

# DFTB (量子論的SPMシミュレータ)

AdvancedAlgorithm & Systems Inc.  
中目黒court

会社URL <https://www.aasri.jp/> メールアドレス [r\\_k@aasri.jp](mailto:r_k@aasri.jp)

- ・バンド構造/電子状態密度の高速計算
- ・原子レベルでのSPMシミュレーション

密度汎関数法に基づく強束縛法という計算手法を採用している  
為、計算速度が速く、更に正確にバンド構造やSPM像をシミュ  
レーションする事が可能となっております。

# DFTBの操作方法

左側にある**Project Editor**にパラメータを入力するだけで、計算が開始されます。  
また**Fileボタン**から**Sample Projectフォルダ**の**Qt Project file**を開くと何もパラメータを調整せずとも計算を開始することができます。

The screenshot displays the SPM Simulator software interface. The main window is titled "kapton\_afm06.pro - SPM Simulator". The interface is divided into several sections:

- Project Editor:** A table with columns for "property", "value", "unit", and "descriptions". It lists various simulation parameters such as "mode", "title", "two\_body\_parameter\_folder", "tip" (amplitude, k\_cantilever, resonant\_freq), "Ndiv", "CG\_param", "Broyden\_param", "Fvdw", "tip\_bias\_voltage", "tip\_charge\_neutrality", and "translational\_vector".
- 3D Visualization:** A central window showing a 3D model of a molecular structure (Kapton AFM) on a tip, with coordinate axes (X, Y, Z) and a color-coded surface.
- Log View:** A bottom-right window displaying simulation results, including energy levels (Lpore, DelE, ResF, Efrm) and calculation statistics (CPU time).

property	value	unit	descriptions
mode	DFTB_AFM		
title	kapton		not used in calculation
two_body_parameter_folder	two_body_parameters		
tip			
amplitude	160	Ang	
k_cantilever	40	N/m	
resonant_freq	170	kHz	
Ndiv			
X	60		
Y	30		
Z	10		
CG_param			
MaxIter	0		0: No structural optimization
TolForce	1	nN	
TolEnergy	0.001	eV	
displacement	0.1	Ang	
trial_point_number	10		
Broyden_param			
MaxIter	30		
TolEnergy	10	10 <sup>-6</sup> eV	
output_eigenvalue	on		on/off
Fvdw			
tip_shape	conical		
height_of_highest_adsorbed_molecule	0.00000	Ang	
Hamaker_const	0.22000	aJ/mol	
apex_angle	160	degree	
tip_height	1000.00	Ang	
radius_of_tip_apex	1.00000	Ang	
tip_bias_voltage			
minimum	4	V	
maximum	4	V	
Ndiv	100		
Ndiv_kpoints	4		
electron_temperature	50	K	
tip_charge_neutrality			
minimum	-0.1	e	
maximum	0.10000	e	
Ndiv	4		
translational_vector			
a			
X	16.3578	Ang	

# 69種類の原子間相互作用パラメータを用意

標準型

区分1:12元素 H, C, N, O, P, Al, Si, Ti, Ru, W, Pt, Au

区分2:27元素 S, F, Cl, Br, I, Ge, Ga, As, Na, Ag, Bi, Mg, Cu, Li, B

区分3:69元素

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, Ce, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb

