

このシミュレータの特長

- 系の**電子状態**に基づいた像計算
 - **トンネル電流像**(トンネル電流分光) / **局所接触電位差像**
 - **精密な** 原子間力像 / 周波数シフト像
- 密度汎関数法に基づいた**強束縛計算法**を採用
[Elstner et al.(1998)]
 - 自己無撞着計算
 - 密度汎関数法のみでの計算よりも**高速**
 - 強束縛法パラメータ(e.g. H_{ij} , S_{ij})は**弊社で作成**

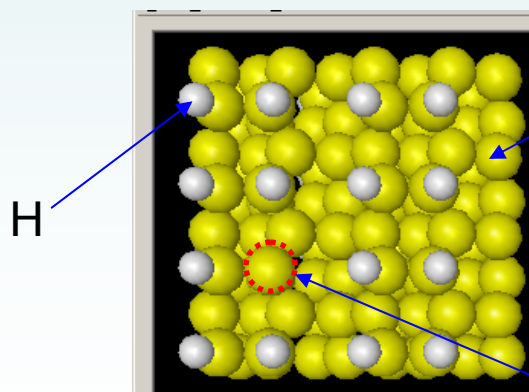
トンネル電流像 (1/2)

Bardeenの摂動論による公式を利用

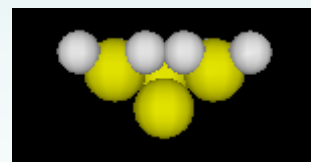
- 探針試料間距離が離れていると仮定
- 電子状態計算：一度
- 像の計算が高速！

欠陥のあるH-Si(001)-(2x1)表面 (→実演)

