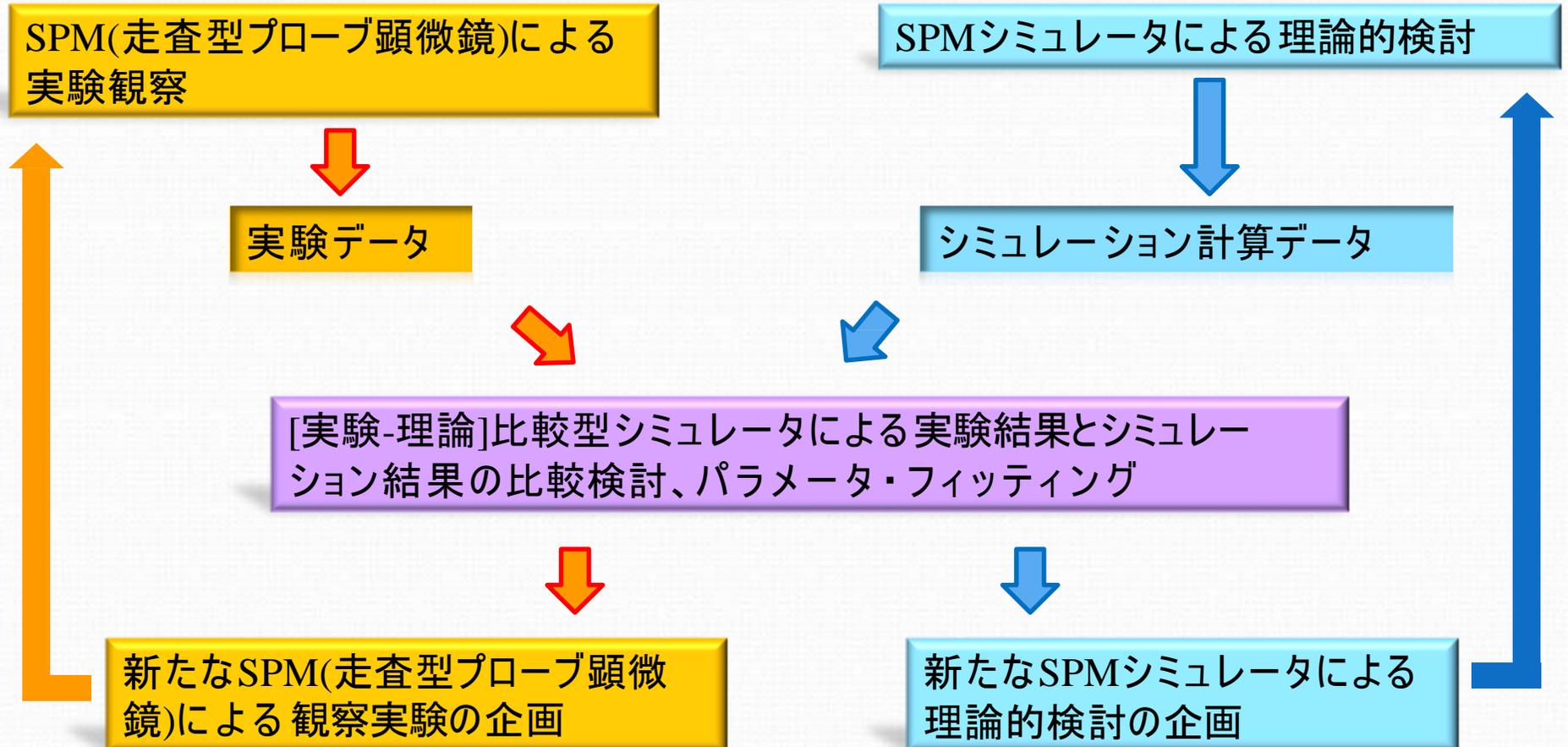
- カンチレバーの先端に探針を取り付ける
- 探針を試料表面に接近させる
 - 探針・試料表面間に原子間力(ファンデルワールス力)が働く
 - カンチレバーのたわみ具合で、試料表面の凹凸を推定する

カンチレバーのたわみ具合は、カンチレバーの先端にレーザー光線を照射し、反射されたレーザー光線を検出することで測定する
→数Åオーダーの精度が可能

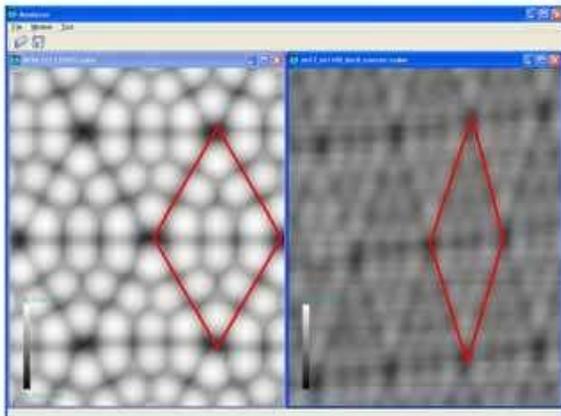
トンネル電流を測定に使わないので、絶縁体でも測定可能
→ソフトマテリアル・バイオ関連物質の計測に適している

[実測-計算]比較型SPM シミュレーターは、これまで別々に取り扱われてきた実験データと理論シミュレーションデータを統一的に扱います

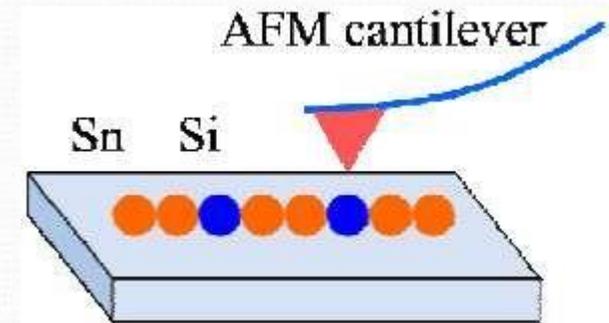
これにより、実験とシミュレーションの相互が補完し合うサイクルを確立することが可能となります



- メーカーの枠を超えたSPM実験データの統一的処理
異なるメーカーのSPM実験装置の出力データ、および、シミュレーション結果を、同一のプラットフォーム上で比較・加工処理可能
 - ➡ 原子・分子の(XYZ)位置座標をテキストデータとして出力
- バイオ・薬学・化学触媒関連分野の研究者の参入を促す 粘弾性を持つ(生体)試料に対する接触力学解析
触媒金属(Pt, Ru等)に対して第一原理計算を適用
 - ➡ 当該分野は、今後、産業上の大きな発展・投資が見込める
- 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：原子・分子を寄せ集めて、ナノ構造体を組み立てる



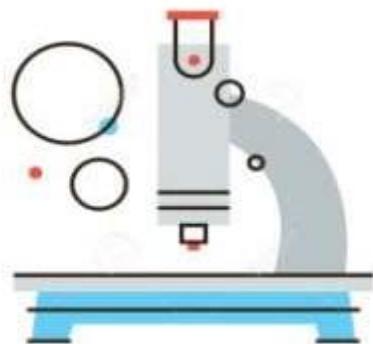
シリコン表面AFM観察に関するシミュレーション画像(左)と実験画像(右)
(実験画像提供：東京大学生産技術研究所福谷研究室)



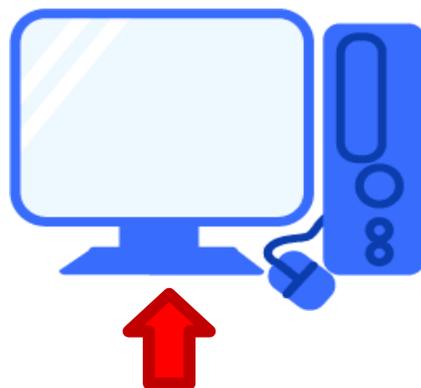
AFMによる、原子の移動、配置、ナノ構造の組み立て

- SPM実験装置をお買い上げの顧客に、SPMシミュレータの実行ファイルを収めたDVD-ROMを同時提供します
- SPM実験装置ユーザーは、すぐに、お手元のWindowsパソコンにSPMシミュレータをインストールして使用できます
- ライセンスもインターネットで簡単に登録できます

- SPMシミュレータを使えば、SPM実験装置で得られた生データを、お手元のWindowsパソコン上でデジタル処理できます
- シミュレーション計算もWindowsパソコン上で簡単操作できます



SPM実験装置



Linux, GPUにも対応しています
(ただし、Linuxにはグラフィックユーザインターフェースが付属していません)

SPM実験装置のすぐそばのPCにSPMシミュレータをインストール

SPIP等の従来のSPM実験画像処理ソフトを使われていた方は、
SPMシミュレータをその代わりに使うことも、
併用することも可能です

画像処理ソフトとして、SPMシミュレータは、SPIP等の従来ソフトにはない機能を提供
します

→ニューラルネットワーク学習による画像補正機能、探針形状推定機能、etc

SPMシミュレータと、SPIP等の従来ソフトを併用することも可能です

→ SPIP等の従来ソフトで実験画像処理

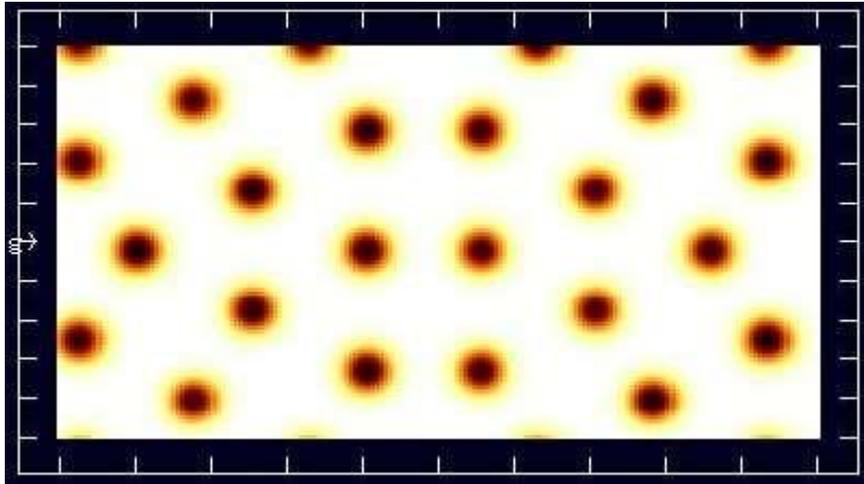
→ SPMシミュレータでシミュレーション計算

というように使い分けることも可能です

SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ

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。



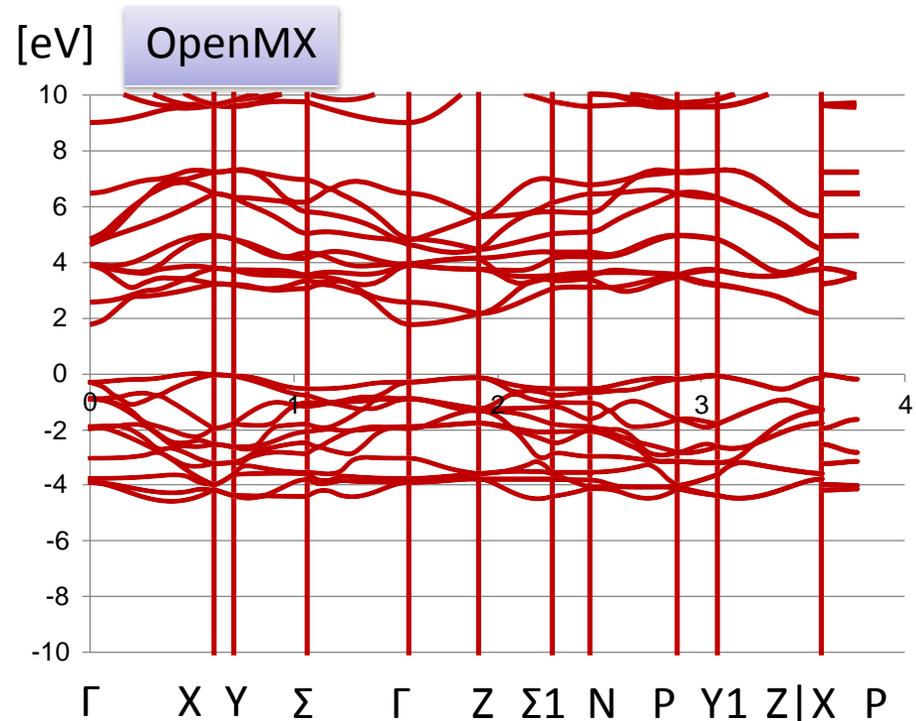
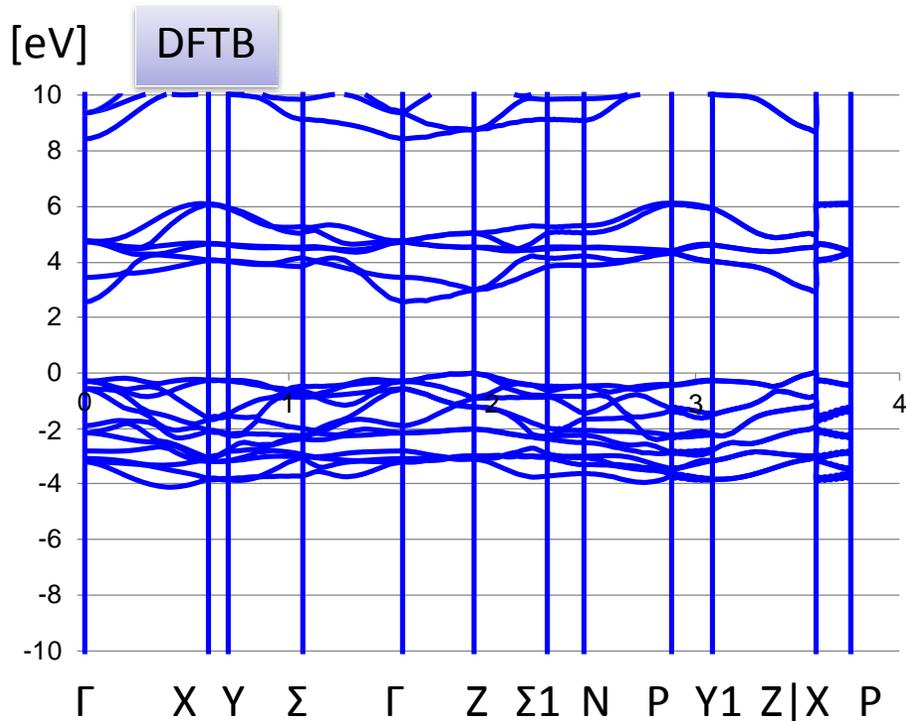
DFTBソルバによる、Si(111)表面
(7×7)DAS構造のSTM(走査型トンネル顕微鏡)画像のシミュレーション結果

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。

DFTBソルバのベンチマークテスト

DFTBソルバとOpenMXで、酸化チタン(TiO_2)のバンド構造を計算した結果の比較



DFTBソルバは、本来、走査型プローブ顕微鏡画像のシミュレーションを行うためのソフトですが、計算途中の過程で密度汎関数法によるバンド構造計算を行います。このDFTBのバンド計算機能と、OpenMXによるバンド計算の結果を比較したのが上の図です。両者は良く一致していることが分かります。(実際に販売されるDFTBソルバには、バンド構造を出力する機能は付与されていません。)

OpenMXは、東京大学物性研究所の尾崎泰助教授が中心となって開発された、フリーの第一原理計算ソフトです。信頼性の高いソフトであることが、広く認められています。

SPMシミュレータの位置づけ

量子力学、分子動力学系代表アプリ：VASP、Gaussian、NAMD、Amber、LAMPSなどの
計算開始前の予備計算としてSPMシミュレータを活用する

	時間かけてでも精度を求めたい	精度はそこそこでも短時間で結果を知りたい
SPMシミュレータ	△	◎
VASP、Gaussianなど	◎	△

研究プロセス初期段階

研究プロセス最終段階

Δt

SPM優位 (短時間で数多くのシミュレーションを行う)

SPM/DFTBは、密度汎関数法に基づく強結合法 (第一原理計算) の採用、で計算時間実績は「1日」程度です。

SPM計算データの予備活用により、VASP等の計算時間大幅削減

VASP等優位 (時間かけて精度を求める)

SPMライセンス、契約体系、ご案内

SPMシミュレータ適用領域

- 化学・ゴム・プラスチック関連分野
- 繊維関連分野
- 金属・セラミックス関連分野
- 自動車関連分野
- エレクトロニクス関連分野
- 光学・情報通信関連分野
- エネルギー関連分野
- 食品医療・その他

計算パラメータのみの発売は致しておりません。ご承知頂ければ幸いです。

価格の弾力的運用ご案内として、レンタル期間を超長期化(7~10年)し、レンタル料を低く抑えるご提案の用意もあります。

DFTB使用元素69[種数]を専門・業態領域特徴に対応させ、計算パラメータを12[種数]、27[種数]、69[種数]、DFTB計算不要なスタンダード型、4区分の価格体系をご案内。

