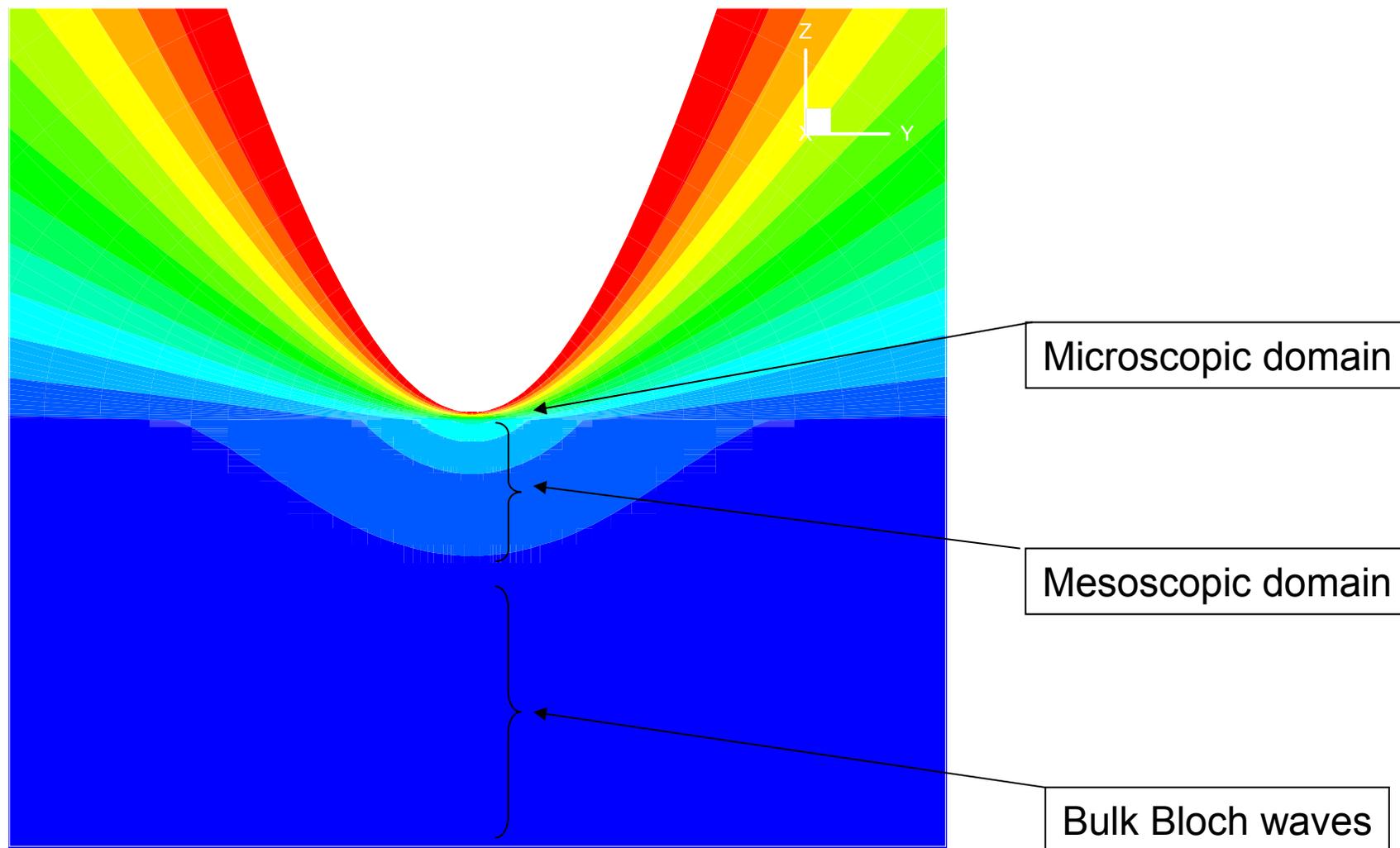


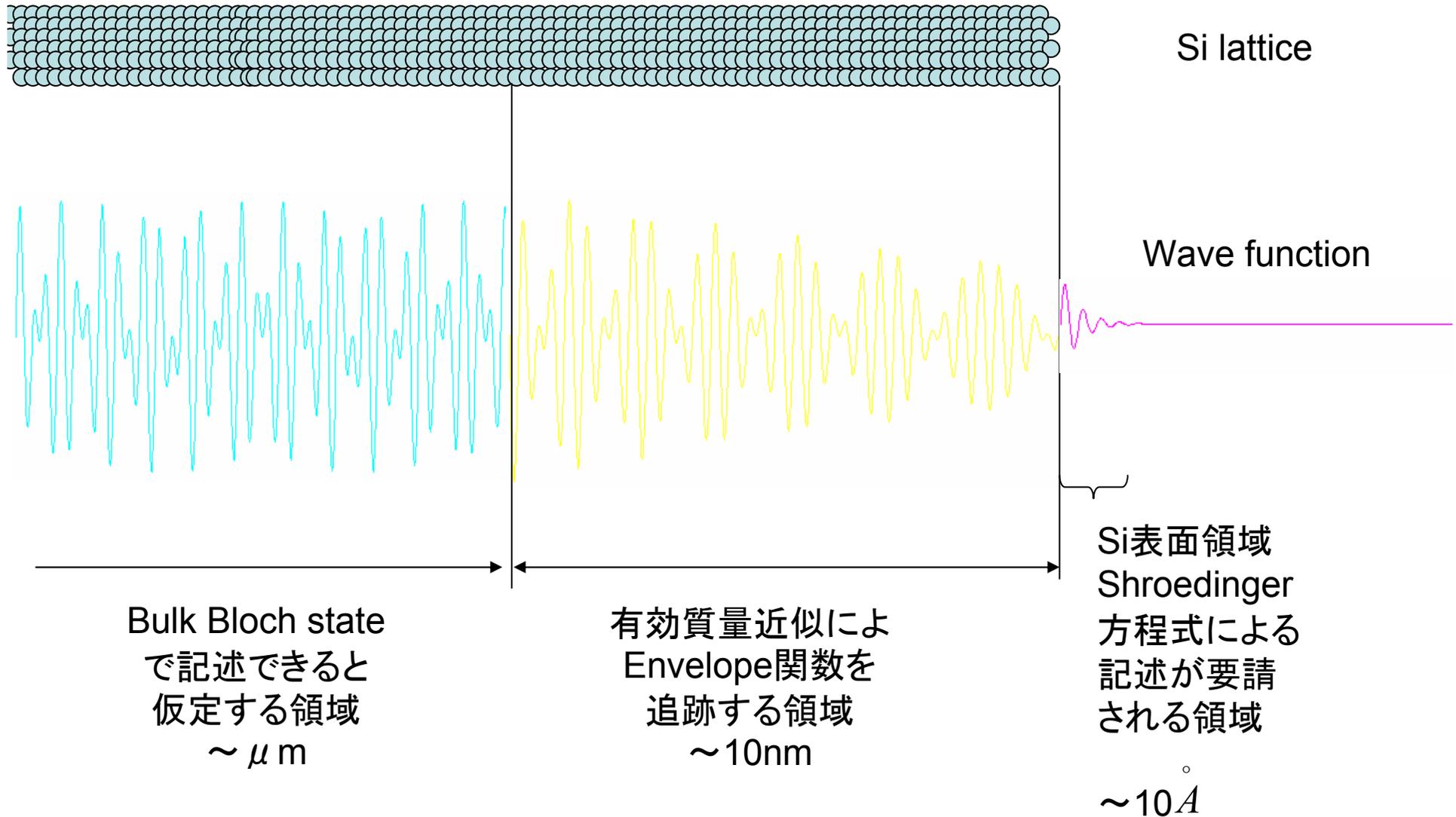
極微細トランジスタ設計を視野 にいたした表面電子状態シミュ レーション

Advanced Algorithm & Systems

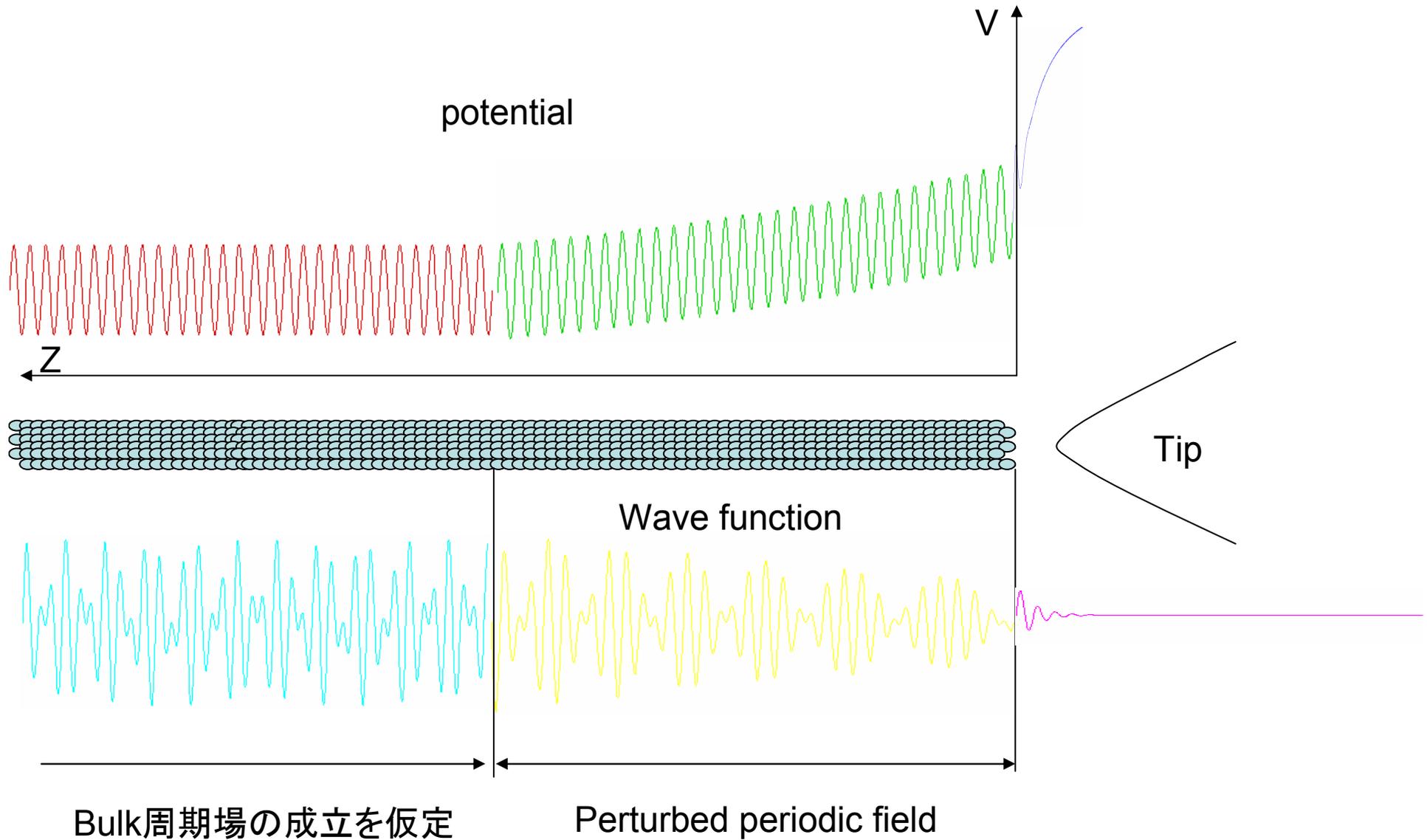
Tipとsample近傍の 3 領域



波動関数の振る舞い