表面モデル

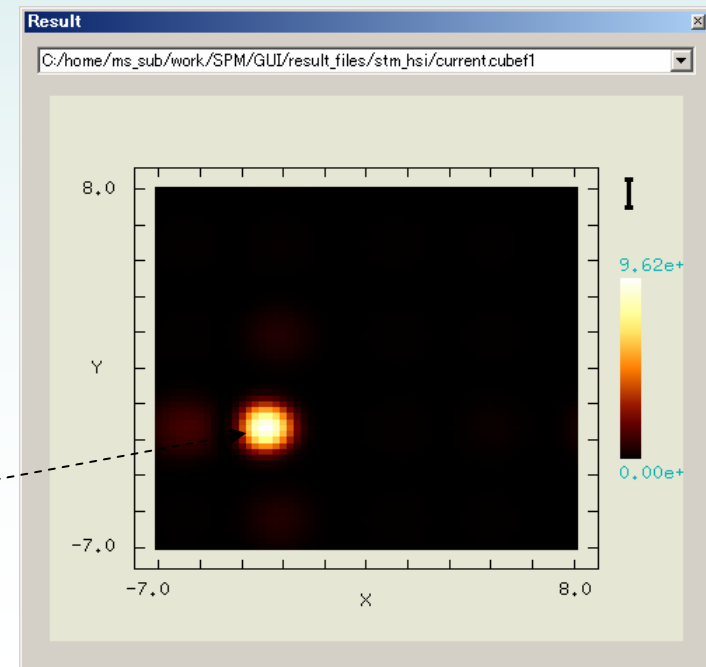


探針モデル



探針高さ 4.2 Å

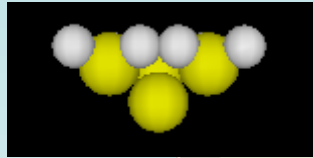
H 欠陥



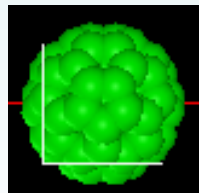
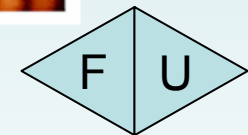
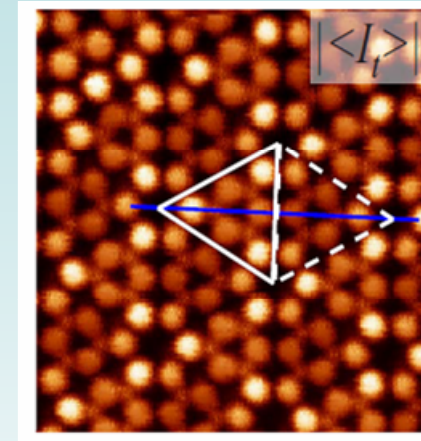
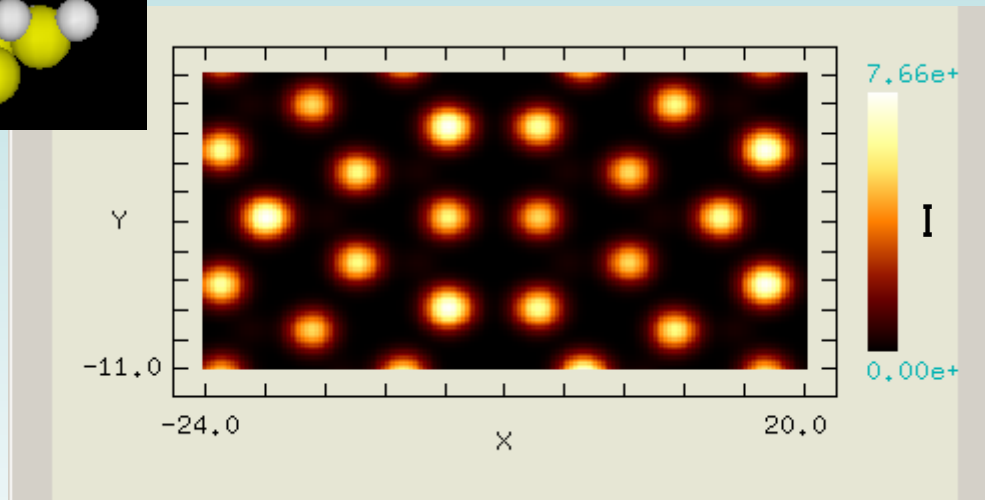
トンネル電流像 (2/2)

Si(111)-7x7 DASモデル

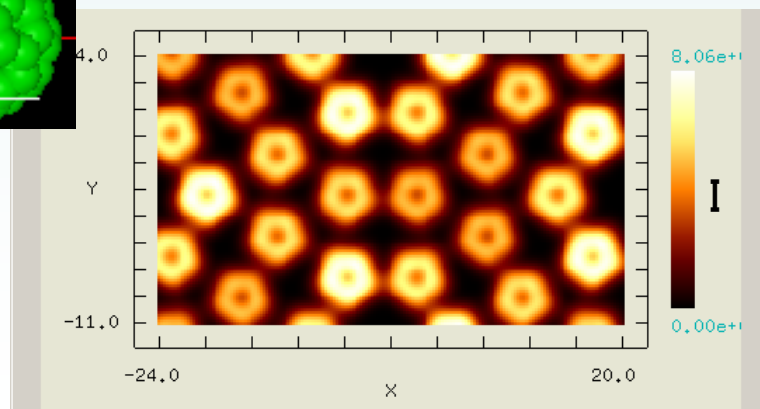
Exp. by Sawada et al. (2009)



Si₄H₉



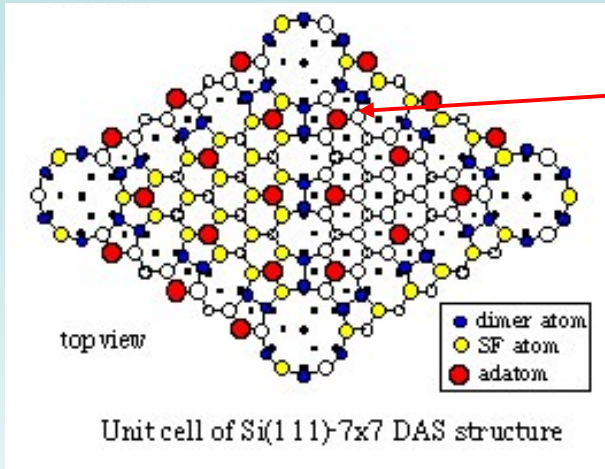
C₆₀



- 計算時間:(PC利用、172x100 pixels)
(上)約**1時間**、(下)約**1日**
- アダトムの位置での電流の強弱が再現されている
- 探針高さ 4.0 Å

