

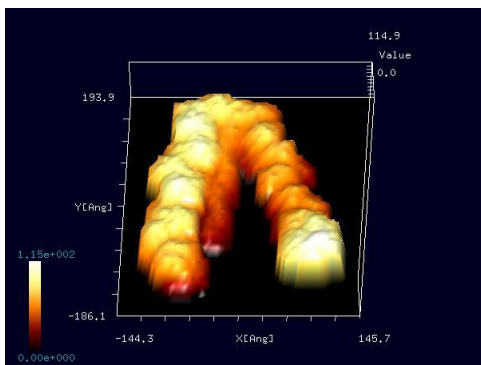
SPM シミュレータ

理論と実験の融合: 走査プローブ顕微鏡シミュレータ

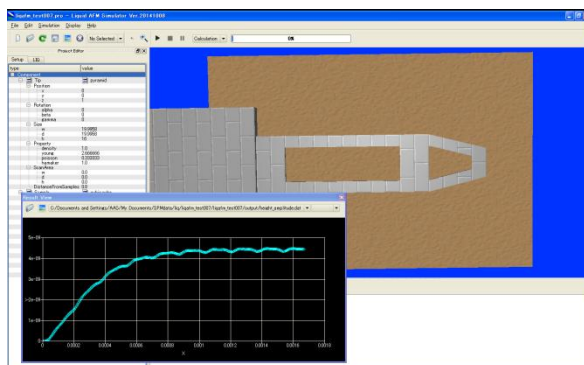
問合せ先 株式会社Advanced Algorithm & Systems
 代表取締役 柿沼良輔 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿ISビル 7F
 TEL:03-3447-5501 FAX:03-3447-4100 E-mail:r_k@asri.jp

SPM シミュレータは以下の 8 個のソルバの集合体です

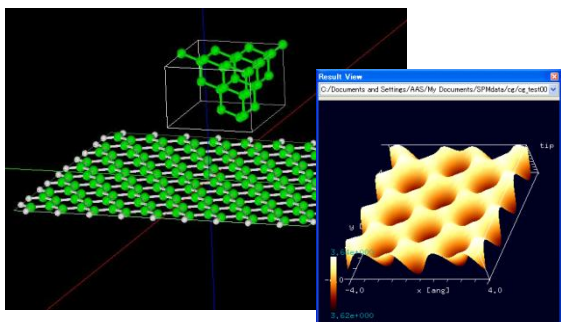
ソルバ名	機能	特徴
Analyzer	実験データ画像処理プロセッサ	探針形状の予測と形状効果補正
SetModel	試料・探針の原子モデル作成	シミュレーションの前処理、探針・試料の原子構造モデルを作成
GeoAFM	幾何学法交互予測 AFM シミュレーション	メゾからマクロスケールでのシミュレーション 試料構造・探針構造・AFM 像の二つから、残りを高速で予測 液中・大気中・ソフトマター全てに対応
FemAFM	連続弾性体 AFM シミュレータ	試料・探針の弾性変形を考慮して、メゾからマクロスケールの解像度で AFM イメージを計算
LiqAFM	液中カンチレバー振動解析・粘弾性凝着系 AFM 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 (液中)ソフトマター、高分子などに適用可能
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



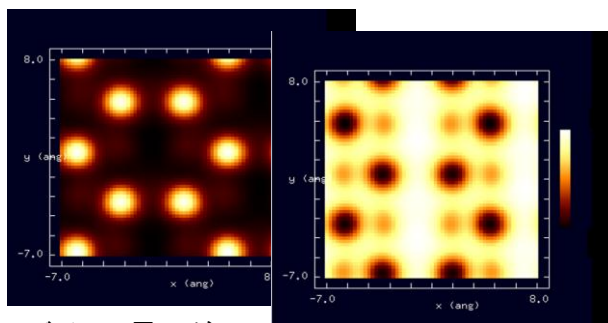
GeoAFM による生体高分子ミオシン V の AFM 像シミュレーション



LiqAFM による液体中のカンチレバーの振幅の時間変化



CGによる、ダイヤモンド探針での、グラフェンシートのカ最小モード AFM シミュレーション



バイアス電圧が正の場合 バイアス電圧が負の場合

DFTBによる Si(001)-c(4x2)表面の STM シミュレーション

DFTB(密度汎関数法)シミュレーションでは、69 種類の元素が使用可能です

詳しい情報が以下の Web ページにまとめられています。ご参照ください。
https://www.asri.jp/pub/spm/about_spm.html