

初めて SPM シミュレータを使われる方に向けての

ソルバ毎 SPM シミュレータ計算事例

「SPM シミュレータ用途別機能紹介資料[Part6: 金属・無機半導体の観察]」編

株式会社 Advanced Algorithm & Systems

2017. 11. 10

1・目次

[Part6: 金属・無機半導体の観察]が提示する**計算事例（1～5）**は、用途別市場において

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

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

研究テーマでは、 金属・無機半導体

用途別市場では、

用途区分 半導体素子 ハードディスク 金属材料 セラミックス 情報通信機器

に固有の科学的知見、或は支配的条件に従う、代表的シミュレーション（アルゴリズム）に原理的に準拠しており、この用途別市場の産官学SPMユーザー様には、共通に使用される特性をもち、ユーザー所属先の事業形態・から部分を担当するか否か、の差異があるのみである。

還元すれば、これら計算事例は、用途別市場の産官学SPMユーザーに取り、原理的に共有され、ユーザー各位が共通に使用出来ることになる。

共通性に着目し、初めてSPMシミュレータを使われる方に向けての、ソルバ毎SPMシミュレータ計算事例として用意しました。計算結果の解説も記載しています。SPMシミュレータを使う時の、モデル作成を含む、基本的なシミュレーション実行例を示しています。実行例のデータファイルをダウンロードして、シミュレーションを行うための工程を知っていただき、その後、必要な箇所だけパラメータを変更すれば、ご要望に合ったシミュレーション計算を実行することができます。ソルバ毎SPMシミュレータ計算事例に用いる物質は、なるべく単純なものとし、モデル構築及び、ソルバ毎のシミュレーションパラメータ設定がどのように結果に反映するかが理解し易いよう解説します。**本編は「金属・無機半導体の観察」向けです。**

以下に参考事例モデルと作成試料モデルでの各ソルバによる計算例のリストを示します。

- 1・目次（本ページ）
- 2・GeoAFM(高速相互予測AFMシミュレータ) CalcImage (GeoAFM 探針・試料からAFM像計算)
 - ・Si(111)-(7x7)DAS構造及び作成試料Si(011)の構造データとピラミッド型探針を使用 **(計算事例1)**
 - ・類例：作成試料Si(011)構造の構造データとピラミッド型探針を使用
- 3・FemAFM(連続弾性体AFMシミュレータ) FreqShift (FemAFM 周波数シフトAFM像)
 - ・Si(001)-c(4x2)構造及び作成試料Si(011)の周波数シフトAFM像シミュレーション **(計算事例2)**
 - ・類例：Si(011)表面の周波数シフトAFM像シミュレーション
- 4・SetModel
 - ・試料 Si(011) 表面の作成方法】 **(計算事例3)**

5 ・ DFTB_STM(ConstantHeight)

- ・ Si (001)-c (4x2) 表面の STM 観察と Si (001)-c (4x2) 表面と作成試料 Si (011) 表面のシミュレーション (計算事例 4)
- ・ 類例 : Si (011) 表面の ConstHeightSTM シミュレーション
- ・ 高さ一定シミュレーション事例試料モデル Si (001)-c (4x2) 解説

6 ・ DFTB_STM(ConstantCurrent)

- ・ Si (001)-c (4x2) 表面の STM 観察と Si (001)-c (4x2) 表面と作成試料 Si (011) 表面のシミュレーション (計算事例 5)
- ・ 類例 : Si (011) 表面の ConstCurrentSTM シミュレーション
- ・ 電流一定シミュレーション事例試料モデル Si (001)-c (4x2) 解説

7 ・ 本編でのSPMシミュレータにおけるソルバー一覧

2. GeoAFM(高速相互予測 AFM シミュレータ) CalcImage 計算事例①

●GeoAFM : Si (111)-(7x7)DAS 構造及び作成試料 Si (011)の構造データとピラミッド型探針を使用

計算モード識別番号 : [GeoAFM_CalcImage_Inorganic_001]

ソルバ・モード・計算例アドレス https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/GeoAFM/CalcImage/GeoAFM_CalcImage.php

分類 : GeoAFM (探針・試料から AFM 像計算)、 μm オーダー、無機半導体

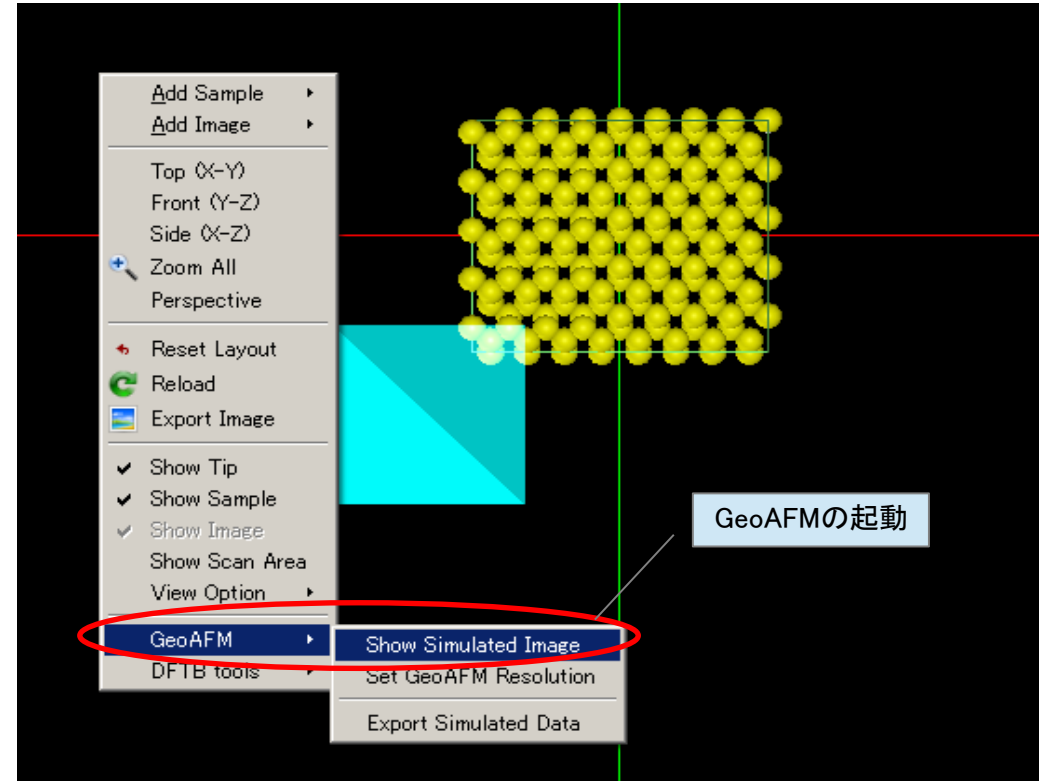
事例紹介ページを下左図に示します。

探針と試料の形状位置関係のみで計算されます。

スキャンエリアの設定は無効です。

周期境界は考慮されません。

GeoAFM は、他ソルバ選択中でも、マウス右クリックによるサブメニュー選択で起動できます (下右図)。



事例紹介ページ

探針は登録済みデータ「pyramid」(先端角度 32 度) を用います。

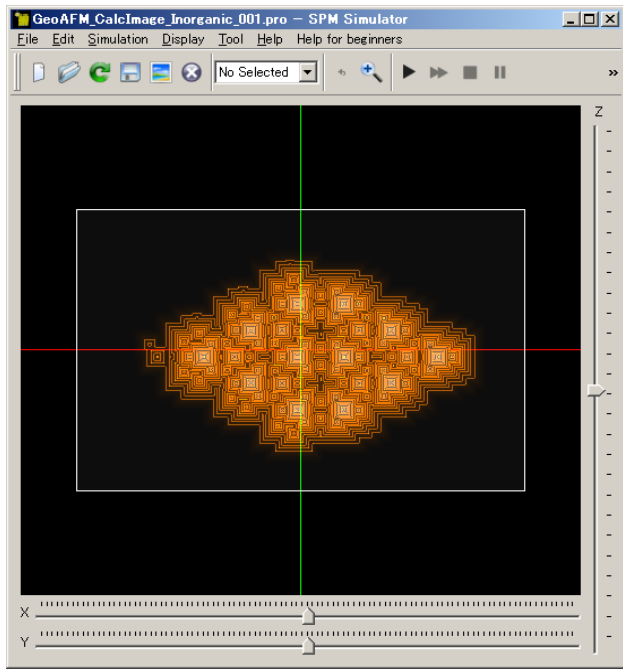
以下に、紹介事例のセットアップ条件 (下左図) とシミュレーション結果を TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

GeoAFM の起動操作

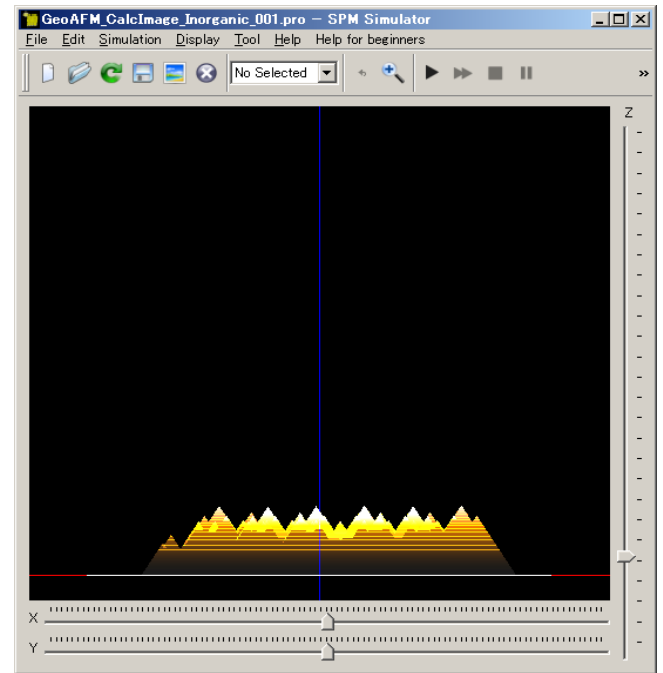
Project Editor

Setup DFTB

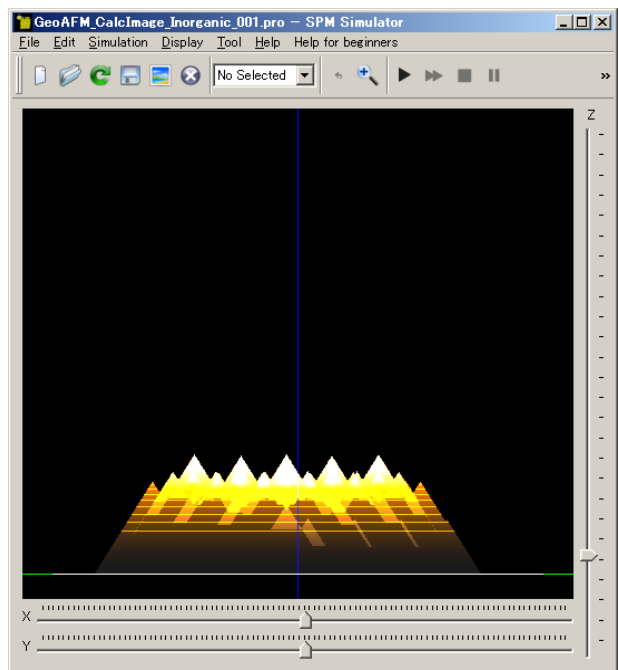
| type | value |
|---------------------|----------|
| Component | |
| Tip | pyramid |
| Position | |
| x | 0 |
| y | 0 |
| z | 0 |
| Rotation | |
| alpha | 0 |
| beta | 0 |
| gamma | 0 |
| Size | |
| w | 19.9958 |
| d | 19.9958 |
| h | 16 |
| Property | |
| young | 76.5 |
| poisson | 0.22 |
| hamaker | 50 |
| ScanArea | |
| w | 0 |
| d | 0 |
| h | 0 |
| DistanceFromSamples | -10.0601 |
| Sample | jas7.xyz |
| Position | |
| x | 0 |
| y | 0 |
| z | 0 |
| Rotation | |
| alpha | 0 |
| beta | 0 |
| gamma | 0 |
| Size | |
| w | 42.9905 |
| d | 24.8917 |
| h | 10.0691 |
| Property | |
| young | 76.5 |
| poisson | 0.22 |
| hamaker | 50 |



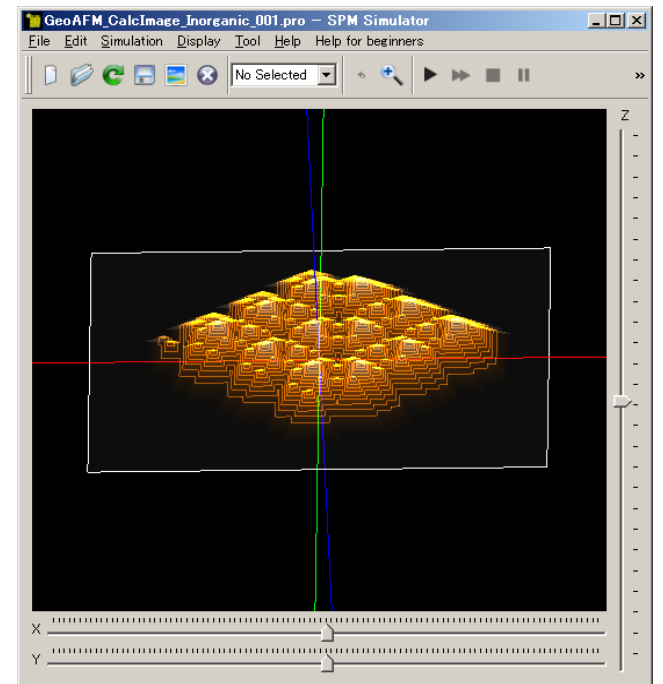
TOP



SIDE



FRONT



俯瞰

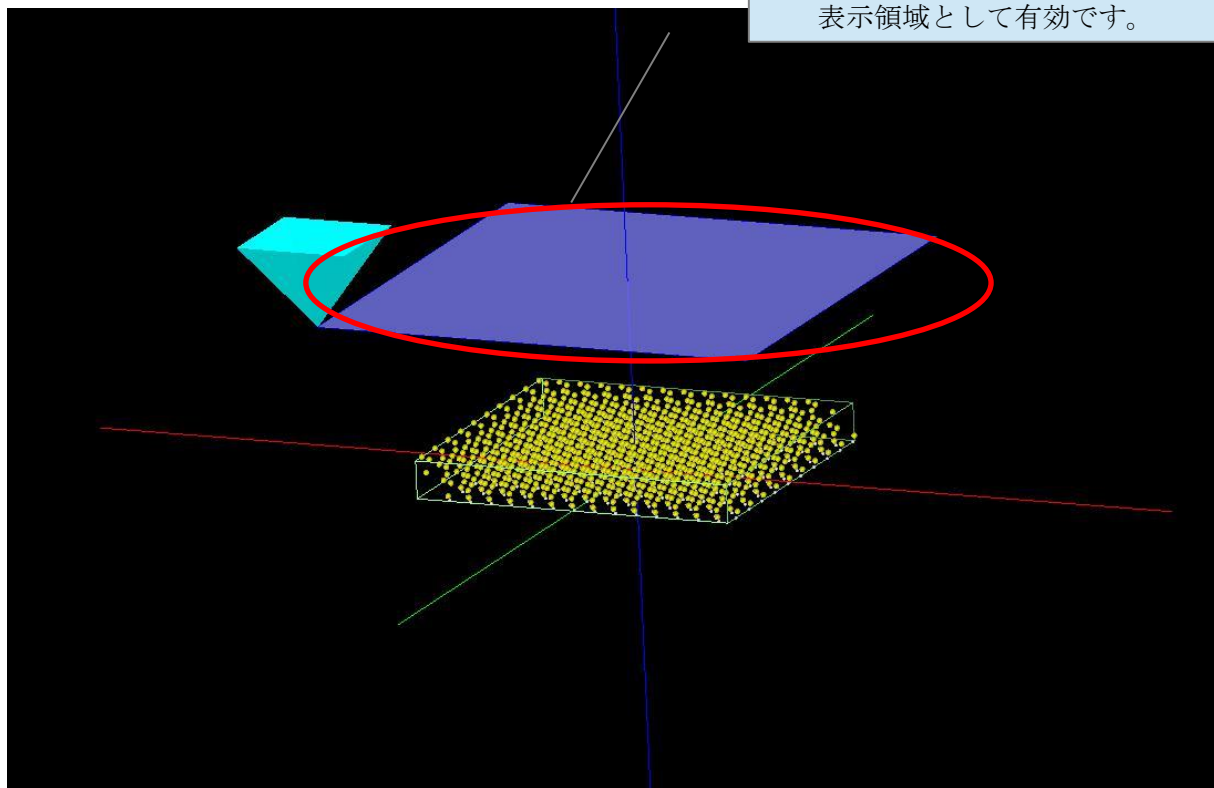
事例モデルのセットアップ条件

類例：作成試料Si(011)構造の構造データとピラミッド型探針を使用

先の事例のSi(111)-(7x7)DAS構造の代わりに、Si(011)を基本とする単位胞に置き換えます。
単位胞サイズを大きくしたSi(011)モデル「Si1_ICSD_652265(011)(7,10,2).xyz」(x=7、y=10、z=2)を用います。
探針は登録済みデータ「pyramid」(先端角度32度)を用います。

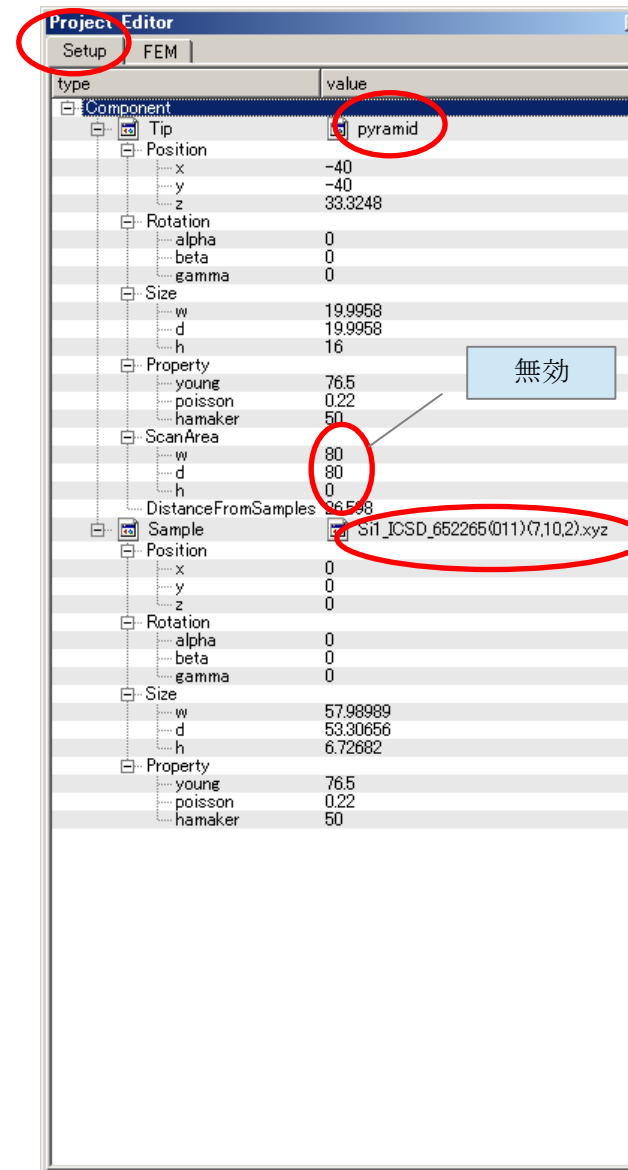
計算モード識別(番号)プロジェクト名:

[project_file_for_beginners_version_GeoAFM_CalcImage_Inorganic_001](#)