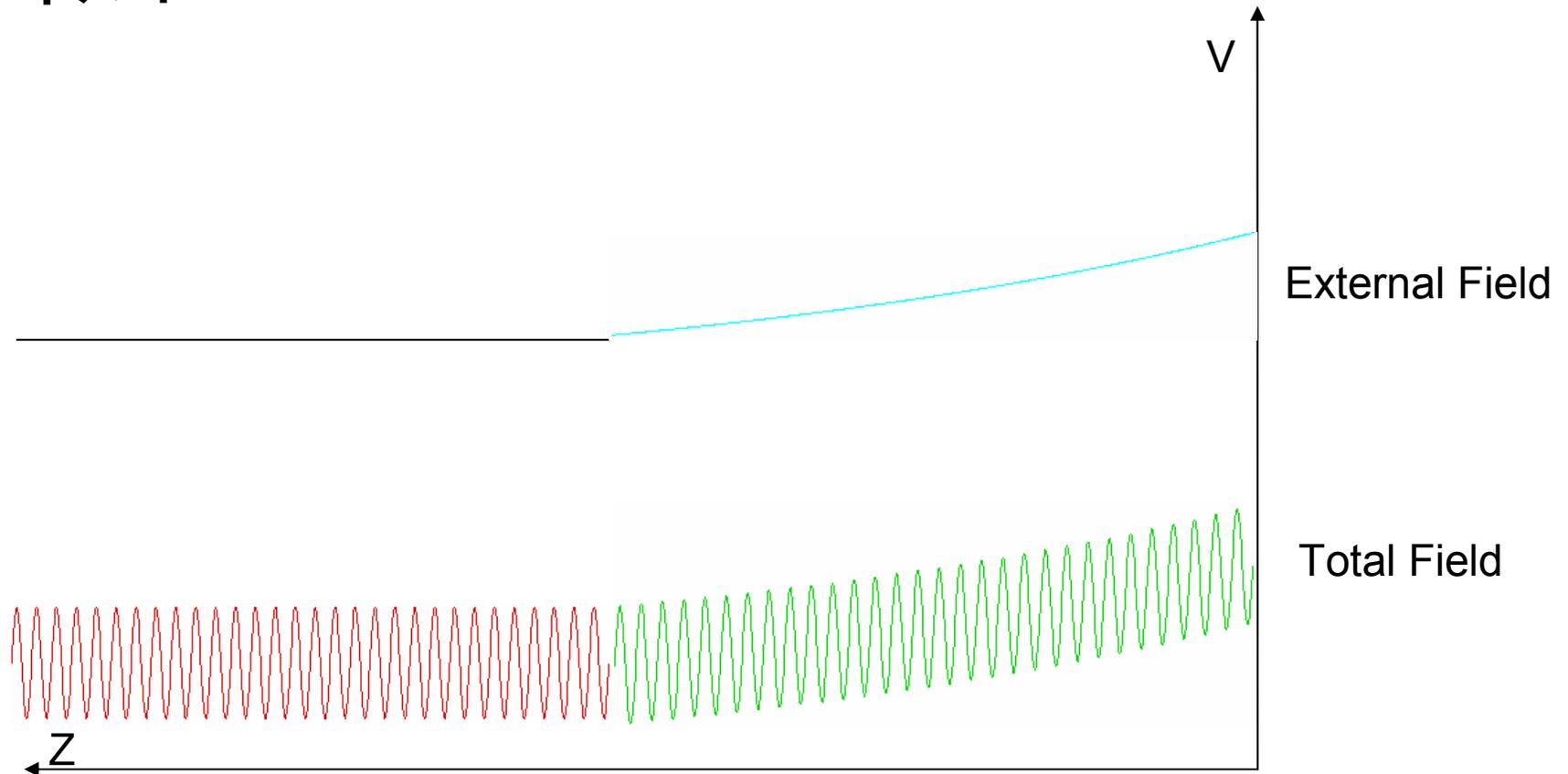
電場と波動関数の関係



Mesoscopic regionの方法論1

外場

外場の変化がBulk内の周期場に比べて十分マイルド



Mesoscopic regionの方法論2

波動関数からEnvelope関数へ

Kohn-Luttinger baseによる波動関数の展開



Envelope関数

