

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

2018.03.09

# 1・目次

[Part6: 金属・無機半導体の観察]が提示する**計算事例（1～20）**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/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf)

[https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM\\_simulator\\_application\\_examples.html](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・SetModel
  - ・原子モデル作成、欠陥を持つグラファイト薄膜を作成する方法（**計算事例1**）
- 3・SetModel
  - ・原子モデル作成、シリコンクラスター探針原子モデル作成法（**計算事例2**）
- 4・SetModel
  - ・原子モデル作成、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 ConstHeightSTM 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 (計算事例 5)
  - ・ 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) 表面のシミュレーション (計算事例 6)
  - ・ 類例 : Si (011) 表面のConstCurrentSTMシミュレーション (計算事例 7)
  - ・ 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 ・ DFTB\_STM( ConstantHeight 、 ConstantCurrent)
  - ・ GaAs 結晶(100)面の ConstantHeight シミュレーション (計算事例 8)
  - ・ GaAs 結晶(100)欠陥面の ConstantCurrent シミュレーション (計算事例 9)
- 8 ・ DFTB\_KPDM、DFTB\_AFM
  - ・ シリコン結晶表面の KPDM 像のシミュレーション (計算事例 10、11)
  - ・ Si (001)-c (4x2) 表面の埋め込まれた不純物(N原子)の AFM 像の解析モデル (計算事例 12)
- 9 ・ DFTB STM( ConstantHeight) 、 DFTB\_STS
  - ・ シリコン(001)表面から水素を一つ取り除いたもののトンネル電流像シミュレーション (計算事例 13)
  - ・ シリコン(001)-3x1:H 表面でのトンネル電流分光シミュレーション (計算事例 14)
- 10 ・ DFTB\_ STM ( ConstantHeight)
  - ・ ZnSe結晶観察 ZnSeの立方晶の(001)面のconstant height STM像 (計算事例 15)
- 11 ・ DFTB\_ STM ( ConstantHeight)
  - ・ ZnSe 結晶観察 ZnSe の立方晶の(110)面の constant height STM 像 (計算事例 16)
- 12 ・ DFTB\_ STM ( ConstantHeight)
  - ・ シリコンナイトライドの観察 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> の六方晶の(001)面の constant height STM 像 (計算事例 17)
- 13 ・ DFTB\_ STM ( ConstantHeight)
  - ・ シリコンナイトライドの観察 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> の六方晶の(111)面の constant height STM 像 (計算事例 18)
- 14 ・ DFTB\_ STM ( ConstantHeight)、DFTB\_ STS
  - ・ SiGe の観察 SiGe の立方晶の(001)面の constant height STM 像 (計算事例 19)
  - ・ SiGe の立方晶の(001)面のトンネル電流分光 (計算事例 20)
- 15 ・ 本編でのSPMシミュレータにおけるソルバー一覧

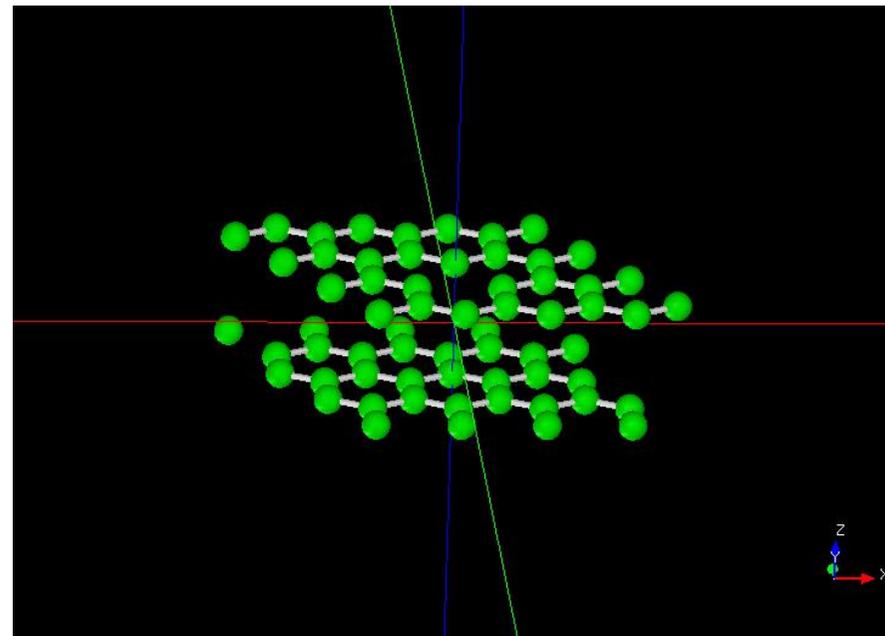
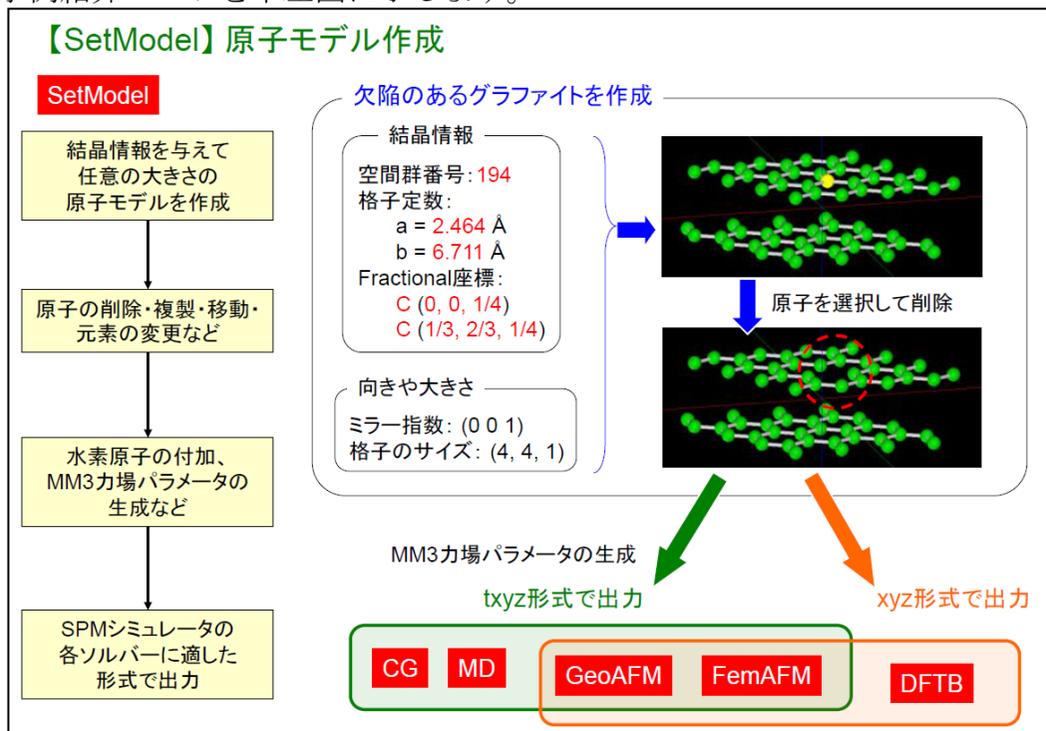
## 2・SetModel 計算事例①