トンネル電流分光

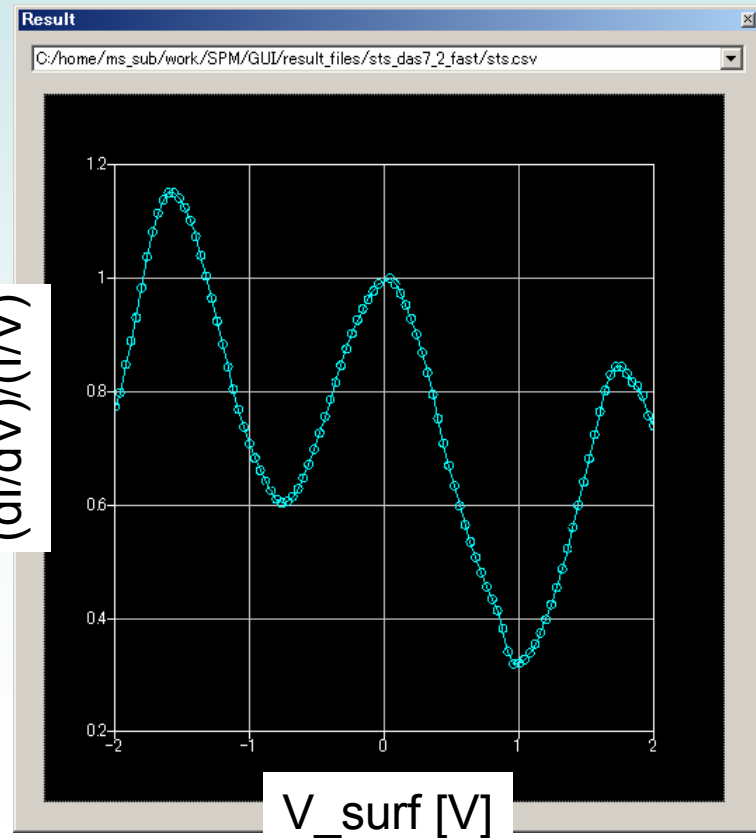
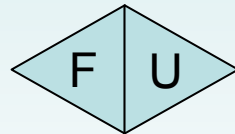
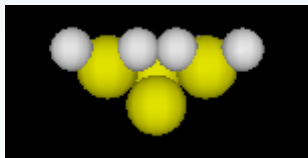
Si(111)-7x7 DASモデル



このアダトム上でのトンネル電流分光
(計算された電流値を数値微分)