$$\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = F_{n,\vec{k}-\vec{k}_0}(\vec{r})\psi_{n,\vec{k}_0}(\vec{r})$$

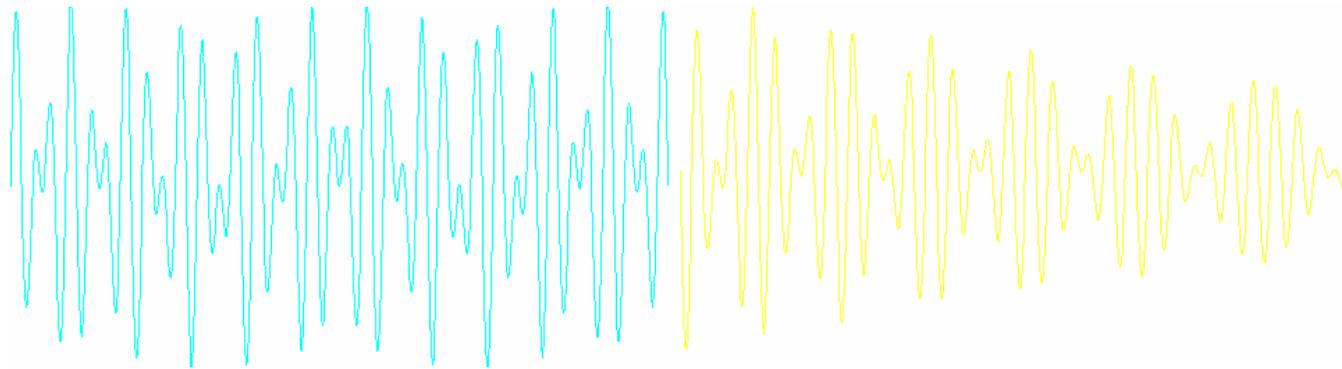
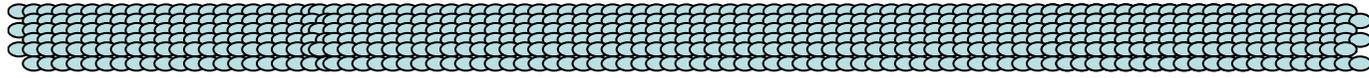
$$\psi_{n,\vec{k}_0}(\vec{r}) \quad \text{Bloch 関数}$$