半金属 Se, Sb, Te

アルカリ金属 K, Cs, Rb

アルカリ土類金属 Ca, Ba, Sr

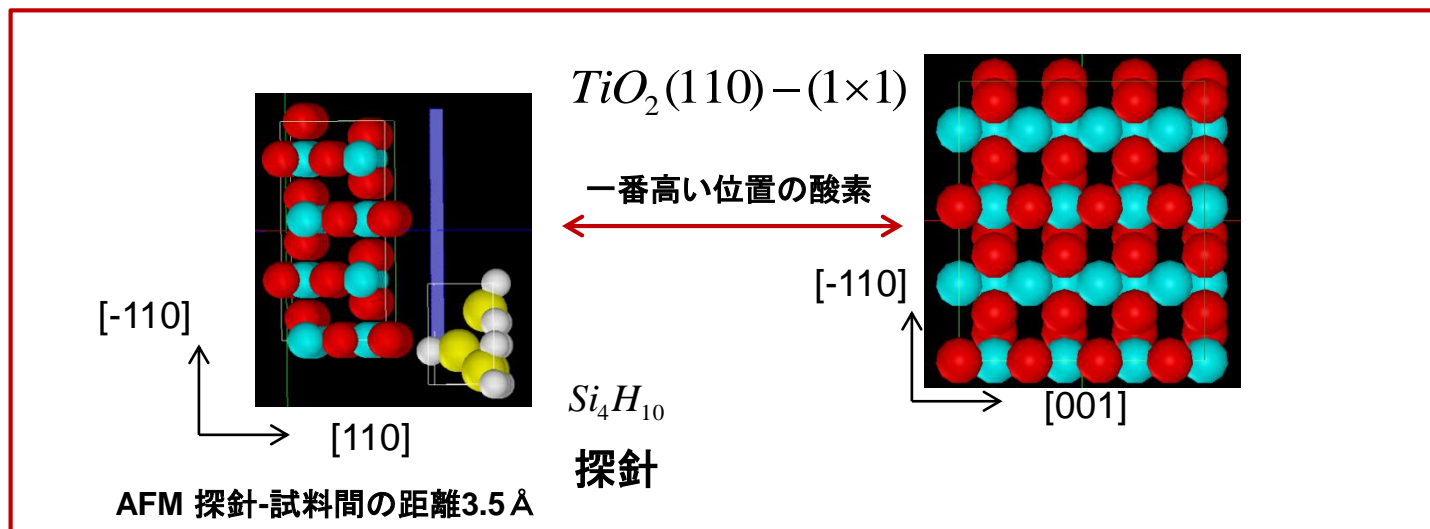
卑金属 Be, Zn, In, Sn, Cd, Hg, Pb

アクチノイド系 U

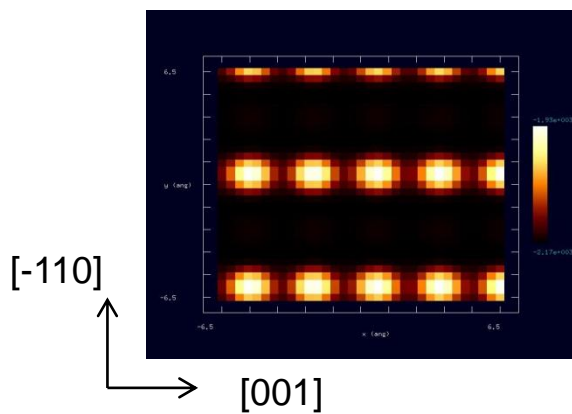
必要に応じて  
購入していただ  
く必要があります。

これにより、**ほぼ全ての**、無機・有機化合物のDFTB計算による、STM/STS, AFM, KPFMシミュレーションが可能となります

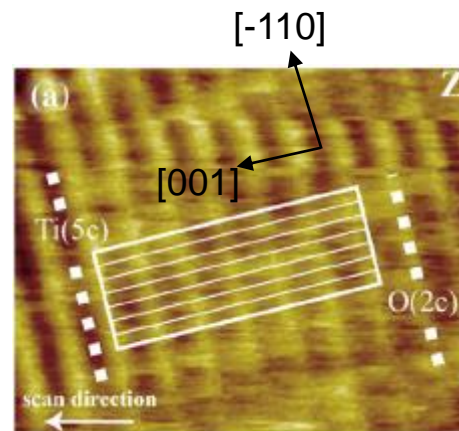
# 【DFTB】TiO<sub>2</sub>(110)面のAFM観察とシミュレーション



原子分解能で  
Bridging-oxygen  
のAFMシミュ  
レーション画像を  
再現できた!