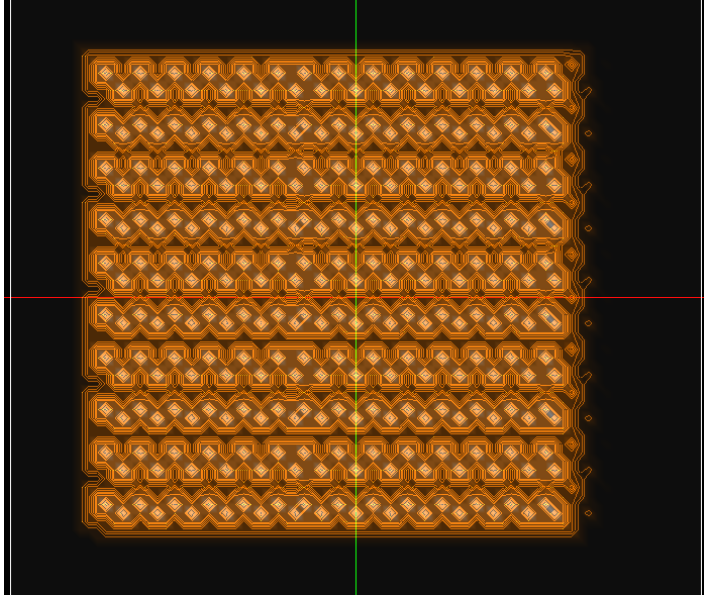


解析モデル

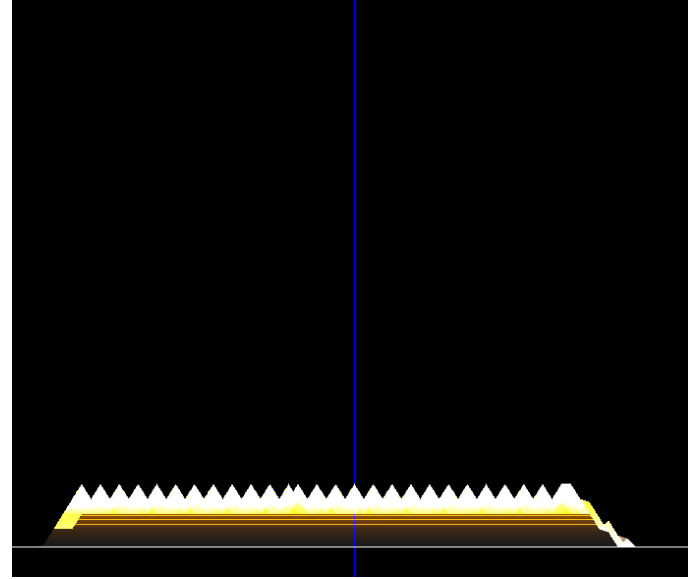
スキャンエリアの設定は無効です。
周期境界は考慮されません。



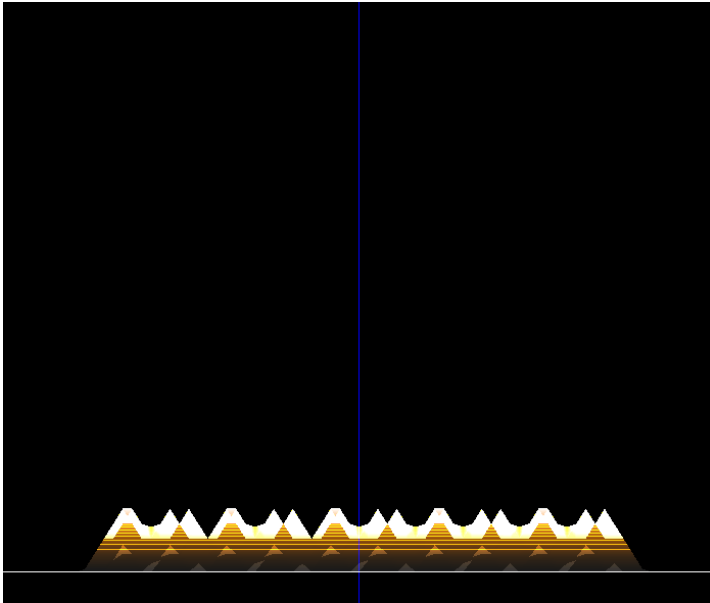
以下に、シミュレーション結果を TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。
作成試料 Si(011) の AFM 像がシミュレーションされます。



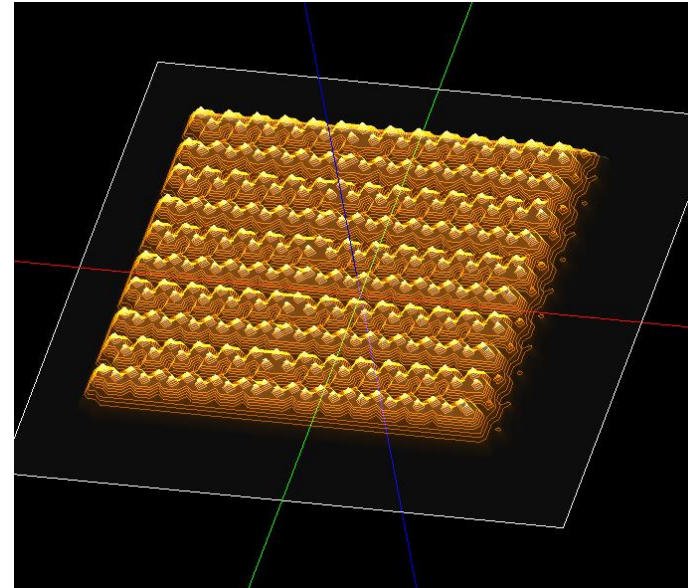
TOP



SIDE



FRONT



俯瞰図

3・FemAFM(連続弾性体 AFM シミュレータ) FreqShift 計算事例②

●FemAFM : Si (001)-c (4x2) 構造及び作成試料 Si (011) の周波数シフト AFM 像シミュレーション

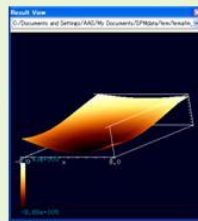
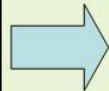
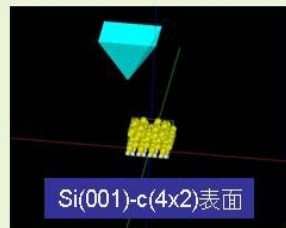
計算モード識別番号 : [FemAFM_FreqShift_Inorganic_001]

ソルバ・モード・計算例アドレス https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/FemAFM/FreqShift/FemAFM_FreqShift.php

分類 : FemAFM 周波数シフトAFM像、 μm オーダー、無機半導体

【FemAFM】周波数シフト像モード

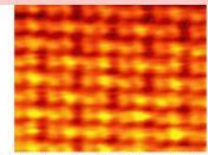
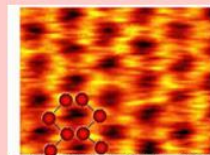
カンチレバーを外力によって一定の周波数で振動させながら、非接触で試料表面に近付け、探針-試料間の相互作用により生じる周波数シフトの分布画像を求める状況に対応しています。



cf. Experiment

Si(001)-c(4x2)

Si(001)-p(2x1)



(a) 弱い相互作用 ($\Delta f = -10\text{Hz}$) (b) 強い相互作用 ($\Delta f = -30\text{Hz}$)

図1: Si (001) 表面のNC-AFM像 (40 Å x 30 Å)

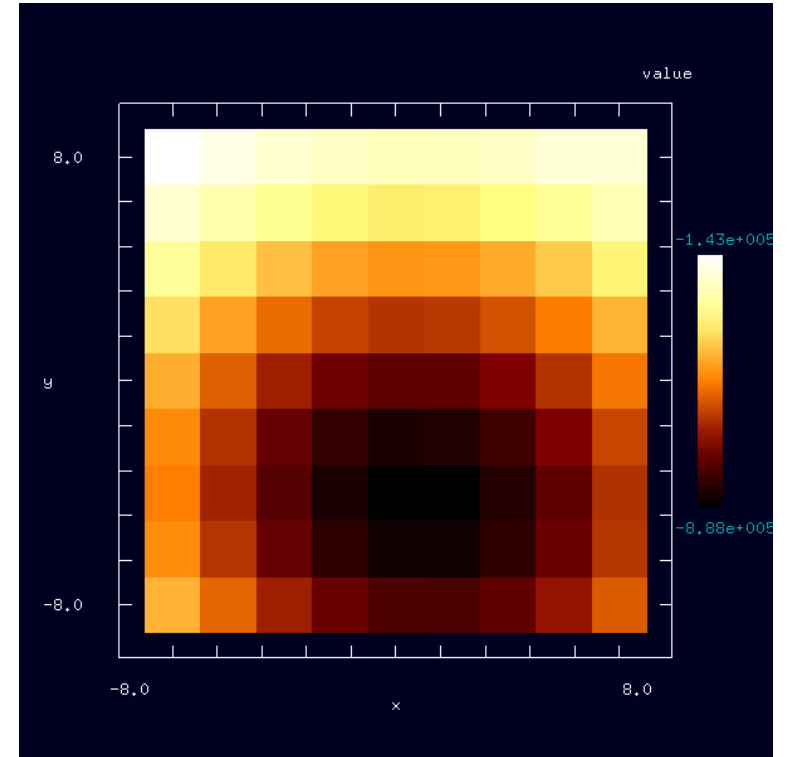
第26回表面科学講演大会(2006) 要旨集2C04
内藤 賀公ら、LT-NC-AFM によるSi(001)ダイマー構造変化の観察

FemAFM

事例紹介ページを下左図に示します。

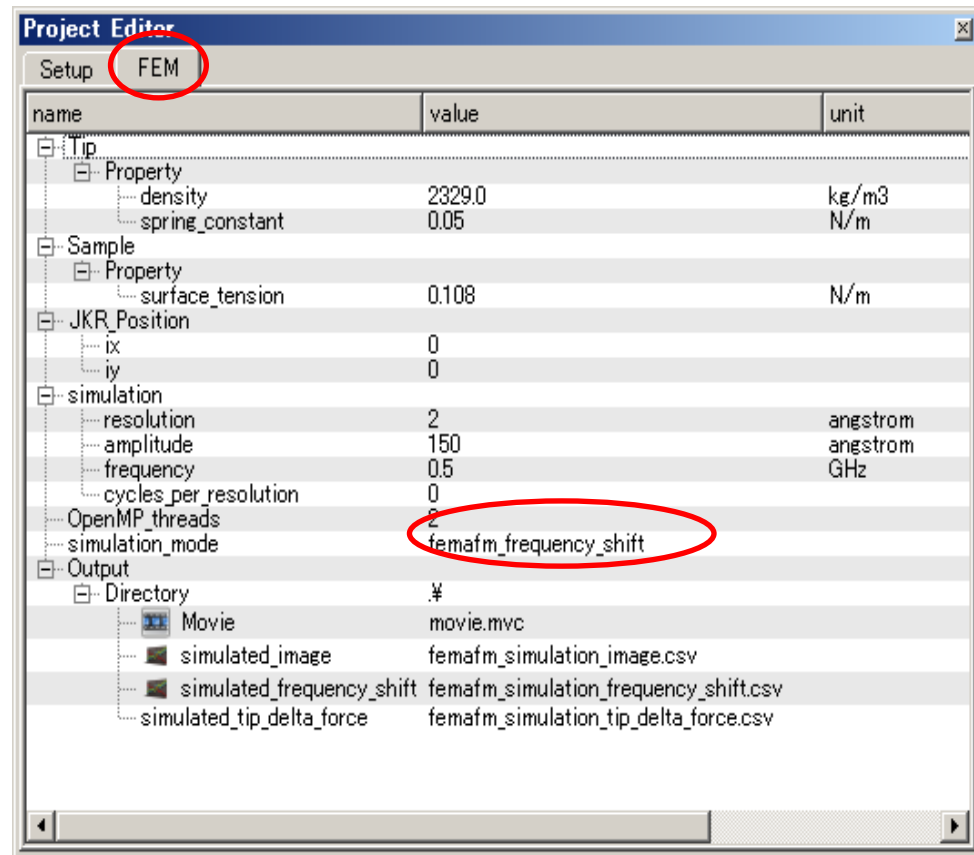
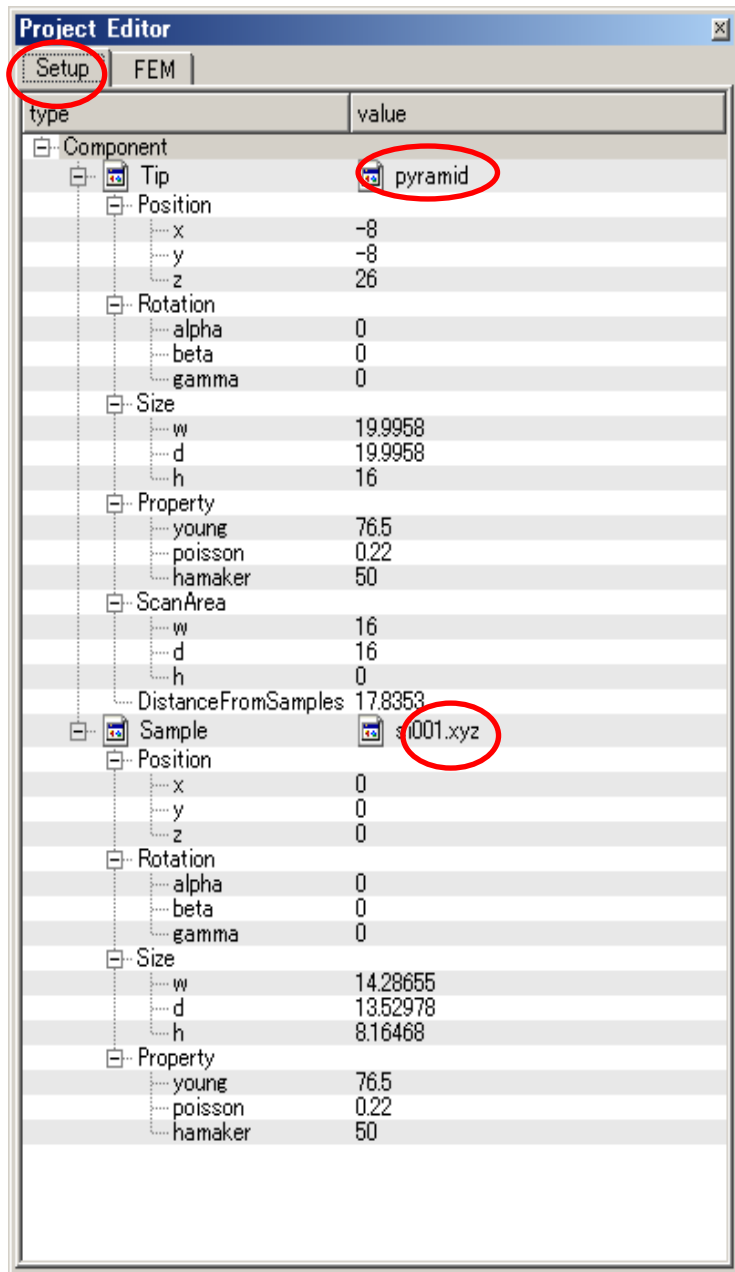
本事例は、非対称ダイマーを持つSi(001)-c(4x2)表面を、周波数シフトの分布像でシミュレートします。探針は登録済みデータ「pyramid」(先端角度 32 度)を用います。

探針試料間距離は 17.8353Å としています。



事例紹介ページ

紹介事例の結果像 (高さ方向Hz)



設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

モデルのセットアップ条件

類例：Si (011) 表面の周波数シフトAFM像シミュレーション

本事例は、今回作成した試料 Si (011) の単位胞サイズを大きくしたモデルを表面を、周波数シフトの分布像でシミュレートします。

単位胞サイズを大きくしたSi (011)モデルは、「Si1_ICSD_652265(011) (7, 10, 2).xyz」(x = 7、y = 10、z = 2) としています。