及び、

販売契約以外、取引形態の弾力的運用のご案内、ご参照。

SPMシミュレータ構成ソルバ計算機能Table ー活用・運用を支えるITインフラ付きー

Advanced Algorithm & Systems

Analyzer

SPM実験画像データのデジタル処理プロセッサ

GeoAFM

幾何学情報に基づく高速相互予測AFMシミュレータ

FemAFM

連続弾性体AFMシミュレータ

LiqAFM

液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ

macroKPFM

マクロスケールKPFMシミュレータ

CG

構造最適化AFM像シミュレータ

MD

分子動力学AFM像シミュレータ

DFTB

量子論的SPMシミュレータ

SetModel

原子モデル作成ツール

この資料では、各ソルバでの典型的な使用方法を数例ずつ示しています。これら全体を、一通り目を通していただき、それらの中から、自分の目的に近いシミュレーションをお選びください

ソルバー	特徴	機能
Analyzer 実験データ画像 処理プロセッサ	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。 操作の流れフローチャート	<ul style="list-style-type: none">探針構造推定機能メーカー各社のSPM実験データの読み込み機能画像データの傾斜補正機能etc.
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。 操作の流れフローチャート	<ul style="list-style-type: none">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
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。 操作の流れフローチャート	<ul style="list-style-type: none">試料と探針から計測像を予測する機能計測像と探針から試料形状を予測する機能計測像と試料から探針形状を予測する機能対象（カラーゲン、タンパク質分子）

実用開発者向き

<p>FemAFM 連続弾性体AFMシミュレータ</p>	<p>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。 DLVO理論シミュレーション機能追加予定 操作の流れフローチャート</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応 ・単振動加振・二重加振／多モードに対応 ・カンチレバーの共鳴曲線（真空中、大気中、液中）を描く ・マルチコア並列計算機能 ・対象（コラーゲン、タンパク質分子） ・DLVO理論機能追加により、コロイド溶液中の電気二重層による斥力の効果が見積れる予定
<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。 操作の流れフローチャート1 操作の流れフローチャート2 操作の流れフローチャート3</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応 ・単振動加振・二重加振／多モードに対応 ・カンチレバーの共鳴曲線（真空中、大気中、液中）を描く ・マルチコア並列計算機能 ・対象（コラーゲン、タンパク質分子） ・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)
<p>macroKPFM 巨視的KPFM像シミュレータ</p>	<p>KPFM像シミュレーションを、μmからnm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。 操作の流れフローチャート</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・任意の形状の誘電体を試料として設定可能 ・試料表面に電荷の分布を指定可能 ・任意の位置の電荷を置くことができる ・対象(高分子、トナー粒子)

<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。摩擦顕微鏡シミュレーション機能追加予定。 操作の流れフローチャート</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・散逸像・周波数シフト像、フォースマップ等を計算 ・接触高さ、力一定のコンタクトモード像計算 ・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 ・対象（コラーゲン、タンパク質分子） ・ゴム・高分子等の摩擦顕微鏡画像シミュレーション機能追加予定
<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。 操作の流れフローチャート</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・フォースカーブの計算 ・三次元力場の計算、散逸像・周波数シフト像予測に対応 ・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 ・液中計算に伴う溶媒の分子動力学計算 ・対象（コラーゲン、タンパク質分子）
<p>DFTB 量子論的SPM像 シミュレータ</p>	<p>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。 スピン偏極走査型トンネル顕微鏡シミュレーション機能追加予定。 操作の流れフローチャート</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・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/Oとの連携運用も視野に入れている。(参考資料) ・スピン偏極走査型トンネル顕微鏡シミュレーション機能により、スピントロニクス分野への展開も視野に

SPMシミュレーション計算機能を、使用法・運用法次元で下支えする効果（初心者ユーザ補助機能、**計算実行データ登録済み状態(ユーザ入力不要)から計算開始可能**、64ビット対応、DFTB使用元素69種提供など）を付与させる、ITインフラ

[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、世界初国内外向け新機軸商用ソフトウェア](#)

[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](#)

[SPMシミュレーター情報交換プラットフォーム](#)

(戻るにはブラウザを閉じる)

[初心者にSPMシミュレータの使用法・運用法を短期間の練習で習得させる、普及を推進させる、\[SPM初心者ユーザ補助機能\]、を具備](#)

[初心者のための参考計算例検索ページ](#)

(戻るにはブラウザを閉じる)

[補助機能活用ガイド](#)

(戻るにはブラウザを閉じる)

[SPM（操作型プローブ顕微鏡）シミュレータ/新規計算機能](#)

(戻るにはブラウザを閉じる)

SPMシミュレータは、あらゆるユーザの方のために、ドキュメント類の充実に力を入れています

[SPMシミュレータのチュートリアル、マニュアル、ガイドブック等のドキュメント類は、こちらにまとめられています](#)

[SPMシミュレータ活用ガイド](#)

(戻るにはブラウザを閉じる)

[SPMシミュレータ操作ナビシステムのご紹介](#)

(戻るにはブラウザを閉じる)

[SPMシミュレータ操作ナビシステム](#)

(戻るにはブラウザを閉じる)



SPMシミュレータ操作ナビシステムを使えば、初めての方でも、質問項目に答えていくだけで、シミュレータが簡単にご利用いただけます

[SPMシミュレータの使い方、無料お試し計算のご案内](#)

(戻るにはブラウザを閉じる)

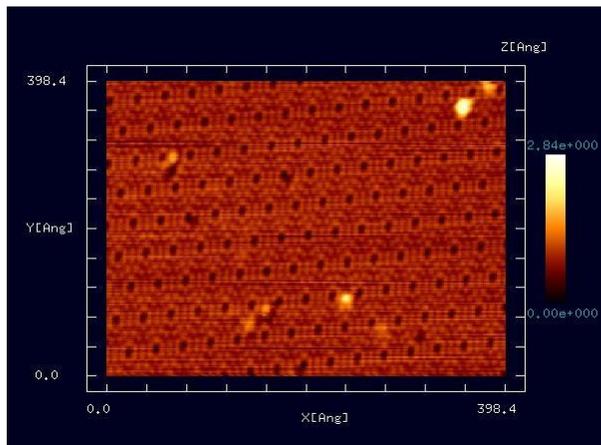
[SPMシミュレータの全体的なコンセプトの説明がこちらにまとめられています](#)

[SPMシミュレータの総合的なパンフレットが、こちらからご覧になれます](#)

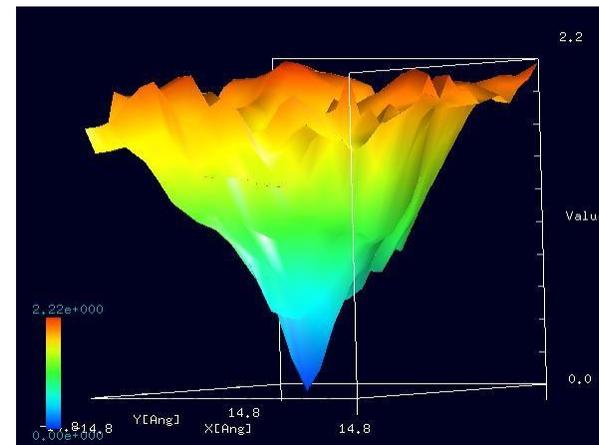
(戻るにはブラウザを閉じる)

探針形状推定・探針影響除去

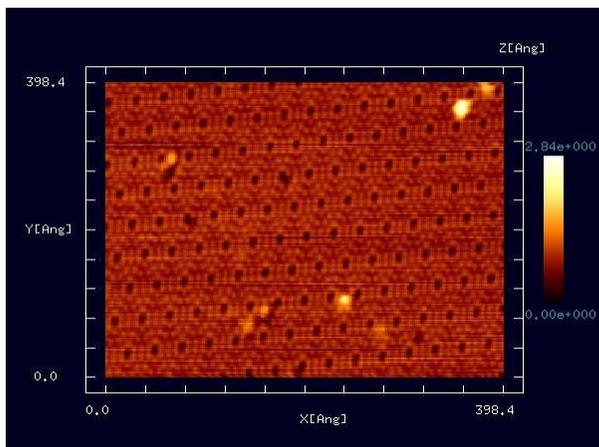
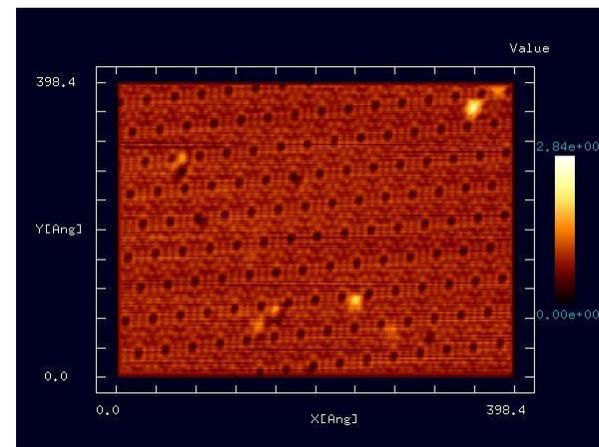
SPM実験画像を元にして、探針形状推定を行い、オリジナルSPM像から探針によって生じたアーティファクトを除去する



探針形状推定



探針形状データ

探針形状データを指定して
探針影響除去

ユーザは、まず、SPM実験をして実験画像データファイルを用意します

実験画像データファイルは、SPM装置から直接出力されたバイナリ形式のファイルで
構いません

Analyzerは主要SPMメーカーのファイル形式をサポートしています



Analyzerで実験画像を読み込みます



Analyzerで探針形状を自動推定します



Analyzerで、探針形状ファイルの情報を元に、オリジナルのSPM実験画
像から、探針の形状によって生じたアーティファクトを除去します

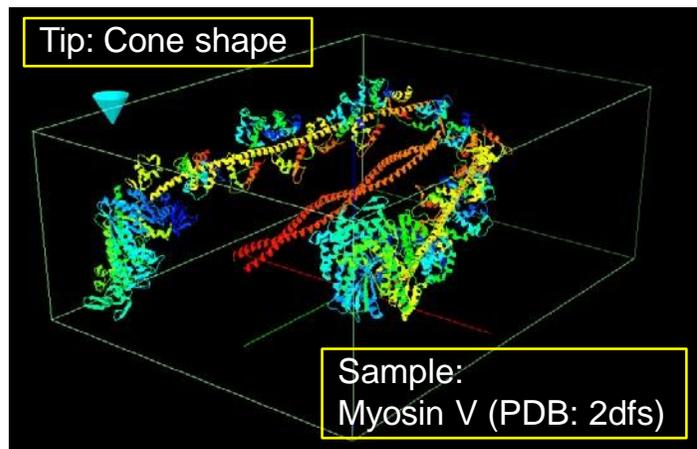


最終的に、真の試料形状データが得られます

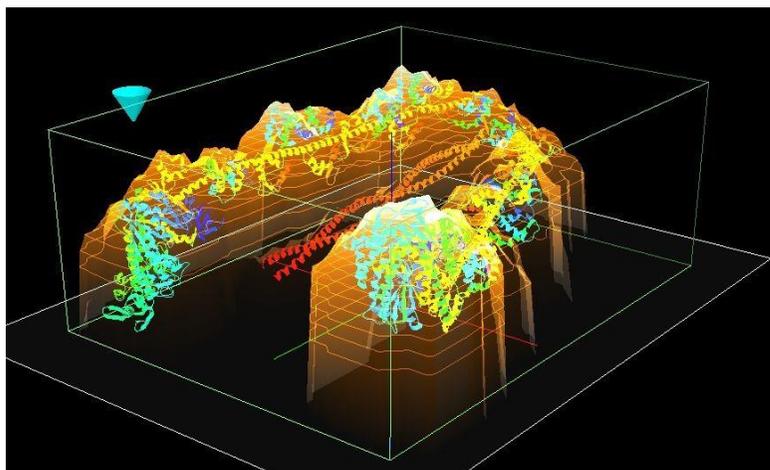
探針と試料の分子構造からAFM像を予測

生体高分子ミオシンVのAFM像シミュレーション

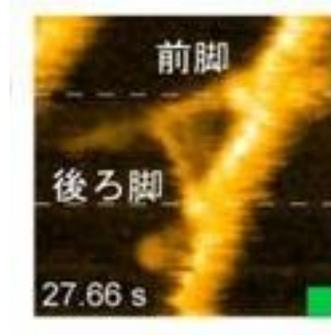
Simulation



GeoAFMによるシミュレーション



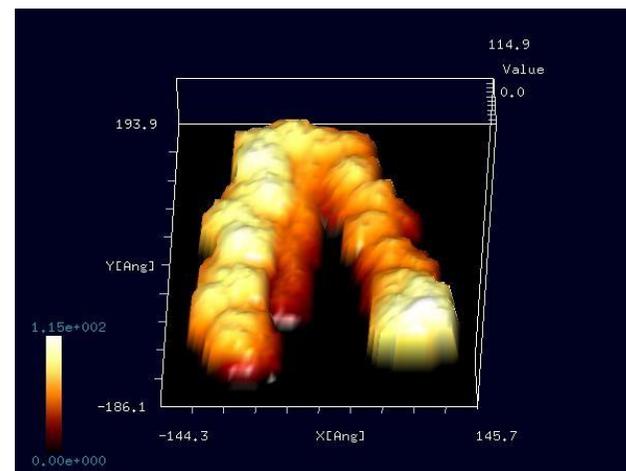
Experiment



金沢大学 理工研究域数物科学系の安藤 敏夫教授と古寺 哲幸助教らの研究グループは、世界最高性能の高速原子間力顕微鏡を開発し、アクチンフィラメントに沿って動くミオシンV分子の振舞いを直接高解像撮影することに世界で初めて成功した

<http://www.jst.go.jp/pr/announce/20101011/>

GeoAFMのシミュレーション画像をAnalyzerで出力することも可能



GeoAFM

探針と試料の分子構造からAFM像を予測する操作の流れ

ユーザは、まず、Protein Data BankというWebサイトから、調べたい分子の構造データをダウンロードします

Protein Data Bankには13万種類以上のたんぱく質構造がデータベースとして保存されています

GeoAFMでたんぱく質の構造データを読み込みます

[Protein Data Bankのホームページはこちら](#)

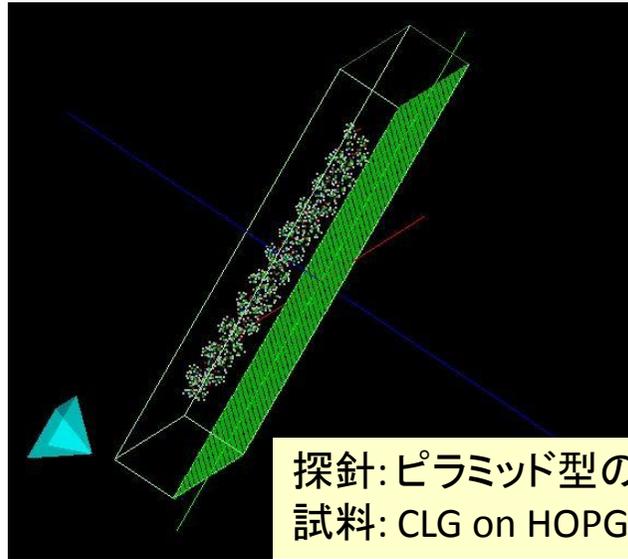
GeoAFMで探針形状を指定します

典型的な探針形状は、あらかじめソフトウェア内に登録されています
自分で、探針形状ファイルを作成することも可能です
実験的に得られた探針形状データを使用することも可能です

GeoAFMで、AFM画像を推定します

最終的に、GeoAFMで推定されたAFM画像と、実験で得られたAFM画像を比較検討します

ラクトン系高分子ポリマーのAFMシミュレーション

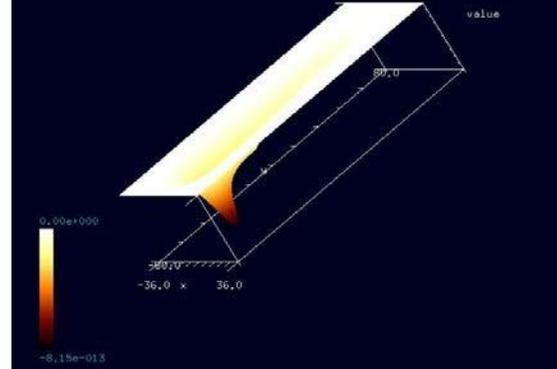


探針: ピラミッド型の SiO_2
試料: CLG on HOPG

HOPG: 高配向熱分解黒鉛 (Highly Oriented Pyrolytic Graphite)
CLG: ラクトン系高分子量ポリマー
(CLG: ϵ カプロラクトン・(L)ラクチド・グリコリド共重合体)