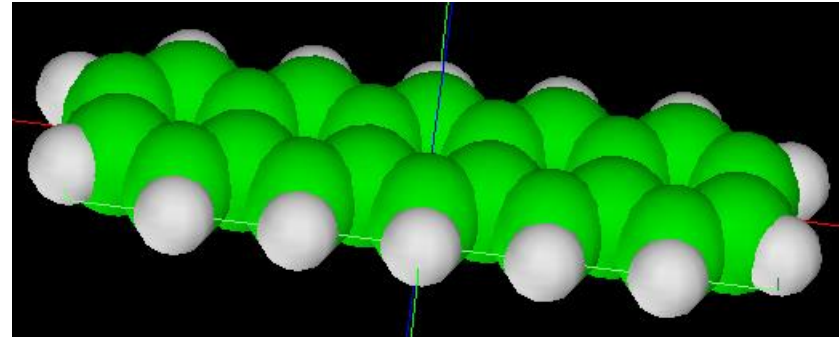
シミュレーション結果



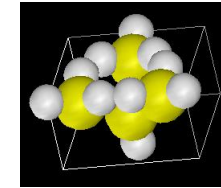
実測画像

# 【DFTB】ペンタセン分子のAFM, STM観察とシミュレーション

探針:  $\text{Si}_4\text{H}_{10}$  (AFM, KPFM用)  
または  $\text{Si}_4\text{H}_9$  (STM用)  
試料: ペンタセン分子

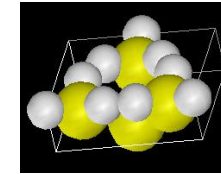


ペンタセン



$\text{Si}_4\text{H}_{10}$

AFM, KPFM用探針



$\text{Si}_4\text{H}_9$

STM用探針

## 実測画像



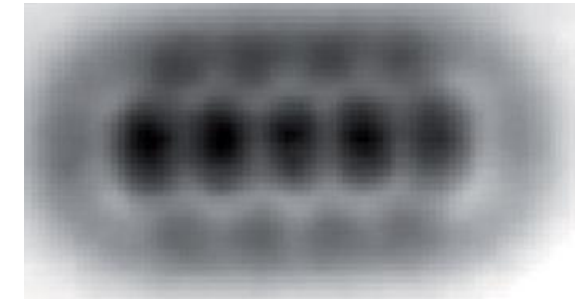
STM HOMO

Phys. Rev. Lett. 94, 026803 (2005)



STM LUMO

同左

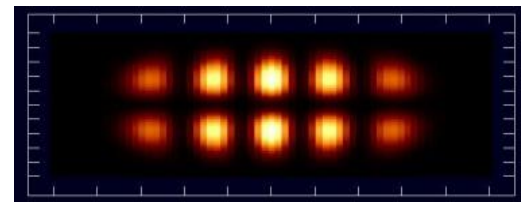


NC-AFM

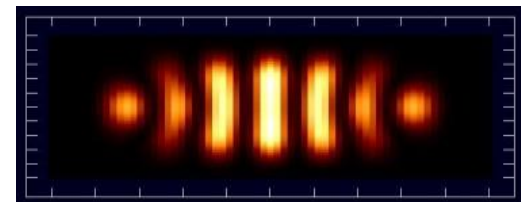
Science 325, 1110–1114 (2009)