$$F_{n,\vec{k}-\vec{k}_0}(\vec{r}) \quad \text{Envelope関数}$$

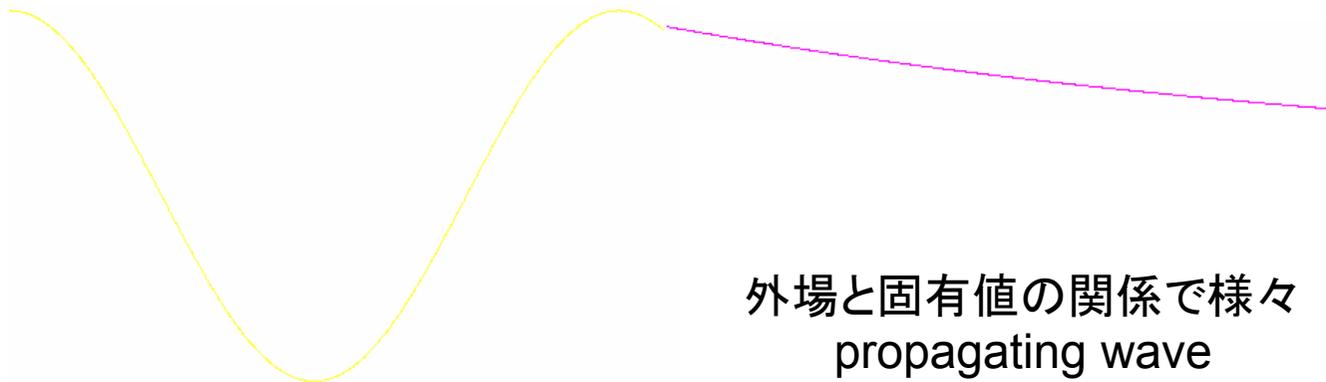


波数は基本的に $\vec{k} - \vec{k}_0$ ぐらいで非常にゆるやかな変化のみ記述する

波動関数とEnvelope関数



Wave function



Envelope function

propagating wave

外場と固有値の関係で様々
propagating wave
damping wave

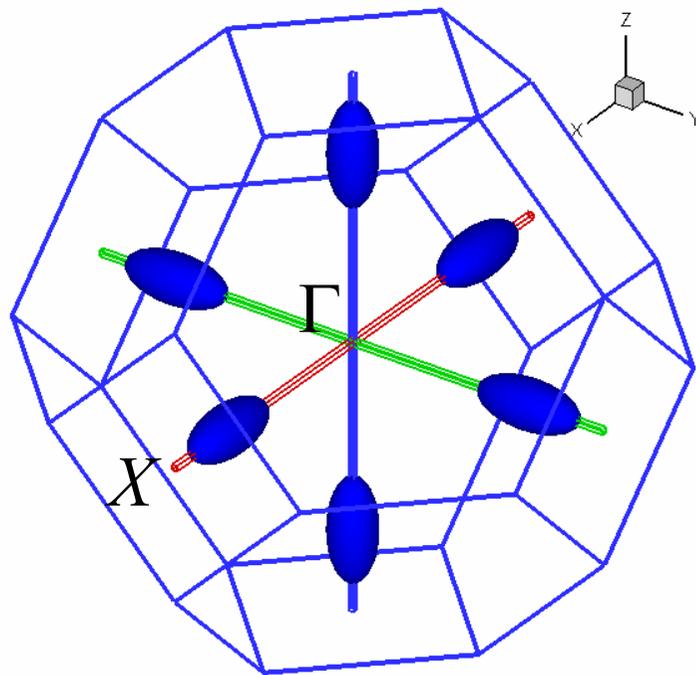
復習1 逆空間上でのエネルギー分散

- SiのFBZにおけるエネルギー分散の確認
- 各表面への射影の確認
- **Bulk側での接続条件の確認**
- **Surface側での接続条件の確認**

FBZ はfirst Brillouin zoneのこと

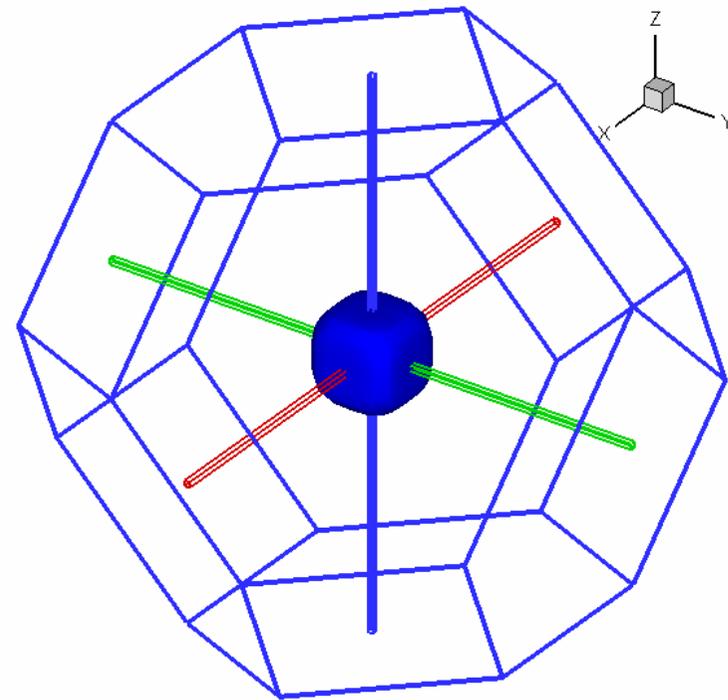
SiのFBZにおけるエネルギー分散の確認

Conduction Band Minimum



$$E(\vec{k}) = E_{CBM} + \delta$$

Valence Band Maximum

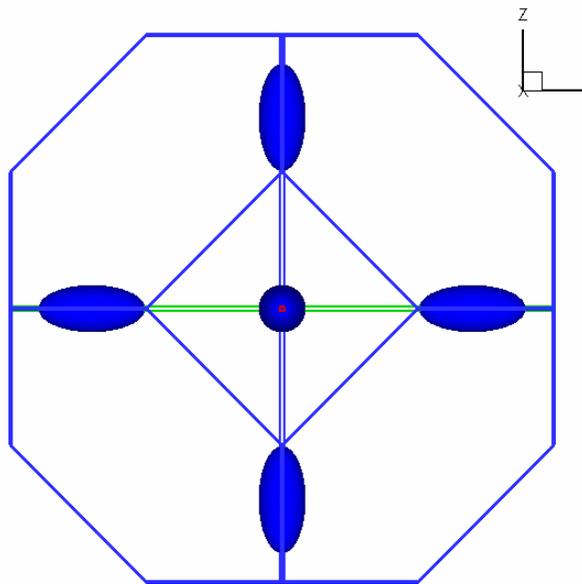


$$E(\vec{k}) = E_{VBM} - \delta$$

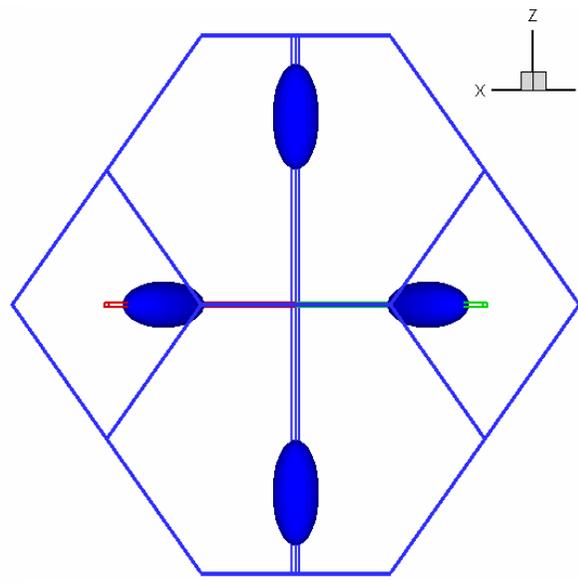
解析関数で表現できる。各種実験データ、理論的考察によりパラメータが決定できる表面への接続において重要なobservableである (E, k_{\parallel}) の決定に関係している。

エネルギー面は正確ではありません(以下省略)

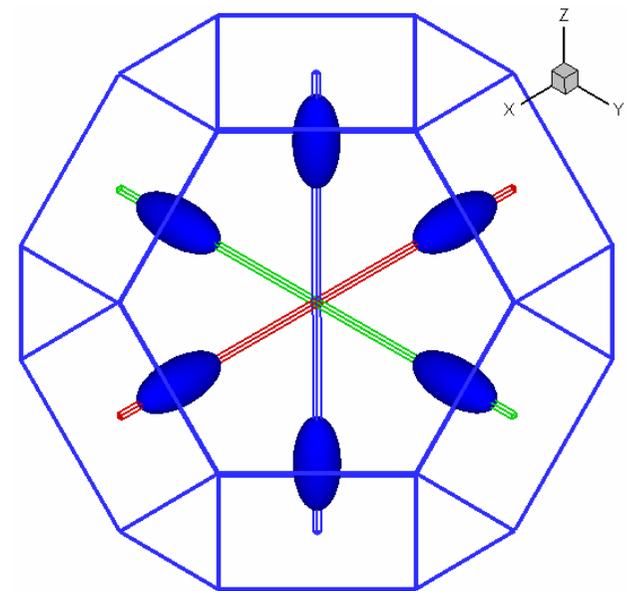
(100),(110),(111)方向から見た等エネルギー一面
 ($E(\vec{k}) = E_{CBM} + \delta$)