探針は登録済みデータ「pyramid」(先端角度 32 度) を用います。

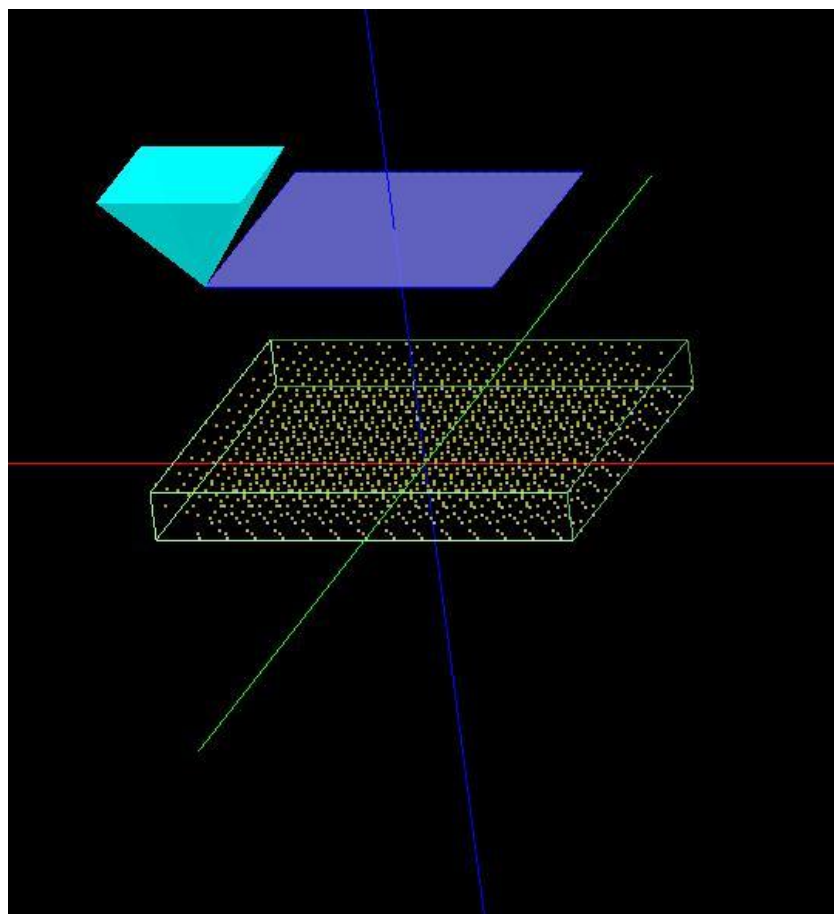
探針試料間距離は 26.598 Å としています。

スキャンエリアは、試料面にほぼ覆われます (下左図)。

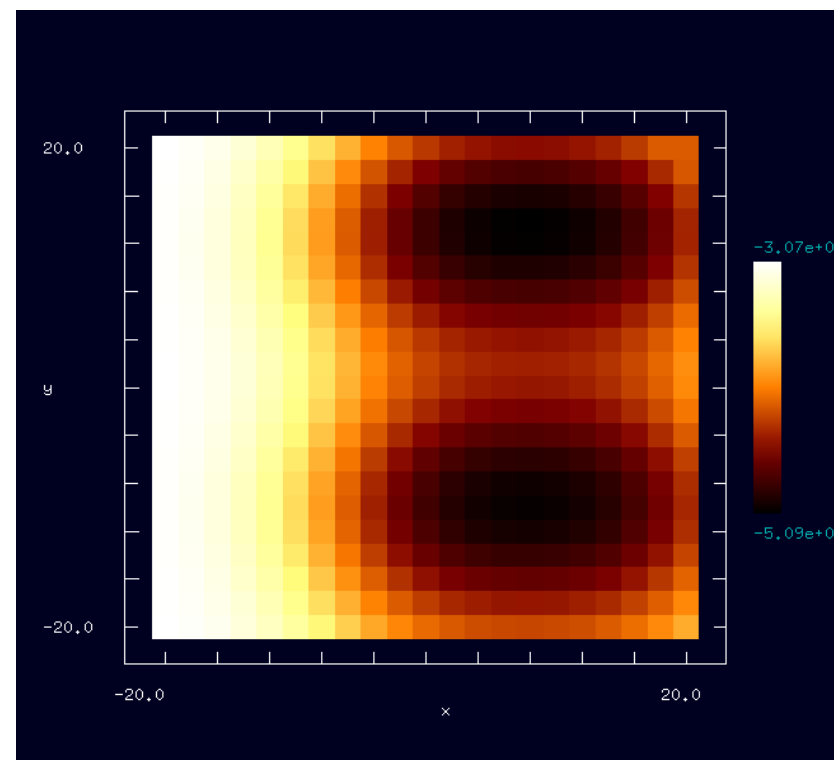
スキャンエリアの高さ(厚さ) を「0 Å」としています。

シミュレーションは、Y軸方向では対称ですが、X軸方向に偏りのある結果となりました。

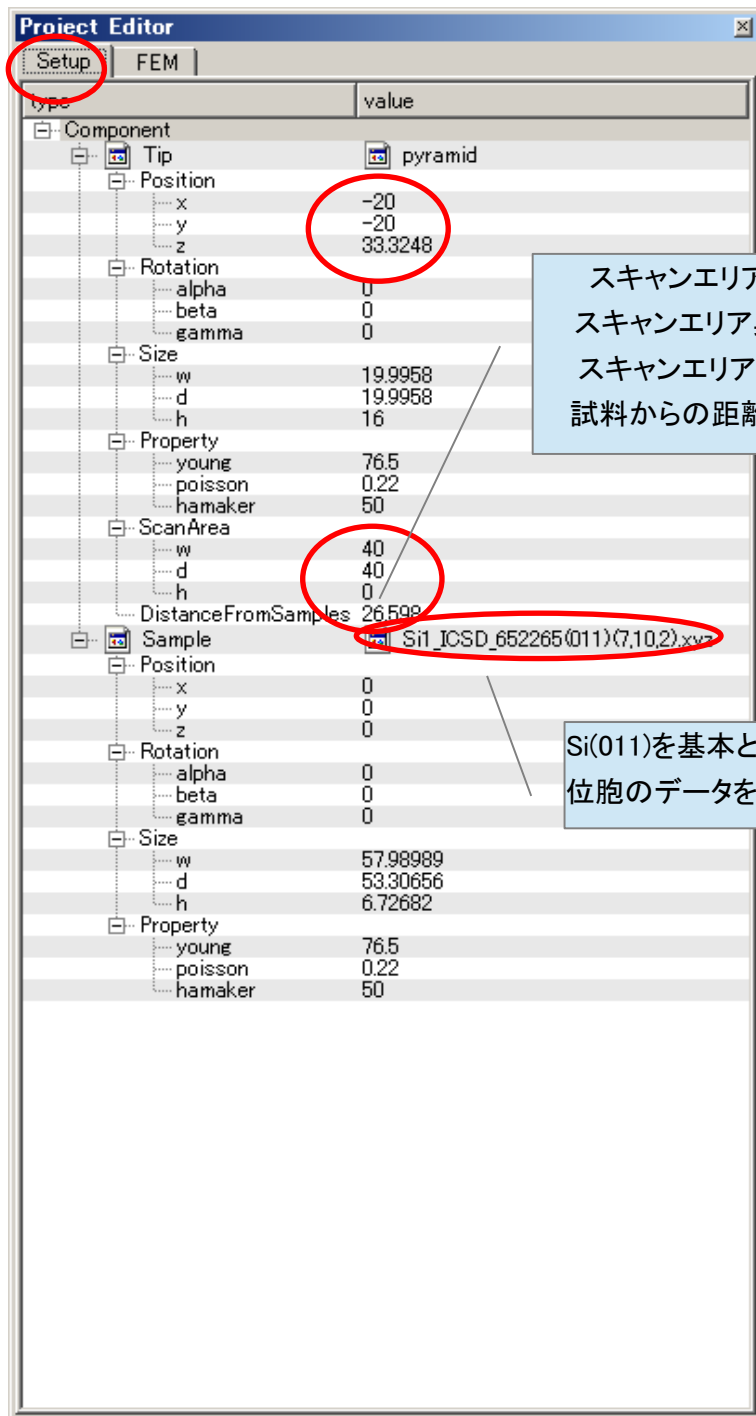
計算モード識別 (番号) プロジェクト名 : [project_file_for_beginners_version_FemAFM_FreqShift_Inorganic_001](#)



解析モデル俯瞰図

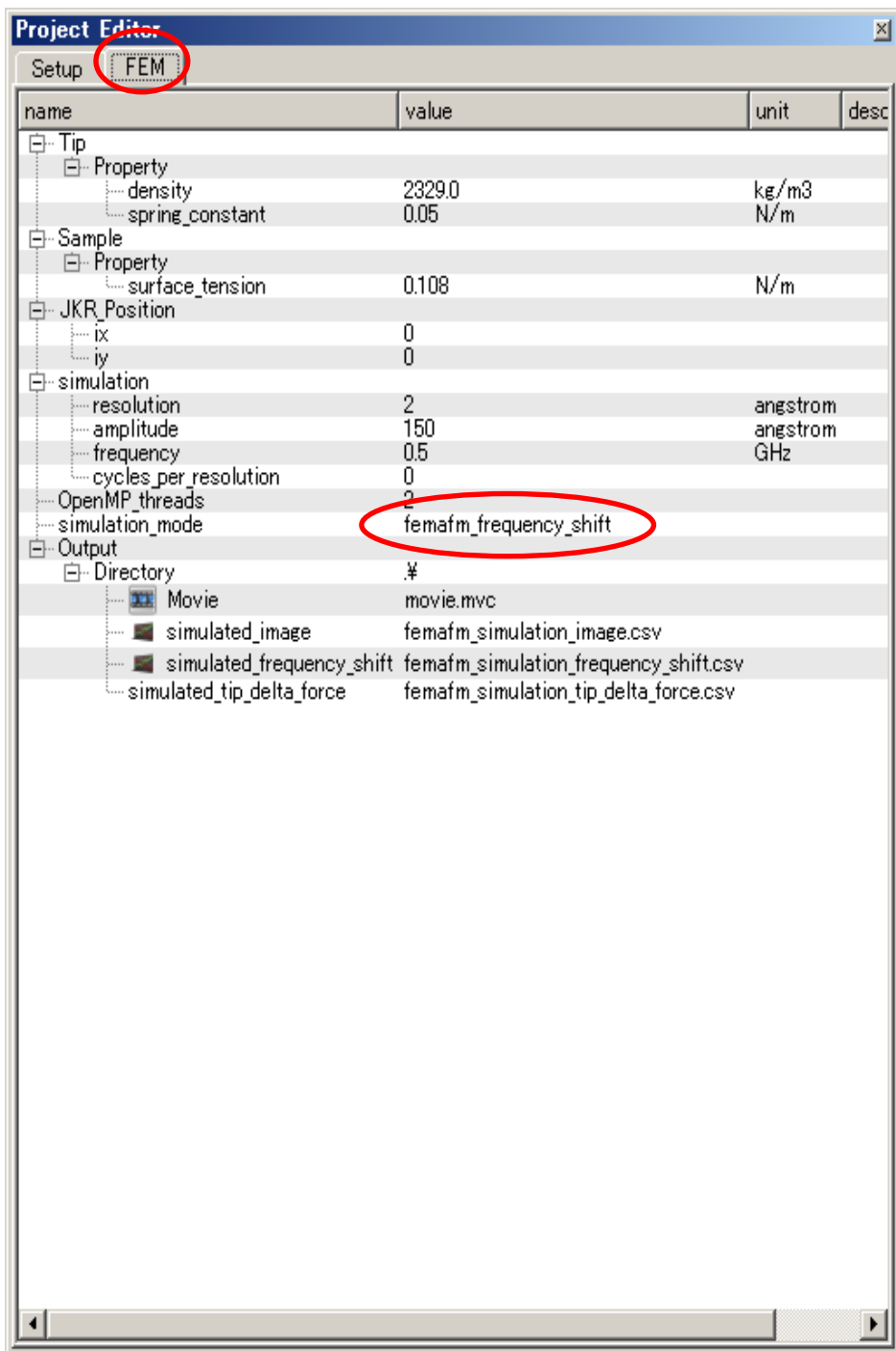


シミュレーション結果



スキャンエリア幅40 Å
 スキャンエリア奥行40 Å
 スキャンエリア高さ 0 Å
 試料からの距離 26.598 Å

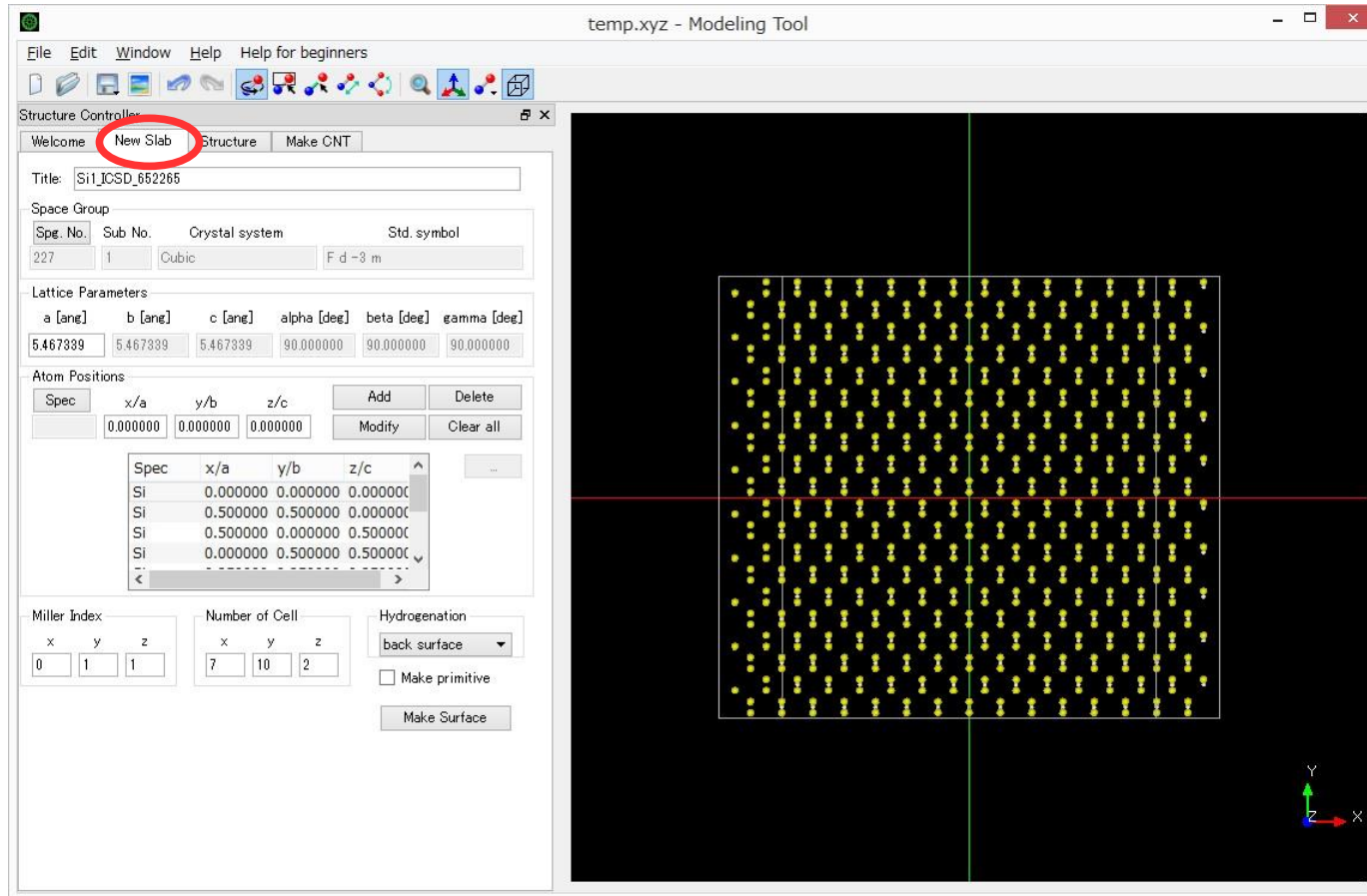
Si(011)を基本とする本事例用単
 位胞のデータを設定する。



モデルのセットアップ条件

設定条件

単位胞サイズを大きくしたSi(011)モデルは、 $x = 7$ 、 $y = 10$ 、 $z = 2$ とし、「Si1_ICSD_652265(011)(7,10,2).xyz」として試料を再構築しました。以下に構築条件を示した画面を示します。



NewSlab画面

temp.xyz - Modeling Tool

File Edit Window Help Help for beginners

Structure Controller

Welcome New Slab **Structure** Make CNT

Duplex / Change

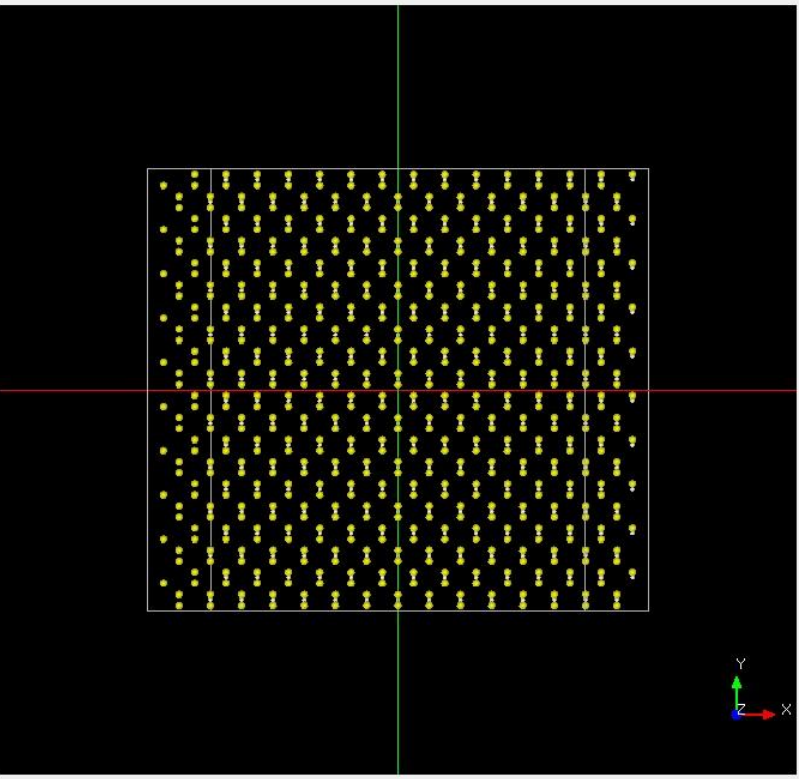
| Spec | x [ang] | y [ang] | z [ang] | Charge | MM3Type | Opt |
|----------|----------|----------|----------|----------|---------|-----|
| 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0 | 0 |

Buttons: Duplex, Delete, Change, Add, Withdraw

| No. | Spec | x [ang] | y [ang] | z [ang] | Edit | Charge | MM3 |
|-----|------|------------|------------|-----------|------|--------|-----|
| 1 | Si | -23.195... | -26.653... | -2.435575 | | 4.000 | -1 |
| 2 | Si | -25.128... | -23.919... | -0.502575 | | 4.000 | -1 |
| 3 | Si | -21.262... | -23.919... | -0.502575 | | 4.000 | -1 |
| 4 | Si | -19.329... | -26.653... | -2.435575 | | 4.000 | -1 |
| 5 | Si | -19.329... | -25.286... | -0.502575 | | 4.000 | -1 |
| 6 | Si | -23.195... | -25.286... | -0.502575 | | 4.000 | -1 |
| 7 | Si | -21.262... | -22.552... | -2.435575 | | 4.000 | -1 |
| 8 | Si | -17.396... | -22.552... | -2.435575 | | 4.000 | -1 |
| 9 | Si | -15.463... | -26.653... | -2.435575 | | 4.000 | -1 |
| 10 | Si | -17.396... | -23.919... | -0.502575 | | 4.000 | -1 |
| 11 | Si | -13.530... | -23.919... | -0.502575 | | 4.000 | -1 |
| 12 | Si | -11.597... | -26.653... | -2.435575 | | 4.000 | -1 |

Chemical Formula: H 280 Si 1120 (1400 atoms)

Buttons: Bond, Hydrogenate, Bond clear, Bond/MM3



Structure画面

4・SetModel 計算事例③

●SetModel : 試料 Si(011) 表面の作成方法

分類 : SetModel、試料と探針の原子モデル作成、Åオーダー、無機半導体

プロジェクト名 : [project_file_for_beginners_version_SetModel](#)

【シリコン (0 1 1) 表面の作成方法】

ソルバでの**類例解析対象**として、なるべく共通の試料、探針を用います。

シリコンの面心立方構造 空間群番号 227

Space Group: Fd-3m (#227)

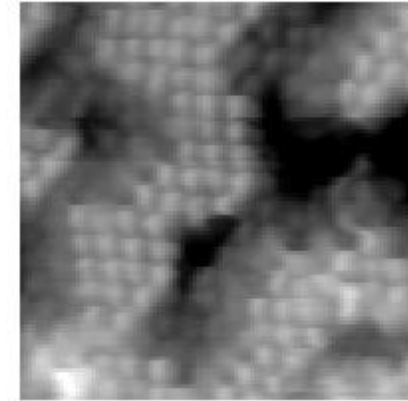
「Si1_ICSD_652265(011)(12).xyz」としてデータ作成しました。

試料面に6角形構造が現れるようミラー指数を(0, 1, 1)とします。

また、表面超周期構造は、考えない事にします。

右図にシリコン(0 1 1)をSTMで観察した例を示します。

最上層が示すジグザグ模様が観察されます。



シリコン (0 1 1) STM観察例

フッ酸・過酸化水素混合薬液で酸化膜を取り除いた時のSi(011)表面のSTM像
STMによるSi(011), (111)ウエハ超精密加工表面の原子構造観察 図1(b)

大阪大学大学院工学研究科 加藤潤 他

2004年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集より

最上層と第二層による6角形構造が確認し易いよう、単位胞のサイズを $x = 1$, $y = 2$, $z = 1$ とします。

各ソルバでの周期境界条件として、単位胞のサイズをÅ(オングストローム)で入力します

(下表 translational_vector: 単位格子ベクトル)。周期境界条件を入力する事により、

少ない原子データ数で、広い範囲の試料面の状態を比較的短時間で解析できるようになります。

設定項目「OpenMP_tread」を1より大きく設定する事により、並列化処理によって、計算処理時間が短縮される場合があります。

| | X | Y | Z |
|---|--------|--------|-------|
| a | 7.732 | 0.000 | 0.000 |
| b | 0.000 | 10.935 | 0.000 |
| c | -3.866 | 0.000 | 3.866 |

translational_vector : Å (オングストローム)

単位格子ベクトル入力値

2・2 モデル作成

チュートリアル第5章試料モデリング機能P173 薄膜モデルの作成事例を参考に

Si(011)の試料モデルを作成します。

シリコンの面心立方構造で空間群番号 227 (Space Group: Fd-3m) の単位格子を用います。

試料モデル名称を「Si1_ICSD_652265」とします。(物質データベース・コード番号より流用)

モデリングプロジェクトファイル: Si1_ICSD_652265_H(011)-(12).mpro モデリングを行うためのデータを記録します。

XYZファイル: Si1_ICSD_652265(011)(12).xyz モデリングを行った結果データを記録します。

以下2つの表データ(下2表)を基に試料モデルをソルバ「SetModel」(試料と探針の原子モデル作成)を用いて生成します。

| 設定格子定数 | 設定数値 | 単位 |
|------------------|-------|-----------------------|
| cell_length_a | 5.467 | Å (オングストローム、Angstrom) |
| cell_length_b | 5.467 | Å (オングストローム、Angstrom) |
| cell_length_c | 5.467 | Å (オングストローム、Angstrom) |
| cell_angle_alpha | 90 | ° (度、degree) |
| cell_angle_beta | 90 | ° (度、degree) |
| cell_angle_gamma | 90 | ° (度、degree) |