## DFTB

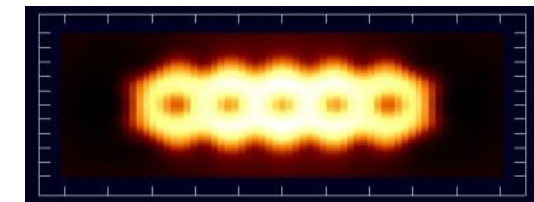
## シミュレーション 結果



STM 探針-試料間の距離4.0 Å  
探針のバイアス+1.0V



STM 探針-試料間の距離4.0 Å  
探針のバイアス-1.0V

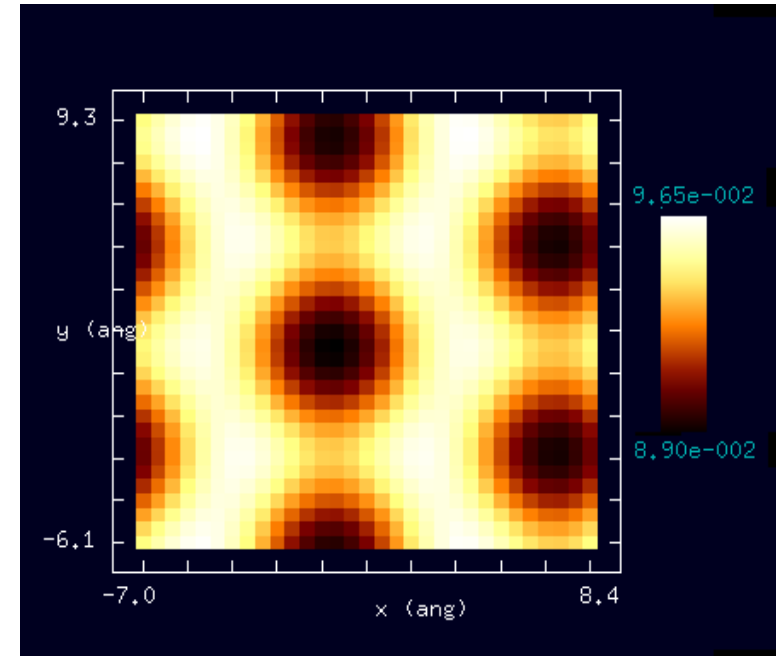
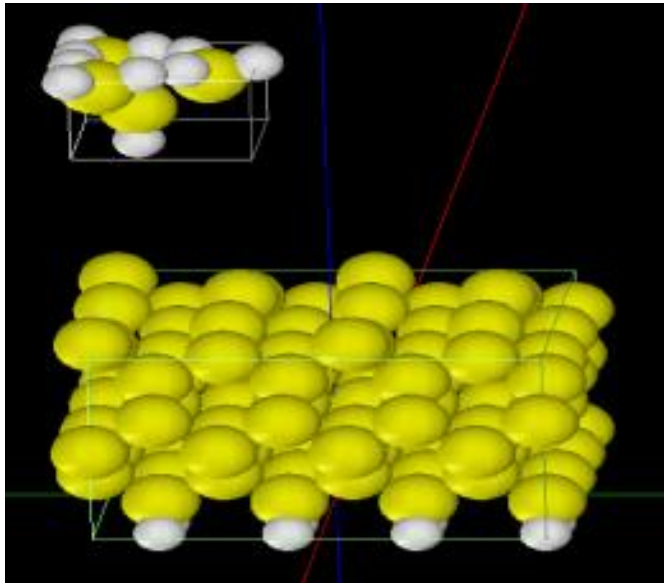


AFM 探針-試料間の距離4.0 Å

# 【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のKPFM像

探針: H-Si<sub>4</sub>H<sub>10</sub>  
試料表面: Si(001)-c(4x2)

探針-試料間の距離: 6 Å



KPFM 局所接触電位差像  
(LCPD像)