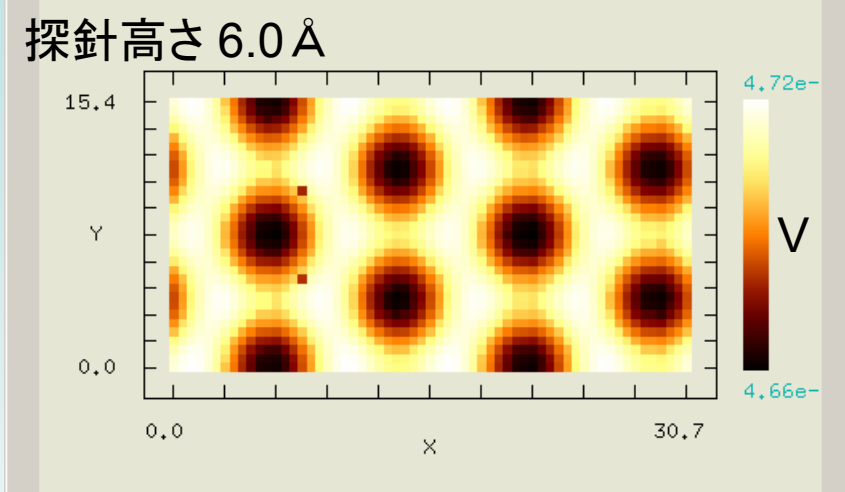
-2.0 V ~ +2.0 V、探針高さ 3.0 Å

探針モデル



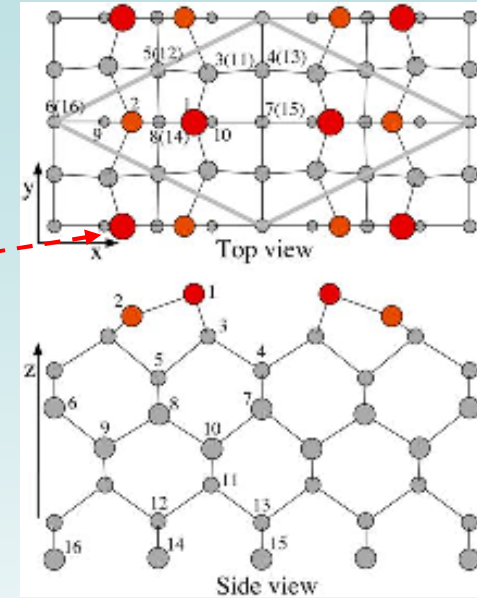
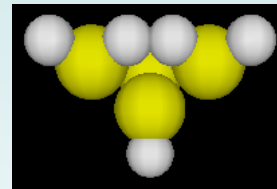
接触電位差像(1/2)

Si(001)-c(4x2) 清浄表面

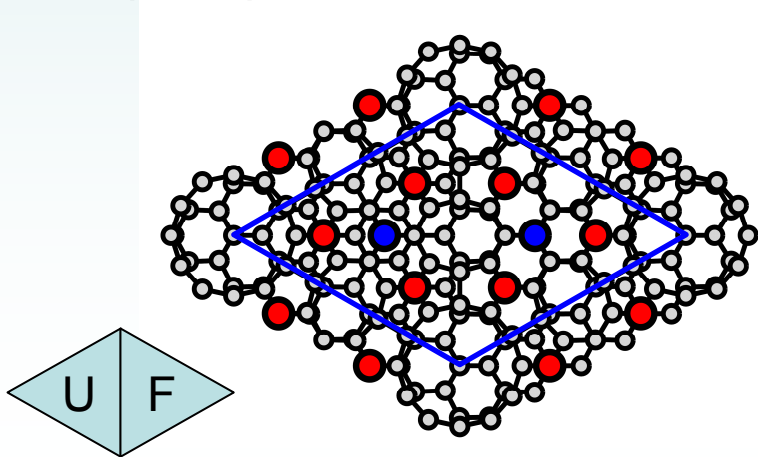


原子配置
(左図の1/4の範囲)