高さ一定モード

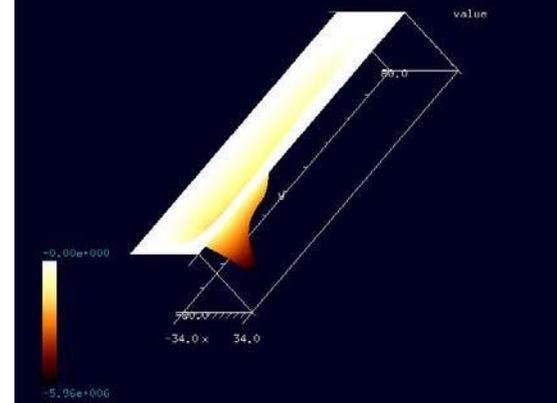
AFM画像



探針が試料に接近している部分では、逆6乗法則に従ってファンデルワールス力が急激に増大

周波数シフトモード

周波数シフトAFM画像



カンチレバーを周波数500[MHz]で励振させており、周波数のずれは最大で5.96[MHz]

FemAFM

試料の変形を有限要素法で計算してAFM画像を推定する操作の流れ

ユーザは、まず、Protein Data BankというWebサイトから、調べたい分子の構造データをダウンロードします

Protein Data Bankには13万種類以上のたんぱく質構造がデータベースとして保存されています

たんぱく質以外の試料も指定できます(一般的な有機材料等)

[Protein Data Bankのホームページはこちら](#)

FemAFMで試料の構造データを読み込みます

FemAFMで探針形状を指定します

典型的な探針形状は、あらかじめソフトウェア内に登録されています
自分で、探針形状ファイルを作成することも可能です
実験的に得られた探針形状データを使用することも可能です

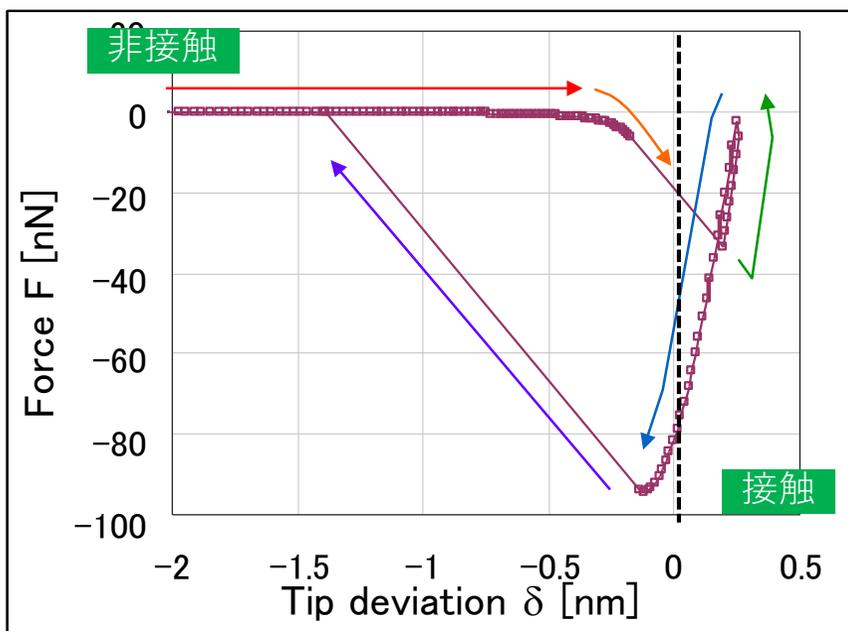
FemAFMで、AFM画像を推定します

最終的に、FemAFMで推定されたAFM画像と、実験で得られたAFM画像を比較検討します

粘弾性接触解析

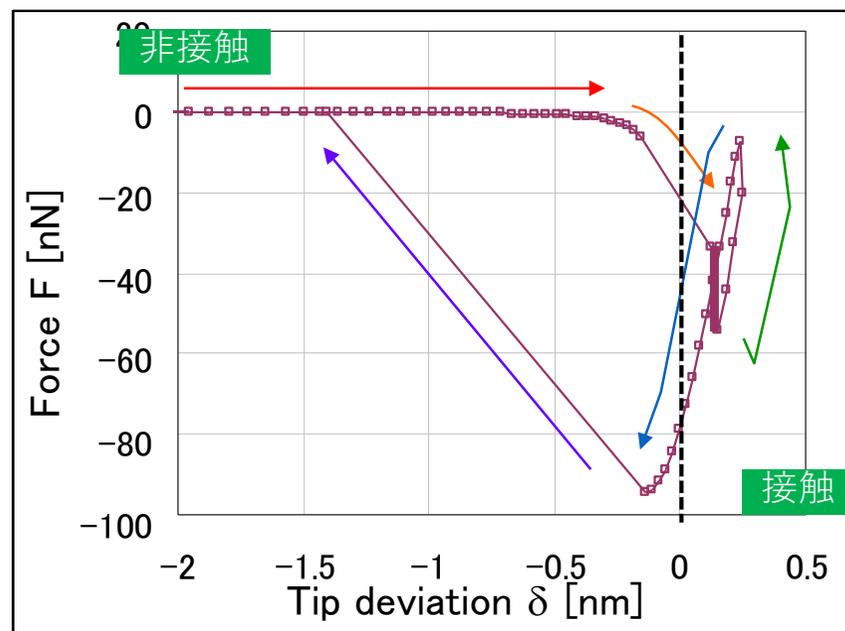
粘弾性を持つ試料と探針の接触の様子をシミュレーションし、フォースカーブを求める

真空中



液体中

探針が試料に接触する過程で、探針の動きが流体の影響を受けている



1. 探針が試料表面に近づく
2. 試料表面から上部に突き出た部分で接触し、試料の内部に押し込まれる
3. 凝着力がゼロになる位置まで押し込まれる
4. 試料から離れる方向に引き戻される
5. 試料から離脱する

LiqAFM

粘弾性を持つ試料と探針の接触の様子をシミュレーションし、フォースカーブを求める操作の流れ

ユーザは、まず、LiqAFMのグラフィック・ユーザ・インターフェースで、以下の物理量を指定します

- カンチレバーの形状
- 流体の動粘性係数などの物性値
- 試料の表面張力、ヤング率などの物性値



LiqAFMでシミュレーションを行います



フォースカーブが得られます



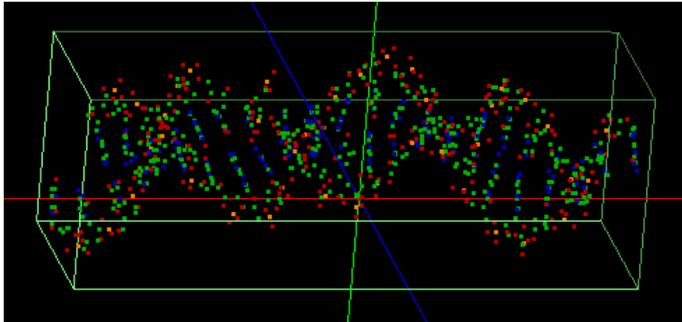
最終的に、LiqAFMで推定されたフォースカーブと、実験で得られたフォースカーブを比較検討します

LiqAFM

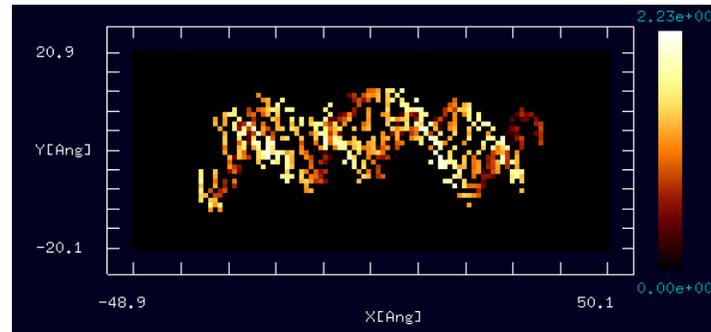
タッピング機能

DNA分子の周波数シフト・位相シフトAFM像

DNAの分子構造図



DNA分子表面の高さ情報を表した図



流体:

動粘性係数: $0.25e-6$ [m^2/s]

密度: 200.0 [kg/m^3]

カンチレバーの振動:

周波数: 20.0 [kHz]

振幅: 30.0 [nm]

試料(DNA分子):

ヤング率: 76.5 [GPa]

ポアソン比: 0.22

ハーメーカー定数: $5.0e-20$ [J]

表面張力: 0.4 [N/m]

粘性抵抗: 10.0 [$Pa s$]

カンチレバー:

密度: 2200.0 [kg/m^3]

ヤング率: 6000.0 [GPa]

ポアソン比: 0.22

長さ、幅、深さ:

$400.0, 50.0, \text{ and } 4.0$ [μm]

ばね定数: 75.0 [N/m]

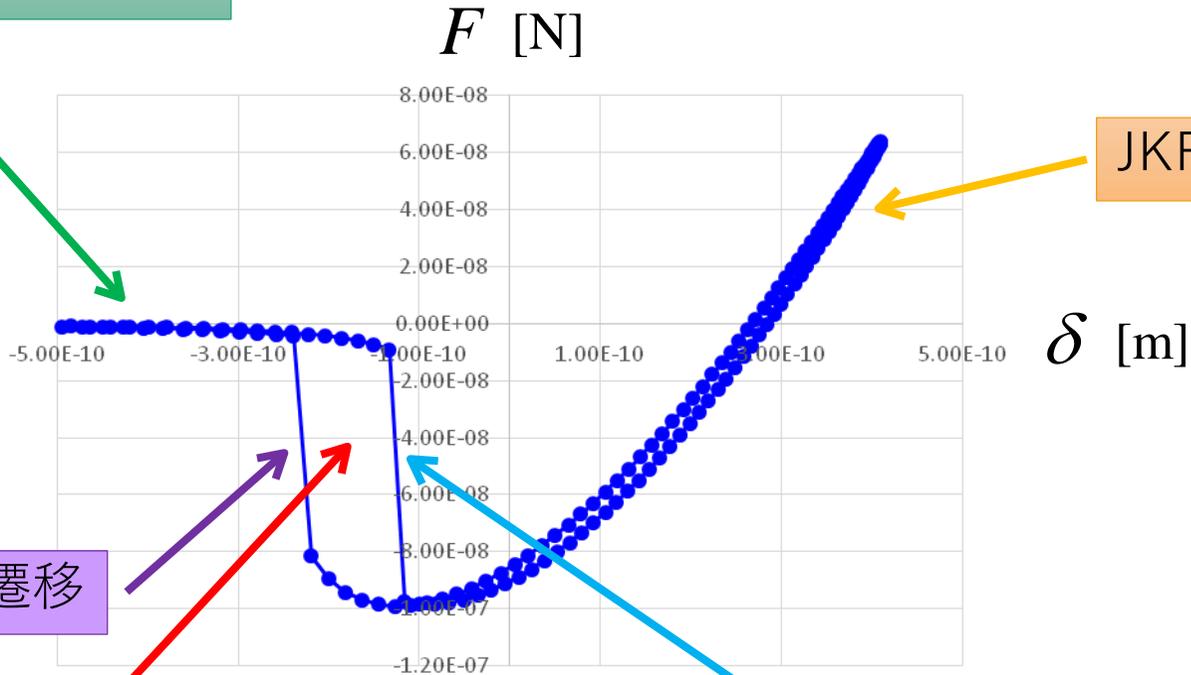
探針のハーメーカー定数:

$5.0e-20$ [J]

フォースカーブ：探針－試料間の距離 vs 探針の感じる力

真空中での場合

ファンデルワールス力



決定論的状態遷移

ヒステリシスが生じている

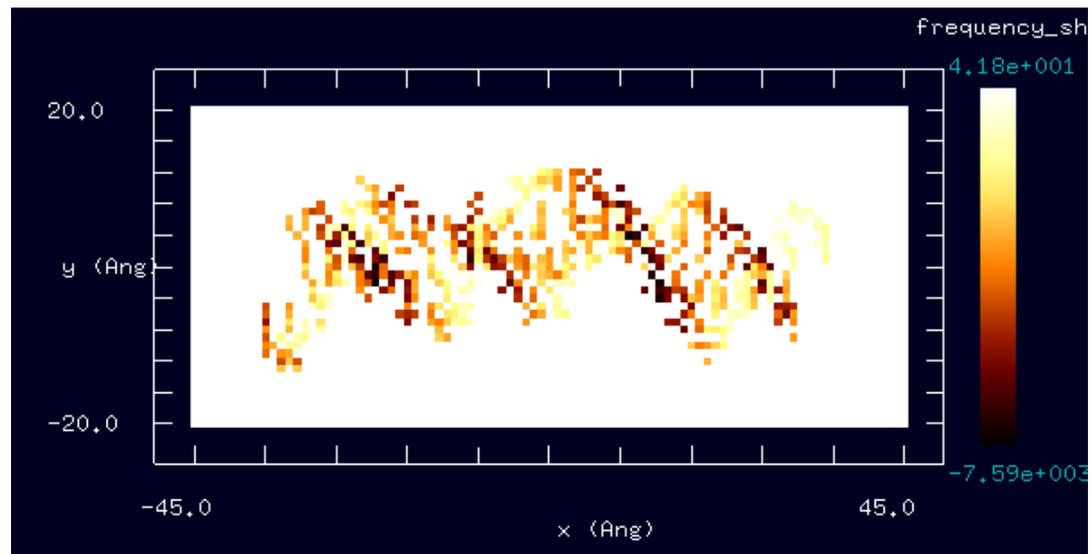
確率的状態遷移

真空中でのシミュレーション

周波数シフト像

最大値: 0.0418[kHz]

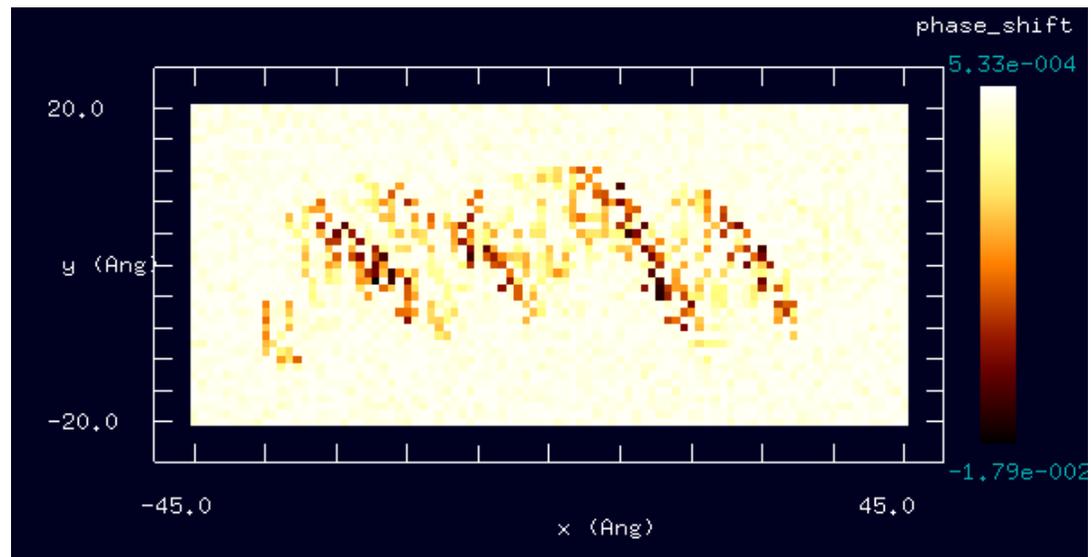
最小値: -7.59[kHz]



位相シフト像

最大値: $5.33e-4$ [radian]

最小値: $-1.79e-2$ [radian]

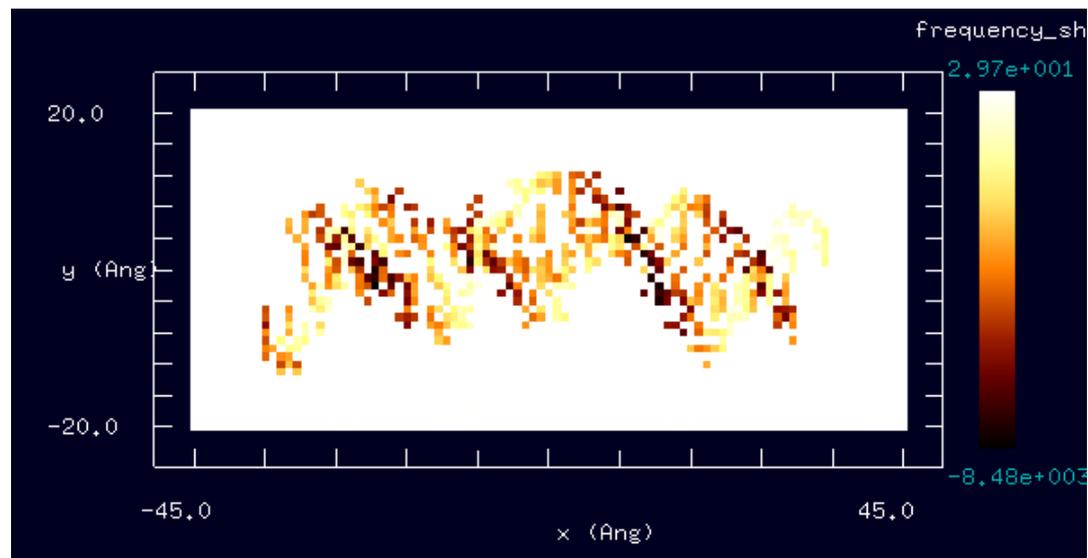


液中環境下でのシミュレーション

周波数シフト像

最大値: 0.0297[kHz]