(100)- projection
 紙面に平行な
 reflection planeがある



(110)-projection
 紙面に平行な
 reflection planeがある



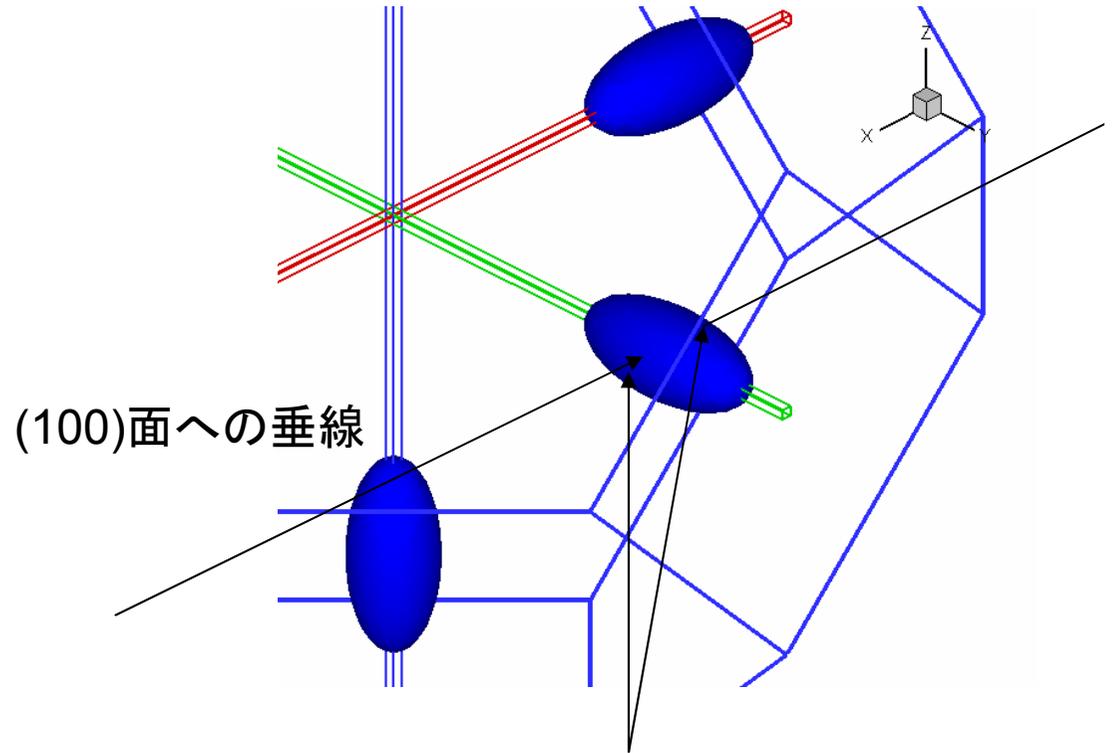
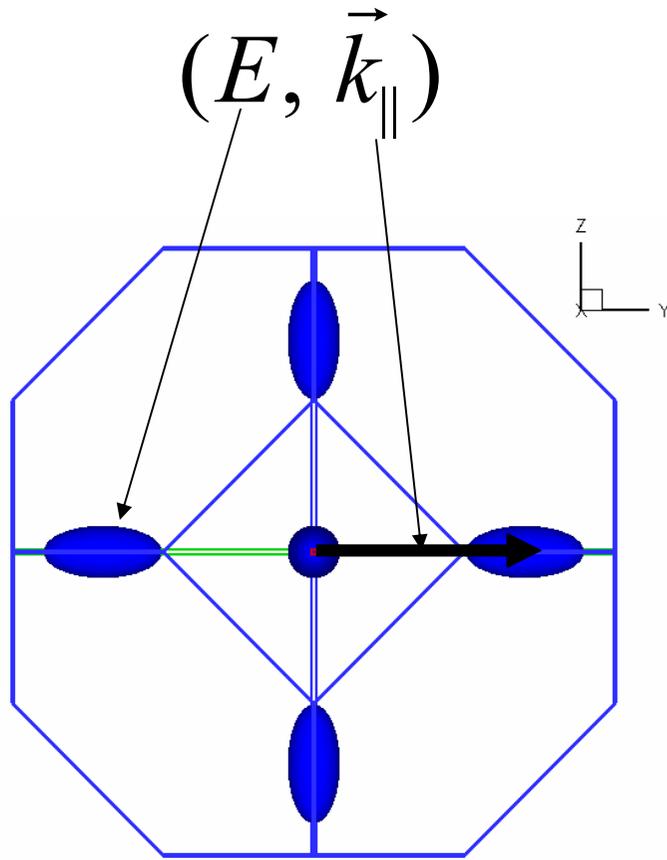
(111)-projection
 紙面に平行な
 reflection planeがない

Bulk Bloch waveとの接続について (前回までの不十分だった点の修正点について)

- 要請1 表面に対してStanding Waveを構成する
(表面で減衰する場合に全反射する。)
- 要請2 Bulk内の状態密度を漸近的に保存する

前回までは同じ (E, \vec{k}_{\parallel}) を持つBloch waveを表面に対して
垂直な波数成分 $k_z, -k_z$ を持つBloch waveから探そうとしたけど
(111)面で破綻した。今回はエネルギー分散が解析的に既知なので
上の要請を満たし、かつ表面でもよく振舞う接続を構成できる