Si(011)試料モデルの物質データ格子定数

| Si 番号 | x/a | y/b | z/c |
|-------|------|------|------|
| Si1 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| Si2 | 0.50 | 0.50 | 0.00 |
| Si3 | 0.50 | 0.00 | 0.50 |
| Si4 | 0.00 | 0.50 | 0.50 |
| Si5 | 0.25 | 0.25 | 0.25 |
| Si6 | 0.75 | 0.75 | 0.25 |
| Si7 | 0.75 | 0.25 | 0.75 |
| Si8 | 0.25 | 0.75 | 0.75 |

Si(011)試料モデルの単位格子中の代表的な構成原子

「Si1_ICSD_652265_H(011)-(12).mpro」の読み込みにより再編集が可能です。

裏面のみ、水素終端 による Si 単結晶表面の不活性化を設定しました。

Hydrogenationに「back surface」を設定し、「Make Surface」ボタンを押します。

空間群番号 227 (Fd-3m) を選ぶ

格子定数を $a = 5.4673393427$ (Å) とする。

単位格子中の代表的な構成原子を指定する

ミラー指数を $x=0, y=1, z=1$ とする。

単位胞のサイズを $x=1, y=2, z=1$ とする。

裏面のみ、水素終端 による Si 単結晶表面 の不活性化を行います。

ボタンを押すと結晶薄膜モデルの計算が実行され、XYZファイルが作成される。

単位胞のサイズがÅで表示されます。

| Spec | x/a | y/b | z/c |
|------|----------|----------|----------|
| Si | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 |
| Si | 0.500000 | 0.500000 | 0.000000 |
| Si | 0.500000 | 0.000000 | 0.500000 |
| Si | 0.000000 | 0.500000 | 0.500000 |

```
Log View
Si 0.000000 0.000000 0.000000
Si 0.000000 0.500000 0.500000
Si 0.500000 0.500000 0.000000
Si 0.500000 0.000000 0.500000
Si 0.750000 0.250000 0.750000
Si 0.250000 0.250000 0.250000
Si 0.250000 0.750000 0.750000
Si 0.750000 0.750000 0.250000
24 atoms were generated.
Translation vector (Ang):
vector_a= 7.731985 -0.000000 -0.000000
vector_b= 0.000000 10.934678 0.000000
vector_c= -3.865992 0.000000 3.865992
Solver normally finished.
The lattice type is MCL
Use the name in DFTB band calculation.
```

Space Group:の選択画面：検索するかリストより選択します（下図）。

| Table No. | Sub No. | Crystal system | Std. symbol |
|-----------|---------|----------------|-------------|
| 205 | 1 | Cubic | P a 3 |
| 206 | 1 | Cubic | I a 3 |
| 207 | 1 | Cubic | P 4 3 2 |
| 208 | 1 | Cubic | P 42 3 2 |
| 209 | 1 | Cubic | F 4 3 2 |
| 210 | 1 | Cubic | F 41 3 2 |
| 211 | 1 | Cubic | I 4 3 2 |
| 212 | 1 | Cubic | P 43 3 2 |
| 213 | 1 | Cubic | P 41 3 2 |
| 214 | 1 | Cubic | I 41 3 2 |
| 215 | 1 | Cubic | P -4 3 m |
| 216 | 1 | Cubic | F -4 3 m |
| 217 | 1 | Cubic | I -4 3 m |
| 218 | 1 | Cubic | P -4 3 n |
| 219 | 1 | Cubic | F -4 3 c |
| 220 | 1 | Cubic | I -4 3 d |
| 221 | 1 | Cubic | P m -3 m |
| 222 | 1 | Cubic | P n -3 n |
| 223 | 1 | Cubic | P m -3 n |
| 224 | 1 | Cubic | P n -3 m |
| 225 | 1 | Cubic | F m -3 m |
| 226 | 1 | Cubic | F m -3 c |
| 227 | 1 | Cubic | F d -3 m |
| 228 | 1 | Cubic | F d -3 c |
| 229 | 1 | Cubic | I m -3 m |
| 230 | 1 | Cubic | I a -3 d |

Space Group: Fd-3m (#227)を選択します。

ボタンを押すと空間群番号が決定されます。

Space Group:の選択画面

「Si1_ICSD_652265_H(011)-(12).xyz」の読み込みにより表示が可能です（下図）。

「Si1_ICSD_652265_H(011)-(12).xyz」の読み込みでは、構成原子ごとの編集のみが可能です。

temp.xyz - Modeling Tool

File Edit Window Help Help for beginners

Structure Controller

Welcome New Slab **Structure** Make CNT

Duplex / Change

Spec x [ane] y [ane] z [ane]

0.000000 0.000000 0.000000 Duplex Delete

Charge MM3Type Opt Change Withdraw

0.000000 0 0 Add

| No. | Spec | x [ang] | y [ang] | z [ang] | Edit | Charge | MM3 |
|-----|------|-----------|-----------|-----------|------|--------|-----|
| 1 | Si | -1.932995 | -4.783920 | -0.502580 | | 4.000 | -1 |
| 2 | Si | -3.865995 | -2.050250 | 1.430420 | | 4.000 | -1 |
| 3 | Si | 0.000005 | -2.050250 | 1.430420 | | 4.000 | -1 |
| 4 | Si | 1.932995 | -4.783920 | -0.502580 | | 4.000 | -1 |
| 5 | Si | 1.932995 | -3.417090 | 1.430420 | | 4.000 | -1 |
| 6 | Si | -1.932995 | -3.417090 | 1.430420 | | 4.000 | -1 |
| 7 | Si | 0.000005 | -0.683420 | -0.502580 | | 4.000 | -1 |
| 8 | Si | 3.865995 | -0.683420 | -0.502580 | | 4.000 | -1 |
| 9 | Si | -1.932995 | 0.683420 | -0.502580 | | 4.000 | -1 |
| 10 | Si | -3.865995 | 3.417090 | 1.430420 | | 4.000 | -1 |
| 11 | Si | 0.000005 | 3.417090 | 1.430420 | | 4.000 | -1 |
| 12 | Si | 1.932995 | 0.683420 | -0.502580 | | 4.000 | -1 |

Chemical Formula H 8 Si 16 (24 atoms)

Bond Hydrogenate

Bond clear Bond/MM3

Log View

```
Si 0.000000 0.000000 0.000000
Si 0.000000 0.500000 0.500000
Si 0.500000 0.500000 0.000000
Si 0.500000 0.000000 0.500000
Si 0.750000 0.250000 0.750000
Si 0.250000 0.250000 0.250000
Si 0.250000 0.750000 0.750000
Si 0.750000 0.750000 0.250000
24 atoms were generated.
Translation vector (Ang):
vector_a= 7.731985 -0.000000 -0.000000
vector_b= 0.000000 10.934678 0.000000
vector_c= -3.865992 0.000000 3.865992
Solver normally finished.
The lattice type is MCL
Use the name in DFTB band calculation.
```

ソルバ「SetModel」「Structure」タブ

Si (011) の試料モデルの表面形状について以下解説します。

$x = 2$ 、 $y = 5$ 、 $z = 5$ とし、試料面TOP表示での6角形構造を見易くしました。この面が解析対象となります。

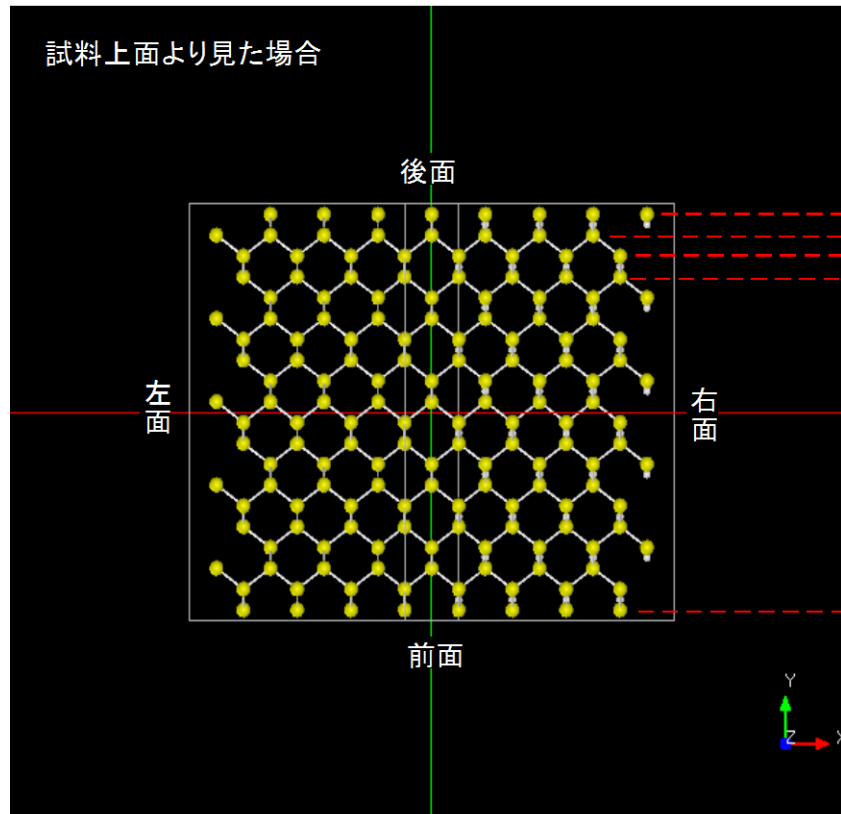
試料構成 Si 原子の配置について次に説明します。

上面より見える6角形構造は、最上層と第二層により形成されています（下左図）。

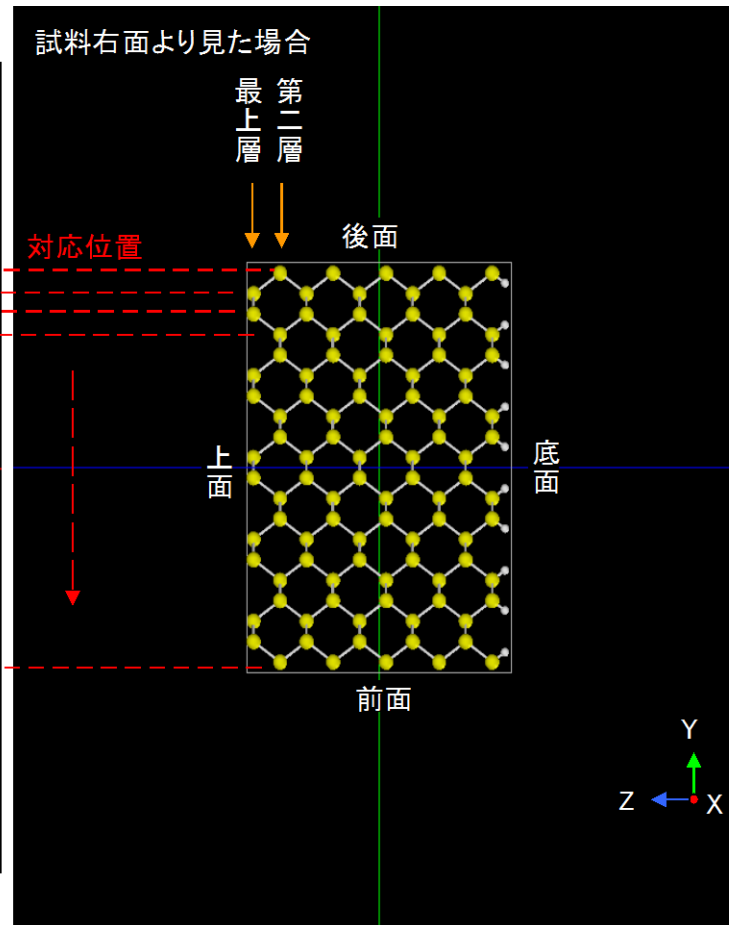
試料右面より見たモデル図のとおり、最上層と第二層は Si 原子間距離の8割程度離れていることが判ります（下右図）。

試料上面より、探針がスキャンすると、最上層と第二層の距離差の影響が検出されることとなります。

Si (001)-c(4x2) 試料モデルでは、表面が一部、5角形形状をした安定構造（非対称ダイマー構造）となり、最上層と第二層の距離差が、本モデル例より小さく、最上層と第二層との間の、相互に影響している状態が観察し易いといえます。その意味では、本モデル例の単純表面構造では、最上層と第二層との間の相互の影響は小さくなります。



Si (011) の試料モデル上面



Si (011) の試料モデル右面

5・DFTB_STM(ConstantHeight) 計算事例④

●DFTB ConstHeightSTM : Si (001)-c(4x2)表面のSTM観察とSi(001)-c(4x2)表面と作成試料 Si(011)表面のシミュレーション

計算モード識別番号 : [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_008]

ソルバ・モード・計算例アドレス https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php

分類 : DFTB ConstHeightSTM (高さ一定、トンネル電流像)、Å オーダー、無機半導体

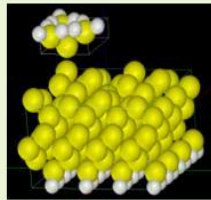
事例紹介ページを下左図に示します。

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション

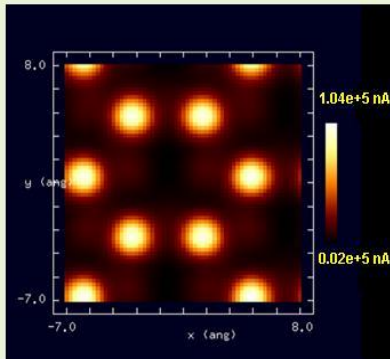
DFTB

探針・試料モデル

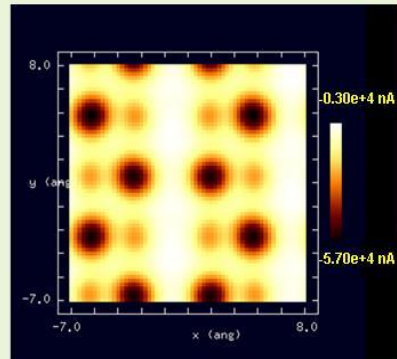
探針: Si_4H_9
試料表面: Si(001)-c(4x2)
探針-試料間の距離: 2.32 Å



STM像の計算結果



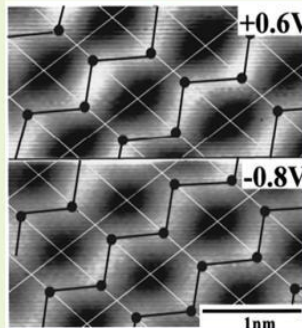
バイアス電圧 +1.0V



バイアス電圧 -1.0V

バイアスによって、蜂の巣構造が反転

実験



Si(001) 表面のトンネル電流像

バイアスの正負によって蜂の巣構造が反転することが知られている。

K. Hata, S. Yasuda, and H. Shigekawa, Phys. Rev. B **60**, 8164 (1999).

類似

事例紹介ページを左図に示します。

本事例は、非対称ゲイマーを持つSi(001)-c(4x2)表面を、高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。探針は作成済みデータ「tip_si4.xyz」を用います。

本計算事例の入力条件について記載します。

s t m _ m o d e はConstantHeight (Default、指定のない場合：探針の高さ一定モード) に設定しています。

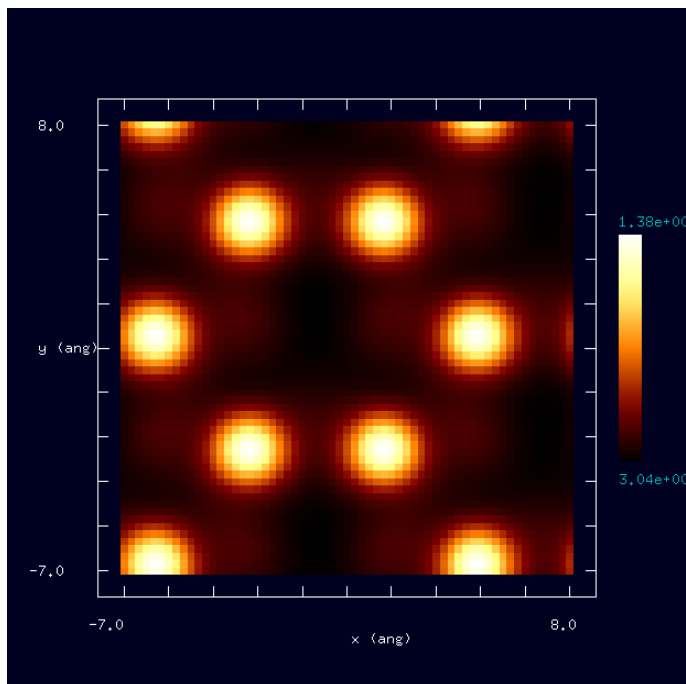
並列化処理設定を行っていません (1 スレッド対応)

バイアス電圧 +1.0V とバイアス電圧 -1.0V での計算を設定例条件で行わせました (下左右表)。

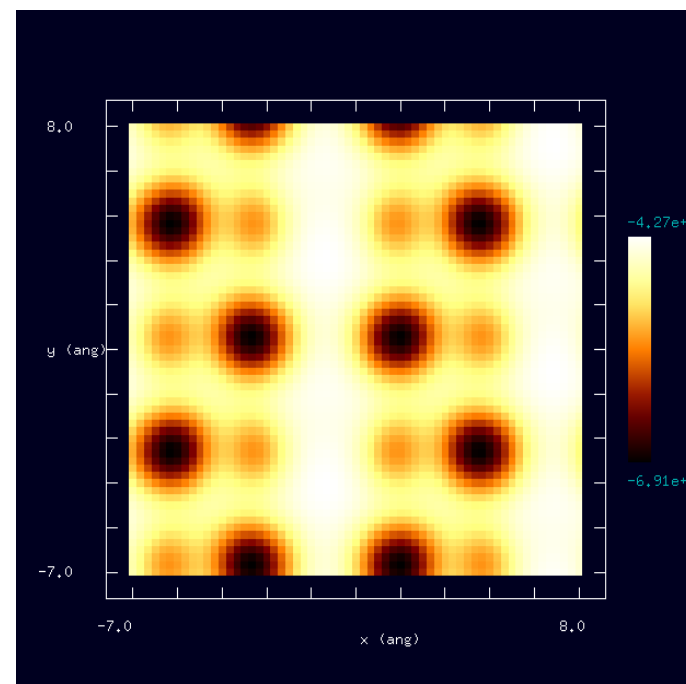
バイアス電圧 +1.0V では、最上層Si原子が最も明るくなり (下左図)、バイアス電圧 -1.0V では第二層のSi原子が最も暗くなります (下右図)。