●SetModel：原子モデル作成、欠陥を持つグラファイト薄膜を作成する方法

分類：SetModel、試料の原子モデル作成、Åオーダー、無機半導体

プロジェクト名：[project\\_file\\_for\\_beginners\\_version\\_SetModel\\_part6](#)

事例紹介ページを下左図に示します。



作成する“欠陥を持つグラファイト薄膜”原子モデル

本事例は、原子モデル作成に関する事例で、欠陥を持つグラファイト薄膜を作成する方法を紹介します。

SPMガイドブック・第12章 原子モデル作成法(SetModel) “12.2 結晶表面原子モデル作成法”に関連する記述があります。

基本パラメータによる結晶モデルは「SetModel\_sample01.mpro」として、読み込むことが可能です。

モデル作成段階ごとのモデルデータを読み込むことが可能ですのでご利用下さい。

・モデルデータ

グラフィットの六方晶構造 空間群番号 194、Space Group: P 63/m m c

「SetModel\_sample01.mpro」としてデータ作成します。

(0001)表面を作ることとして、ミラー指数を (0, 0, 1) とします。

単位胞のサイズを  $x = 4$ ,  $y = 4$ ,  $z = 1$  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	9.85600	0.000	0.000
b	-4.92800	8.53555	0.000
c	0.0	0.000	6.71100

translational\_vector : Å (オングストローム)

単位格子ベクトル入力値

・モデル作成

試料モデル名称を「SetModel\_sample01」とします。

モデリングプロジェクトファイル： SetModel\_sample01.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： SetModel\_sample01.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	2.464	Å（オングストローム、Angstrom）
cell_length_b	2.464	Å（オングストローム、Angstrom）
cell_length_c	6.711	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	120	°（度、degree）

C(001)試料モデルの物質データ格子定数

C番号	x/a	y/b	z/c
C1	0.00000	0.00000	0.25000
C2	0.33333	0.66667	0.25000

C(001)試料モデルの単位格子中の代表的な構成原子

「SetModel\_sample01.mpro」の読み込みにより再編集が可能です。

(基本パラメータの読み込みとなりますので、基本パラメータ以外の編集中的数据を読み込み、保存することはできません)

設定を完了したら、「Make Surface」ボタンを押します。

空間群番号 194 (P 63/m m c) を選ぶ

格子定数を  $a = 2.464$  (Å) とする。

格子定数を  $c = 6.711$  (Å) とする。

単位格子中の代表的な構成原子“C”を指定する

ミラー指数を  $x=0, y=0, z=1$  とする。

単位胞のサイズを  $x=4, y=4, z=1$  とする。

表面の不活性化を行いません。NONEのまま

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。

Structure Controller

Welcome **New Slab** Structure Make

Title: Table No.194, Sub No.1, Hexagonal, P 63

Space Group

Spg. No. Sub No. Crystal system

194 1 Hexagonal

Lattice Parameters

a [ang] b [ang] c [ang] alpha [deg] beta [deg] gamma [deg]

2.46400 2.46400 6.71100 90.00000 90.00000 120.00000

Atom Positions

Spec	x/a	y/b	z/c
C	0.00000	0.00000	0.00000
C	0.33333	0.66667	0.25000

Miller Index

x	y	z
0	0	1

Number of Cell

x	y	z
4	4	1

Hydrogenation

none

Make Surface

Log View

```
<<< Load a file "C:\Documents and Settings#aas#デスクトップ¥InstallFiles_32bit¥MakeAtom¥SetModel_sample01.mpro"
>>>
Now loading ...
Completed to load.

<<< Make Surface >>>
The solver normally started.
mkatmstruct (last modified on October 10 2016)

64 atoms are generated.
Translation vector (Ang):
vector_a= 9.85600 0.00000 0.00000
vector_b= -4.92800 8.53555 0.00000
vector_c= 0.00000 0.00000 6.71100

Solver normally finished.
```

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
169	1	Hexagonal	P 61
170	1	Hexagonal	P 65
171	1	Hexagonal	P 62
172	1	Hexagonal	P 64
173	1	Hexagonal	P 63
174	1	Hexagonal	P -6
175	1	Hexagonal	P 6/m
176	1	Hexagonal	P 63/m
177	1	Hexagonal	P 6 2 2
178	1	Hexagonal	P 61 2 2
179	1	Hexagonal	P 65 2 2
180	1	Hexagonal	P 62 2 2
181	1	Hexagonal	P 64 2 2
182	1	Hexagonal	P 63 2 2
183	1	Hexagonal	P 6 m m
184	1	Hexagonal	P 6 c c
185	1	Hexagonal	P 63 c m
186	1	Hexagonal	P 63 m c
187	1	Hexagonal	P -6 m 2
188	1	Hexagonal	P -6 c 2
189	1	Hexagonal	P -6 2 m
190	1	Hexagonal	P -6 2 c
191	1	Hexagonal	P 6/m m m
192	1	Hexagonal	P 6/m c c
193	1	Hexagonal	P 63/m c m
194	1	Hexagonal	P 63/m m c