## バンド構造計算手順

(1) 調べたい結晶の構造データを文献などで調べます。

必要な情報: 空間群、格子定数、原子の位置

(2) SetModelに結晶構造情報を入力し、試料構造ファイルを作成します。

VASP形式またはCIF形式ファイルをお持ちであれば、ファイルを読み込ませるだけで結晶構造情報を自動入力できます。

(3) SPMシミュレータのグラフィック・ユーザ・インターフェース(GUI)画面で、パラメータを入力します。

必要なパラメータ: 並進ベクトル情報、k点数

(4) [計算開始ボタン](#)を押すだけです。

計算終了後、グラフィック・ユーザ・インターフェース(GUI)上にバンド構造を表示できます。

## DFTBソルバのバンド構造計算機能は、PHASE/0の利用をバックアップします

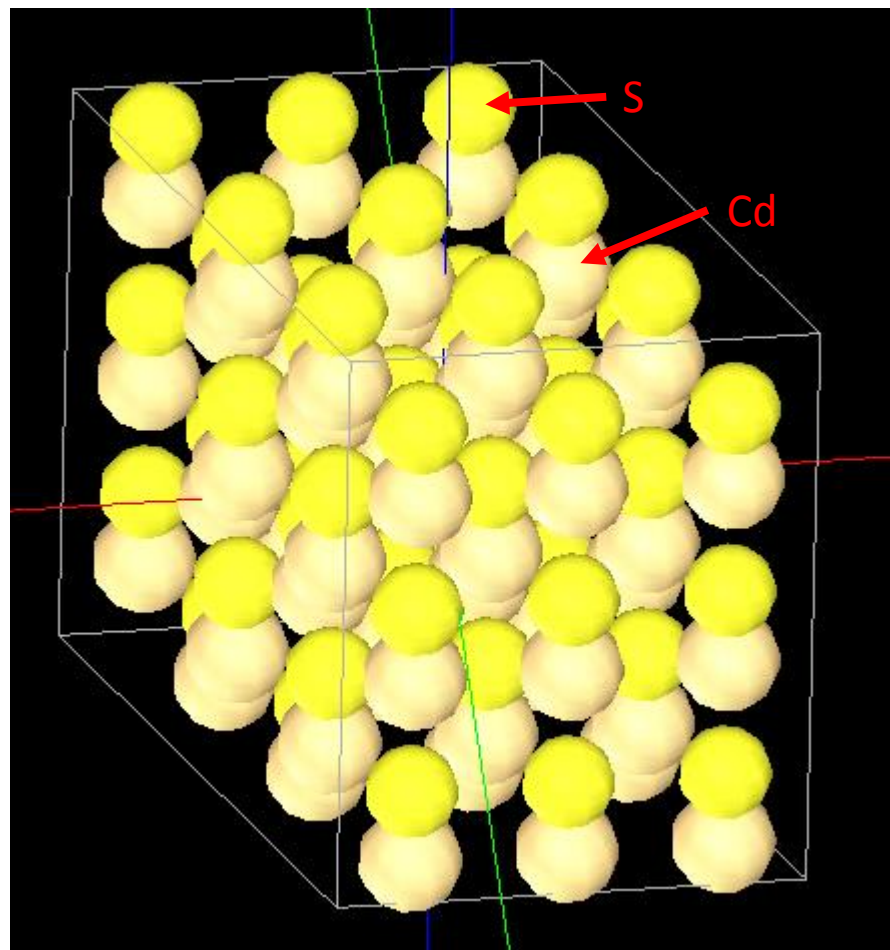
PHASE/0は物質・材料研究機構で開発された第一原理計算ソフトです。

DFTBソルバでバンド構造計算を予備的に行い、その結果を踏まえて、PHASE/0の計算に移行することができます。

DFTBは、高速で、比較的正確な計算結果を出してくれます。

DFTBでの結果を見て、計算対象となる物質のバンド構造計算が難しいか簡単か予想することができます。





## CdSの(001)面

空間群: 186

格子定数

長さ:  $a=b=4.189954$ [ang] $c=6.806707$ [ang]角度:  $\alpha=\beta=90$ [deg] $\gamma=120$ [deg]

原子の相対的位置座標:

Cd: (0.6667, 0.3333, 0.0)

S: (0.6667, 0.3333, 0.3770)