2つ下の左図にモデル形状最上層における六角形構造、また2つ下の右図にモデル形状第二層における六角形構造の位置を示しました。

また、明暗の発生原理について、参考文献よりの抜粋を記しました (参考1)。

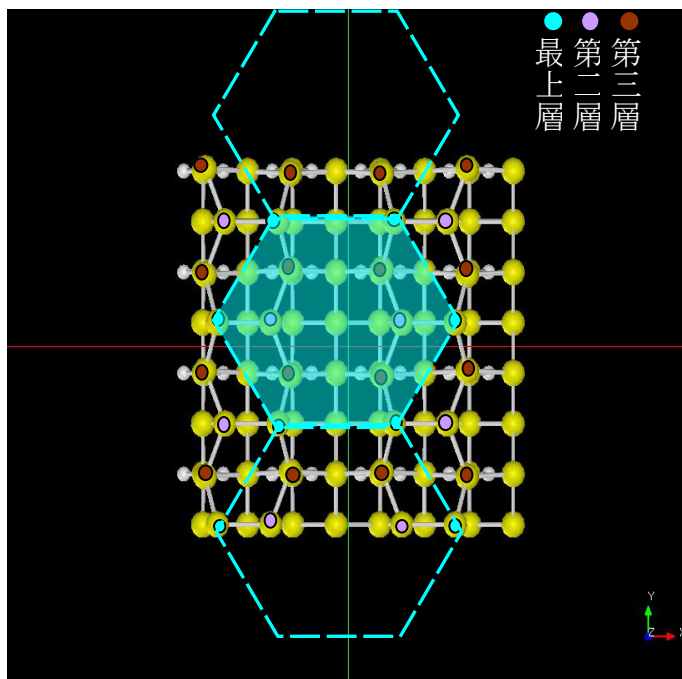


バイアス電圧 +1.0Vでのシミュレーション像



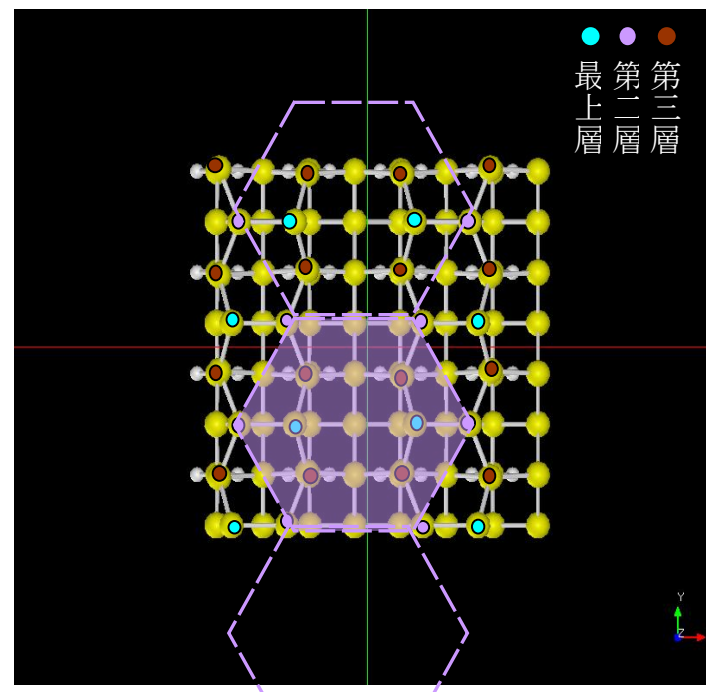
バイアス電圧 -1.0Vでのシミュレーション

バイアス電圧 +1.0V
では、最上層における
六角形構造が際立つ。



モデル形状最上層における六角形構造

バイアス電圧 -1.0Vで
は、第二層における
六角形構造が際立つ。



モデル形状第二層における六角形構造

| type | value |
|---------------------|-------------|
| Component | |
| Tip | tip_si4.xyz |
| Position | |
| x | -7 |
| y | -7 |
| z | 10.480544 |
| Rotation | |
| alpha | 0 |
| beta | 0 |
| gamma | 0 |
| Size | |
| w | 6.24 |
| d | 5.41 |
| h | 2.02466 |
| ScanArea | |
| w | 15 |
| d | 15 |
| h | 0 |
| DistanceFromSamples | 2.31586 |
| Geometry | |
| radius | 0.0 |
| angle | 0.0 |
| Sample | si001.xyz |
| Position | |
| x | 0 |
| y | 0 |
| z | 0 |
| Rotation | |
| alpha | 0 |
| beta | 0 |
| gamma | 0 |
| Size | |
| w | 14.28655 |
| d | 13.52978 |
| h | 8.16468 |
| Property | |
| young | 76.5 |
| poisson | 0.22 |
| hamaker | 50 |

高さ一定
 スキャンエリア高さ 0 Å
 試料からの距離 2.31586 Å

| property | value | unit | descriptions |
|-------------------------------------|-----------------------|---------------------|-------------------------------|
| mode | DFTB-STM | | |
| title | H-Si(001) with defect | | not used in calculation |
| two_body_parameter_folder | two_body_parameters | | |
| tip | | | |
| amplitude | 100.00000 | Ang | |
| k_cantilever | 40.00000 | N/m | |
| resonant_freq | 170.00000 | kHz | |
| Ndiv | | | |
| X | 60 | | |
| Y | 60 | | |
| Z | 0 | | |
| CG_param | | | 0: No structural optimization |
| MaxIter | 0 | | |
| TolForce | 1.0 | nN | |
| TolEnergy | 0.001 | eV | |
| displacement | 0.10000 | Ang | |
| trial_point_number | 10 | | |
| Broyden_param | | | |
| MaxIter | 30 | | |
| TolEnergy | 10. | 10 ⁻⁶ eV | |
| output_eigenvalue | off | | on/off |
| Fvdlw | | | |
| tip_shape | conical | | |
| height_of_highest_adsorbed_molecule | 0.00000 | Ang | |
| Hamaker_const | 2.20000 | aJ/mol | |
| apex_angle | 160.000 | degree | |
| tip_height | 1000.00 | Ang | |
| radius_of_tip_apex | 1.00000 | Ang | |
| tip_bias_voltage | | | |
| minimum | 1.0 | V | |
| maximum | -1.0 | V | |
| Ndiv | 0 | | |
| Ndiv_kpoints | 4 | | |
| DoS | | | |
| output_dos | on | | on/off |
| minimum | -5.0 | eV | |
| maximum | +5.0 | eV | |
| Ndiv | 1024 | | |
| electron_temperature | 50 | K | |
| tip_charge_neutrality | | | |
| minimum | -0.1 | e | |
| maximum | 0.10000 | e | |
| Ndiv | 4 | | |
| translational_vector | | | |
| a | | | |
| X | 15.35014 | Ang | |
| Y | 0.00000 | Ang | |
| Z | 0.00000 | Ang | |
| b | | | |
| X | 0.00000 | Ang | |
| Y | 15.35014 | Ang | |
| Z | 0.00000 | Ang | |
| c | | | |
| X | 0.00000 | Ang | |
| Y | 0.00000 | Ang | |
| Z | 100.00000 | Ang | |
| Output | | | |
| Directory | | | |
| AtomPosition | atpos.mvf | | |
| Force_x | force_x.csv | | |
| Force_y | force_y.csv | | |
| Force_z | force_z.csv | | |
| Freq_shift | freq_shift.csv | | |
| EnergyLevel | ene_lev.txt | | |
| TunnelingCurrent | current.csv | | |
| TunnelingSpectroscopy | current_spectro.csv | | |
| CurrentVoltage | curr_volt.csv | | |
| ContactPotential | LCPD.csv | | |

バイアス電圧 の異なる部分
 (a) +1.0V
 (b) -1.0V

Z方向への周期境界条件による影響が少なくなります。

モデルのセットアップ条件
 ※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

バイアス電圧 +1.0V と
 バイアス電圧 -1.0Vの
 設定条件

参考1 明暗の発生原理

STMは、試料バイアス電圧が正の時 (> 0) に試料表面の空準位 (Empty states), 試料バイアス電圧が負のとき (< 0) に充満準位 (Filled states) の空間分布を観察することになる. 2×1 表面での両者の違いを見てみると, Filled statesではダイマーの中心が, Empty statesではダイマー原子が高く見えている. これは, ダイマーの π 結合準位 (Filled states) と π^* 反結合準位 (Empty states) を観察しているためと理解されている [29].

[29] J. Pollman et al., Appl. Phys. A41, 21(1986).

Si (001) 表面の相転移と量子現象の研究 横山 崇 著より

類例：Si (011) 表面のConstHeightSTMシミュレーション

計算モード識別 (番号) プロジェクト名：[project_file_for_beginners_version_DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_008a](#)(バイアス電圧 +1.0V)
[project_file_for_beginners_version_DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_008b](#)(バイアス電圧 -1.0V)

本事例は、今回作成した試料 Si (011) 表面を、高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。

先の事例の表面超周期構造を持つSi (001)-c (4x2)の代わりに、Si (011)を基本とする単位胞に置き換えます。

探針は作成済みデータ「tip_si4.xyz」を用います。

単位胞に合わせて周期境界条件を入力します。

探針の試料からの距離を「1.5Å」とします。

s t m_m o d eはConstantHeight (探針の高さ一定モードDefault、指定のない場合)に設定しています。

スキャンエリアは、試料単位胞上面をほぼ覆うサイズとなっています (右図)。

また、スキャンエリアの高さを「0Å」としています。

並列化処理設定を行っています (マルチスレッドに対応)

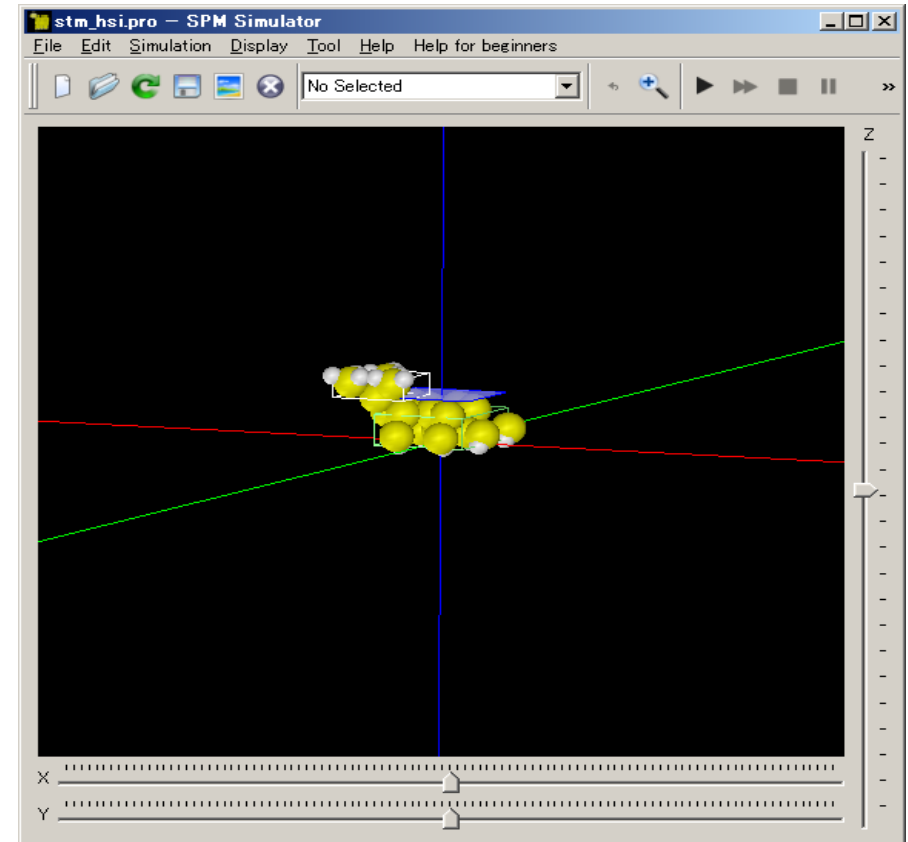
バイアス電圧 +1.0V とバイアス電圧 -1.0V での計算を設定条件で行わせました (下図左右)。

下図左 にバイアス電圧 +1.0Vでのシミュレーション像を示しており、最上層Si原子が明るくなっています。

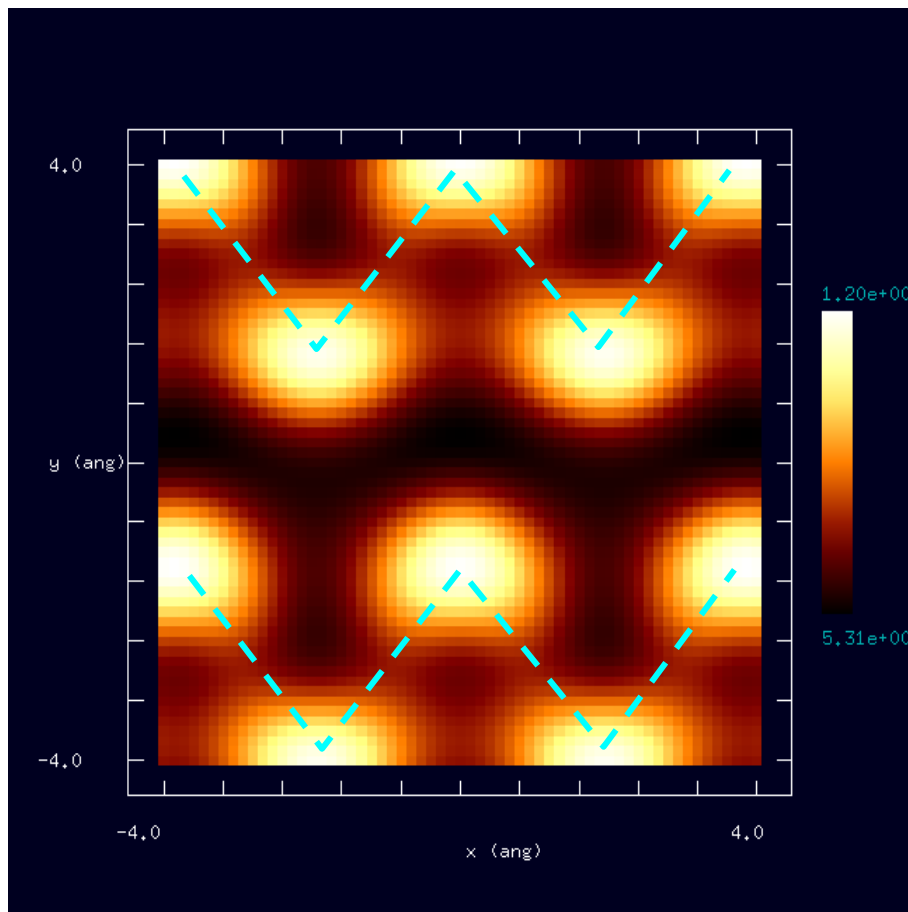
下図右 にバイアス電圧 -1.0Vでのシミュレーション像を示しており、最上層Si原子が暗くなっています。

最表面上のSi原子のジグザグな並びが表示されています (下図左右 共に)。

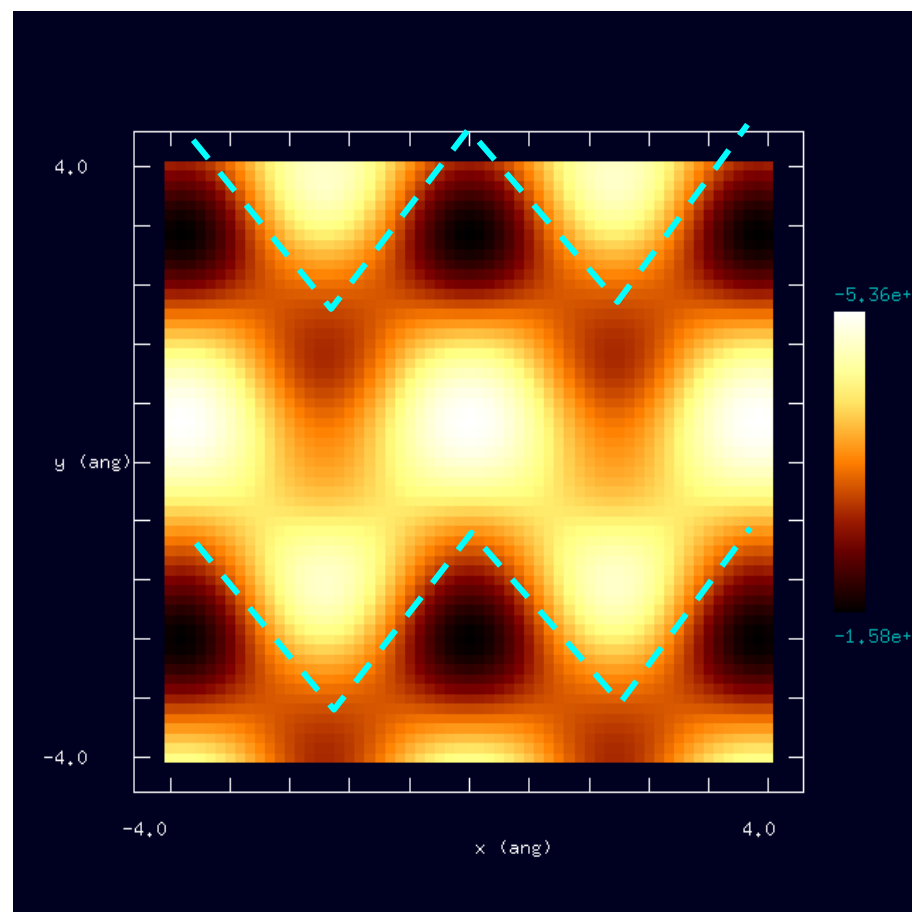
バイアスの正負によって構造が反転することは、Si (001)-c (4x2) と共通しています。



本計算事例のスキャン領域俯瞰図



バイアス電圧 +1.0Vでのシミュレーション像



バイアス電圧 -1.0Vでのシミュレーション像

Project Editor

Setup DFTB

| type | value |
|---------------------|------------------------------|
| Component | |
| Tip | tip_si4.xyz |
| Position | |
| x | -4 |
| y | -4 |
| z | 4.36084 |
| Rotation | |
| alpha | 0 |
| beta | 0 |
| gamma | 0 |
| Size | |
| w | 6.24 |
| d | 5.41 |
| h | 2.02466 |
| ScanArea | |
| w | 8 |
| d | 8 |
| h | 0 |
| DistanceFromSamples | 1.5 |
| Geometry | |
| radius | 0.0 |
| angle | 0.0 |
| Sample | Si1_ICSD_652265(011)(12).xyz |
| Position | |
| x | 0 |
| y | 0 |
| z | 0 |
| Rotation | |
| alpha | 0 |
| beta | 0 |
| gamma | 0 |
| Size | |
| w | 7.73198 |
| d | 9.56784 |
| h | 2.86084 |
| Property | |
| young | 76.5 |
| poisson | 0.22 |
| hamaker | 50 |

高さ一定
スキャンエリア高さ 0
試料からの距離 1.5 Å

Si(011)を基本とする本事例用単
位胞のデータを設定する。

モデルのセットアップ条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

Project Editor

Setup DFTB

| property | value | unit | descriptions |
|-------------------------------------|-----------------------|--------------|-------------------------------|
| mode | DFTB STM | | |
| title | H-Si(001) with defect | | not used in calculation |
| two_body_parameter_folder | two_body_parameters | | |
| tip | | | |
| amplitude | 100.00000 | Ang | |
| k_cantilever | 40.00000 | N/m | |
| resonant_freq | 170.00000 | kHz | |
| Ndiv | | | |
| X | 60 | | |
| Y | 60 | | |
| Z | 0 | | |
| CG_param | | | |
| MaxIter | 0 | | 0: No structural optimization |
| TolForce | 1.0 | nN | |
| TolEnergy | 0.001 | eV | |
| displacement | 0.10000 | Ang | |
| trial_point_number | 10 | | |
| Broyden_param | | | |
| MaxIter | 30 | | |
| TolEnergy | 10. | 10^{-6} eV | |
| output_eigenvalue | off | | on/off |
| Fvdw | | | |
| tip_shape | conical | | |
| height_of_highest_adsorbed_molecule | 0.00000 | | |
| Hamaker_const | 2.20000 | | |
| apex_angle | 160.000 | | |
| tip_height | 1000.00 | | |
| radius_of_tip_apex | 1.00000 | | |
| tip_bias_voltage | | | |
| minimum | 1 | V | |
| maximum | 0.1 | V | |
| Ndiv | 0 | | |
| Ndiv_kpoints | 4 | | |
| DoS | | | |
| output_dos | on | | on/off |
| minimum | -5.0 | eV | |
| maximum | +5.0 | eV | |
| Ndiv | 1024 | | |
| electron_temperature | 50 | | |
| tip_charge_neutrality | | | |
| minimum | -0.1 | | |
| maximum | 0.10000 | | |
| Ndiv | 4 | | |
| translational_vector | | | |
| a | | | |
| X | 7.73198 | Ang | |
| Y | 0.00000 | Ang | |
| Z | 0.00000 | Ang | |
| b | | | |
| X | 0.00000 | Ang | |
| Y | 10.93467 | Ang | |
| Z | 0.00000 | Ang | |
| c | | | |
| X | -3.86599 | Ang | |
| Y | 0.00000 | Ang | |
| Z | 3.86599 | Ang | |
| solver_type | CPU | | |
| OpenMP_threads | 6 | | |
| Output | | | |