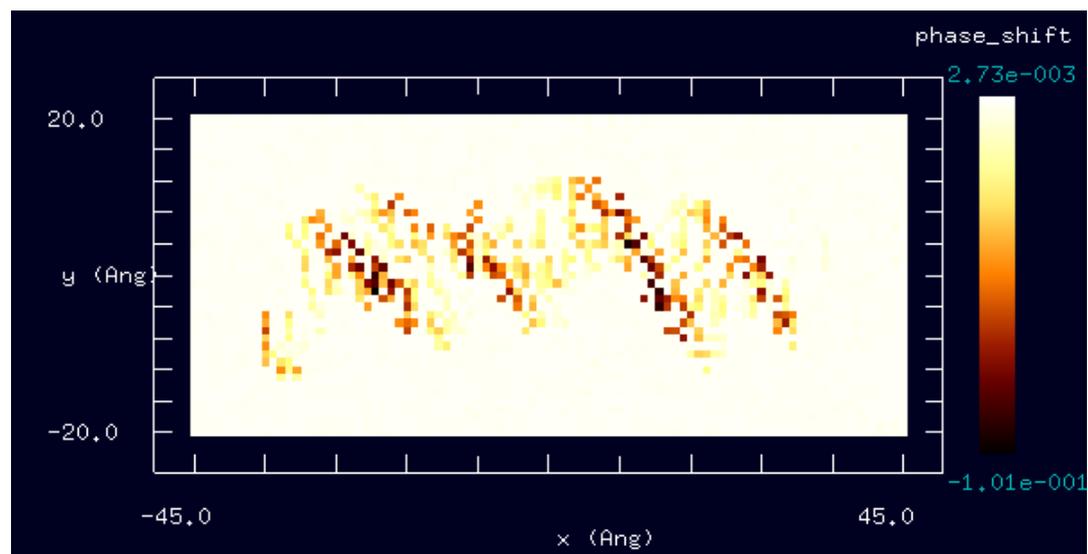
最小値: -8.48[kHz]



位相シフト像

最大値: 2.73e-3[radian]

最小値: -1.01e-1[radian]



LiqAFM

タッピング機能による周波数シフト・位相シフトAFM像推定の操作の流れ

ユーザは、まず、Protein Data BankというWebサイトから、調べたい分子の構造データをダウンロードします

Protein Data Bankには13万種類以上のたんぱく質構造がデータベースとして保存されています

LiqAFMでたんぱく質の構造データを読み込みます

[Protein Data Bankのホームページはこちら](#)

LiqAFMのグラフィック・ユーザ・インターフェースで、以下の物理量を指定します

- カンチレバーの形状
- 流体の動粘性係数などの物性値
- 試料の表面張力、ヤング率などの物性値

LiqAFMで、周波数シフト・位相シフトAFM画像、フォースカーブを推定します

最終的に、LiqAFMで推定された周波数シフト・位相シフトAFM画像、フォースカーブと、実験結果を比較検討します

周波数シフト、位相シフトの値から、ヤング率、表面張力の2種類のパラメータ値を逆算する

- 観測値を再現するヤング率：76.5[GPa]
- 観測値を再現するポアソン比：0.22
- 観測値を再現する表面張力：0.4[N/m]
- 観測値を再現する粘性率：10.0[Pasec]
- 観測値を再現する高さ:0.0[nm]

周波数シフト、位相シフトのずれ関数

$$f = \sqrt{\left(\frac{\Delta\nu - \Delta\nu_{\text{obs}}}{\omega_0 / (2\pi)}\right)^2 + \left(\frac{\Phi - \Phi_{\text{obs}}}{\pi}\right)^2}$$

$\Delta\nu$: シミュレーション計算で得た周波数シフト

$\Delta\nu_{\text{obs}}$: 観測値として得られた周波数シフト

ω_0 : カンチレバーの共鳴振動周波数

Φ : シミュレーション計算で得た位相シフト

Φ_{obs} : 観測値として得られた位相シフト

カンチレバーの周波数: 20kHz

周波数シフトの観測値: 24.888Hz

位相シフトの観測値: -0.00123181(radian)

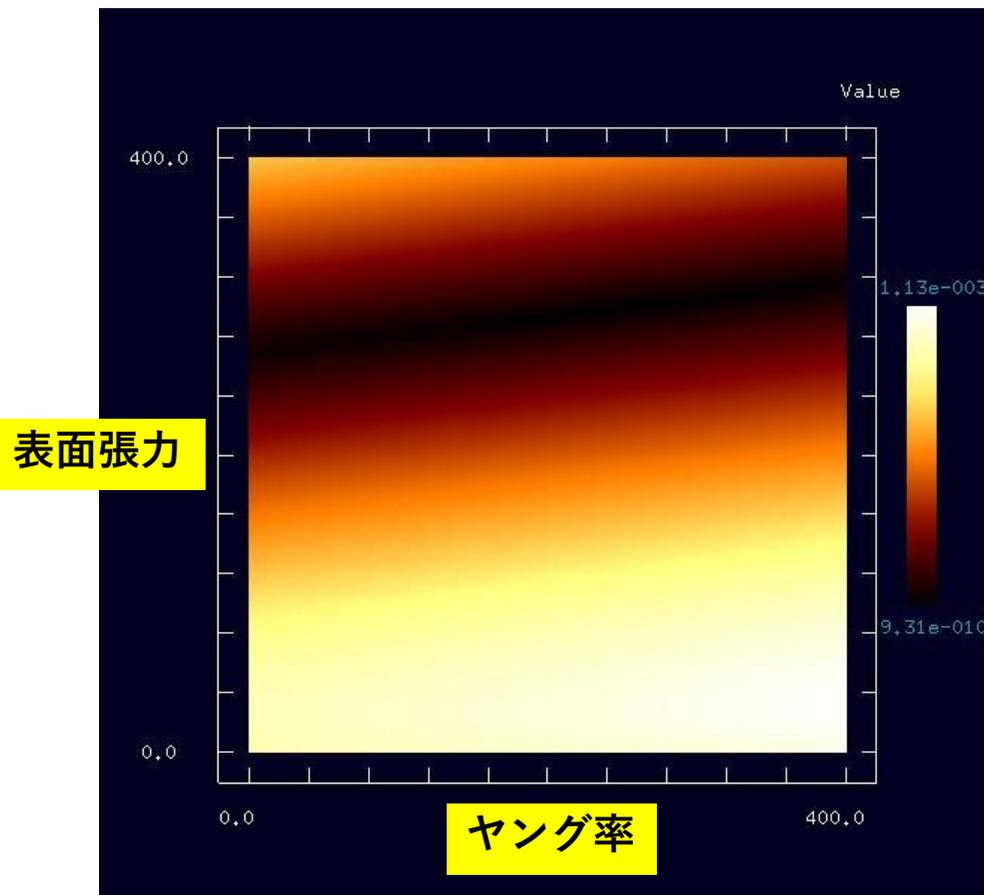
ヤング率と表面張力の2種類のパラメータ平面上でのずれ関数値の分布

カンチレバーの振動の1周期を2048分割した場合

ヤング率と表面張力のパラメータ平面上に、ずれ関数をプロットしたグラフ

ヤング率：70.0～80.0[GPa](400分割)

表面張力：0.1～0.5[N/m](400分割)



ずれ関数を最小にするパラメータの組は、
ヤング率：76.5[Gpa]
表面張力：0.4[N/m]

左の図で、色が最も暗いところが最適なパラメータ値の組み合わせを表している

ユーザは、まず、周波数シフト、位相シフトの観測値を用意します



LiqAFMで試料の構造データを読み込みます

[Protein Data Bankのホームページはこちら](#)

必要なら試料の構造データを、Protein Data Bankからダウンロードします



LiqAFMのグラフィック・ユーザ・インターフェースで、以下の物理量を指定します

- カンチレバーの形状
- 流体の動粘性係数などの物性値
- 試料の表面張力、ヤング率などの物性値

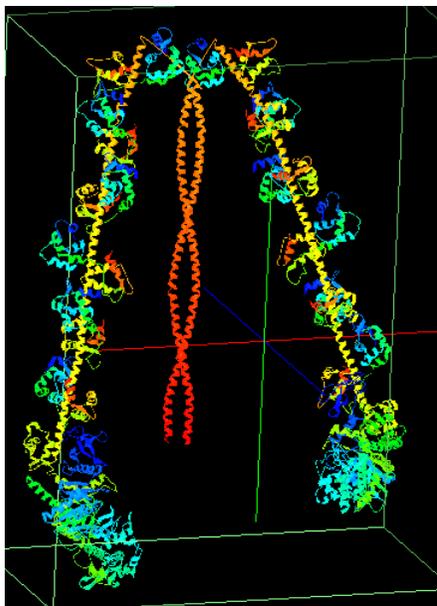


LiqAFMで、試料のヤング率・表面張力を逆算します

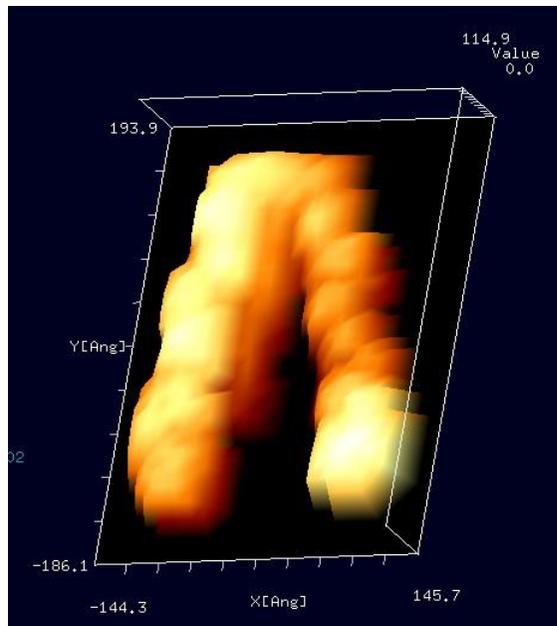
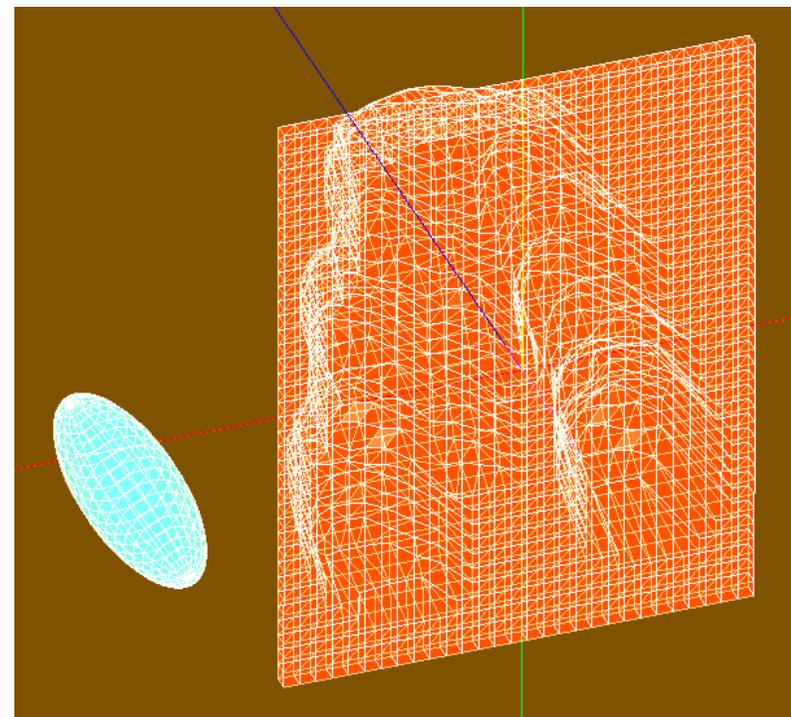


最終的に、試料のヤング率、表面張力の推定値が得られたこととなります

均一な表面電荷を持つミオシン分子のLCPD像



ミオシンの分子構造図

ミオシン分子に対して、
1.0[nm]の分解能で得られた
AFM像探針の形状は、横方向半径3[nm]、
縦方向半径10[nm]の回転楕円体

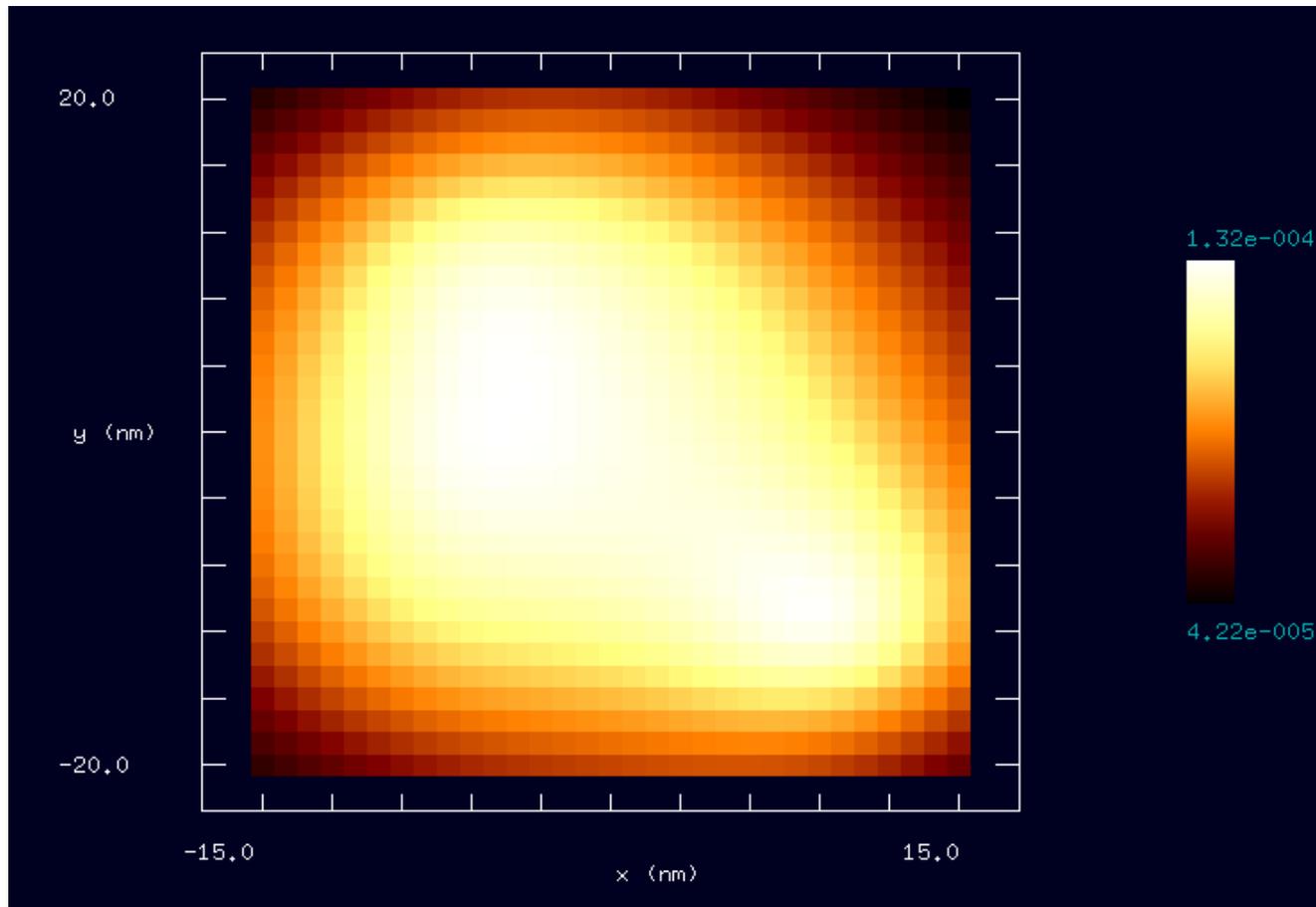
基板の電位: 0[V]

探針-試料間の最短距離: 2.01[nm]

試料形状 横: 29[nm]、縦: 38[nm]、高さ: 12.5[nm]