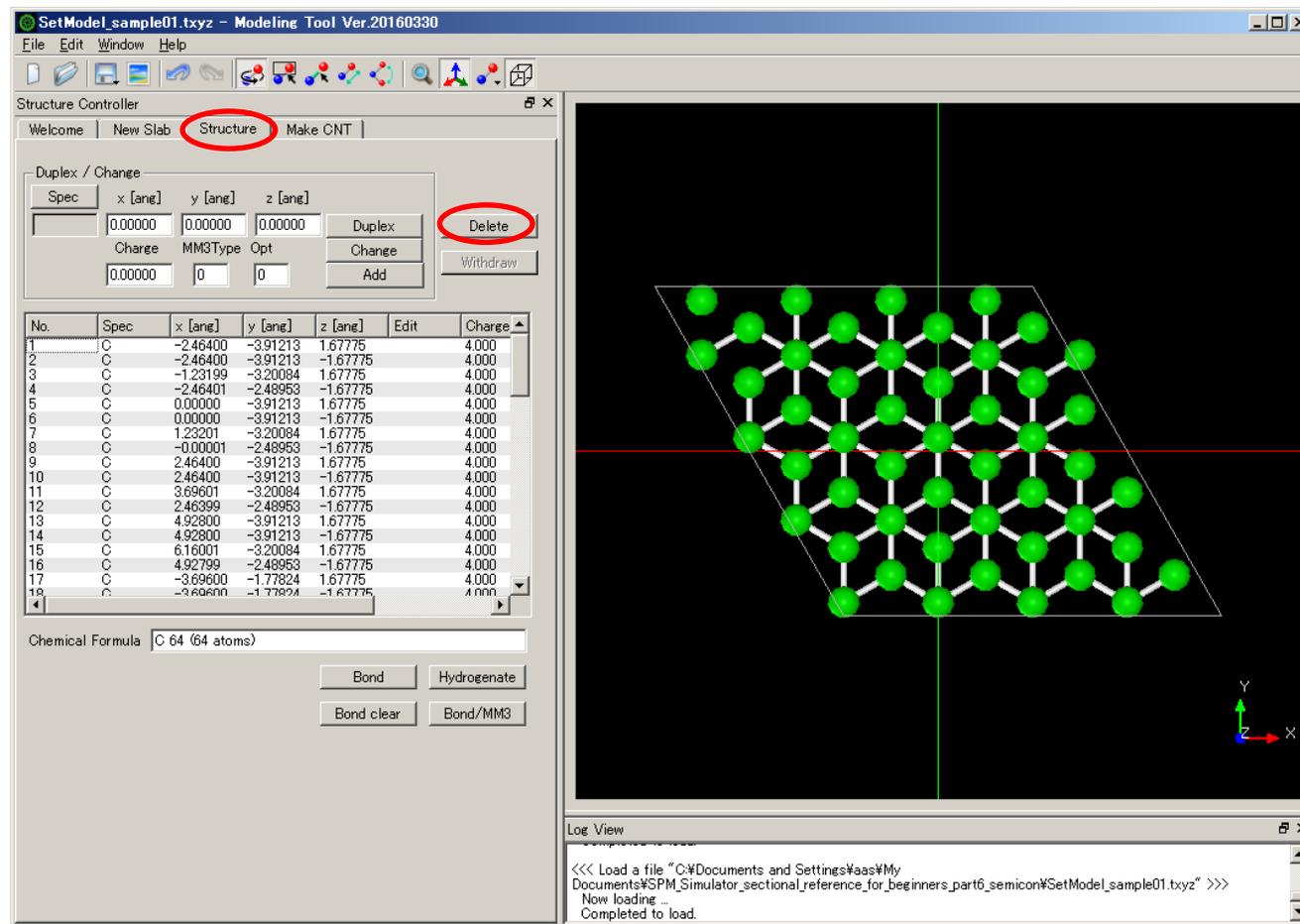
Space Group: 194 (P 63/m m c)を選択します。

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

「SetModel\_sample01.xyz」の読み込みにより表示が可能です（下図）。

「SetModel\_sample01.xyz」の読み込みでは、構成原子ごとの編集のみが可能です（基本パラメータは読み込まれません）。



ソルバ「SetModel」 「Structure」タブ

正常なグラファイト薄膜を作成できたので、次に欠陥を追加します。

削除したい位置の原子モデルをマウスでダブルクリックにより選択します

削除したい位置の原子を表より、マウスで選択する事もできます。

[Delete]ボタンをクリックする事により、その原子を削除できます。

削除モデルは「SetModel\_sample01\_02.xyz」として読み込むことが可能です。

SetModel\_sample01.txyz - Modeline Tool Ver.20160330

File Edit Window Help

Structure Controller

Welcome | New Slab | **Structure** | Make CNT

Duplex / Change

Spec x [Ang] y [Ang] z [Ang]

0.00000 0.00000 0.00000 Duplex **Delete**

Charge MM3Type Opt Change Withdraw

4.000 -1 0 Add Change atomic information

No.	Spec	x [Ang]	y [Ang]	z [Ang]	Edit	Charge
7	C	1.23201	-3.20084	1.67775		4.000
8	C	-0.00001	-2.48953	-1.67775		4.000
9	C	2.46400	-3.91213	1.67775		4.000
10	C	2.46400	-3.91213	-1.67775		4.000
11	C	3.69601	-3.20084	1.67775		4.000
12	C	2.46399	-2.48953	-1.67775		4.000
13	C	4.92800	-3.91213	1.67775		4.000
14	C	4.92800	-3.91213	-1.67775		4.000
15	C	6.16001	-3.20084	1.67775		4.000
16	C	4.92799	-2.48953	-1.67775		4.000
17	C	-3.69600	-1.77824	1.67775		4.000
18	C	-3.69600	-1.77824	-1.67775		4.000
19	C	-2.46399	-1.06695	1.67775		4.000
20	C	-3.69601	-0.35565	-1.67775		4.000
21	C	-1.23200	-1.77824	1.67775		4.000
22	C	-1.23200	-1.77824	-1.67775		4.000
<b>23</b>	<b>C</b>	<b>0.00001</b>	<b>-1.06695</b>	<b>1.67775</b>		<b>4.000</b>
24	C	-1.23201	-0.35565	-1.67775		4.000

Chemical Formula C 64 (64 atoms)

Bond Hydrogenate

Bond clear Bond/MM3

Log View

Completed to load.