バイアス電圧 の異なる部分
(a) +1.0V
(b) -1.0V

周期境界条件を用いるため単
位胞サイズを入力します。

並列化処理設定

バイアス電圧 +1.0V と バイアス電圧 -1.0Vの設定条件

高さ一定シミュレーション事例試料モデルSi(001)-c(4x2)解説

高さ一定シミュレーションでの、Si(001)-c(4x2)事例試料モデルを解説します

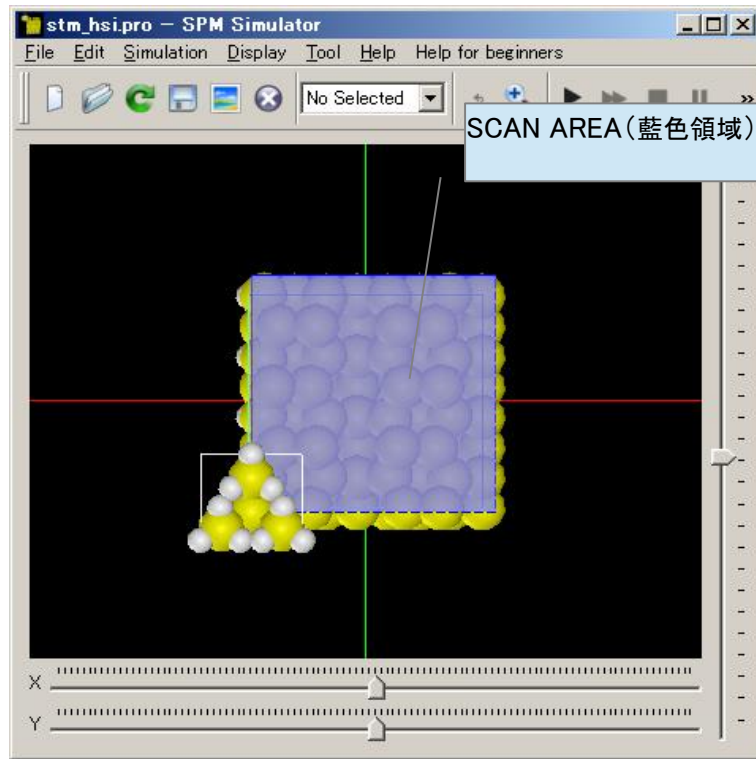
Si(001)-c(4x2)は、Si(001)の表面処理後、終端同士が結合しており、一部5角形形状をした安定構造（非対称ダイマー構造）とされています。

最表面層に対し、第2層は、Si原子間距離の数割の位置に存在するようになり、最上層と比較による構造変化が観察しやすくなります（下右図）。

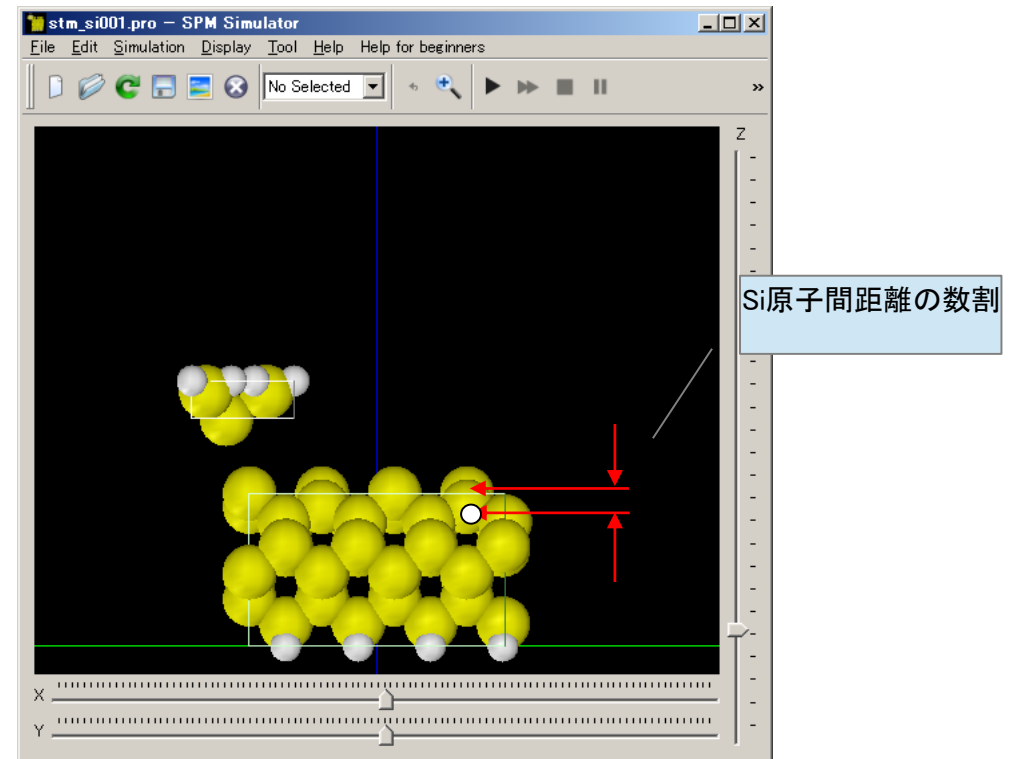
高さ一定シミュレーションでは、スキャンエリアの高さは一定で、厚みは0となります（2つ下左図）。

スキャンエリアは、試料TOP面をほぼ覆っています（下左図）。

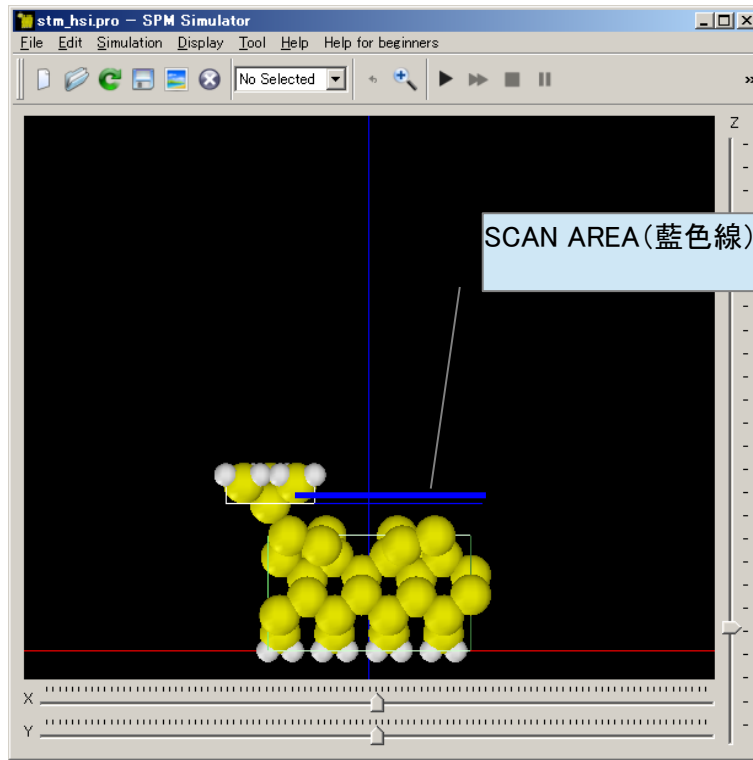
Si(001)-c(4x2)については作成済みデータとして「si001.xyz」が用意されており、利用可能です。



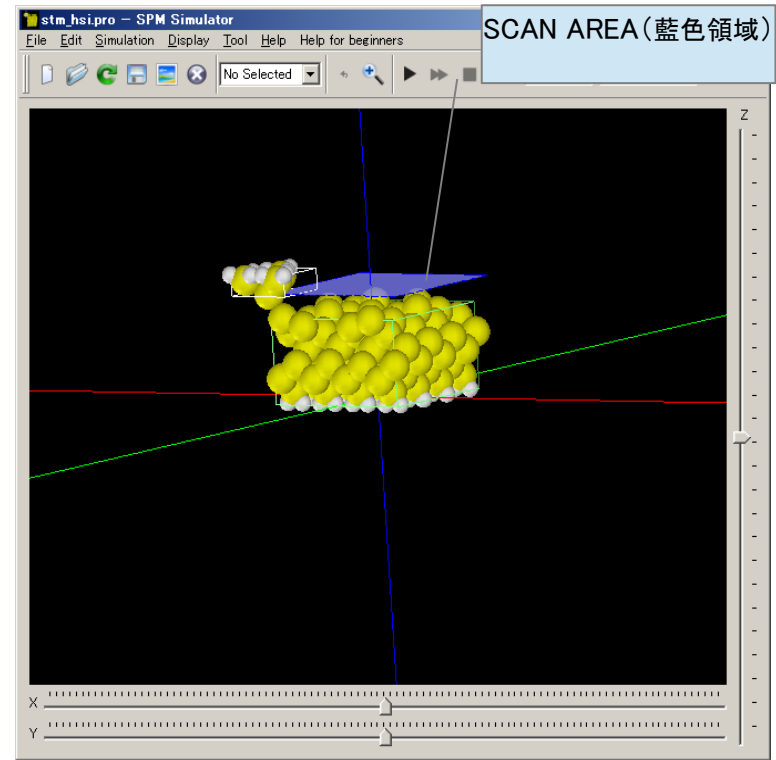
TOP表示でのSCAN AREA（藍色領域）



FRONT



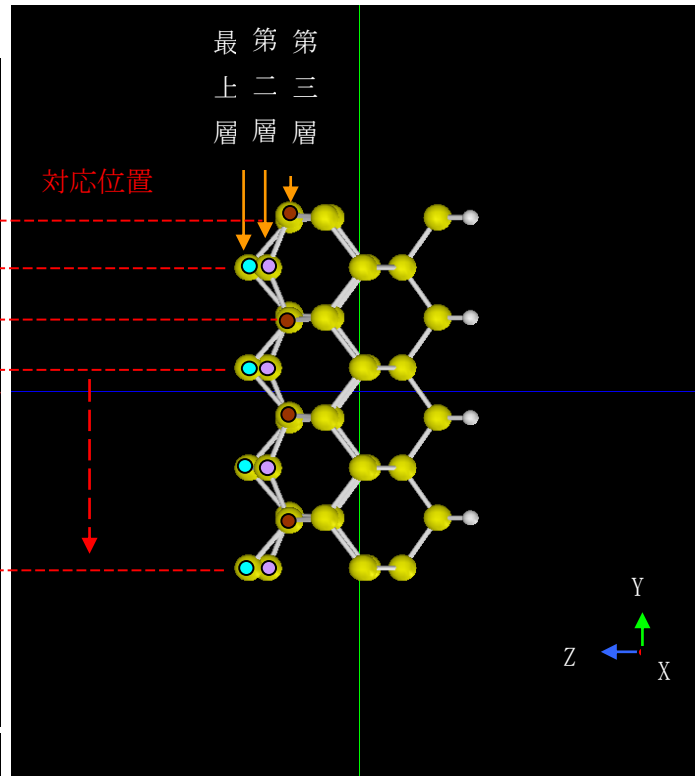
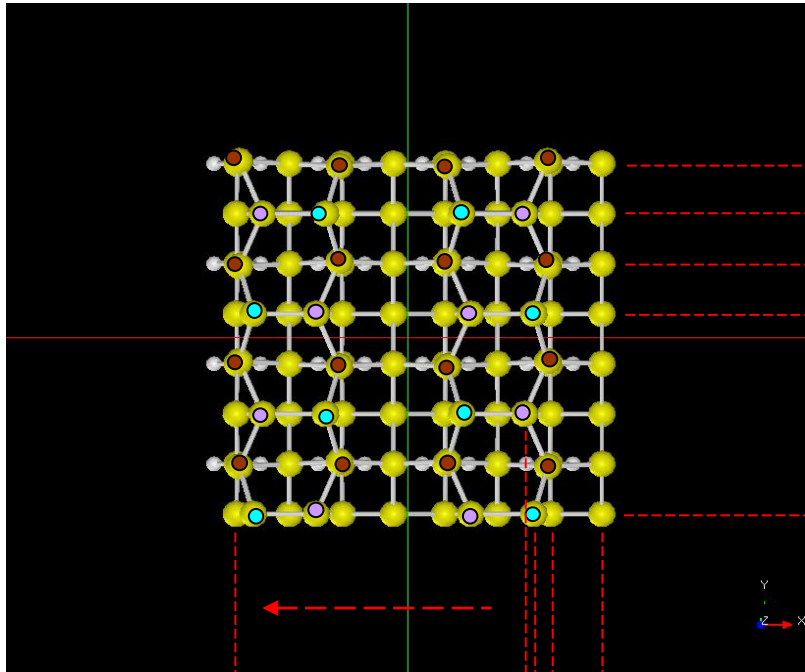
SIDEでのSCAN AREA (藍色線)



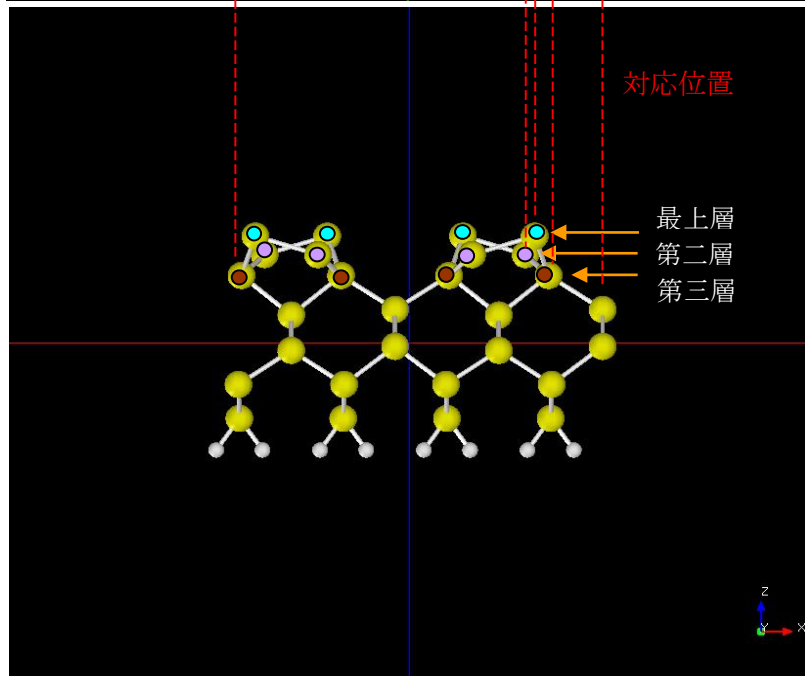
俯瞰図表示でのSCAN AREA (藍色領域)

Si(001)-c(4x2)の試料モデルの表面形状について以下解説します。
(下3面図)

Si (001)-c(4x2) の試料モデル上面



Si (001)-c(4x2) の試料モデル右面



Si (001)-c(4x2) の試料モデル前図

最上層及び第二層は非対称ダイマー構造による”5角形構造”の一部となっています。このため、最上層と第二層の距離は、非対称ダイマー構造ではない6角形構造のみのSi結晶の場合よりも近くなっています。

最上層のSi原子のみで形成される”6角形形状”及び第二層のSi原子のみで形成される”6角形形状”が、測定条件により検出感度が異なるため、違いが顕著に現れます。

6・DFTB_STM(ConstantCurrent) 計算事例⑤

●DFTB ConstCurrentSTM : Si (001)-c(4x2)表面のSTM観察とSi(001)-c(4x2)表面と作成試料 Si(011)表面のシミュレーション

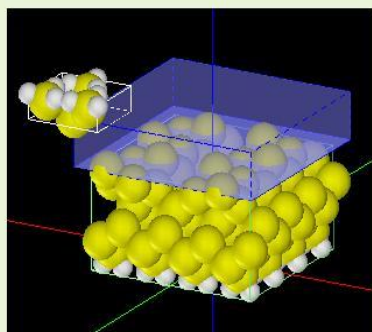
計算モード識別番号 : [DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_001]

ソルバ・モード・計算例アドレス https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstCurrentSTM/DFTB_ConstCurrentSTM.php

分類 : DFTB ConstCurrentSTM (電流一定、STMトポグラフィ像)、Åオーダー、無機半導体

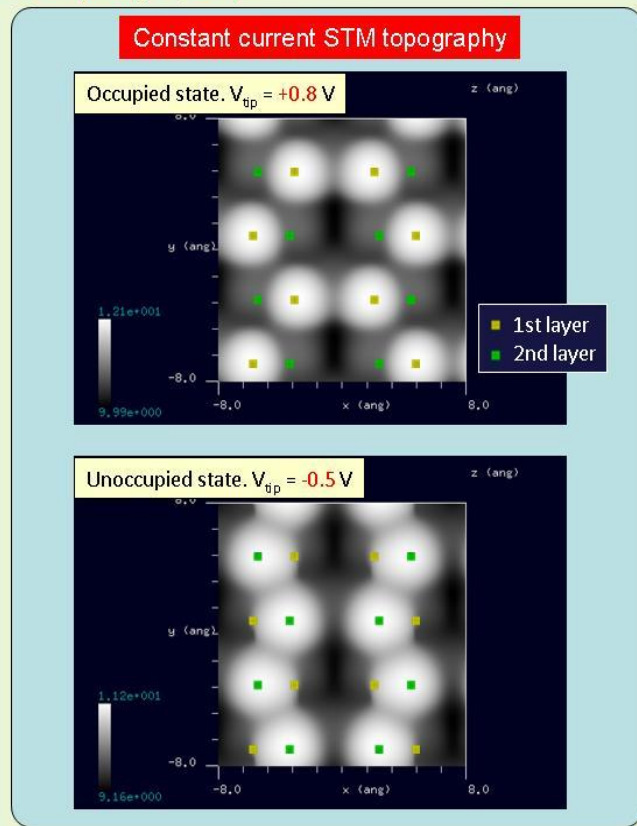
事例紹介ページを下左図に示します。

【DFTB】Constant current STM image of Si(001)-c(4x2)



探針: Si_4H_9
試料: Si(001)-c(4x2)結晶表面
Current = 6000 nA
for both calculations

六角形のハニカム構造がバイアスの正負によって反転することを再現した。



事例紹介ページ

事例紹介ページを左図に示します。

本事例は、非対称ダイマーを持つSi(001)-c(4x2)表面を、電流一定のSTMトポグラフィ像でシミュレートします。探針は作成済みデータ「tip_si4.xyz」を用います。

本計算事例の入力条件について記載します。

stm_modeはConstantCurrent (指定のある場合のみ) に設定しています。

設定電流は6000 nAとなっています。

並列化処理設定を行っていません(1スレッド対応)

バイアス電圧 +0.8V とバイアス電圧 -0.5V での計算を設定例条件で行わせました

(下左右表)。

バイアス電圧 +0.8V では、最上層Si原子が最も明るくなり

(下左)、バイアス電圧 -0.5V では第二層の

Si原子が最も明るくなります(下右)。

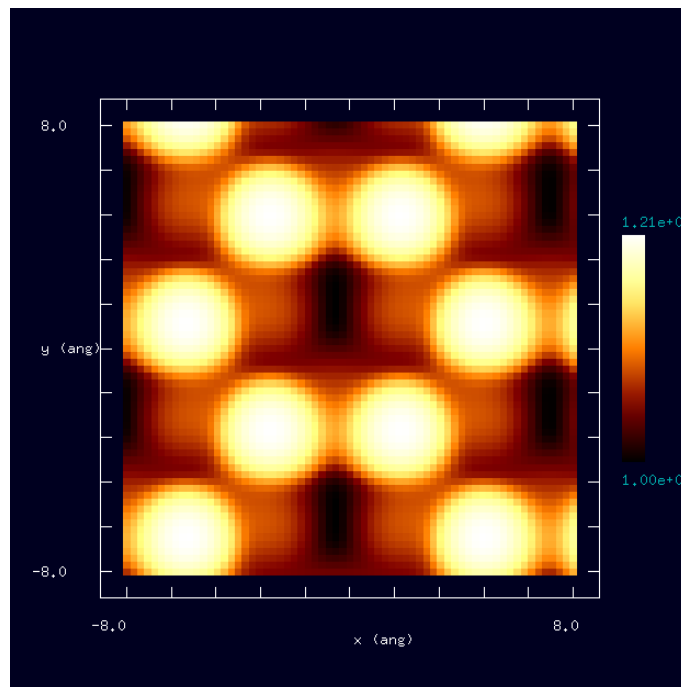
2つ下左図にモデル形状最上層における六角形構造、また2つ下右図にモデル形状第二層における六角形構造の位置を示しました。