試料の比誘電率: 80.4

試料表面の電荷密度: $1.0E-6$ [C/m²]



試料のLCPD像

最大値: $1.32\text{E}-4$ [V]

最小値: $4.22\text{E}-5$ [V]

macroKPFM

均一な表面電荷を持つミオシン分子のLCPD像推定の操作の流れ

ユーザは、まず、Protein Data BankというWebサイトから、調べたい分子の構造データをダウンロードします

[Protein Data Bankのホームページはこちら](#)

GeoAFMでたんぱく質の構造データを読み込み、AFM像を推定します

GeoAFMで作成したAFM画像データに、表面電荷を設定します

表面電荷を設定した試料構造データを、macroKPFMで読み込み、LCPD像を計算します

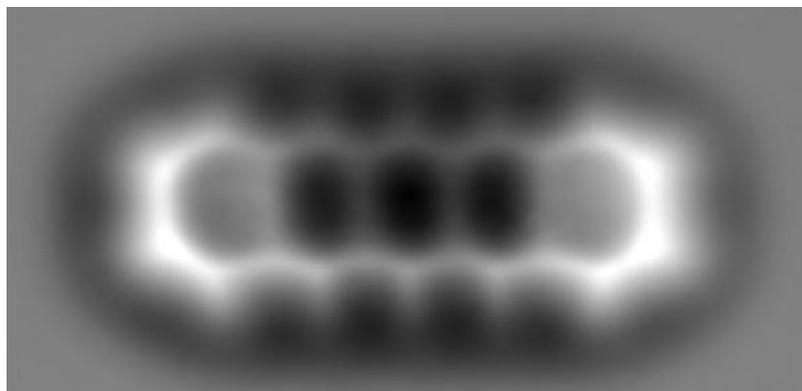
最終的に、macroKPFMで推定されたLCPD画像と、実験で得られるKPFM画像を比較検討します

CG

構造最適化AFM像シミュレータ

ペンタセンの周波数シフトAFM像シミュレーション

周波数シフト像の実験結果

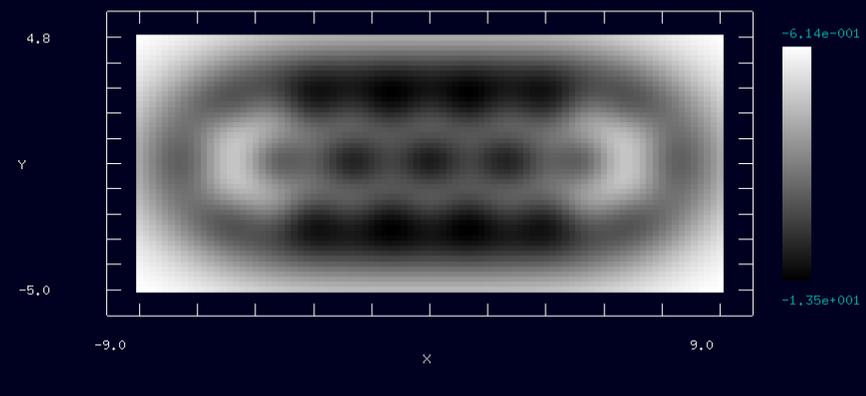


L. Gross *et al.*, Science **325**, 1110-1114 (2009)

周波数シフト像のシミュレーション

真空中: $\Delta f < 0$

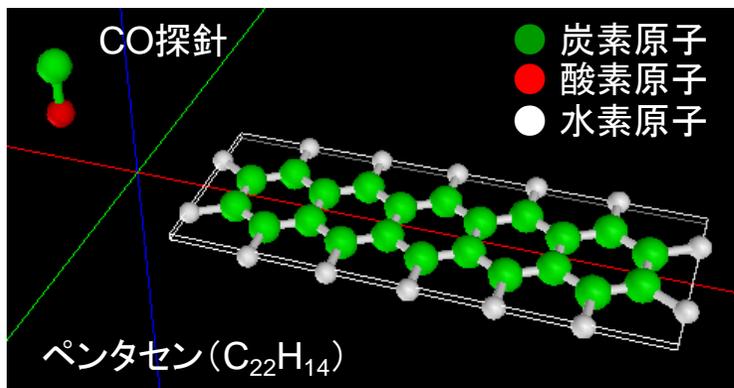
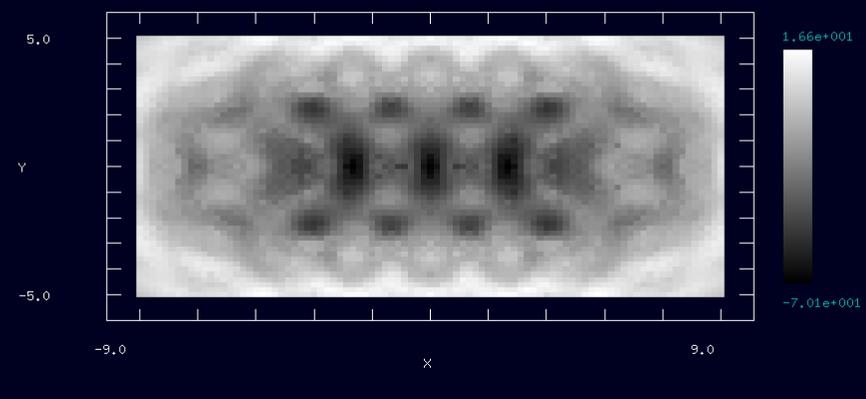
CG



良い一致

水中: $\Delta f \geq 0$

CG-RISM



CG ペンタセンの周波数シフトAFM像シミュレーションの操作の流れ

ユーザは、まず、有機分子の試料構造データを用意します

ChemSketch, OpenBabelというフリーソフトで簡単に分子構造データを作成することができます



CGで試料分子構造データを読み込み、AFM像を推定します

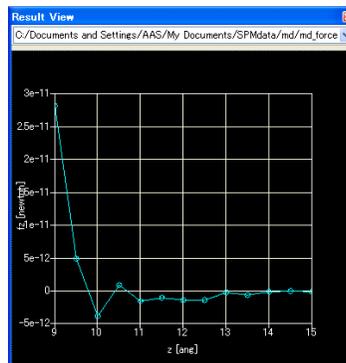
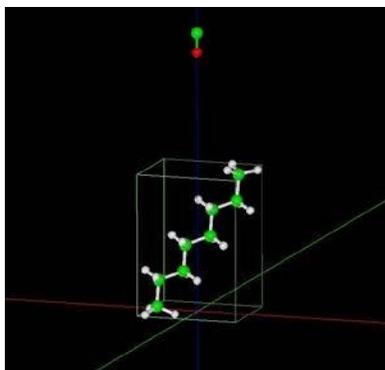


最終的に、CGで推定された周波数シフトAFM画像と、実験で得られるAFM画像を比較検討します

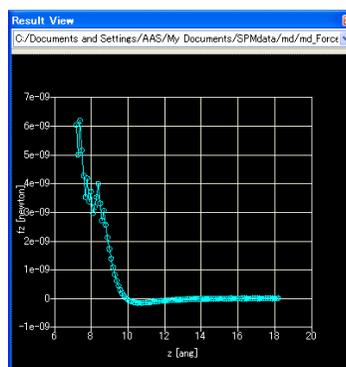
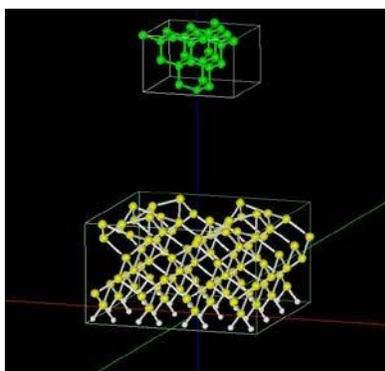
[ChemSketchのホームページはこちら](#)

[OpenBabelのホームページはこちら](#)

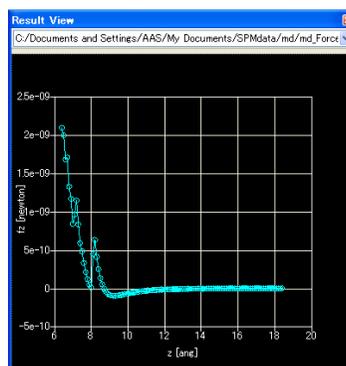
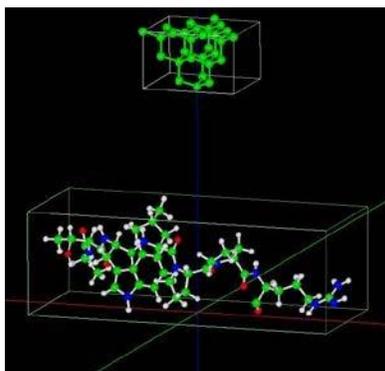
あるxy位置で探針を試料に近づけ、探針に作用する力を計算します



オクタン分子のフォースカーブ



Si(001)表面のフォースカーブ



抗血管新生ペプチドのフォースカーブ

MD 様々な探針・試料によるフォースカーブ・シミュレーションの操作の流れ

ユーザは、まず、探針・試料の結晶・分子の構造データを用意します

ChemSketch, OpenBabelというフリーソフトで簡単に分子構造データを作成することができます
SetModelを使えば、手軽に結晶構造データを作成できます

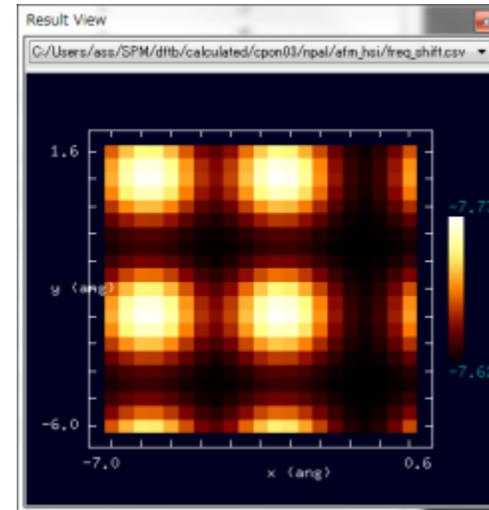
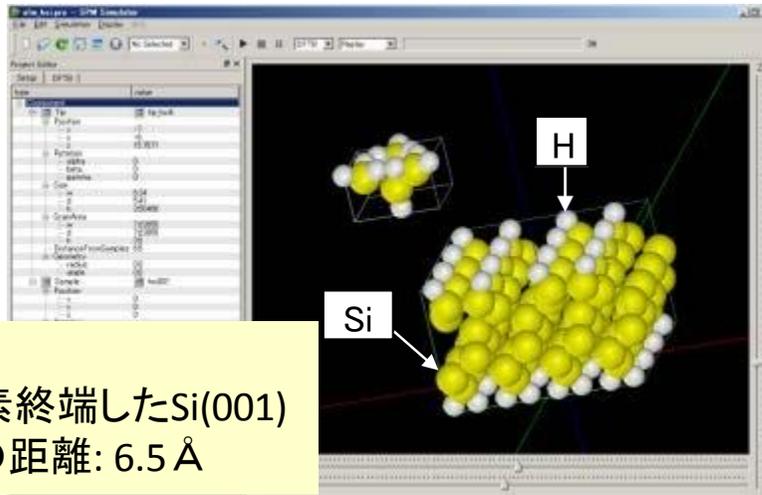


MDで探針・試料形状データを読み込み、フォースカーブを推定します

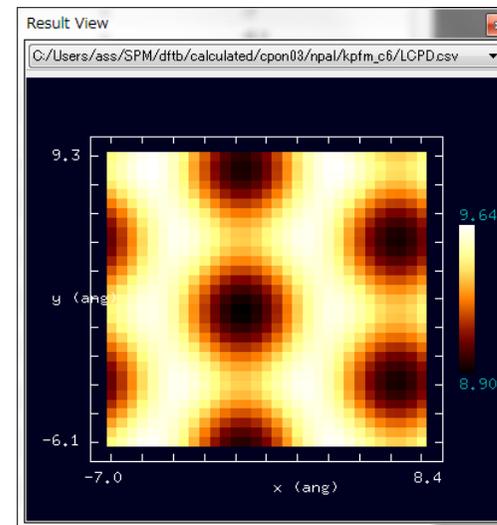
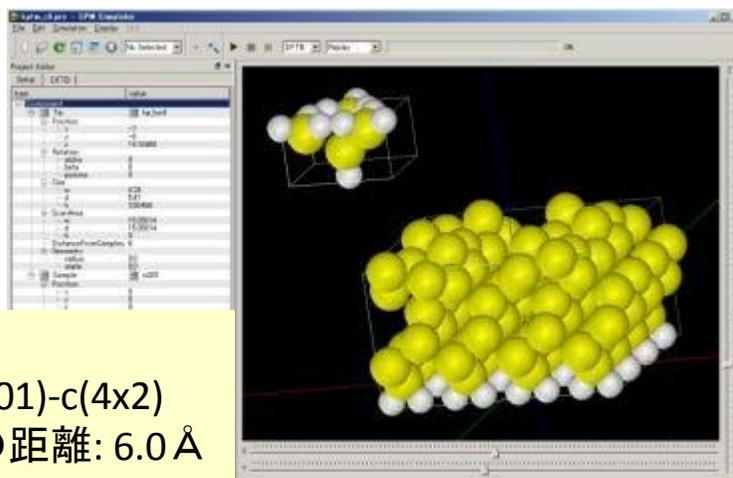


最終的に、MDで推定されたフォースカーブと、実験で得られるフォースカーブを比較検討します

周波数シフト像のシミュレーション



接触電位差像のシミュレーション



表面のアップダイマーを繋ぐようにした電位差の大きい領域が見られる

DFT

周波数シフトAFM像・KPFM像の計算操作の流れ

R

ユーザは、まず、探針・試料の結晶構造データを用意します

SetModelを使えば、手軽に結晶構造データを作成できます

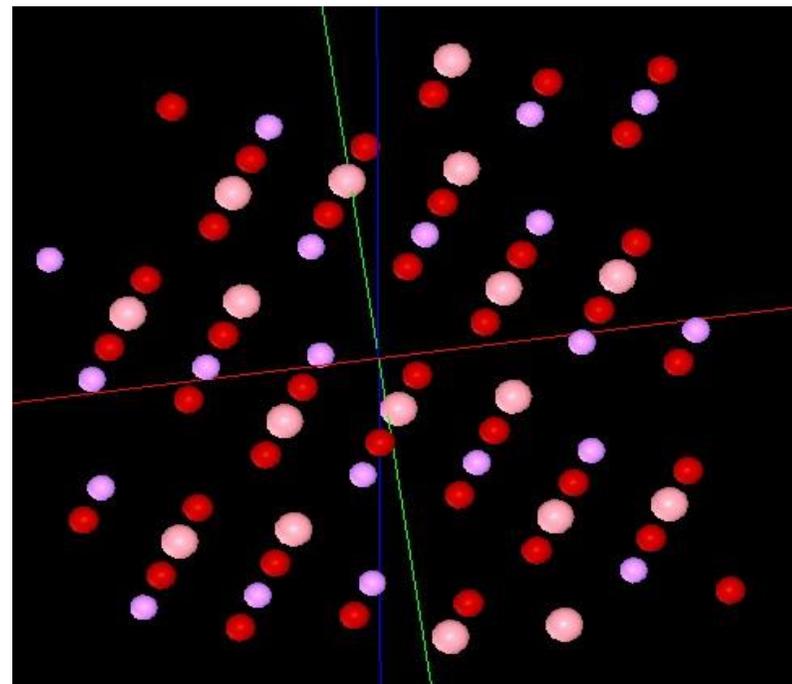
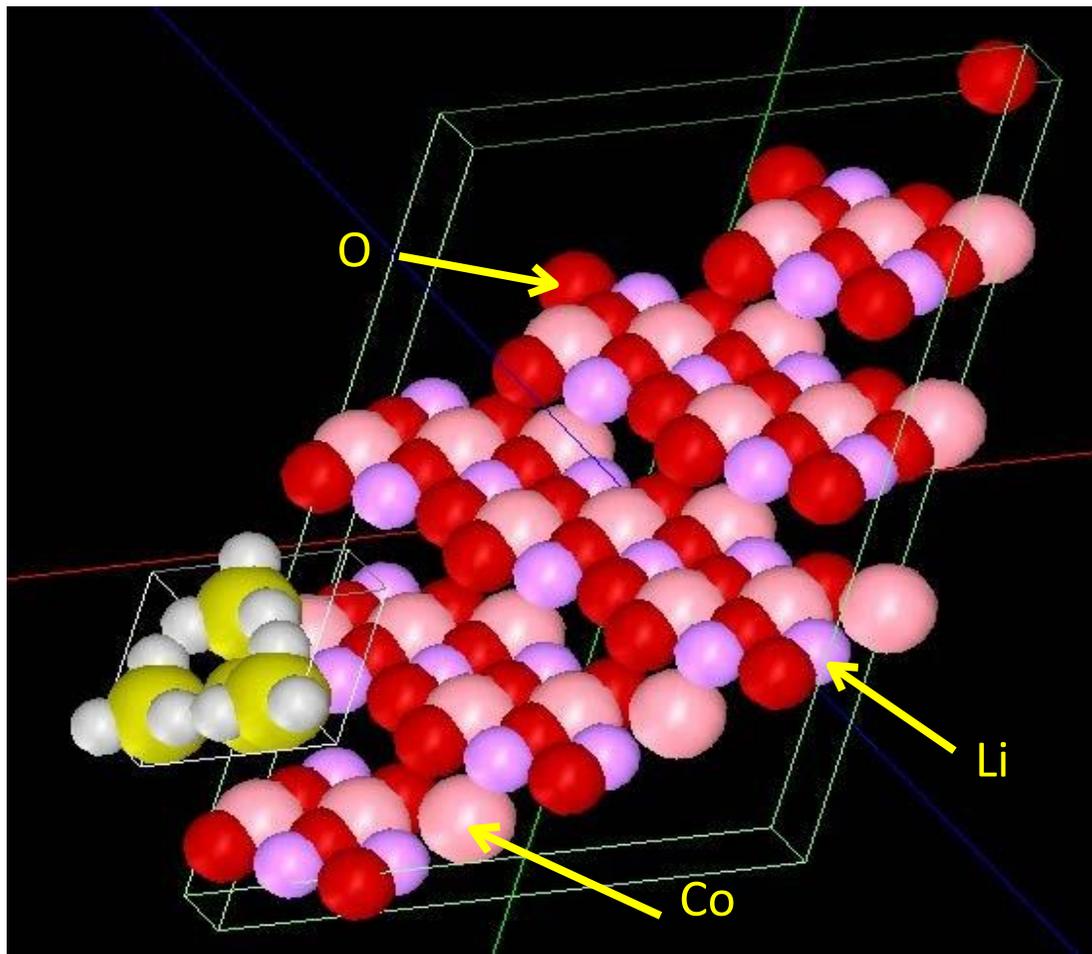