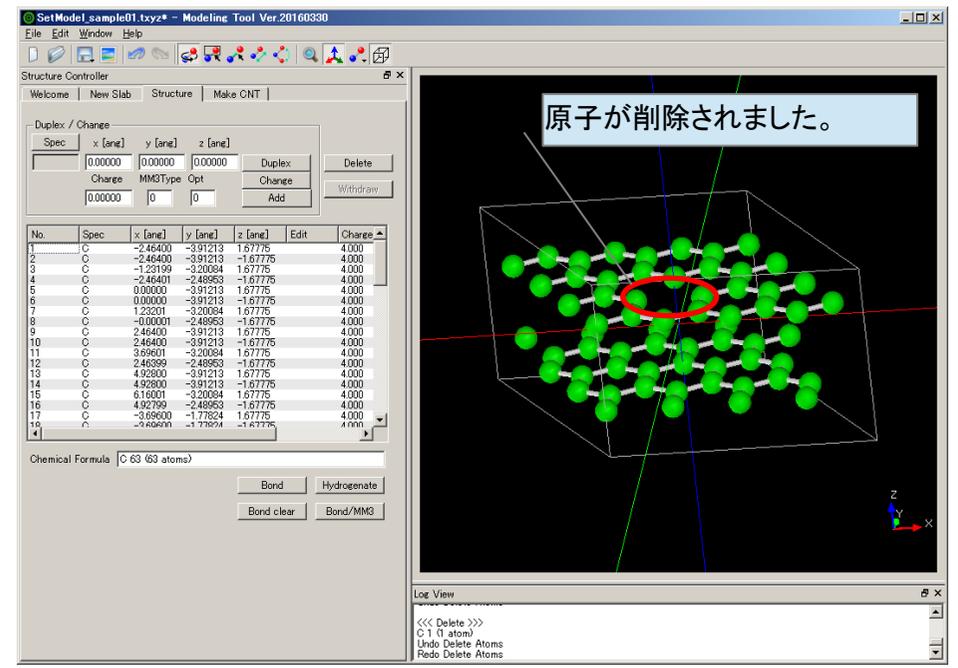
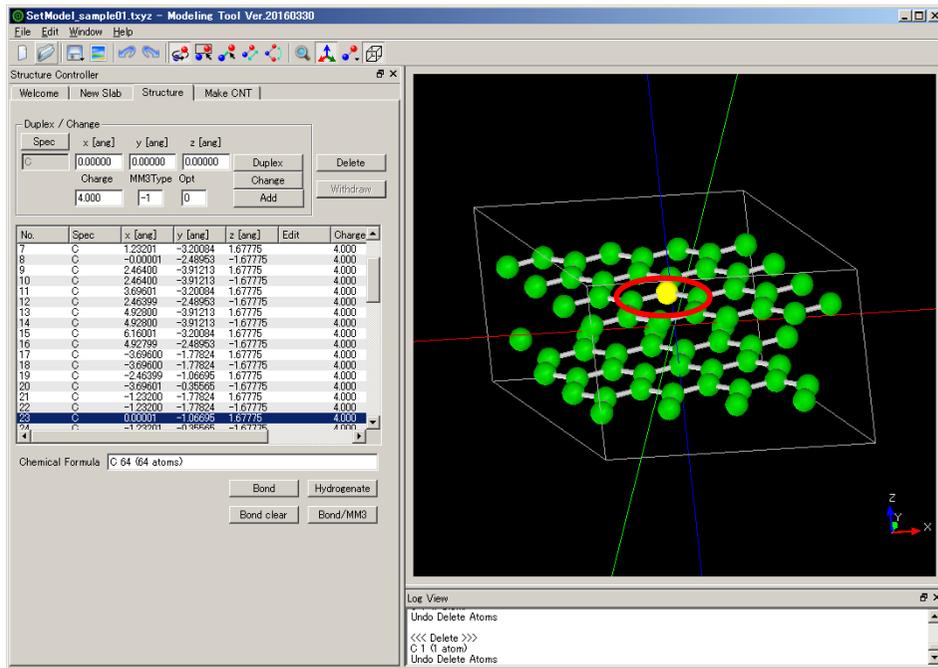
<<< Delete >>>

C 1 (1 atom)