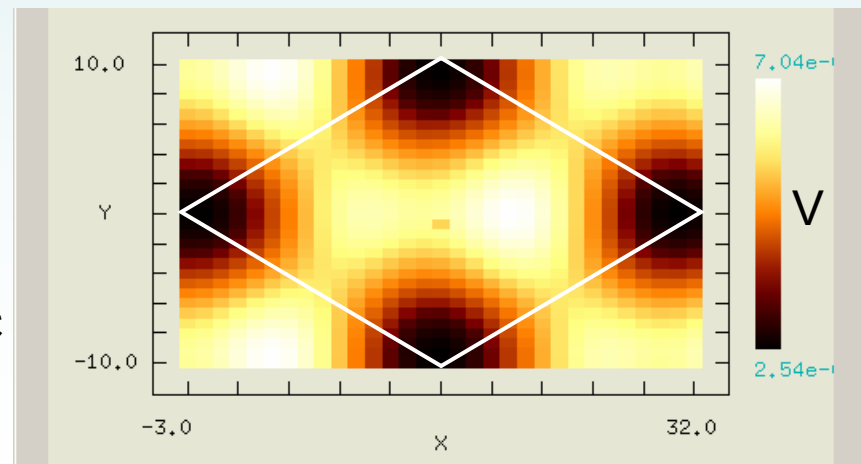
アップダイマー
Si原子



Si(111)-5x5 DAS 表面構造



探針高さ
5.5 Å

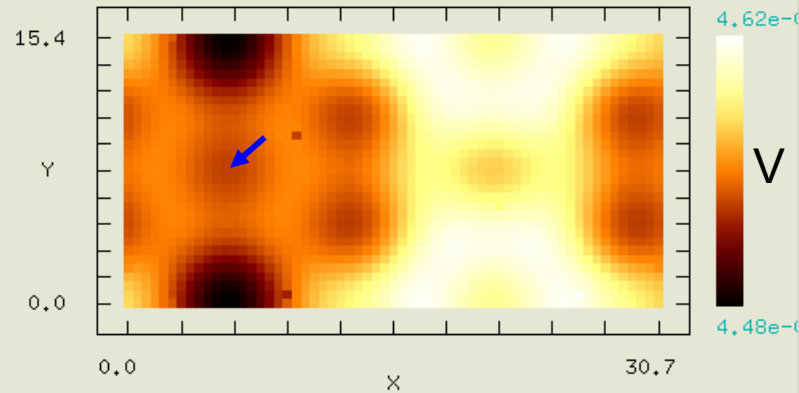


接触電位差像(2/2)

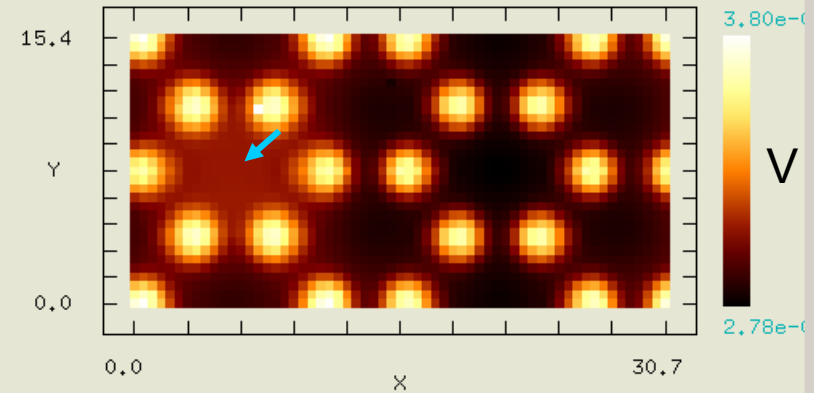
Si(001)-c(4x2) 表面内に不純物(深さ4.2 Å)を一つ入れた系

N

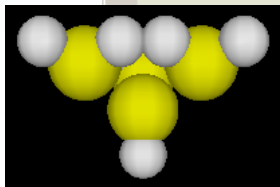
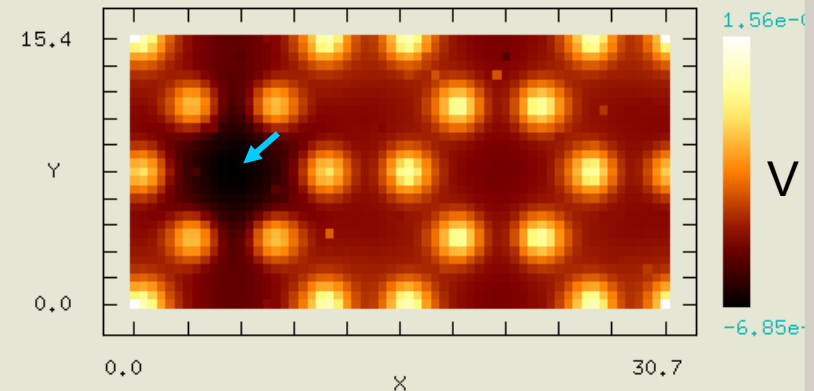
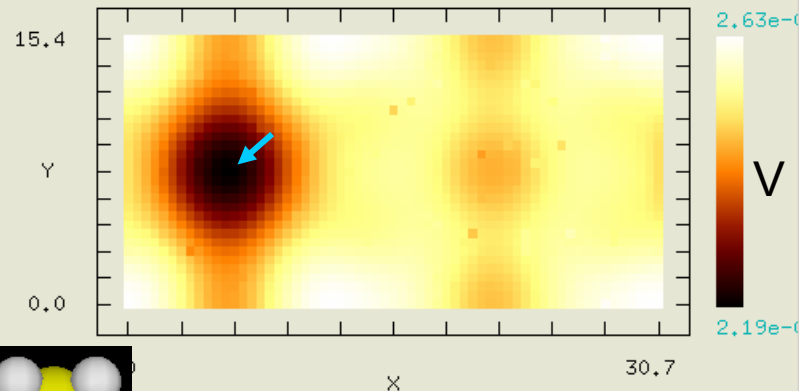
探針高さ 6.0 Å