DFTBで探針・試料形状データを読み込み、周波数シフトAFM像・KPFM像を推定します



最終的に、DFTBで推定された周波数シフトAFM像・KPFM像と、実験で得られる周波数シフトAFM像・KPFM像を比較検討します

三方晶(空間群番号：166)
(111)面



水素終端されたシリコン探針を使用

SetModel

LiCoO₂(リチウムイオン電池の正極活物質)原子構造作成操作の流れ

ユーザは、まず、結晶構造データを準備します(空間群番号、格子定数、格子ベクトルのなす角度、単位格子内の原子の位置)



SetModelに結晶構造データを入力します



最終的に、探針・試料に使用できる結晶構造データが作成されます

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、世界初国内外向け新機軸商用ソフトウェア

SPM世界標準仕様/粘弾性接触解析(含む逆問題)/計算機能、& DFTB計算元素69種類の原子間相互作用パラメータ完成に伴い、あらゆる(有機・無機)化合物について「実験-計算」画像比較型の**粘弾性接触解析・STM/STS、AFM、KPFM計算が可能になり、無機・有機半導体、ソフトマテリアル等、ほぼ、あらゆる物質がシミュレーションの対象となり、透明電極、リチウム電池、触媒反応など、SPMシミュレーション可能な物質・化合物の組み合わせが、V字的に各段に拡大し、国内外のSPM装置の潜在的販売数V字拡大に繋がり、新規市場構築が期待されます。**

- ・SPM装置据付サイトSPM実験担当者向け、
- ・SPMシミュレータハンドリング担当方々向け、
- ・SPM(操作型プローブ顕微鏡)シミュレーション担当者(初心者向け)

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf

https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_simulator_application_examples.html

人間は60兆個の細胞からなり、その細胞は20桁よりはやや少ないが、原子・分子が極めて秩序だった動きをする、統計的扱いが出来る総体としての細胞であり、「バイオ・ソフトマテリアルAFMシミュレータ」を組込んだSPMシミュレータ適用により、高分子、タンパク質、バイオ・ソフト・マテリアルの分析を軸に、薬学・医療分野のSPMワールド展開されます。エリア/深さ、是非参照下さい

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

[戻る](#)

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

https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/integrated_catalog_prologue.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うる条件が出来た。加えて、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共有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

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るので、「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。実験担当者とシミュレーション担当者はこれ等比較画像情報を見極めて、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=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

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_p1.pdf

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

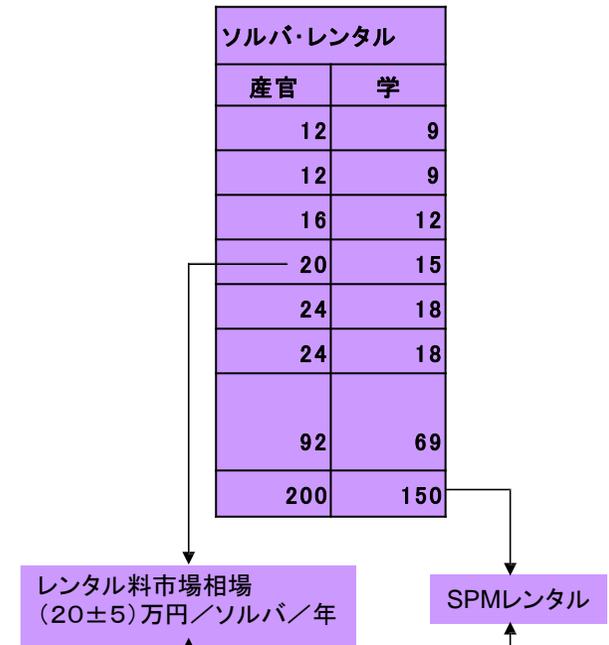
DFTB型: Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素27種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です(2017/7改正、ソルバー売りに対応)

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

Professional型		難度	構成ソルバーマスメリット価格(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			239.9万	構成ソルバ7本毎の設定価格の総和			350万			
学(マスメリット・ダウン適用)SPM価格(基準値)			(市場相場に遜色なし)			産・官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				350万			



Standard型		難度	構成ソルバーマスメリット価格(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	構成ソルバ6本毎の設定価格の総和			270万				
学(アカデミック)への特別配慮 160/270			学(マスメリット・ダウン適用)SPM価格(基準値相当)			(市場相場に遜色なし)			産・官SPM価格(基準値相当)		

[日本発/世界初]ソフト・バイオマテリアルAFMシミュレータ組込版・ [実験-計算]画像比較型SPMシミュレータ

SPMシミュレータの現時点での構成

Analyzer SPM実験画像データのデジタル処理プロセッサ

GeoAFM 幾何学情報に基づく高速相互予測AFMシミュレータ

FemAFM 連続弾性体AFMシミュレータ DLVO理論機能追加済み

LiqAFM 液中ソフトマテリアルAFMシミュレータ 簡易逆問題機能追加済み

macroKPFM マクロスケールKPFMシミュレータ DLVO理論機能追加作業中

CG 構造最適化AFM像シミュレータ

MD 分子動力学AFM像シミュレータ

DFTB 量子論的SPMシミュレータ

SetModel 原子モデル作成ツール

いずれかのソルバーに、本格的な逆問題計算機能を追加する予定

青い文字が、新たに追加される機能

赤い文字が、新たに追加されたバイオ・ソフトマテリアル関連ユーザー向けの機能

ソルバー	特徴	機能
Analyzer 実験データ画像 処理プロセッサ	シミュレーションの前処理を行う。 実験データを補正して計算用入力 データへ変換する。探針形状の予 測と形状効果の補正を行う。	<ul style="list-style-type: none">・探針形状推定機能・メーカー各社のSPM実験データの読み込み機能・画像データの傾斜補正機能等
SetModel 原子モデリング ツール	シミュレーションの前処理を行う。 探針と試料の原子構造モデルを作 成する。	<ul style="list-style-type: none">・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・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・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
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 レーションである。精密でないが、 試料構造・探針構造・AFM像の二 つから、残りを一つを高速で予測 することができる。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といえる。	<ul style="list-style-type: none">・試料と探針から計測像を予測する機能・計測像と探針から試料形状を予測する機能・計測像と試料から探針形状を予測する機能・対象（コラーゲン、タンパク質分子）

実用・開発者向き

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。

DLVO理論シミュレーション機能が追加されている。

- ・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応
- ・単振動加振・二重加振／多モードに対応
- ・カンチレバーの共鳴曲線（真空中、大気中、液中）を描く
- ・マルチコア並列計算機能
- ・対象（コラーゲン、タンパク質分子）
- ・DLVO理論機能追加により、コロイド溶液中の電気二重層による斥力の効果が評価可能となった
- ・DLVO理論機能により、探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価できるようになった。また、ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べることが可能となった。
- ・ μm オーダーの誘電率、分極など、様々な試料・探針の電気特性に興味を持っているユーザーに適している。例えば、金属基板に試料を乗せ、探針でSPM観察する際、試料表面に3から4個の水分子が付着した場合の影響について、シミュレーションが可能となった。
- ・電気二重層による斥力を考慮したシミュレーションによって、メゾスコピック系を調べることが可能になった。

LiqAFM (tapping)

液中ソフトマテ
リアルAFMシ
ミュレータ

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。簡易版の逆問題機能が追加されている。

- ・カンチレバーの垂直振動と捩れ振動に対応
- ・単振動加振・二重加振／多モードに対応
- ・カンチレバーの共鳴曲線（真空中、大気中、液中）を描く
- ・マルチコア並列計算機能
- ・対象（コラーゲン、タンパク質分子）
- ・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。
- ・タッピング機能が強化された。これにより、探針-試料間の粘弾性凝着効果を考慮したスキャンをシミュレーションすることが可能となった。
- ・タッピング・モードの逆問題計算機能が強化された。これにより、周波数シフト・位相シフトの観測データより、試料のヤング率、表面張力、高さ情報を逆算することが可能となった。
- ・粘弾性を考慮したタッピング・モードのシミュレーションによって、大気中でカンチレバーを動かす、試料表面に薄い水の被膜が有るような系のシミュレーションが実行可能となった。

macroKPFM
巨視的KPFM像シミュレータ

KPFM像シミュレーションを、 μm から nm 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。
現在、DLVO理論機能追加作業中である。

- ・ 任意の形状の誘電体を試料として設定可能
- ・ 試料表面に電荷の分布を指定可能
- ・ 任意の位置の電荷を置くことができる
- ・ 対象(高分子、トナー粒子)
- ・ DLVO機能追加により、コロイド溶液中の電気二重層による斥力の効果が評価できる予定である。
- ・ DLVO理論機能により、探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価できるようになった。また、ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べることが可能となった。
- ・ μm オーダーでKPFM等の電気的特性を調べるシミュレータである。古典電磁気学の範囲で調べる。
- ・ 将来的には、実験結果から物性値を求めることを望んでいるSPMユーザーに対して、物性値をシミュレータに代入してSPM推定画像を得るのと、丁度逆のことを行う、逆問題計算機能を提供する予定である。
- ・ 電気二重層による斥力を考慮したシミュレーションによって、メゾスコピック系を調べることが可能になった。

CG 構造最適化AFM 像シミュレータ	古典力学法による原子モデルの最適化計算を行う。液中CG-RISM計算も可能である。	<ul style="list-style-type: none">・散逸像・周波数シフト像、フォースマップ等を計算・接触高さ、力一定のコンタクトモード像計算・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・対象（コラーゲン、タンパク質分子）・ゴム・高分子等の摩擦力顕微鏡画像シミュレーション機能追加予定
MD 分子動力学AFM 像シミュレータ	古典力学法による原子モデルの分子動力学計算を行う。	<ul style="list-style-type: none">・フォースカーブの計算・三次元力場の計算、散逸像・周波数シフト像予測に対応・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・液中計算に伴う溶媒の分子動力学計算・対象（コラーゲン、タンパク質分子）
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を行う。STM/STS, AFM, KPFMに対応している。KPFMはより実用的に拡張したいと考えている。	<ul style="list-style-type: none">・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/Oとの連携運用も視野に入れている。

バイオ・ソフトマテリアル関連ユーザー向けに、新たに追加された機能

LiqAFMタッピング機能

探針-試料間の粘弾性凝着効果を考慮したスキャン

LiqAFMタッピング・モードの逆問題計算機能

周波数シフト・位相シフトの観測データより、試料のヤング率、表面張力、高さ情報を逆算

FemAFM_DLVO機能

探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価
ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べる

macroKPFM_DLVO機能

探針・試料が電解溶液中にあるとして、電気二重層力の効果によるデバイ遮蔽効果を評価
ファンデルワールス力と、電気二重層による斥力の、二つの力の競合を調べる

今後の展開としては、逆問題機能が残されている

株式会社XXXXXX様への対応

XXXXXXでは、誘電率、分極など、様々な試料・探針の電気特性に興味を持っている。例えば、金属基板に試料を乗せ、探針でSPM観察する際、試料表面に3から4個の水分子が付着した場合の影響について、興味を持っている。



FemAFM_DLVOで、対応可能

μm オーダーでKPFM等の電気的特性を調べるシミュレータがあれば良い。古典電磁気学の範囲で十分。また、SPMユーザーは、実験結果から、物性値を求めることを望んでいる。物性値をシミュレータに代入してSPM推定画像を得るのと、丁度逆のことを要求している。このような逆問題に対応できれば、ユーザーのニーズに適合する。



macroKPFM_DLVOで、対応可能

LiqAFMの粘弾性を考慮したtappingモードのシミュレーションには興味を持てる。大気中でカンチレバーを動かし、試料表面に薄い水の被膜が有るような系のシミュレーションは興味深い。



LiqAFMのtapping機能で、対応可能

DLVO理論のように、電気二重層による斥力を考慮したシミュレーションには期待が持てる。メゾスコピック系のシミュレーションとして力を入れるべきである。



FemAFM_DLVO、macroKPFM_DLVOで、対応可能

どのソルバにおいても、単に、シミュレーションをするのではなく、物理的な量が分かりやすく計算・導出されるようにした方が望ましい。物理量が絶対的な値で表示されるように工夫してほしい。



一部、LiqAFMのtapping機能の逆問題で対応可能
すでに、LiqAFMにおいて逆問題ソルバーが完成している
今後は、これをさらに拡張した逆問題ソルバーを開発して対応する予定

たんぱく質などの動的な振る舞いまでシミュレーションできるようになると良い。

様々な材質の微粒子の計測データについて、探針効果を明確にデコンボリュートできるようになるとよい。



どのようなソルバーで対応すべきか、方針が未定

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

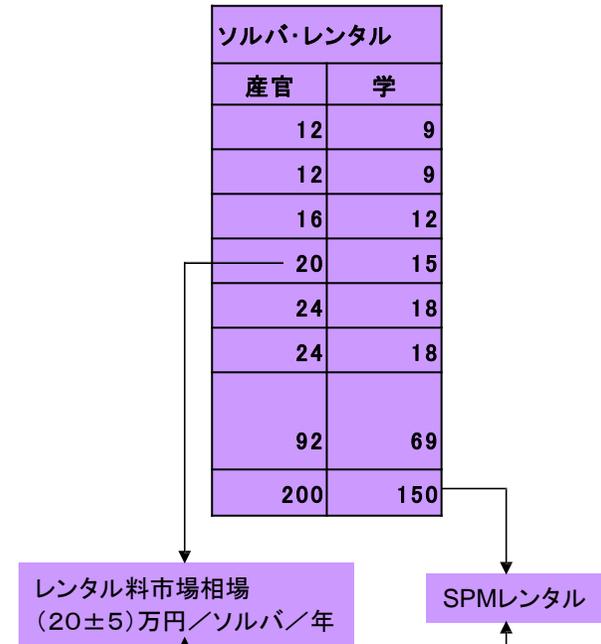
DFTB型: Analyzer, SetModel, DFTBの3本セットです。指定元素27種類の場合の価格です。半導体等の無機・有機材料分野に最適です

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

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	構成ソルバ7本毎の設定価格の総和						500万
学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格(基準値)				(市場相場に遜色なし) 産・官SPM価格(基準値)						
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	構成ソルバ6本毎の設定価格の総和				270万
学(アカデミック)への特別配慮 160/270				(市場相場に遜色なし) 産・官SPM価格(基準値相当)				
学(マスマリット・ダウン適用)SPM価格(基準値相当)								



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
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>

The SPM simulator can process both image data obtained by theoretical simulations and experiments **on the same platform**. It is the world's first **novel** commercial software.

Theoretical numerical simulations:
Adoption of the finite element method, the molecular dynamics, and the density functional based tight binding (DFTB) method.

The 3D processing of experimental image data:
SPM simulator supports data file formats from **worldwide instrument manufactures**. Noise reduction, estimation of shapes of tips, and many other functions are prepared.