Undo Delete Atoms

削除したい位置の原子モデルをマウスでダブルクリックにより選択します。

削除したい位置の原子を表より、マウスで選択することもできます。

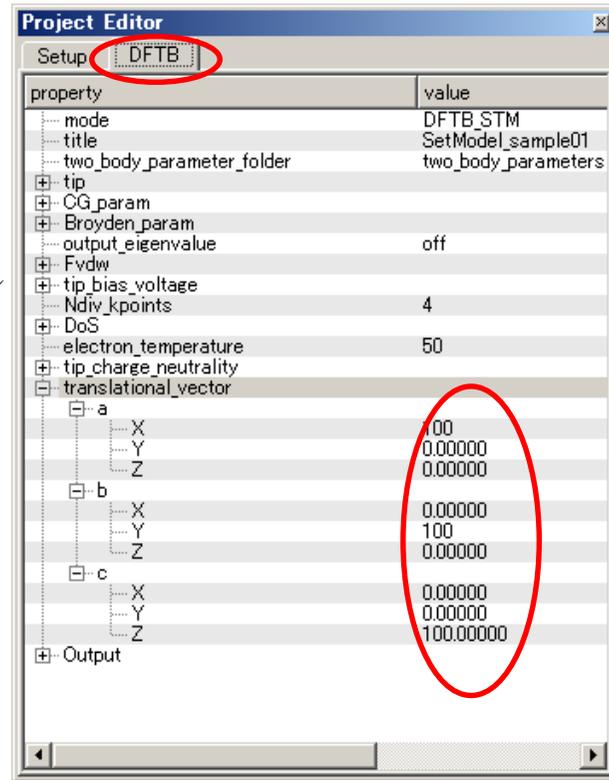


欠陥を持つグラファイト薄膜

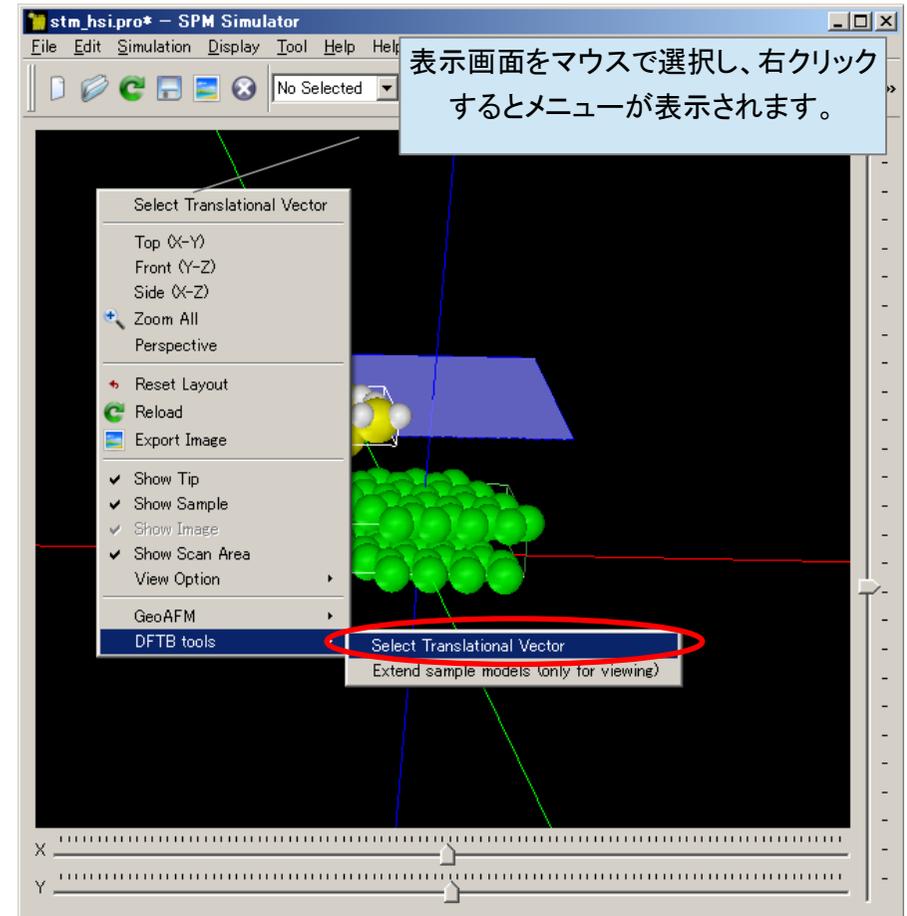
[File]メニューの[Save as]から、このモデルを\*.txyz または\*.xyz 形式で保存します。  
 保存したデータは SPM シミュレータで利用することができます。

・周期境界条件 (Translational Vector) の入力について

周期境界条件は、直接、設定条件タブより入力できませんが、モデル表示画面での右クリックで表示されるメニューの「DFTB tool」の「Select Translational Vector」を選択すると、サンプルのデータファイル選択画面が表示されますので、試料のデータファイル名称を選択し、OKボタンをクリックします。表示された単位格子ベクトルのデータが設定条件に書き込まれます。