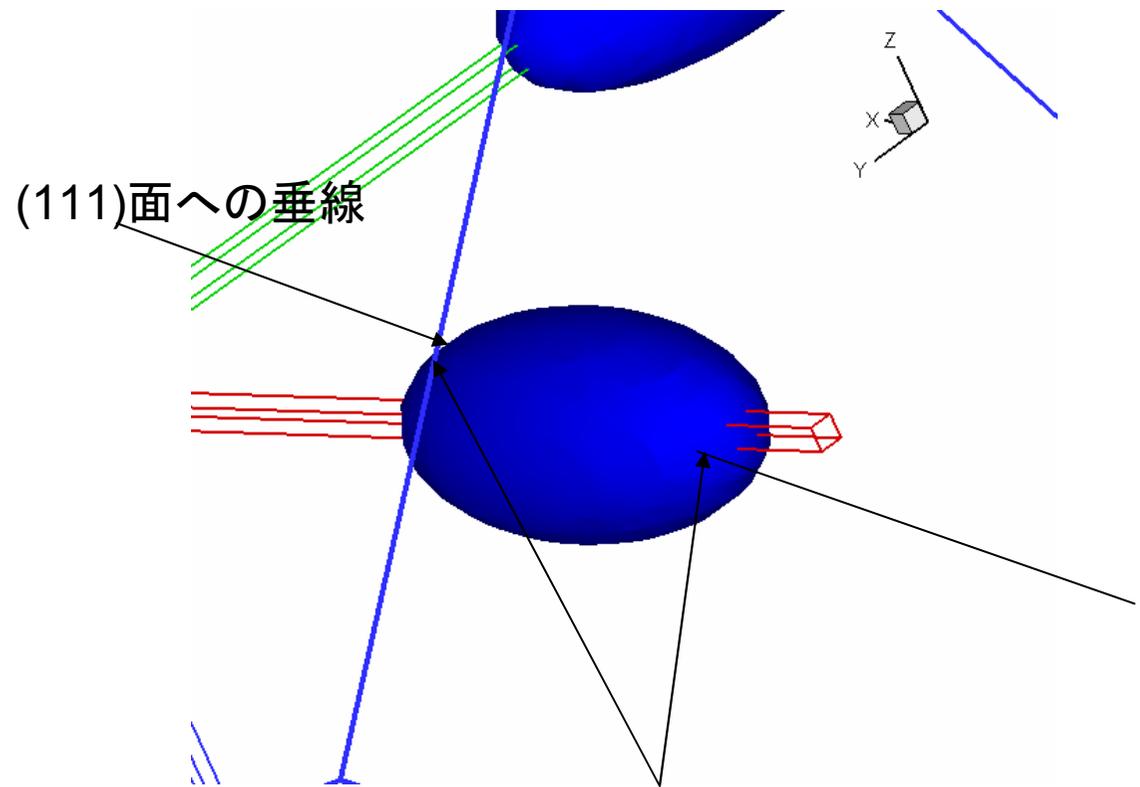
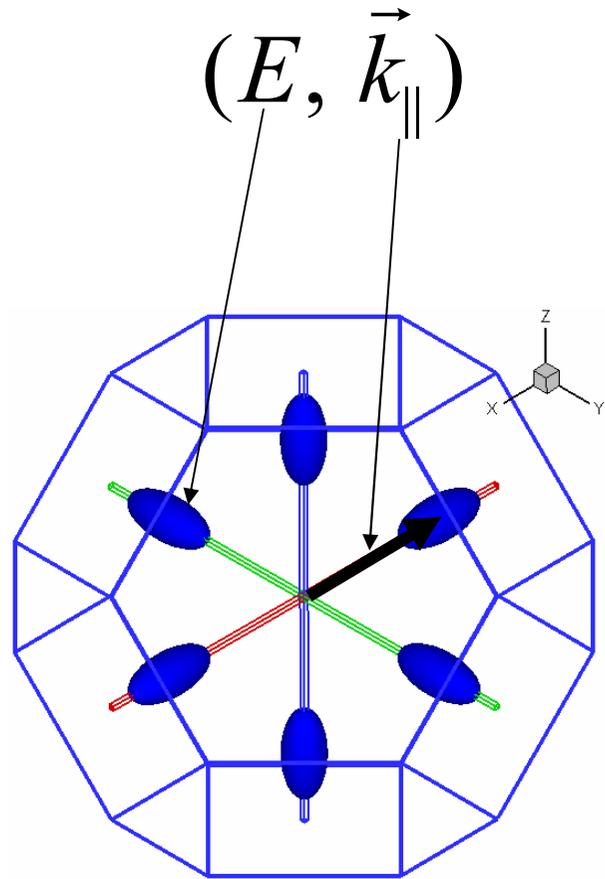
Bloch waveとの接続 Si(100)の例



この例ではふたつのBloch waveが対応するが
実は無数のEvanescent waveが存在している

ふたつの交点を生じる
ひとつが入射波
ひとつが反射波

Bloch waveとの接続 Si(111)の例



この例ではふたつのBloch waveが対応するが
実は無数のEvanescent waveが存在している
(111)面でも縮退したBloch waveを構成できる

ふたつの交点を生じる
ひとつが入射波
ひとつが反射波

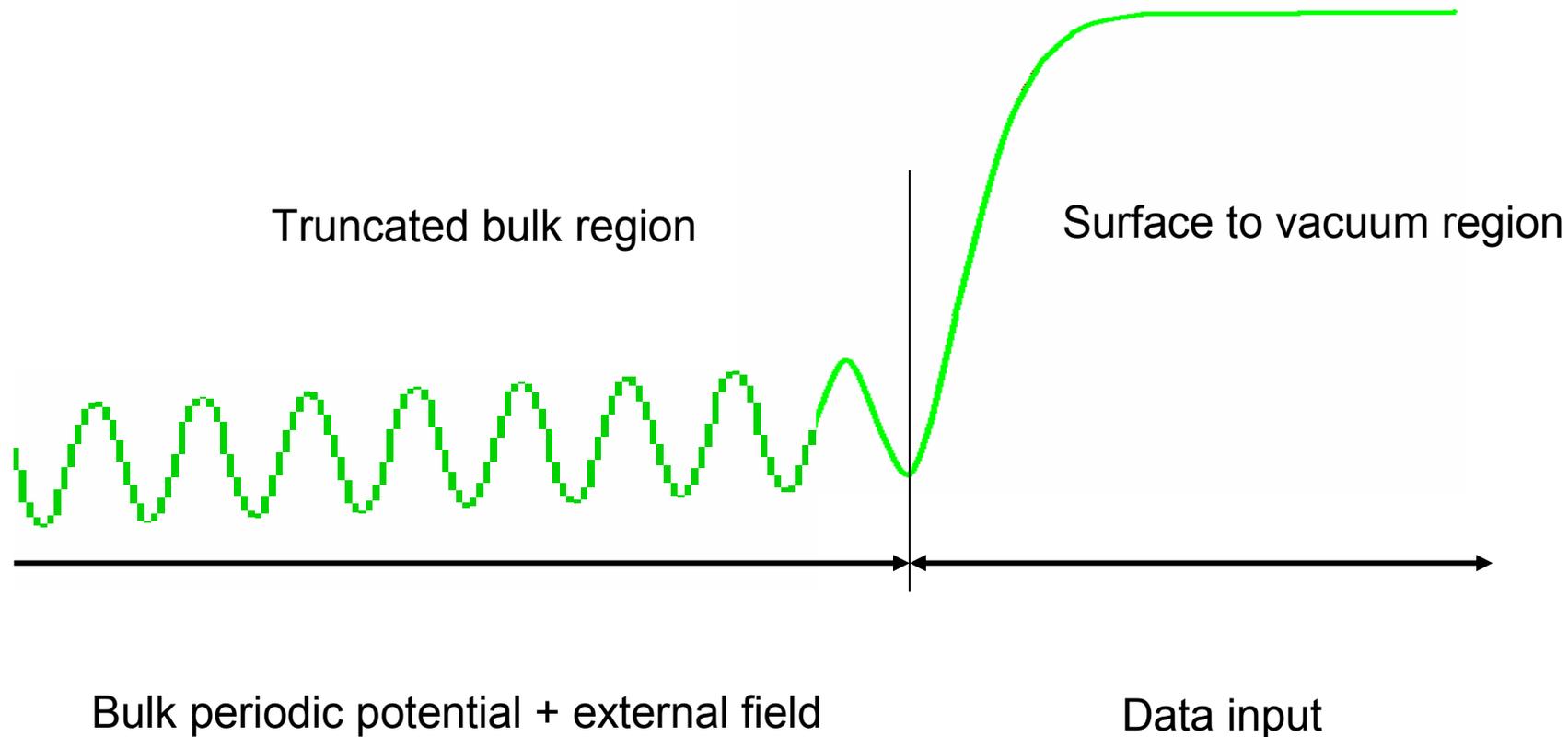
Bulk側のEnvelope functionの接続条件

- 縮退したBloch waveの線形結合を構成する
- 要請1、要請2をみたす拘束を課す
- 以上の結果をEnvelope functionにつなぐ

表面近傍のスキーム1(for mesoscopic calc)