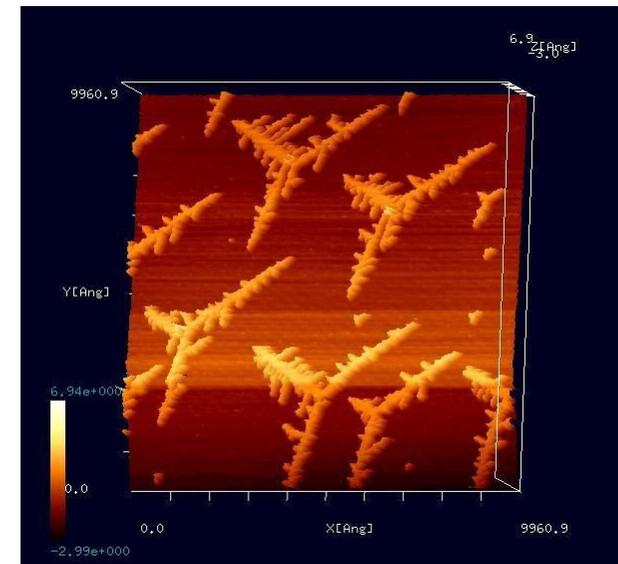
Viscoelastic contact mechanics for simulations of bio-soft materials

The DFTB parameters for 69 kinds of elements (Almost all compounds are available.)

Processing both images obtained by theoretical simulations and experiments, you can clarify surfaces of materials precisely.

[An SPM image provided by Fukutani laboratory in Institute of Industrial Science, University of Tokyo.

S. Ogura et al., Phys. Rev. B 73, 125442 (2006); S. Ogura and K. Fukutani, J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 474210.]

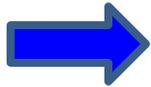


Concepts

Processing both images obtained by theoretical simulations and SPM experiments

Analyzing bio-soft materials with viscoelastic contact mechanics

Simulating almost all compounds with the DFTB parameters for 69 kinds of elements



AFM, KPFM, STM/STS, band structure calculations

Application areas are extending!

Scope

We would like to provide various viewpoints to users.

From viewpoints of users in the field of bio-soft materials

Viscoelastic contact mechanics

The tapping mode AFM in liquid

From viewpoints of users in the field of semiconductors

Quantum mechanical analyses (the density functional based tight binding (DFTB) method)

Various organic and non-organic compounds made up of 69 elements



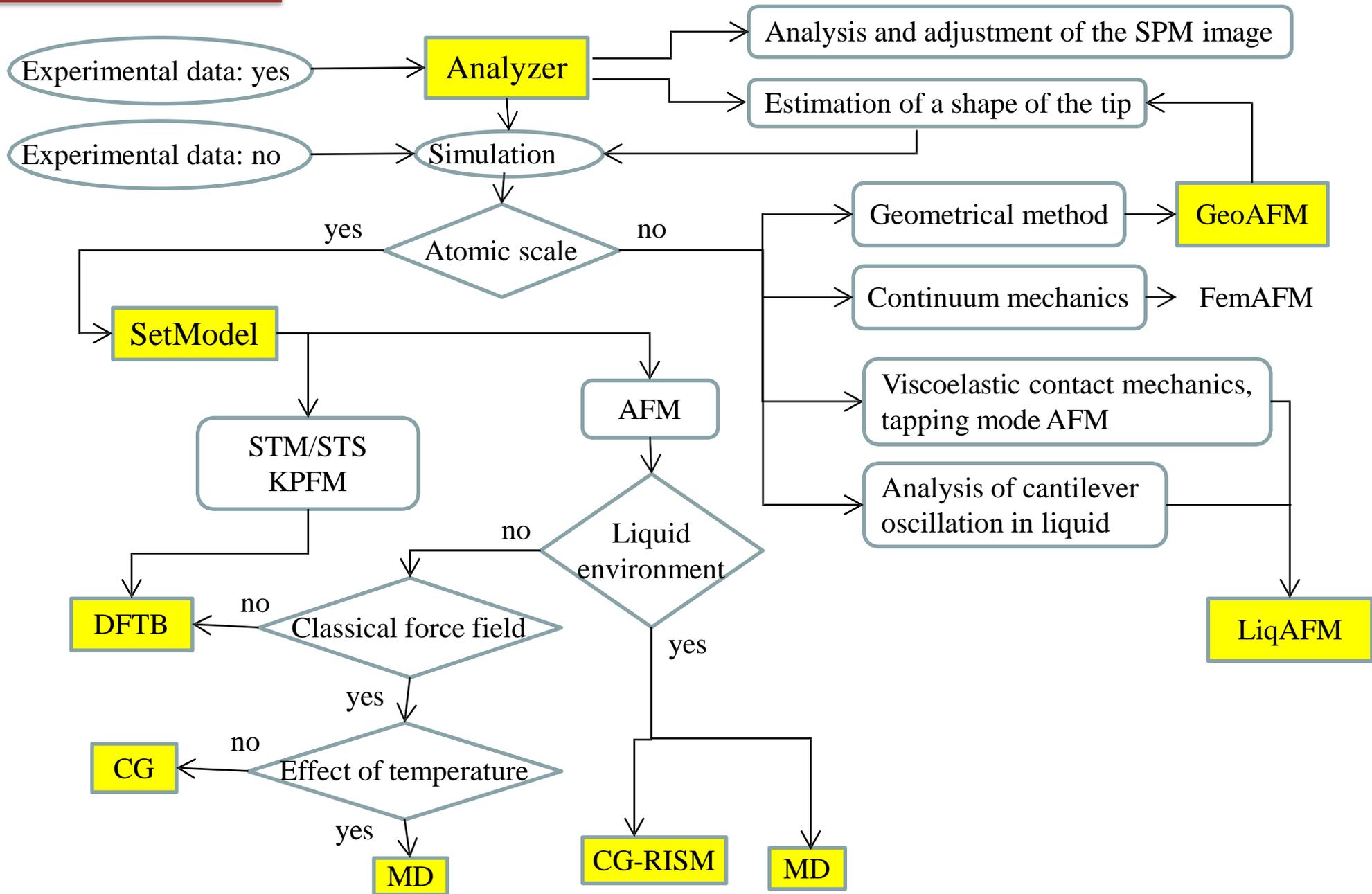
Utilizations of the SPM simulator in interdisciplinary areas are expected.



practical

advanced

Solver	Function	Characteristics
Analyzer	Experimental Image Data Processor	A preprocessor for simulations. Transformation from experimental data into input data for simulations.
SetModel	Sample Modeling	A preprocessor for simulations. Construction of molecular models from atoms for tips and samples.
GeoAFM	Geometrical Mutual AFM Simulator	A practical solver for mesoscopic and macroscopic simulations. Approximate results are obtained very quickly. The GeoAFM reconstructs the one out of the other two among three geometrical elements, a tip, a sample, and its AFM image.
FemAFM	Finite Element Method AFM Simulator	Considering elastic deformations of a tip and a sample, the FemAFM performs AFM simulations in mesoscopic and macroscopic scales.
LiqAFM (tapping)	Soft Material LiquidAFM Simulator Viscoelastic Contact Mechanics Simulator	Examining oscillation of a cantilever in liquid, the LiqAFM simulates the tapping mode AFM for viscoelastic materials. Using the standard theory, it calculates both the frequency shift and phase shift AFM images. The LiqAFM can analyze both soft matters and high polymers.
CG	Geometry Optimizing AFM Image Simulator	According to the classical force fields, the CG performs optimization of molecular models constructed from atoms.
MD	Molecular Dynamics AFM Image Simulator	According to the classical mechanics, the MD performs the molecular dynamics simulations.
DFTB	Quantum Mechanical SPM Simulator	According to the quantum mechanics, the DFTB calculates the force the tip applies to the surface and the tunneling current.



The database of parameters for the DFTB solver

Most types of DFTB solvers distributed generally do not disclose atomic interaction parameters for various elements.

By contrast,

Advanced Algorithm & Systems discloses atomic interaction parameters for the DFTB solver included in the SPM simulator. We prepare the quantum mechanical parameters for **69 kinds of elements**.

12 elements: H, C, N, O, P, Al, Si, Ti, Ru, W, Pt, Au

27 elements: S, F, Cl, Br, I, Ge, Ga, As, Na, Ag, Bi, Mg, Cu, Li, B

69 elements:

Transition metals: V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zr, Nb, Mo, Tc, Re, Rh, Pd, Ir, Y, Sc

Lanthanides: La, Ce, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb

Metalloids: Se, Sb, Te

Alkali metals: K, Cs, Rb

Alkaline earth metals: Ca, Ba, Sr

Base metals: Be, Zn, In, Sn, Cd, Hg, Pb

Actinoids: U

You can investigate almost all organic and non-organic compounds for STM/STS, AFM, and KPFM simulations.

The database of atomic interaction parameters for the DFTB solver

	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 Lanthanides	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
*2 Actinoids	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Elementary 27 elements

	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

Additional 32 elements

	17 Sc, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zn, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Rh, Pd, Re, Ir (Transition metals) 8
	La, Ce, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm (Lanthanides)
	4 Se, In, Sb, Te (Metalloids)
	3 K, Rb, Cs (Alkali metals)

Advanced 10 elements

	10 Be, Ca, Sr, Ba, Cd, Sn, Hg, Pb, Yb, U
--	--

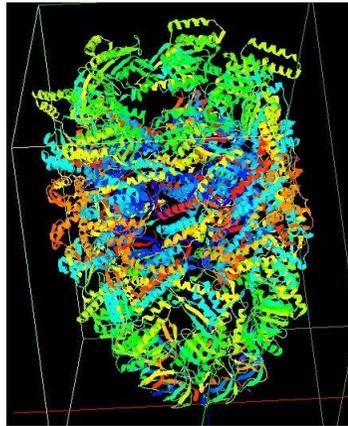
AFM simulations for bio-soft materials

You can perform AFM simulations for micrometer scale.

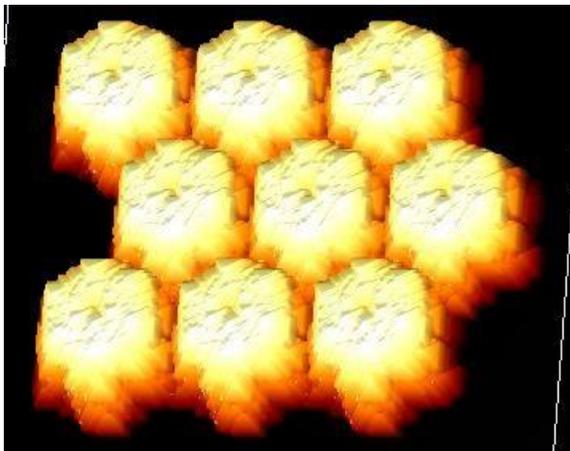
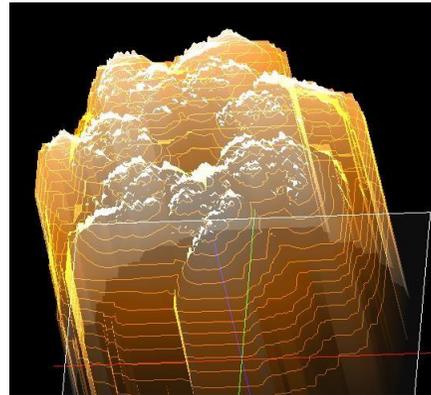
You can use three-dimensional structural data provided by the Protein Data Bank.

You can simulate large and complex protein molecules very quickly within a minute.

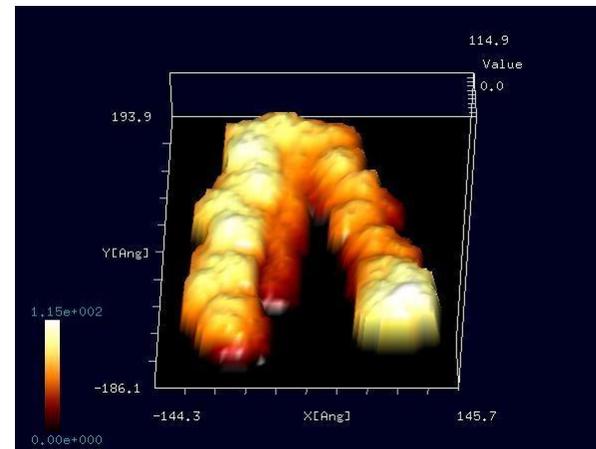
Data of a large molecule



An AFM image



A simulation of an AFM image for aligned connexons



A simulation of an AFM image for a myosin

PURCHASE TYPE

Purchase contract

Rental contract

integrated set

Standard version

A set of all solvers **WITHOUT** DFTB solver.

for biomaterials and soft materials

Professional version

A set of all solvers **WITH** DFTB solver.
You can choose a set of available chemical elements from 12 kinds, 27 kinds or 69kinds.

for all kinds of materials

each solver's set

The sets include each solver, Analyzer and SetModel.

GeoAFM set

FemAFM set

LiqAFM set

CG set

MD set

DFTB set

for biomaterials and soft materials

You can choose a set of available chemical elements from 12 kinds, 27 kinds or 69kinds.

inorganic and organic semiconductors

Software is sent by post in a CR-ROM form.

We manage the software by issuing licence files. If the maintenance fee or the rental fee is not paid, licence file will be out of date and you can't use the software.

CHARACTERISTIC OF EACH SET

Standard version

integrated set

- It includes all solvers but a DFTB solver.
- Appropriate for the AFM study on biomaterials and soft materials.
- Molecular structure data provided by Protein Data Bank can be used.
- You can study viscoelastic contact problems, such as adhesion brought about by surface tension between a tip and a sample.
- Deformation by pushing a tip on a sample is reproduced by the molecular dynamics method.
- You can study structural deformation of a sample.

Professional version

integrated set

- It includes all solvers (with DFTB solver).
- You can treat all kinds of material including inorganic semiconductors and organic semiconductors, in addition to biomaterials and soft materials.
- You can choose a set of available chemical elements from 12 kinds set, 27 kinds set and 69 kinds set for quantum mechanical solver, DFTB.
- You can treat all kinds of materials in reality because the number of available elements reaches 69.
- STM, STS, AFM and KPFM can be simulated.
- Band calculation function for a sample compound is included.
- Preprocess function for ab initio calculation software PHASE/0 (preparation for input data) is included.

GeoAFM set**each solver's set**

- It consists of GeoAFM, Analyzer and SetModel.
- Appropriate for the AFM study on biomaterials and soft materials.
- Molecular structure data provided by Protein Data Bank can be used.
- Calculation time is no more than 1 minute.

FemAFM set**each solver's set**

- It consists of FemAFM, Analyzer and SetModel.
- Appropriate for the AFM study on biomaterials and soft materials.
- You can study structural deformation of a tip and a sample by the finite element method.
- You can study viscoelastic contact problems, such as adhesion brought about by surface tension between a tip and a sample.
- Frequency shift image of AFM also can be simulated.

LiqAFM set**each solver's set**

- It consists of LiqAFM, Analyzer and SetModel.
- Appropriate for the AFM study on biomaterials and soft materials.
- You can analyze vibration of a cantilever in a liquid environment.
- You can study viscoelastic contact problems, such as adhesion brought about by surface tension between a tip and a sample.
- Frequency shift image and phase shift image of AFM can be simulated.

CG set**each solver's set**

- It consists of CG, Analyzer and SetModel.
- Appropriate for the AFM study on biomaterials and soft materials.
- It searches an energetically stable molecular structure and reproduces structural optimization.
- Force curve measured by a tip can be calculated.

MD set**each solver's set**

- It consists of MD, Analyzer and SetModel.
- Appropriate for the AFM study on biomaterials and soft materials.
- Deformation of a sample is studied by the molecular dynamics method.
- Force curve measured by a tip can be calculated.

DFTB set**each solver's set**

- It consists of DFTB, Analyzer and SetModel.
- We can use it on all area of material study such as biomaterials, soft materials, inorganic semiconductors and organic semiconductors.
- You can choose a set of available chemical elements from 12 kinds set, 27 kinds set and 69 kinds set for quantum mechanical solver, DFTB.
- You can treat all kinds of materials in reality because the number of available elements reaches 69.
- STM, STS, AFM and KPFM can be simulated.
- Band calculation function for a sample compound is included.
- Preprocess function for ab initio calculation software PHASE/0 is included.

Contract systems and prices for the integrated type of the SPM Simulator

(DFTB 69 elements included as a standard option)

(Japanese yen)

Standard Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	1,600,000	2,700,000
	Maintenance cost	300,000/year	400,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	810,000/year	1,080,000/year
	Price for the 4 th year and later	400,000/year	600,000/year

Standard Type contains all solvers without DFTB.

It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials.

For example, an academic institution will pay 1,900,000 yen in total for the 1st year in case of the purchase contract.