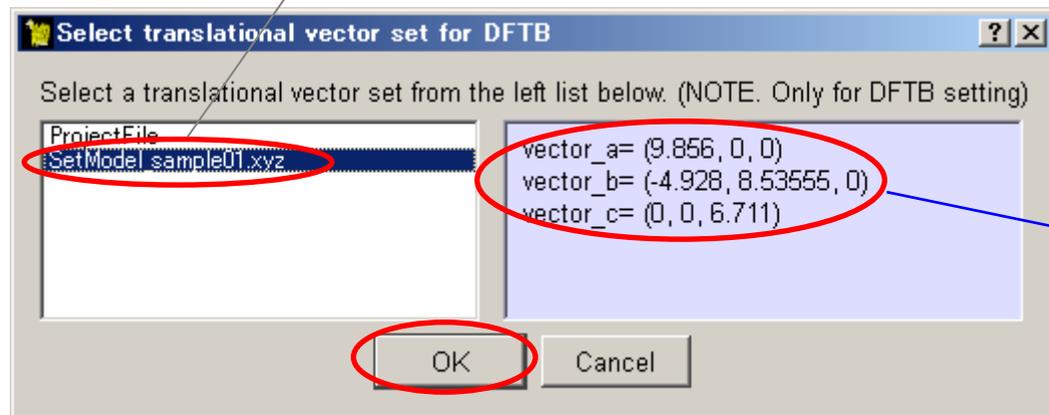
設定条件例



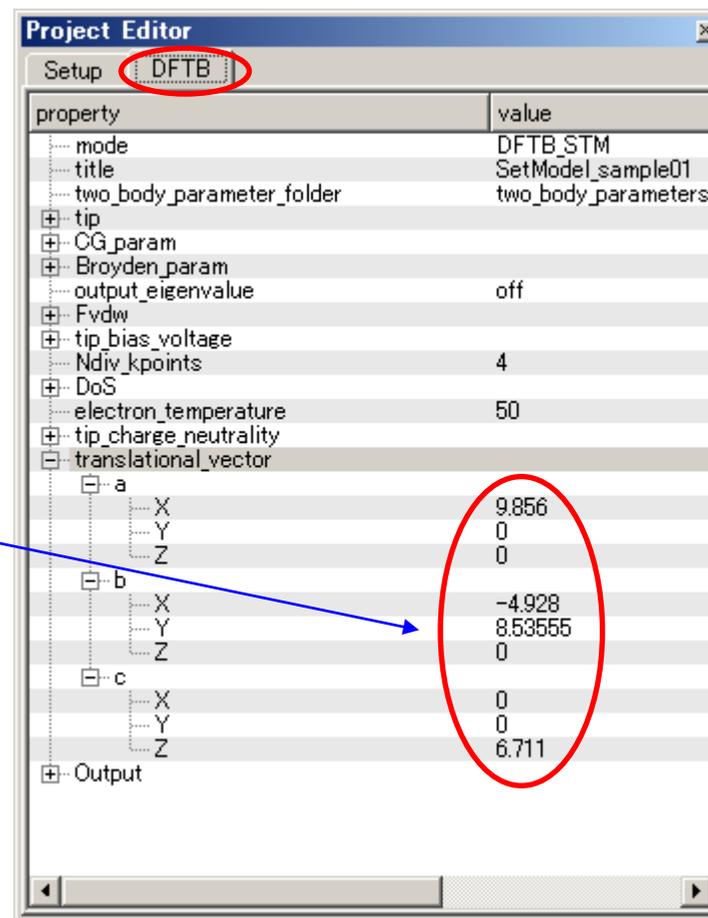
モデル表示画面例

OKボタンをクリックすると、単位格子ベクトルのデータが設定条件に書き込まれます。

試料のデータファイル名称を選択します。



試料データファイル名称選択画面



設定条件例

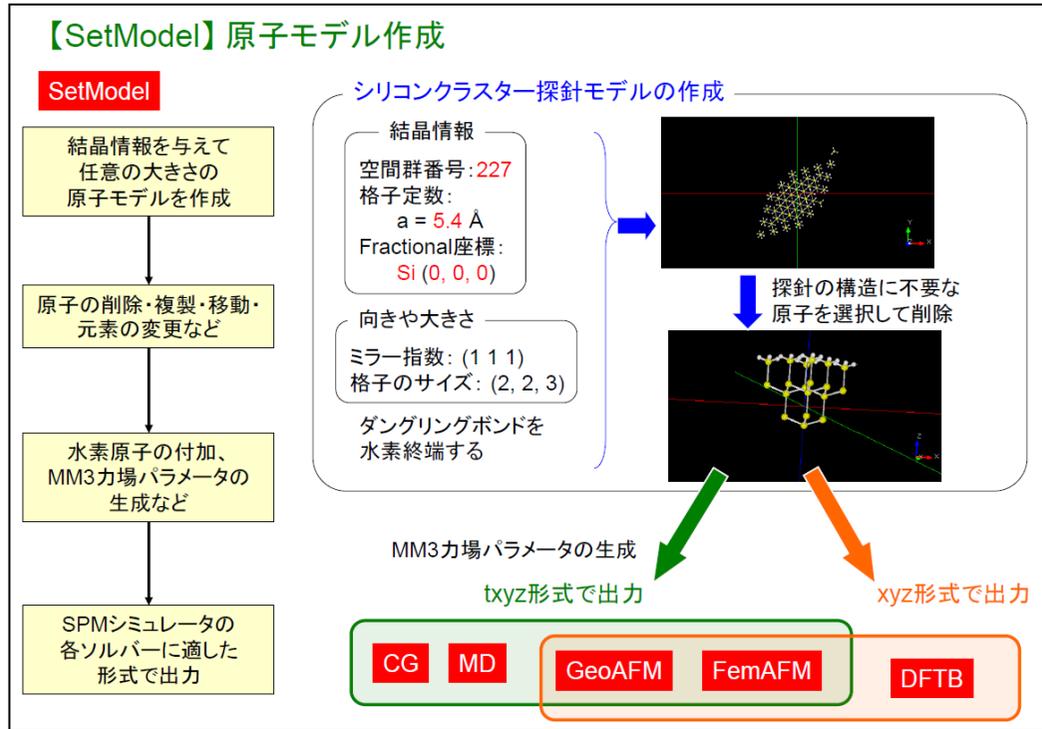
### 3・SetModel 計算事例②

●SetModel：原子モデル作成、シリコンクラスター探針原子モデル作成法

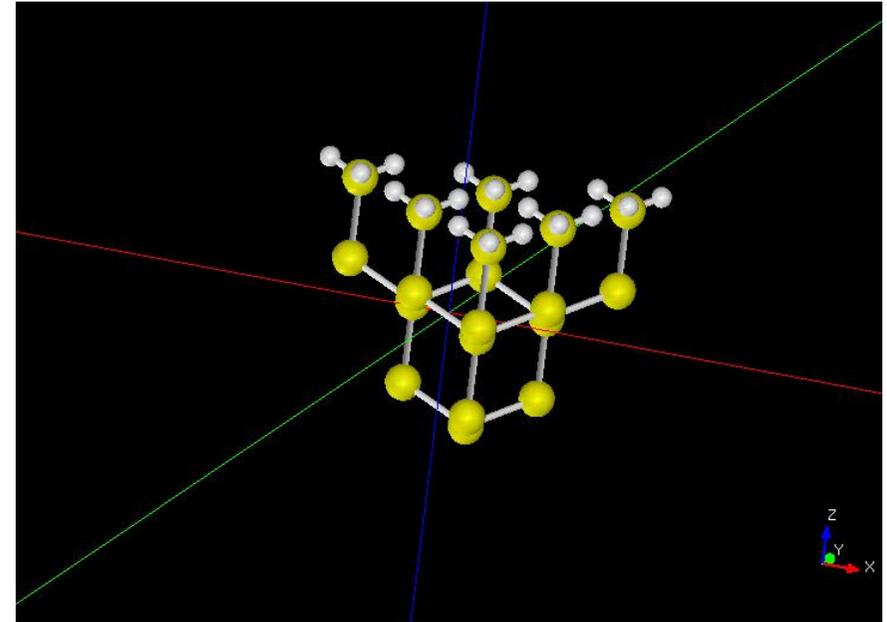
分類：SetModel、探針の原子モデル作成、Åオーダー、無機半導体

プロジェクト名：[project\\_file\\_for\\_beginners\\_version\\_SetModel\\_part6](#)