探針高さ 4.0 Å



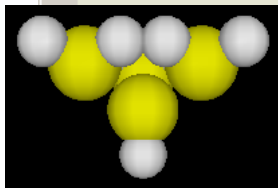
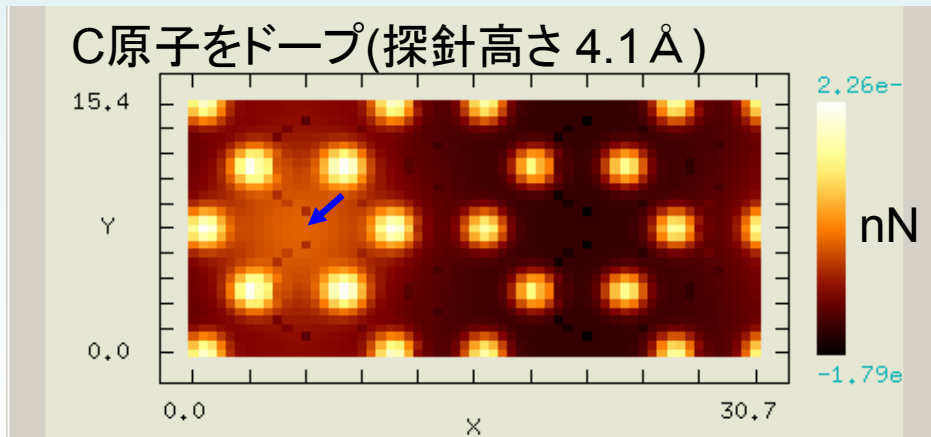
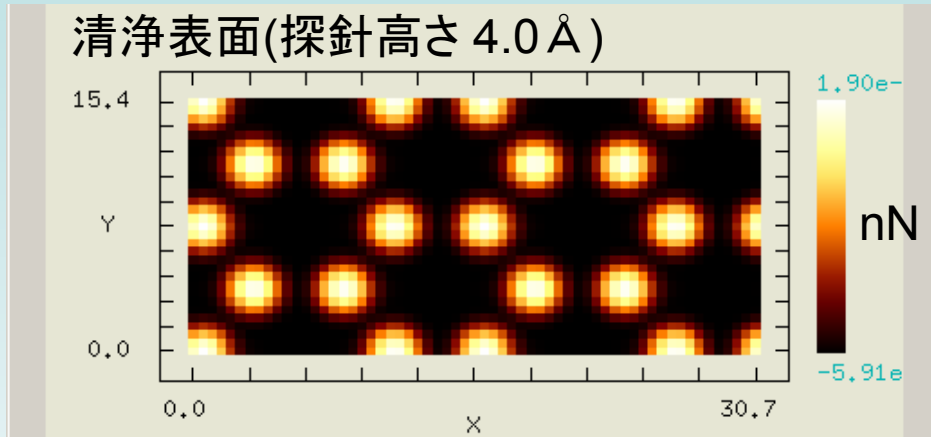
P



A. Masago et al., in preparation.

原子間力関連

Si(001)-c(4x2) 表面: フォースマップ



H-Si(001)-(2x1)表面: 周波数シフト像
探針高さ 2.5 Å