Professional Type	DFTB 12 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,100,000	3,500,000
	Maintenance cost	300,000/year	480,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	900,000/year	1,200,000/year
	Price for the 4 th year and later	500,000/year	700,000/year

Professional Type contains all solvers. This table is for 12 elements selected.

It is available for all material fields. (Revised in July 2017. DFTB 69 elements included as a standard option.)

Contract systems and prices for the integrated type of the SPM Simulator

(Japanese yen)

Professional Type	DFTB 27 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,100,000	3,500,000
	Maintenance cost	300,000/year	480,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	900,000/year	1,200,000/year
	Price for the 4 th year and later	500,000/year	700,000/year

Professional Type contains all solvers. This table is for 27 elements selected.

It is available for all material fields. (Revised in July 2017. DFTB 69 elements included as a standard option.)

Professional Type	DFTB 69 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,100,000	3,500,000
	Maintenance cost	300,000/year	480,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	900,000/year	1,200,000/year
	Price for the 4 th year and later	500,000/year	700,000/year

Professional Type contains all solvers. This table is for 69 elements selected.

It is available for all material fields. (Revised in July 2017. DFTB 69 elements included as a standard option.)

Contract systems and prices for the component type of the SPM Simulator

(Japanese yen)

GeoAFM Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	1,400,000	1,600,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	500,000/year	700,000/year
	Price for the 4 th year and later	450,000/year	550,000/year

GeoAFM Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and GeoAFM .

It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials. (Revised in July 2017. We can sell each solver to you.)

FemAFM Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	1,400,000	1,800,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	500,000/year	700,000/year
	Price for the 4 th year and later	450,000/year	550,000/year

FemAFM Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and FemAFM .

It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials. (Revised in July 2017. We can sell each solver to you.)

Contract systems and prices for the component type of the SPM Simulator

(Japanese yen)

LiqAFM Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	1,500,000	1,900,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	500,000/year	700,000/year
	Price for the 4 th year and later	450,000/year	550,000/year

LiqAFM Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and LiqAFM .

It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials. (Revised in July 2017. We can sell each solver to you.)

CG Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	1,500,000	1,900,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	500,000/year	700,000/year
	Price for the 4 th year and later	550,000/year	650,000/year

CG Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and CG .

It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials. (Revised in July 2017. We can sell each solver to you.)

Contract systems and prices for the component type of the SPM Simulator

(Japanese yen)

MD Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	1,500,000	1,900,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	500,000/year	700,000/year
	Price for the 4 th year and later	550,000/year	650,000/year

MD Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and MD.

It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials. (Revised in July 2017. We can sell each solver to you.)

DFTB Type	DFTB 12 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,000,000	2,500,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	600,000/year	800,000/year
	Price for the 4 th year and later	480,000/year	600,000/year

DFTB Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and DFTB.

This table is for 12 elements selected.

It is suitable for the fields of the inorganic/organic materials such as the semiconductors. (Revised in July 2017. We can sell each solver to you.)

Contract systems and prices for the component type of the SPM Simulator (Japanese yen)

DFTB Type	DFTB 27 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,000,000	2,500,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	800,000/year	1,000,000/year
	Price for the 4 th year and later	480,000/year	600,000/year

DFTB Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and DFTB.
This table is for 27 elements selected.
It is suitable for the fields of the inorganic/organic materials such as the semiconductors.
(Revised in July 2017. We can sell each solver to you.)

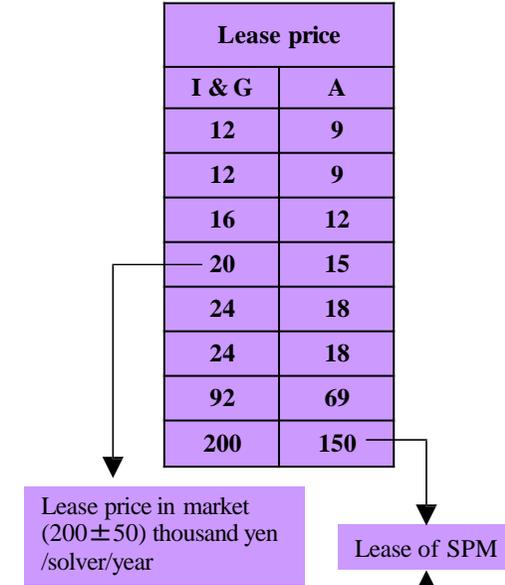
DFTB Type	DFTB 69 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,000,000	2,500,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	600,000/year	800,000/year
	Price for the 4 th year and later	480,000/year	600,000/year

DFTB Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and DFTB.
This table is for 69 elements selected.
It is suitable for the fields of the inorganic/organic materials such as the semiconductors.
(Revised in July 2017. We can sell each solver to you.)

Setting prices of the seven component solvers in the SPM Simulator (Purchase/Lease)

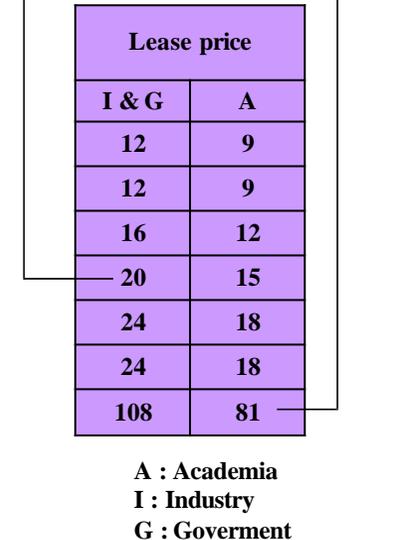
(Thousand Japanese yen)

Professional Type		Difficulty	Purchase prices of solvers with economies of scale						
			7	6	5	4	3	2	1
Analyzer	Digital Image Processor for Experimental Data	0.60	206	221	237	253	269	284	300
GeoAFM	Geometrical Mutual AFM Simulator	0.60	206	221	237	253	269	284	300
FemAFM	Finite Element Method AFM Simulator	0.80	274	295	316	337	358	379	400
LiqAFM	Soft Material Liquid AFM Simulator	1.00	343	369	395	421	448	474	500
CG	Geometry Optimizing AFM Image Simulator	1.20	411	443	474	506	537	569	600
MD	Molecular Dynamics AFM Image Simulator	1.20	411	443	474	506	537	569	600
DFTB	Quantum Mechanical SPM Simulator	1.60	548	590	632	673	716	785	800
Sum of the setting prices of seven solvers			2,399	Sum of the setting prices of seven solvers					3,500
Basic price for Academia with economies of scale				Base price for Industry & Government					
Special treatment for academia 342.9/500			2,399	(It compares favourably with the market price)					3,500



(Thousand Japanese yen)

Standard Type		Difficulty	Purchase prices of solvers with economies of scale					
			6	5	4	3	2	1
Analyzer	Digital Image Processor for Experimental Data	0.60	178	202	227	251	276	300
GeoAFM	Geometrical Mutual AFM Simulator	0.60	178	202	227	251	276	300
FemAFM	Finite Element Method AFM Simulator	0.80	237	270	302	335	367	400
LiqAFM	Soft Material Liquid AFM Simulator	1.00	296	337	378	419	459	500
CG	Geometry Optimizing AFM Image Simulator	1.20	356	404	453	502	551	600
MD	Molecular Dynamics AFM Image Simulator	1.20	356	404	453	502	551	600
Sum of the setting prices of seven solvers			1,601	Sum of the setting prices of six solvers				2,700
Basic price for Academia with economies of scale				Base price for Industry & Government				
Special treatment for academia 160/270				(It compares favourably with the market price)				



Contract systems and prices for the integrated type of the SPM Simulator
 (This is not an official version. DLVO functions and DFTB 111 elements
 will be added in future. These are reference prices.)

(Japanese yen)

Standard Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	1,600,000	2,700,000
	Maintenance cost	300,000/year	400,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	810,000/year	1,080,000/year
	Price for the 4 th year and later	400,000/year	600,000/year

**Standard Type contains all solvers without DFTB.
 It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials.**

For example, an academic institution will pay 1,900,000 yen in total for the 1st year in case of the purchase contract.

Professional Type	DFTB 12 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,100,000	3,500,000
	Maintenance cost	300,000/year	480,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	900,000/year	1,200,000/year
	Price for the 4 th year and later	500,000/year	700,000/year

**Professional Type contains all solvers. This table is for 12 elements selected.
 It is available for all material fields.**

Contract systems and prices for the integrated type of the SPM Simulator

(Japanese yen)

Professional Type	DFTB 27 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,700,000	4,500,000
	Maintenance cost	500,000/year	600,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	1,000,000/year	1,400,000/year
	Price for the 4 th year and later	650,000/year	800,000/year

**Professional Type contains all solvers. This table is for 27 elements selected.
It is available for all material fields.**

Professional Type	DFTB 69 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	3,430,000	5,000,000
	Maintenance cost	500,000/year	600,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	1,500,000/year	2,000,000/year
	Price for the 4 th year and later	650,000/year	800,000/year

**Professional Type contains all solvers. This table is for 69 elements selected.
It is available for all material fields.**

Contract systems and prices for the component type of the SPM Simulator

(Japanese yen)

GeoAFM Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	1,680,000	2,100,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	720,000/year	900,000/year
	Price for the 4 th year and later	450,000/year	550,000/year

**GeoAFM Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and GeoAFM .
It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials.**

FemAFM Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	1,840,000	2,300,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	800,000/year	1,000,000/year
	Price for the 4 th year and later	450,000/year	550,000/year

**FemAFM Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and FemAFM .
It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials.**

Contract systems and prices for the component type of the SPM Simulator

(Japanese yen)

LiqAFM Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,000,000	2,500,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	880,000/year	1,100,000/year
	Price for the 4 th year and later	450,000/year	550,000/year

**LiqAFM Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and LiqAFM .
It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials.**

CG Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,000,000	2,500,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	880,000/year	1,100,000/year
	Price for the 4 th year and later	450,000/year	550,000/year

**CG Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and CG .
It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials.**

Contract systems and prices for the component type of the SPM Simulator

(Japanese yen)

MD Type		Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,000,000	2,500,000
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	880,000/year	1,100,000/year
	Price for the 4 th year and later	450,000/year	550,000/year

**MD Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and MD.
It is suitable for the fields of the biotechnology and the soft-materials.**

DFTB Type	DFTB 12 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,640,000 + parameter fee	3,300,000 + parameter fee
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	720,000/year	900,000/year
	Price for the 4 th year and later	480,000/year	600,000/year

**DFTB Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and DFTB.
This table is for 12 elements selected.**

It is suitable for the fields of the inorganic/organic materials such as the semiconductors.

Contract systems and prices for the component type of the SPM Simulator

(Japanese yen)

DFTB Type	DFTB 27 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,640,000 + parameter fee	3,300,000 + parameter fee
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	800,000/year	1,000,000/year
	Price for the 4 th year and later	480,000/year	600,000/year

DFTB Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and DFTB.

This table is for 27 elements selected.

It is suitable for the fields of the inorganic/organic materials such as the semiconductors.

DFTB Type	DFTB 69 elements	Academia	Industry, Government
Purchase	Price for the 1 st year	2,640,000 + parameter fee	3,300,000 + parameter fee
	Maintenance cost	350,000/year	350,000/year
Lease	Price for the 1 st , 2 nd and 3 rd year	880,000/year	1,100,000/year
	Price for the 4 th year and later	480,000/year	600,000/year

DFTB Type contains a set of three solvers; Analyzer, SetModel and DFTB.

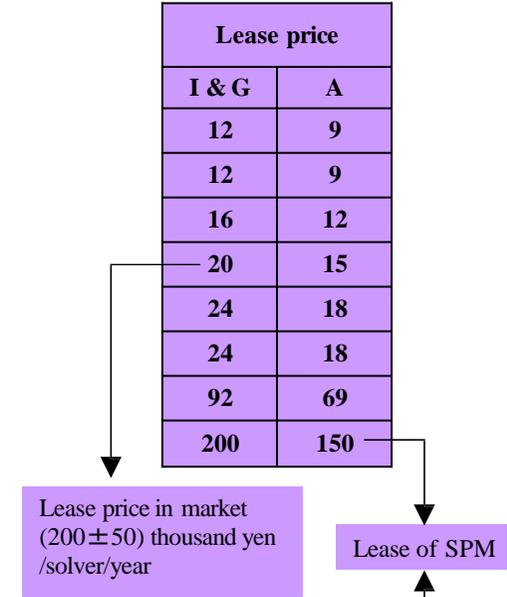
This table is for 69 elements selected.

It is suitable for the fields of the inorganic/organic materials such as the semiconductors.

Setting prices of the seven component solvers in the SPM Simulator (Purchase/Lease)

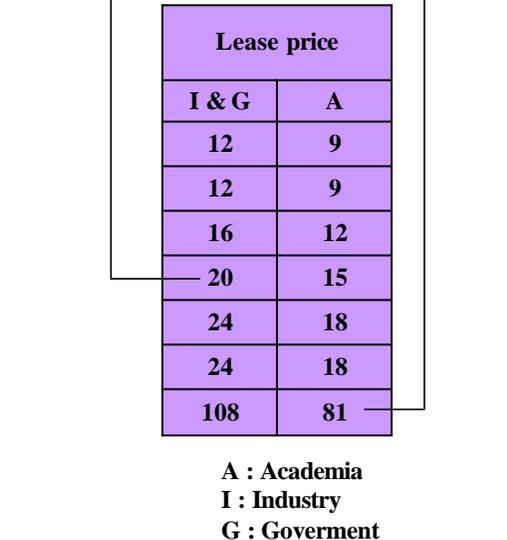
(Thousand Japanese yen)

Professional Type		Difficulty	Purchase prices of solvers with economies of scale						
			7	6	5	4	3	2	1
Analyzer	Digital Image Processor for Experimental Data	0.60	206	221	237	253	269	284	300
GeoAFM	Geometrical Mutual AFM Simulator	0.60	206	221	237	253	269	284	300
FemAFM	Finite Element Method AFM Simulator	0.80	274	295	316	337	358	379	400
LiqAFM	Soft Material Liquid AFM Simulator	1.00	343	369	395	421	448	474	500
CG	Geometry Optimizing AFM Image Simulator	1.20	411	443	474	506	537	569	600
MD	Molecular Dynamics AFM Image Simulator	1.20	411	443	474	506	537	569	600
DFTB	Quantum Mechanical SPM Simulator	4.60	1,577	1,698	1,818	1,939	2,059	2,180	2,300
Sum of the setting prices of seven solvers			3,429			Sum of the setting prices of seven solvers			5,000
Basic price for Academia with economies of scale						Base price for Industry & Government			
Special treatment for academia 342.9/500			3,429			(It compares favourably with the market price)			5,000



(Thousand Japanese yen)

Standard Type		Difficulty	Purchase prices of solvers with economies of scale						
			6	5	4	3	2	1	
Analyzer	Digital Image Processor for Experimental Data	0.60	178	202	227	251	276	300	
GeoAFM	Geometrical Mutual AFM Simulator	0.60	178	202	227	251	276	300	
FemAFM	Finite Element Method AFM Simulator	0.80	237	270	302	335	367	400	
LiqAFM	Soft Material Liquid AFM Simulator	1.00	296	337	378	419	459	500	
CG	Geometry Optimizing AFM Image Simulator	1.20	356	404	453	502	551	600	
MD	Molecular Dynamics AFM Image Simulator	1.20	356	404	453	502	551	600	
Sum of the setting prices of seven solvers			1,601			Sum of the setting prices of six solvers			2,700
Basic price for Academia with economies of scale						Base price for Industry & Government			
Special treatment for academia 160/270						(It compares favourably with the market price)			



Guidance for the flexible operation of a transaction, not a purchase contract, that is a special treatment to listen to your request

- We propose a price down by a reduction of the number of elements for DFTB calculation.
- We propose a price down for business partnerships such as SPM device makers, sales agencies and strategic collaborators.
- If you make a lease contract, we propose a plan to decrease an initial payment by extending the contract period, and decreasing a lease price per month.
- We propose an additional estimate for a customized development, a commission of simulation, a commission of consultation and etc.

- 1) Those who intend to try to learn the SPM Simulator before introduction of the software.
- 2) Those who intend to try the SPM Simulator by the use of a sample material of your interest.
- 3) Those who intend to verify the functions of the SPM Simulator before purchase the software.
We propose a consultation to try your own theme, to help your calculation and to evaluate the software product.
- 4) Those who intend to entrust a calculation of your own materials or samples that you have an interest.
- 5) Those who intend to entrust a consultation of the SPM Simulator with a function of a viscoelastic contact analyses.
We provide the operation navigation system for the SPM Simulator, so that you learn the skills to use the Simulator by self OJT from a beginner to a nonspecialist.
https://www.aasri.jp/pub/spm/assistant/SPM_Simulator_assistant_top.htm
- 6) Those who use the PHASE system software.
<http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/event/event.php?id=77>
<https://azuma.nims.go.jp/events/semi2015/semi20160119>