事例紹介ページを下左図に示します。



事例紹介ページ



作成する“シリコンクラスター探針”原子モデル

本事例は、原子モデル作成に関する事例で、探針原子モデルを作成する方法を紹介します。

SPMガイドブック・第12章 原子モデル作成法(SetModel) “12.3 探針原子モデル作成法”に関連する記述があります。

基本パラメータによる結晶モデルは「SetModel\_sample02.mpro」として、読み込むことが可能です。

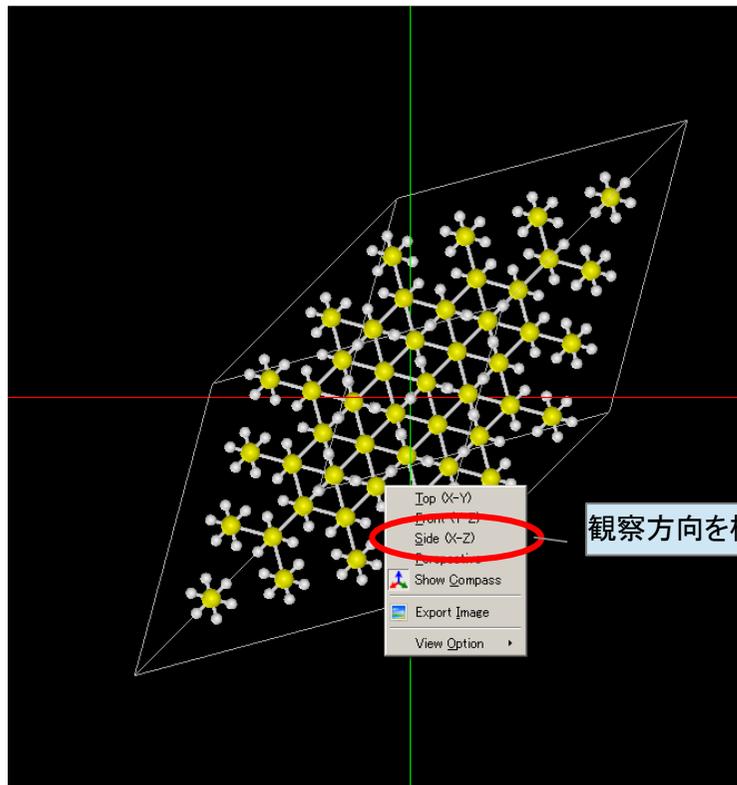
モデル作成段階ごとのモデルデータを読み込むことが可能ですのでご利用下さい。

モデリングツールを起動し、結晶情報を入力するための [New Slab] タブを開く。ダイヤモンド構造を作るため、空間群番号 227 (FD3m) を選ぶ。立方体の単位格子の 1 辺の長さを 5.4 (Å) とする。その他の格子定数 (長さや角度) は、空間群が持つ対称性により自動的に決められる。単位格子中の代表的な構成原子を指定する; 原子番号 14 (Si)、既約原子座標 (0.0, 0.0, 0.0) である。ここで、最終的に得たい探針の原子構造を想定し、立方体の頂点が下を向くようにミラー指数を (1 1 1) と定める。これにより (1 1 1) 面が切り出される。立体的な広がりを持たせるため、薄膜のサイズを 2, 2, 3 と選ぶ。シリコン原子の余った結合手に水素原子を付加するため、All surfaces を選択する。[Make Surface] ボタンを押すと結晶薄膜モデルの計算が実行され、モデルが画面に 3D で描画される。画面上でモデルをいろいろな角度で見ながら、探針の針先の構造に不必要な原子を削除していく。

(SPMガイドブックより)

初期モデル表示画面にマウスを移動し、右クリックすると、サブメニューが表示されるので、表示方向を「S I D E」にすることで、結晶向きを捉えやすくなります。S I D E 表示より、Z 軸を中心に回転すると、編集画面が表示される条件となります。不必要な原子を削除するには、マウスで選択しダブルクリックすることで、原子の表示色が変わります。デリート・キーやデリートボタン・クリック等で削除を確定します。

TOP 表示 (SetModel\_sample02\_0.xyz)



観察方向を横からにします。

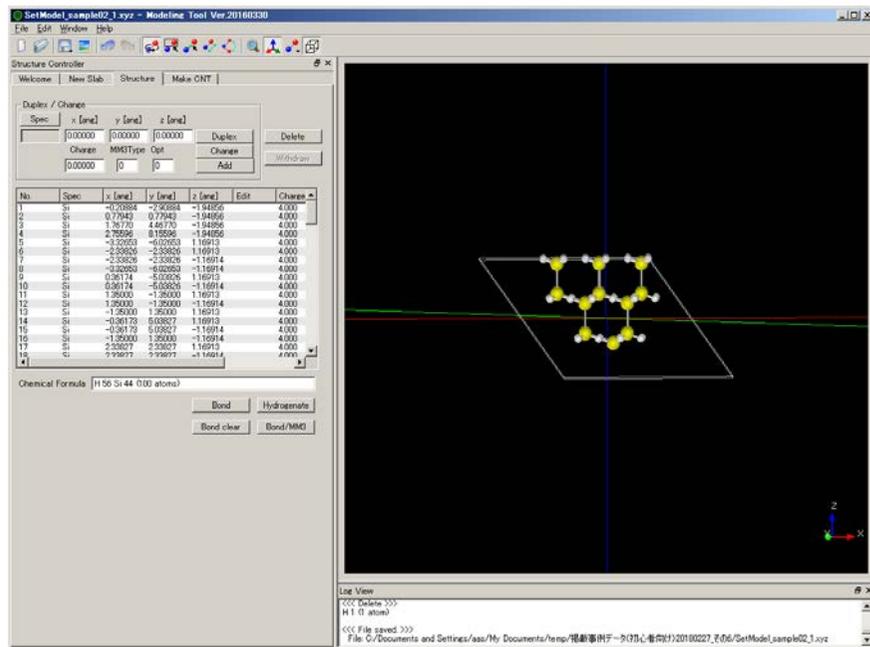
S I D E 表示 (SetModel\_sample02\_0.xyz S I D E 表示より回転)

No.	Spec	x [Å]	y [Å]	z [Å]	Edit	Charge
1	Si	-2.02711	-0.92711	-1.94256		4.000
2	Si	-2.02711	-0.92711	-4.20666		4.000
3	Si	-2.02684	-0.92684	-1.94256		4.000
4	Si	-2.02684	-0.92684	-4.20666		4.000
5	Si	0.73443	0.73443	-1.94256		4.000
6	Si	-2.02684	-0.92684	-4.20666		4.000
7	Si	0.73443	0.73443	-4.20666		4.000
8	Si	-2.02684	-0.92684	-4.20666		4.000
9	Si	3.47943	-1.92684	-1.94256		4.000
10	Si	3.47943	-1.92684	-4.20666		4.000
11	Si	4.46770	1.76770	-1.94256		4.000
12	Si	4.46770	1.76770	-4.20666		4.000
13	Si	8.15506	-2.70506	-1.94256		4.000
14	Si	4.46770	1.76770	-4.20666		4.000
15	Si	8.15506	-2.70506	-4.20666		4.000
16	Si	7.16770	-0.92520	-4.20666		4.000
17	Si	-1.92677	3.47943	-1.94256		4.000
18	Si	-1.92677	3.47943	-4.20666		4.000