Abruptly truncated bulk approximation

Mesoscopic regionの計算のためのポテンシャルはBulkの状態が突然打ち切られたと考える。表面から真空におけるポテンシャルは外部入力とし、表面に平行なFourier成分は当面無視する。



表面近傍のスキーム2(for mesoscopic calc)

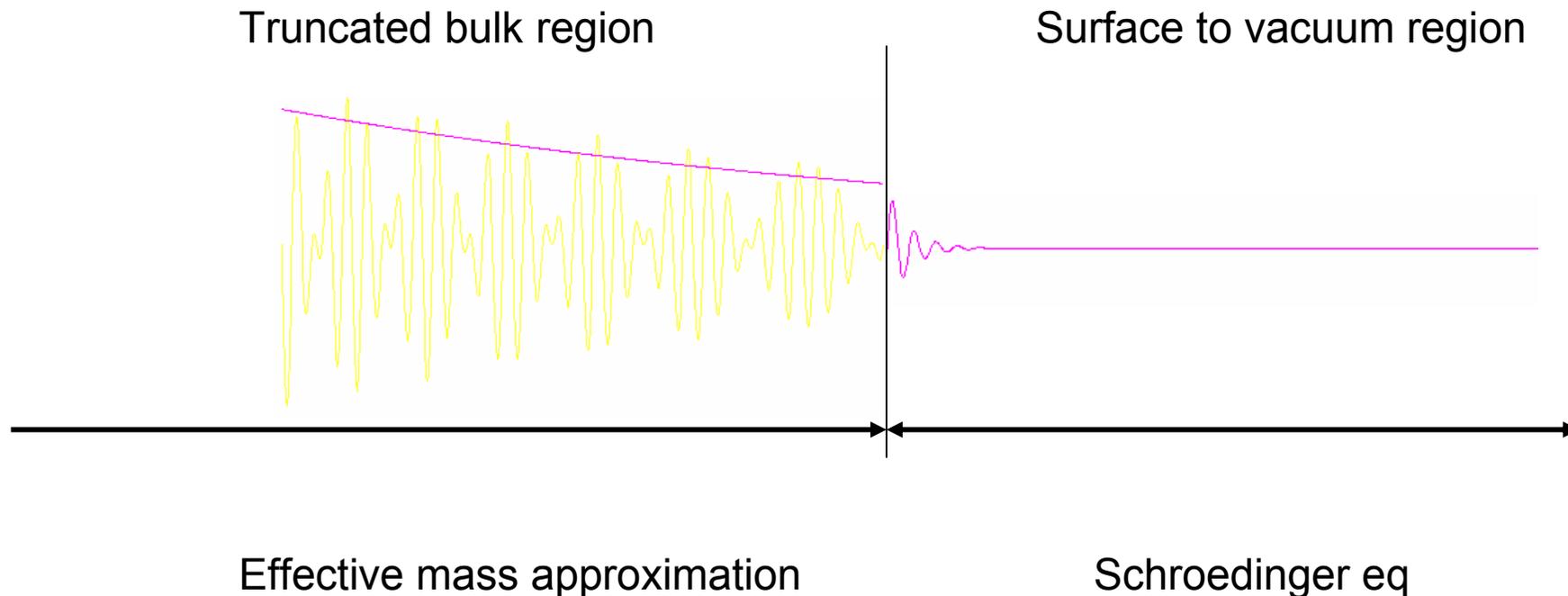
Connection between bulk and vacuum

Bulkの波動関数はeffective mass theoryでenvelope functionを計算しそれより求める。

Vacuumの波動関数はSchroedinger方程式から求める。

両者をvariational principleにより接続する。

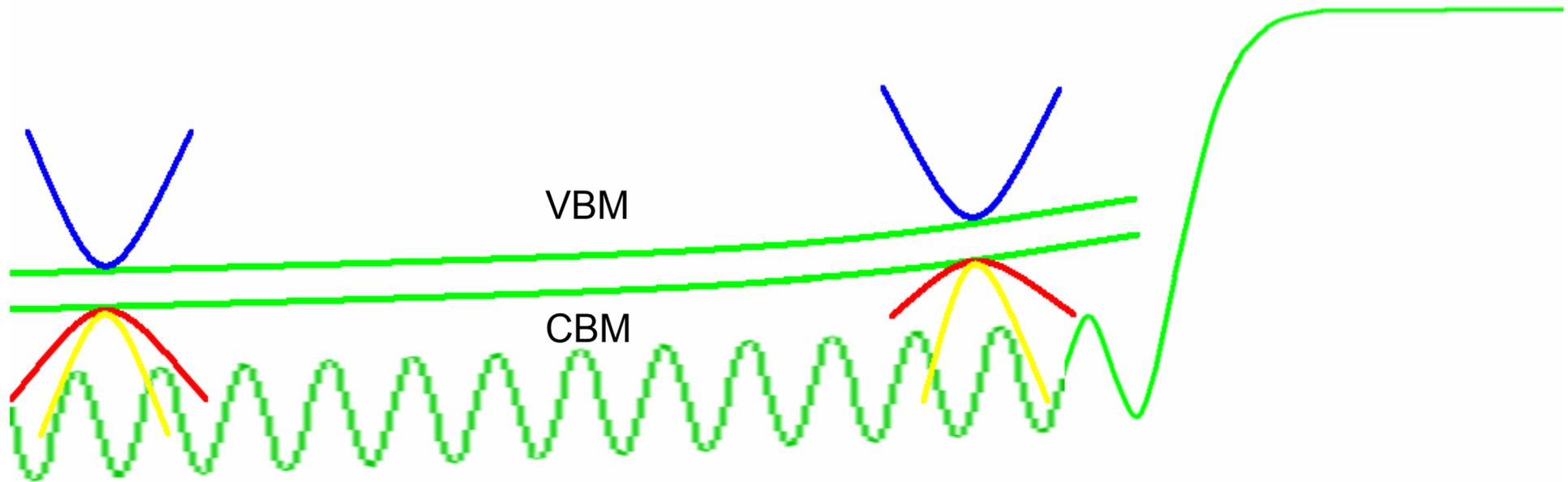
ここで拘束条件はbulk内部における要請1、要請2ならびに場合によってはVacuumにおけるDumpingとする。