第二層の表層からの距離は、Si原子間距離の数割程度

あるので、構造を反映した形状データが得られます。

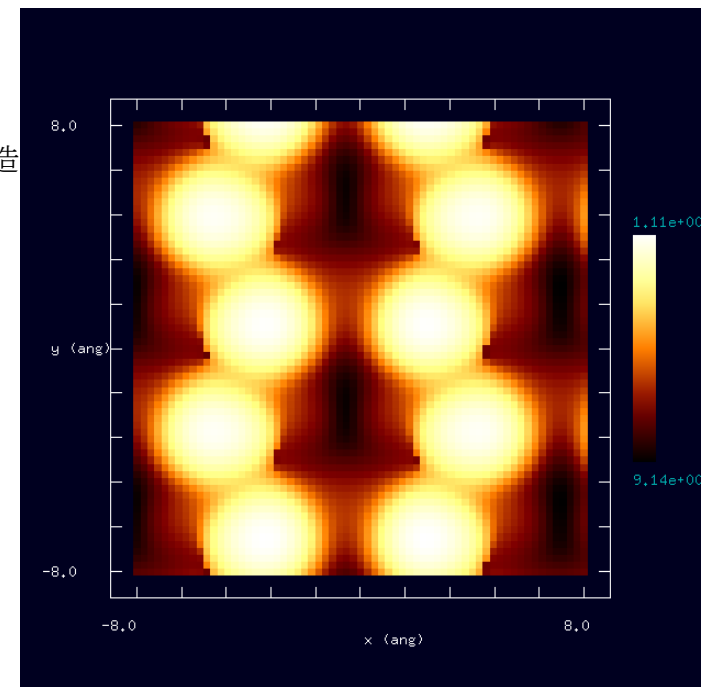
試料の原子数が多いので、設定したスキャン領域では、処理に時間が掛かります。(数時間)

バイアス電圧 +0.8V では、最上層における6角形構造が際立つ。

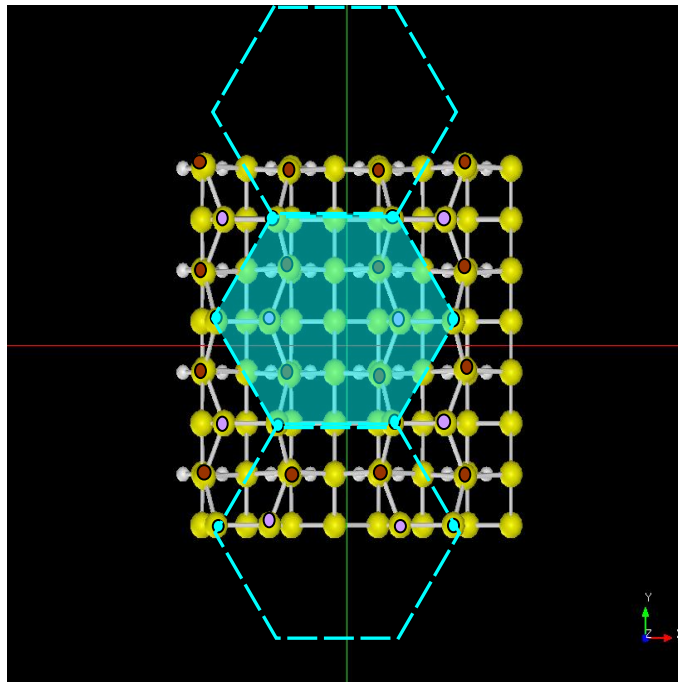


バイアス電圧 +0.8Vでのシミュレーション像

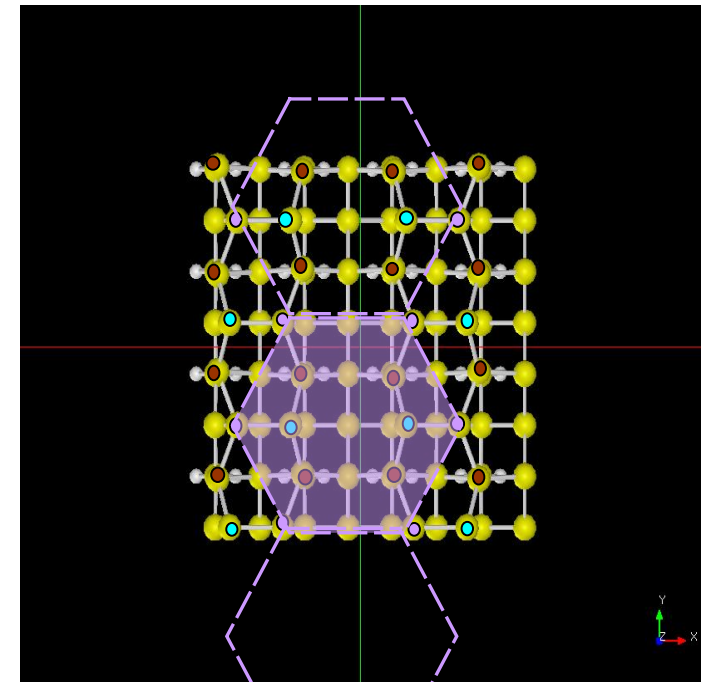
バイアス電圧 -0.5Vでは、第二層における6角形構造が際立つ。



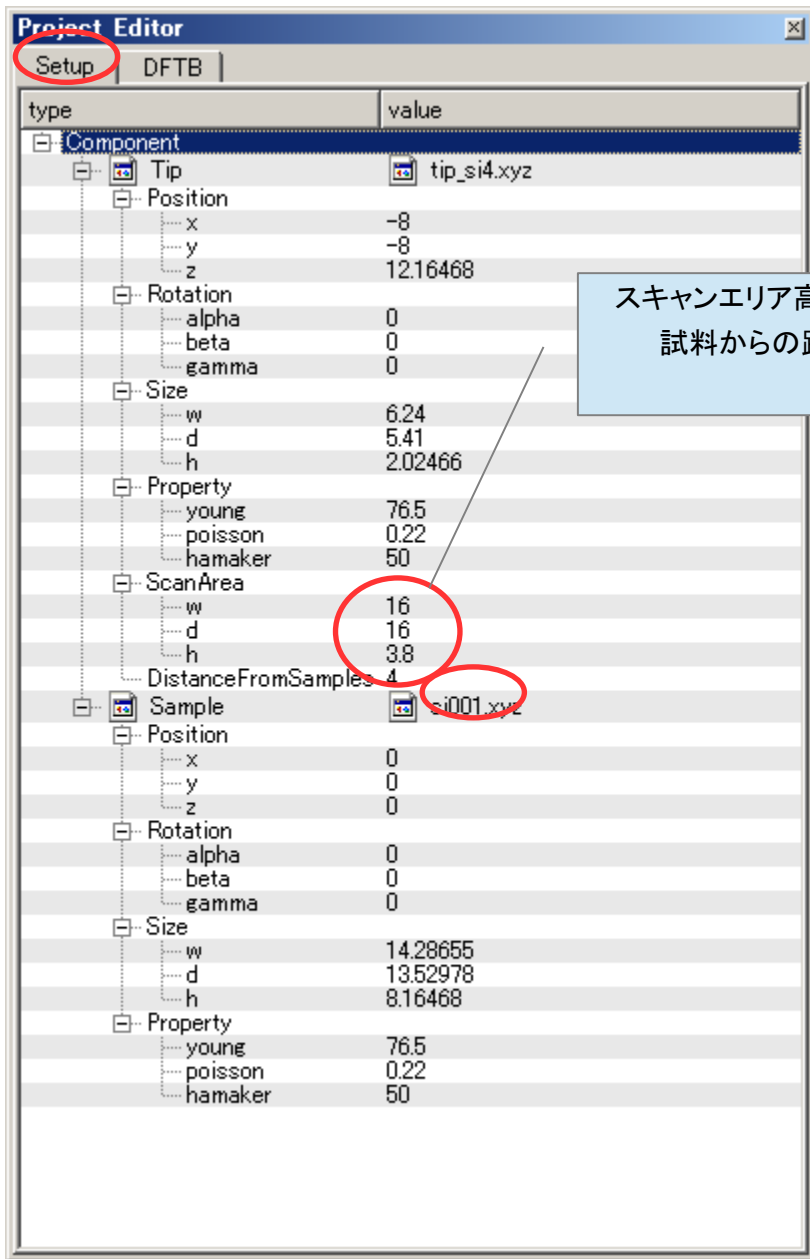
バイアス電圧 -0.5Vでのシミュレーション像



バイアス電圧 +0.8V での、最上層における6角形構造



バイアス電圧 -0.5Vでの、第二層における6角形構造

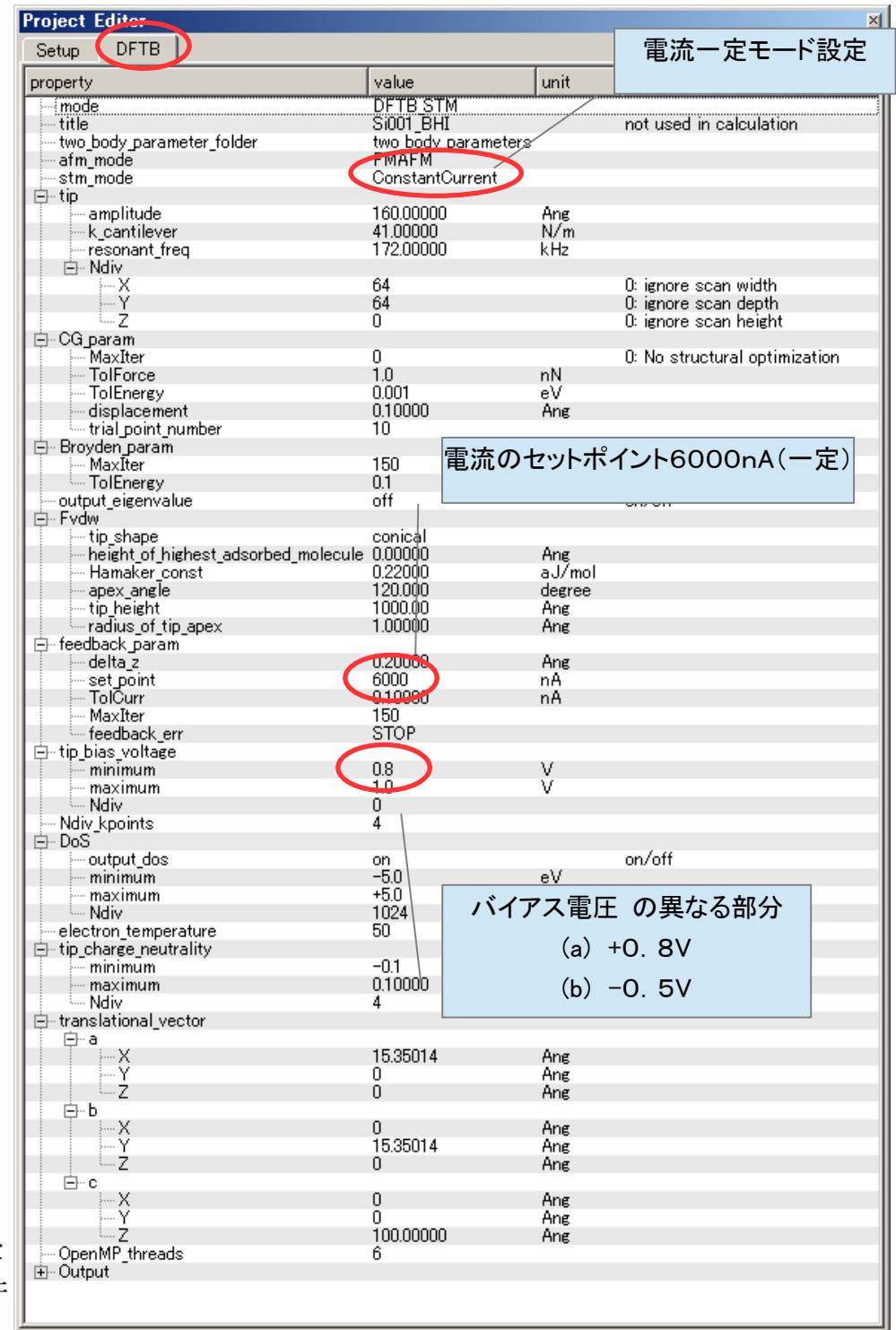


スキャンエリア高さ 3.8 Å
試料からの距離4 Å

モデルのセットアップ条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

バイアス電圧 +0.8V と
バイアス電圧 -0.5Vの設定条件



電流のセットポイント6000nA(一定)

バイアス電圧 の異なる部分
(a) +0.8V
(b) -0.5V

類例：Si (011) 表面のConstCurrentSTMシミュレーション

計算モード識別 (番号) プロジェクト名：
[project_file_for_beginners_version_DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_001a](#) (バイアス電圧 +0.8V)
[project_file_for_beginners_version_DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_001b](#) (バイアス電圧 -0.5V)

本事例は、今回作成した試料 Si (011) 表面を、電流一定のSTMトポグラフィー像でシミュレートします。

先の事例の表面超周期構造を持つSi (001)-c (4x2) の代わりに、

Si (011) を基本とする単位胞に置き換えます。

探針は作成済みデータ「tip_si4.xyz」を用います。

単位胞に合わせて周期境界条件を入力します。

stm_mode は **ConstantCurrent** (指定のある場合のみ) に設定しています。

スキャンエリアは、試料単位胞上面をほぼ覆うサイズとなっています (右図)。

スキャンエリアの高さを「**3.8Å**」としています。

探針の試料からの距離を「**4Å**」とします。

並列化処理設定を行っています (マルチスレッドに対応)

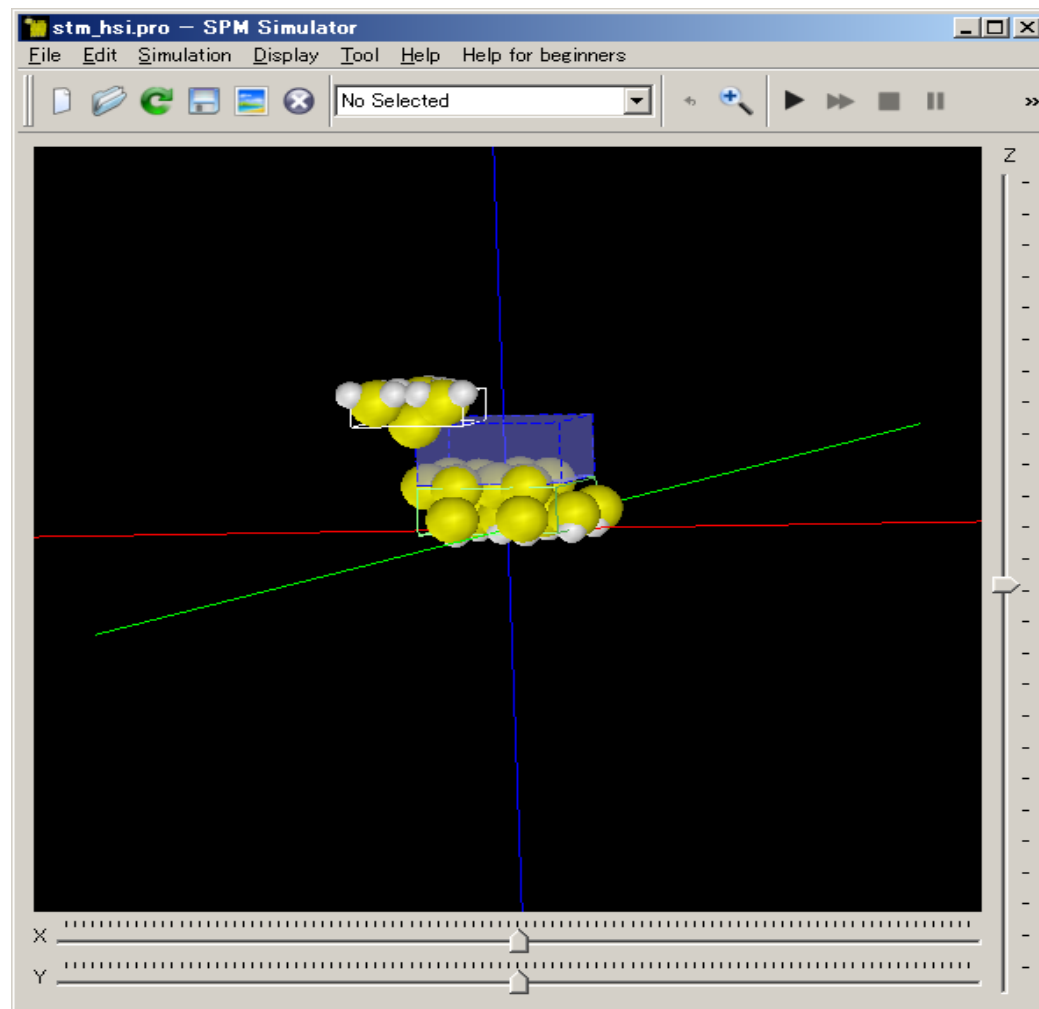
バイアス電圧 +0.8V とバイアス電圧 -0.5V での計算を設定条件で行わせました (下左右表)。

下左図のバイアス電圧 +0.8V では、最上層の構造が目立ちます。

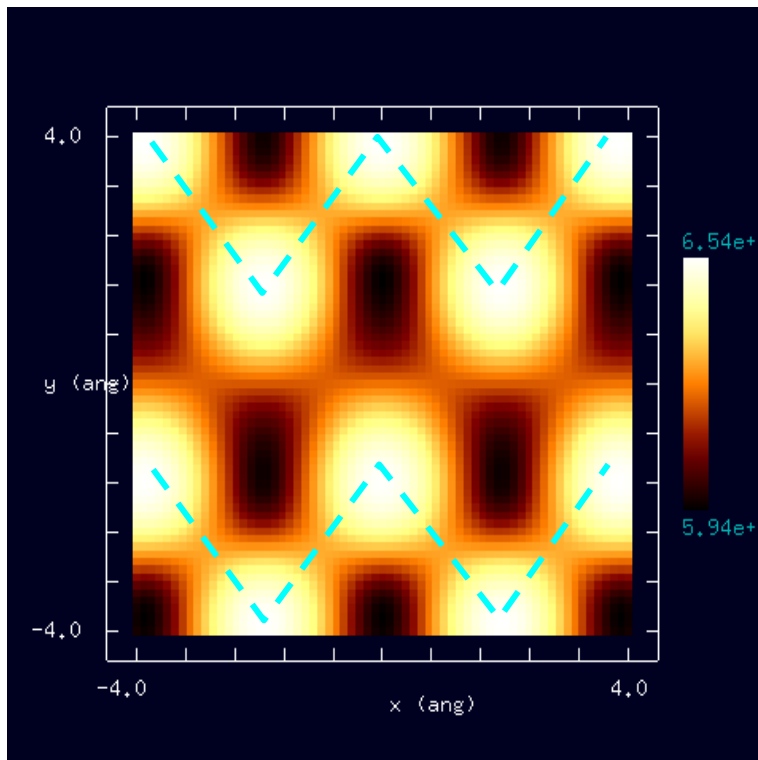
下右図のバイアス電圧 -0.5V では、最上層のジグザグ構造が消失します。

第二層の表層からの距離は、Si原子間距離程度あるので、構造を反映した形状データは埋没し、見えにくくなっています。

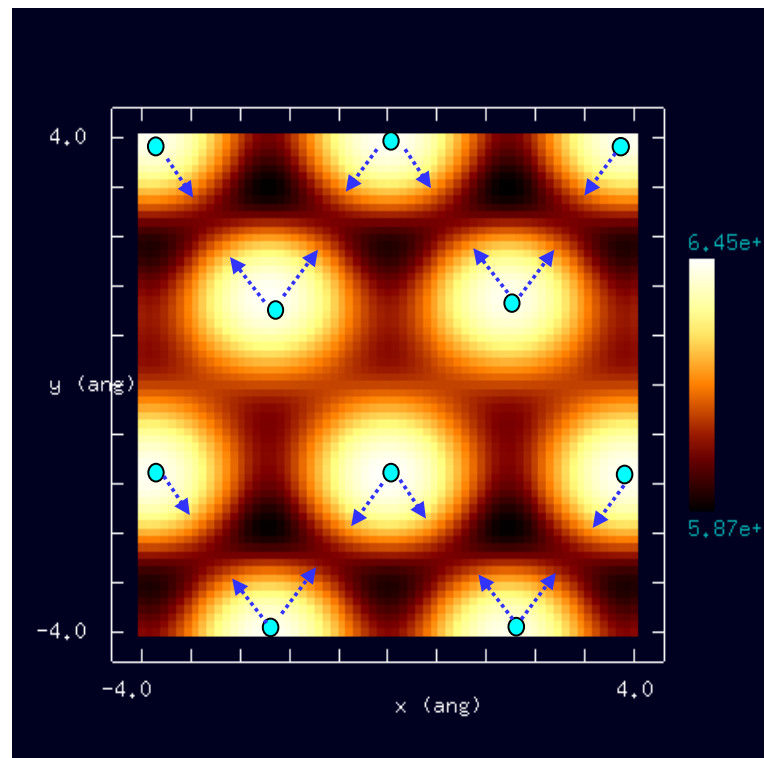
バイアスの正負によって構造が異なることは、Si (001)-c (4x2) と似ています。