Lattice\_type: HEX

この情報が  
必要になって  
くる。

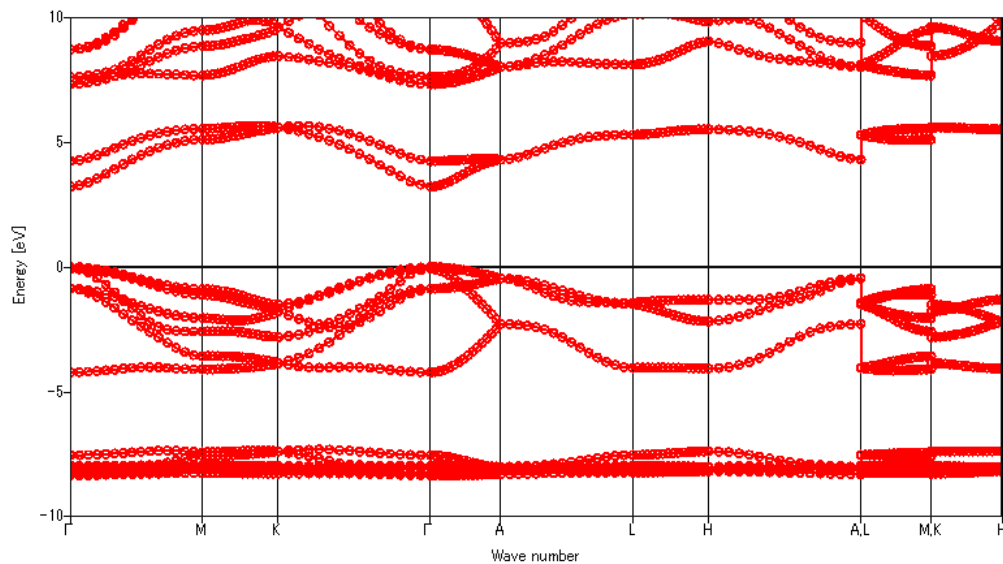
DFTBソルバーで、化合物バンド計算をする場合、以上の情報は**AFLOW (Automatic-FLOW for Materials Discovery)**というサイトを利用する事で得ることができます。