局所状態密度の修正

Mesoscopic regionの計算の結果局所状態密度に修正が加わる

→ MacroへFeedback

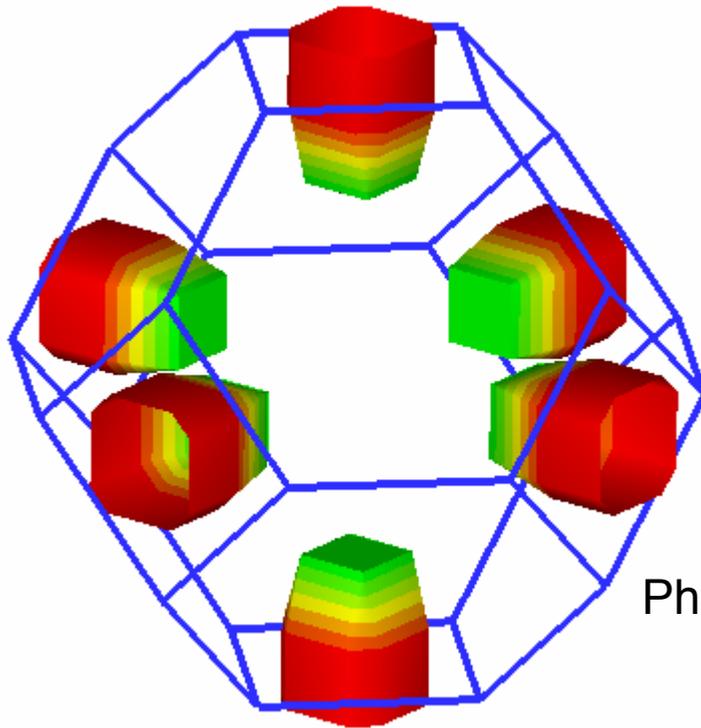


Microscopic calculationの修正

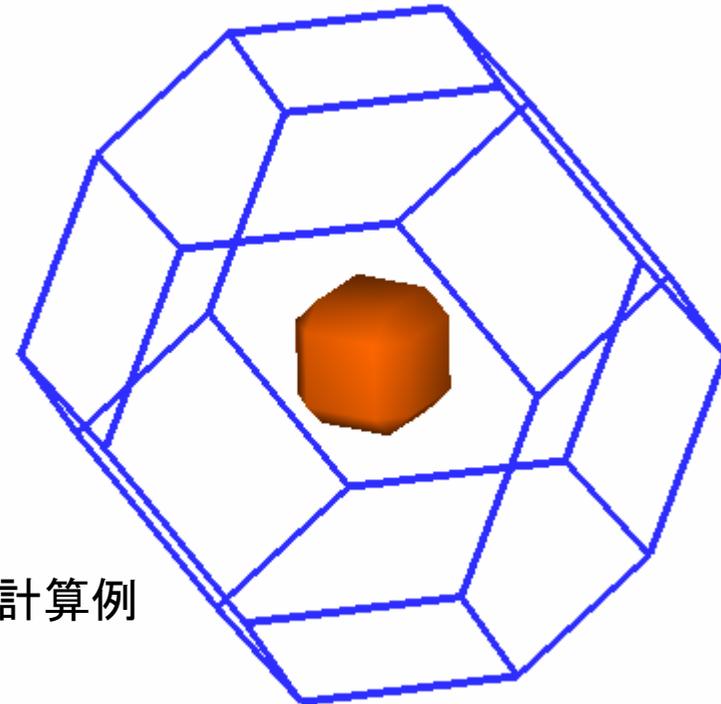
- Band gapの補正
- BulkのBloch waveとの接続の改善
- Nonlocal potentialの表面計算への組み込み
- Phaseにあわせたアップデート
- Yonas B. Abraham and N.A.W.Holzwarthらの手法の検討
ならびに導入

BulkのBloch waveとの接続の改善

CBM,VBM以外の広い範囲に及ぶエネルギー分散の情報が必要。
可能な限り解析的な情報を用いたが、必要ならBulkのSCF計算値を
数値的に利用する。



$$E(\vec{k}) = E_{CBM} + \delta$$



$$E(\vec{k}) = E_{VBM} - \delta$$

Phaseによる計算例

最近の関連報告

for Microscopic and mesoscopic region (Yonas B. Abraham and N.A.W.Holzwarth)

最近見出した論文で詳細は検討中であるが非常に興味深いもの。以下は冒頭の抜粋である

We present a stable scheme to calculate **continuum and bound** electronic states in the vicinity of a surface of a semi-infinite crystal within the framework of density functional theory. The method is designed for solution of the Kohn-Sham equations in a pseudopotential formulation, including both local and **separable nonlocal** contributions. The method is based on the **Numerov integration algorithm** and uses **singular value decomposition** to control the exponentially growing contributions. The method has been successfully tested on the Li(110) surface with and without absorbed H. For this model system, we are able to **locate the energies of H-induced surface states** relative to the corresponding energies of bulk continuum states. Result encourage further development.

以下はSummaryからの抜粋である。

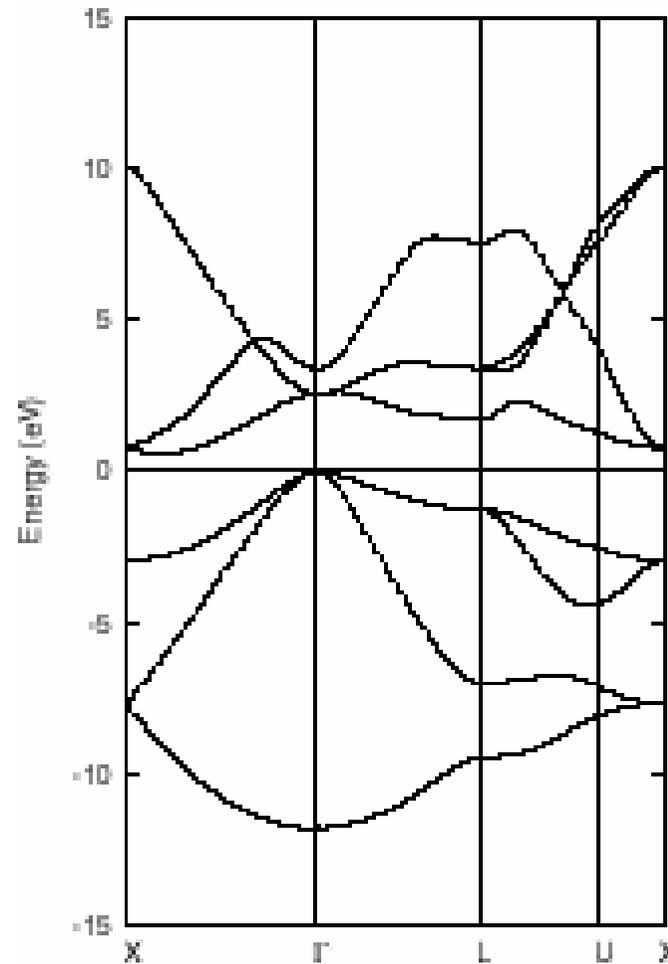
The method is designed to work with the **PAW** formulation of the Kohn-Sham equations, but can also be used with the soft-pseudopotential formulation of Vanderbilt or with norm-conserving pseudopotentials approximated with separable nonlocal terms such as the form of Kleinman and Bylander.

マクロ静電場計算の修正

- No inversion and or no accumulationへの対応

付録 Siのバンド構造

SCFの電荷密度計算
で必要なエネルギー
範囲



Fermi energy $\pm 2.5\text{eV}$

有効質量近似で
用いたいエネルギー
範囲