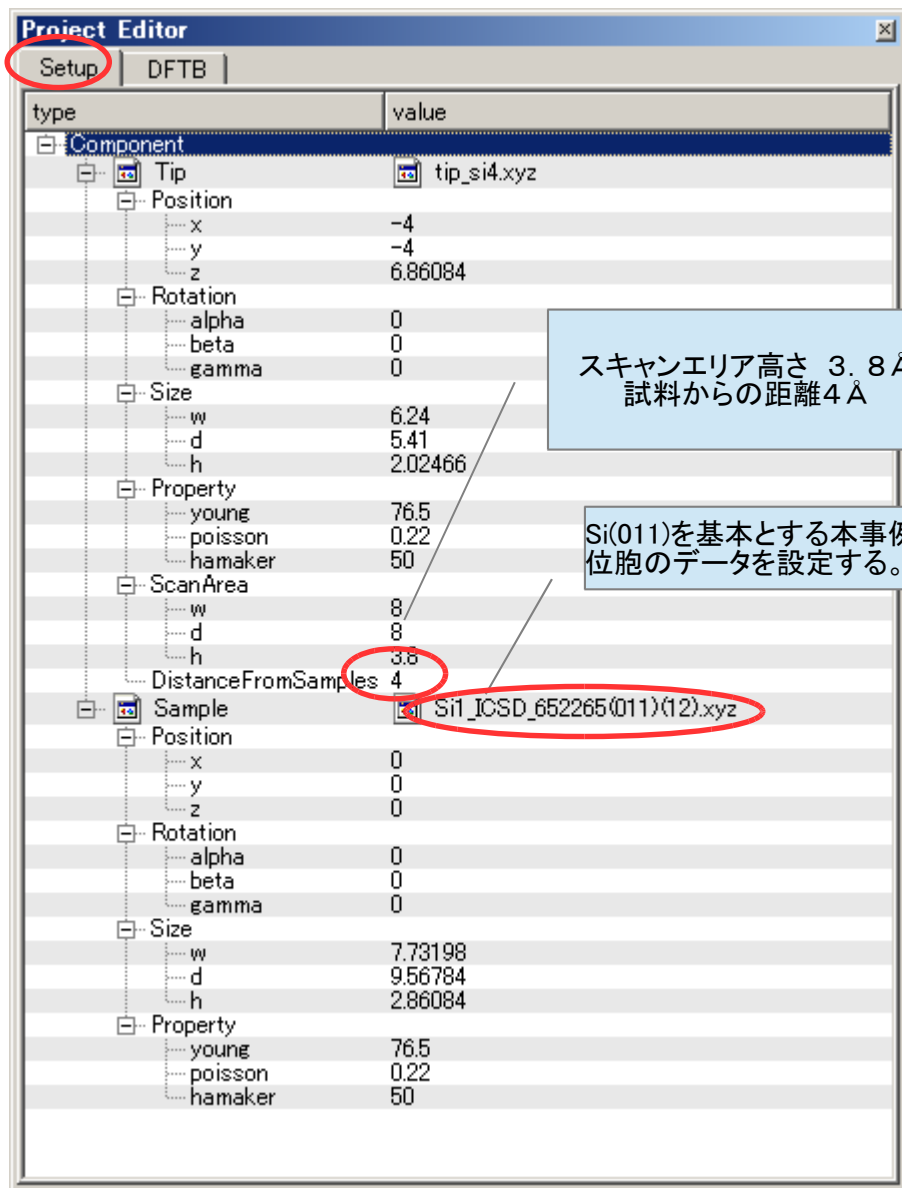
本計算事例のスキャン領域俯瞰図



バイアス電圧 +0.8V



バイアス電圧 -0.5V

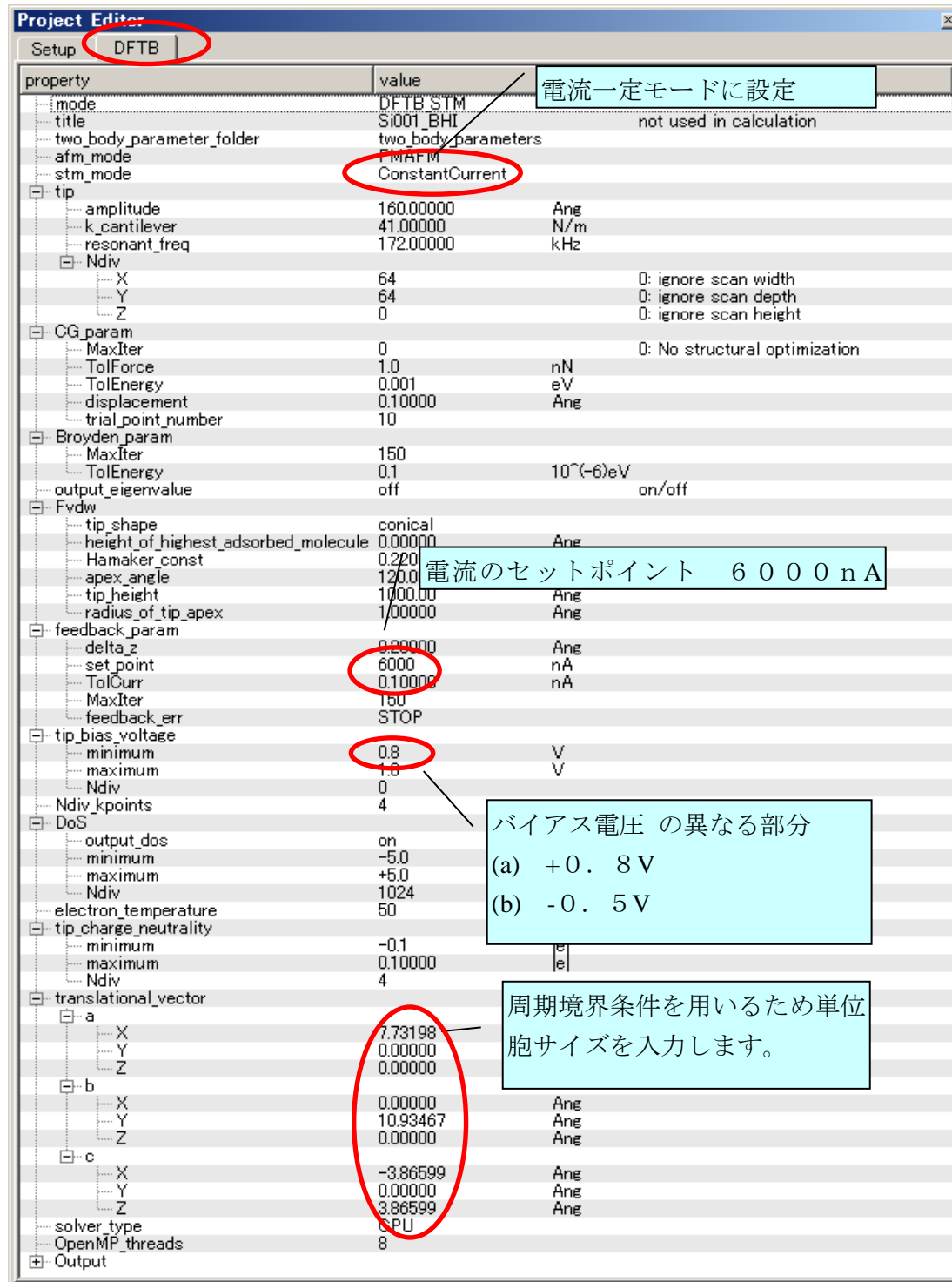


スキャンエリア高さ 3.8 Å
試料からの距離 4 Å

Si(011)を基本とする本事例用単位胞のデータを設定する。

モデルのセットアップ条件

バイアス電圧 +0.8V と
バイアス電圧 -0.5Vの設定条件



電流一定モードに設定

電流のセットポイント 6000 nA

バイアス電圧 の異なる部分
(a) +0.8V
(b) -0.5V

周期境界条件を用いるため単位胞サイズを入力します。

電流一定シミュレーション事例試料モデルSi(001)-c(4x2)解説

電流一定シミュレーションでの、Si(001)-c(4x2)事例試料モデルを解説します。

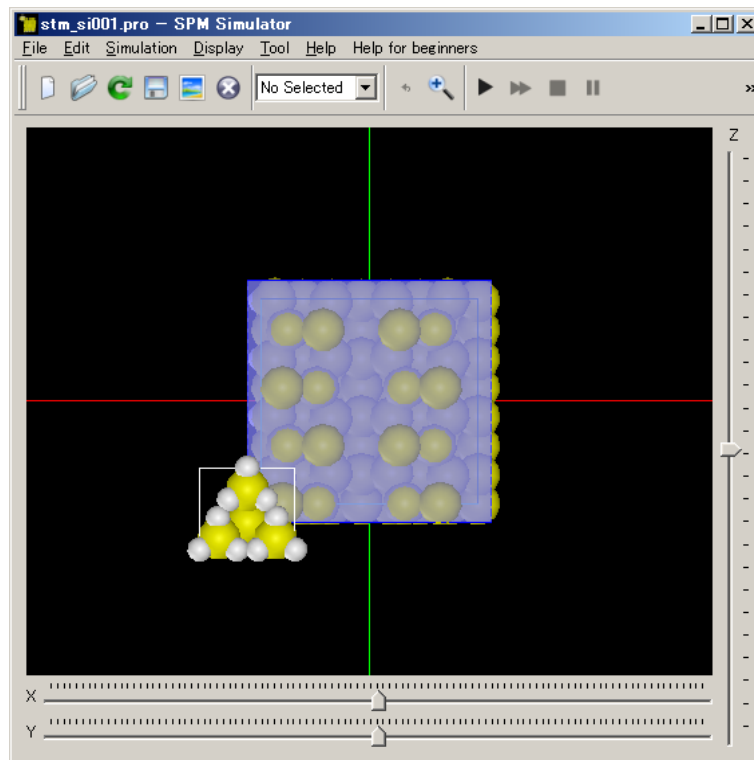
Si(001)-c(4x2)は、Si(001)の表面処理後、終端同士が結合しており、一部5角形形状をした安定構造（非対称ダイマー構造）とされています。

最表面層に対し、第2層は、Si原子間距離の数割の位置に存在するようになり、最上層と比較による構造変化が観察しやすくなります（下右図）。

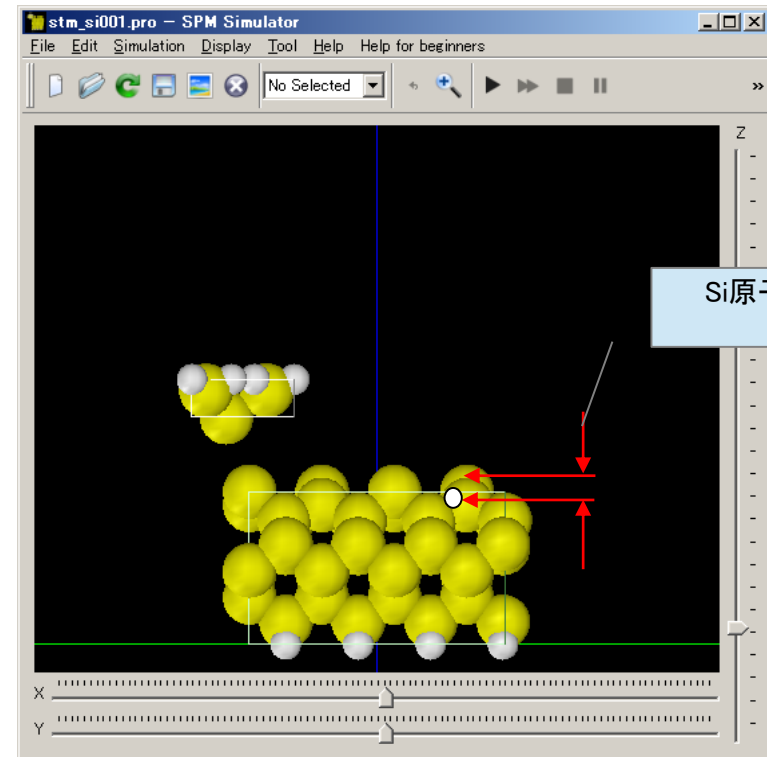
電流一定シミュレーションでは、高さ一定シミュレーションと異なり、スキャンエリアの厚みに幅（ > 0 ）があります（2つ下左図）。

スキャンエリアは、試料TOP面をほぼ覆っています（下左図）。

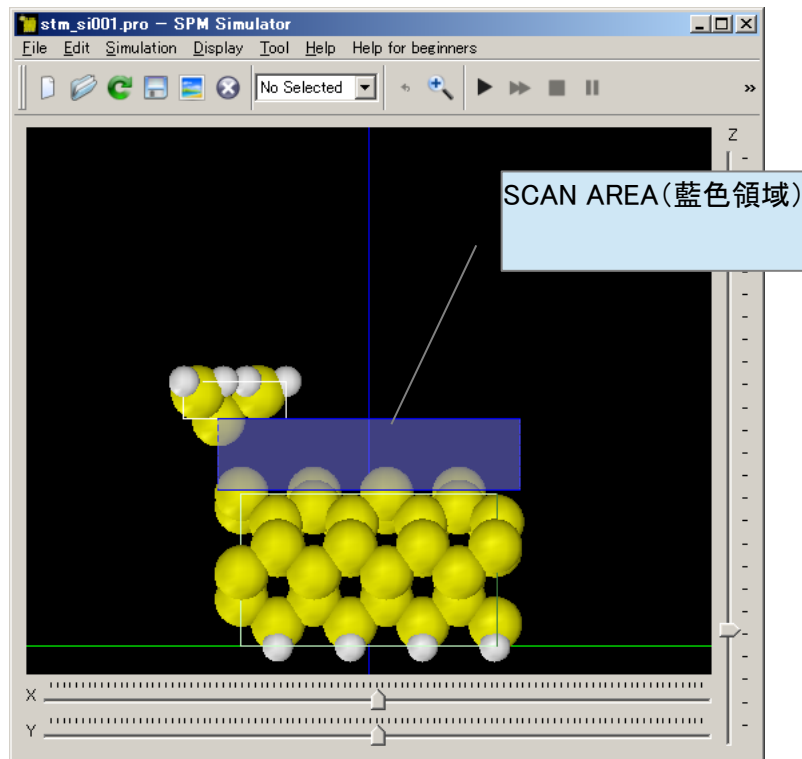
Si(001)-c(4x2)については作成済みデータとして「si001.xyz」が用意されており、利用可能です。



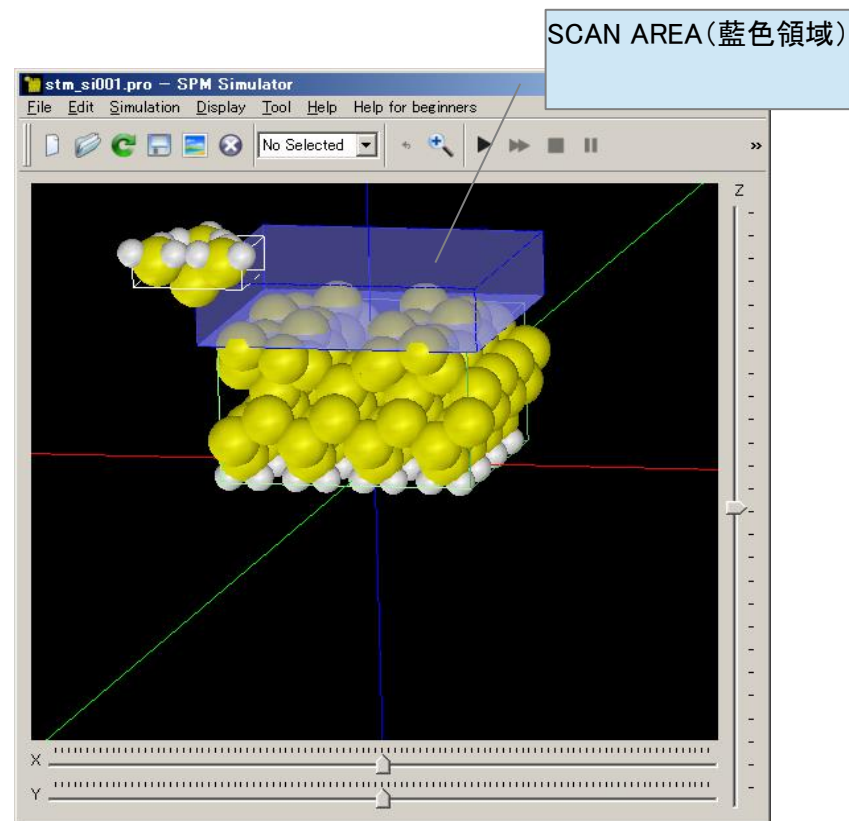
TOP表示でのSCAN AREA（藍色領域）



FRONT



SIDEでのSCAN AREA (藍色領域)



俯瞰図表示でのSCAN AREA (藍色領域)

7・本編での SPM シミュレータにおけるソルバー一覧

(事例として取上げたソルバー・モードを赤字で示しました)

| ●: 対応済 | | ×: 未対応 | | | | | |
|-----------|-----------|--------|--|-----------------------------------|--|---|--|
| V20170313 | V20160722 | ソルバー | モード1 | モード2 | モード名称 | 機能・その他 | |
| ● | ● | GeoAFM | | | | 幾何学法による交互予測 AFM シミュレーション ポップアップ・メニュー [GeoAFM] → [Show Simulated Sample] で表示 [GeoAFM] → [Show Simulated Tip] | |
| ● | ● | FemAFM | femafm_Van_der_ Waals_force femafm_frequency_shift femafm_JKR | | ノンコンタクトモード 周波数シフト像モード 粘弾性接触解析モード | 連続弾性体 AFM シミュレータ | |
| ● | ● | DFTB | DFTB_STM DFTB_STM DFTB_STS DFTB_AFM | ConstantHeight ConstantCurrent | 高さ一定、トンネル電流像: コンスタントカレント、 STM トポグラフィ像 トンネル電流分光 周波数シフト AFM 像: | 量子力学的 SPM 像シミュレータ | |

| | | | | | | |
|---|---|----------|--|--|--|---------------|
| ● | ● | SetModel | | | | 試料と探針の原子モデル作成 |
|---|---|----------|--|--|--|---------------|