<http://aflowlib.org/>

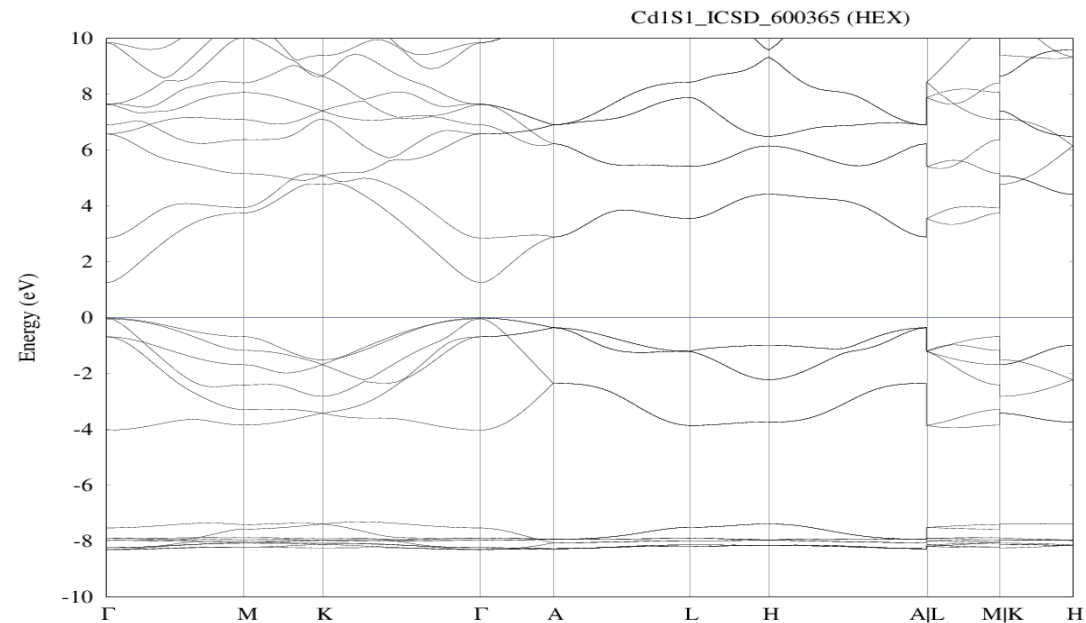


# CdSバンド構造の計算結果

## CdSのバンド構造



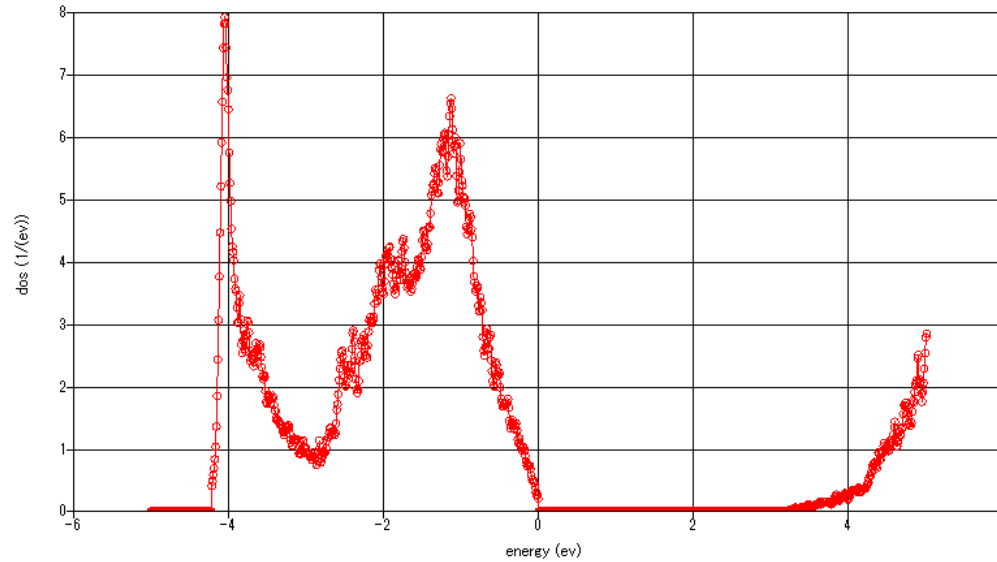
DFTBで求められたバンド構造



AFLOWで求められているバンド構造  
(<http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:9ce2472f0e485f6d>)

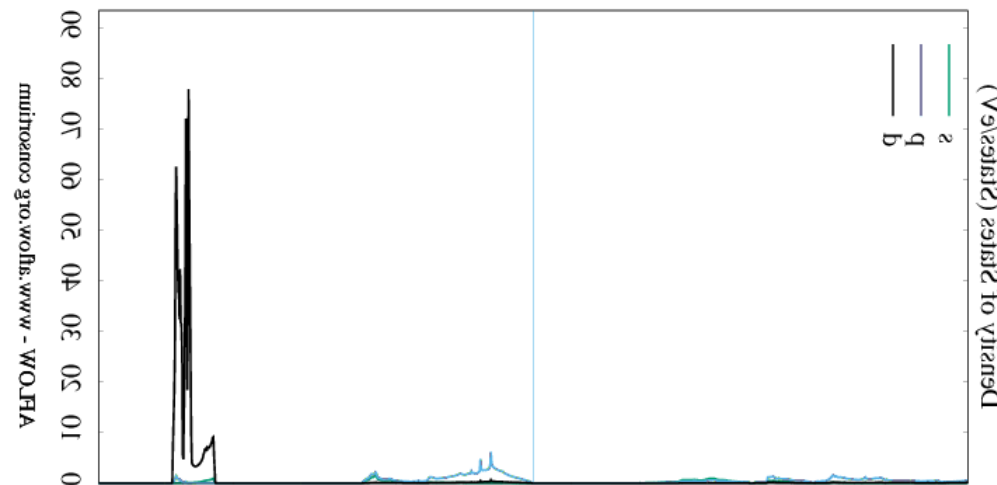
# CdS状態密度の計算結果

## CdSの状態密度



DFTBで求められた状態密度  
バンド・ギャップ 3.23[eV]

バンド・ギャップ観測値: 2.42[eV]



AFLOWで求められている状態密度  
(<http://aflowlib.org/material.php?id=aflow:9ce2472f0e485f6d>)  
バンド・ギャップ 2.6147[eV]