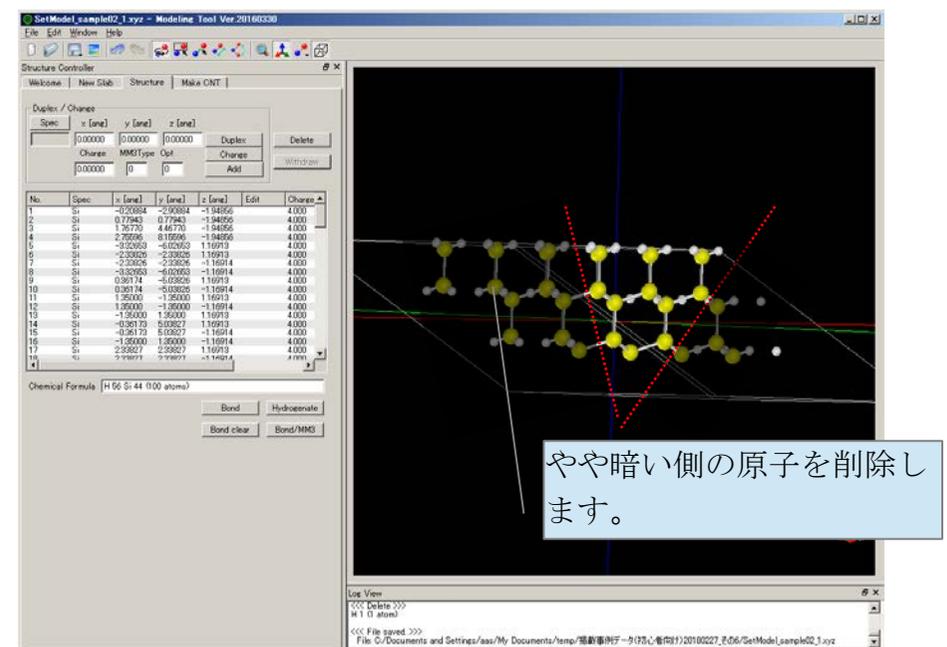
やや暗い側の原子を削除します。

赤点線の、やや暗い側の原子を削除します。

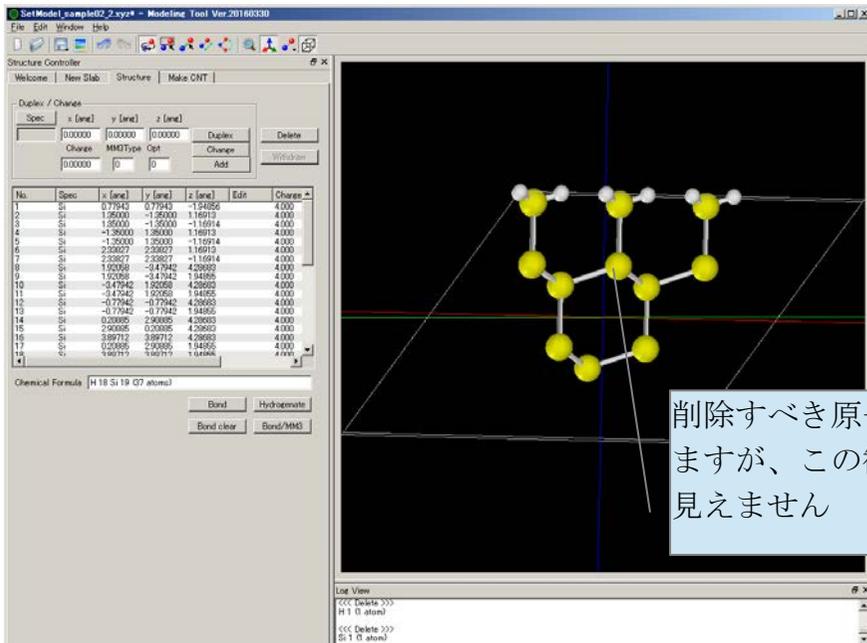
S I D E 表示 (SetModel\_sample02\_1.xyz S I D E 表示より回転)



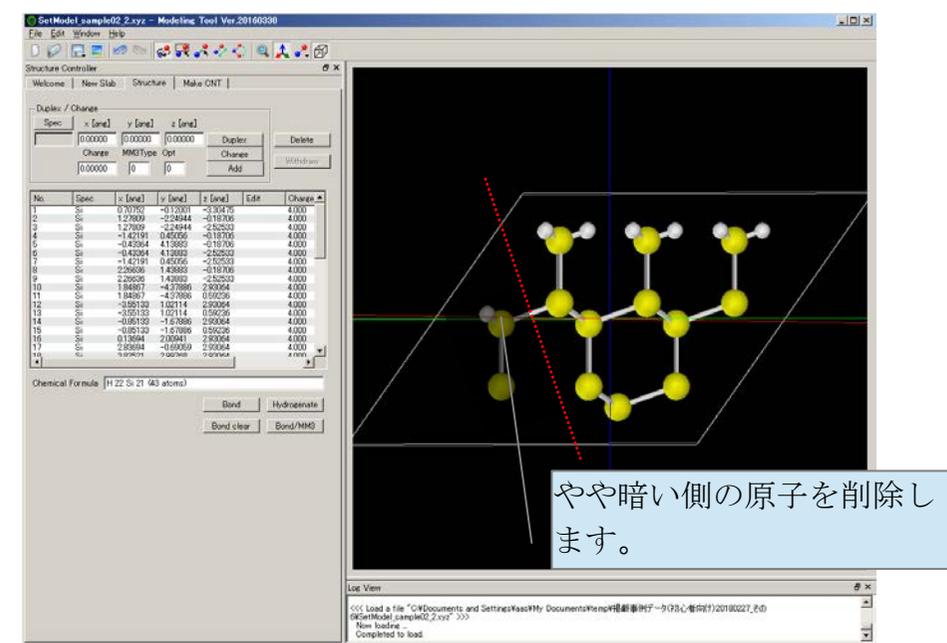
S I D E 表示回転



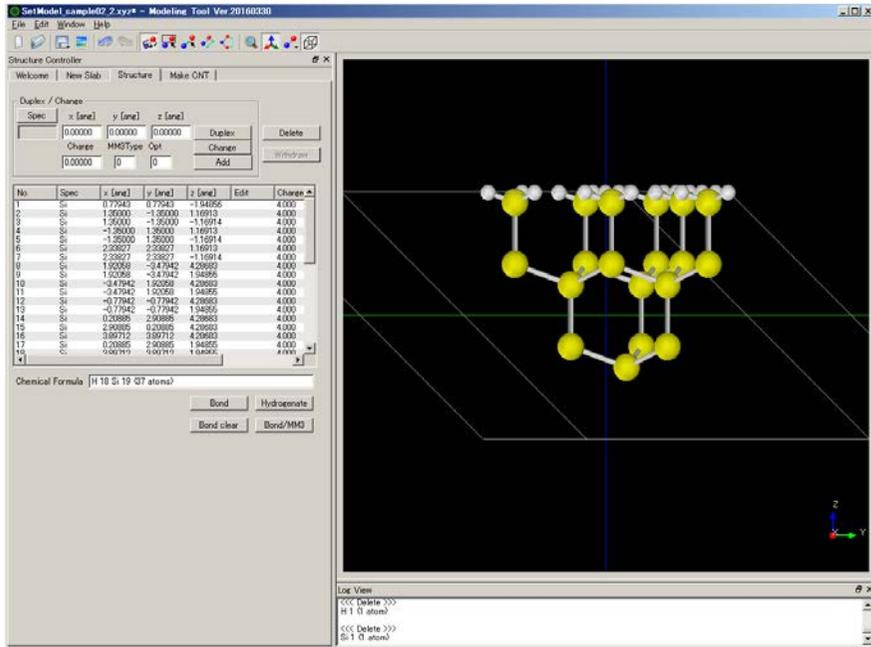
S I D E 表示回転 (SetModel\_sample02\_2.xyz S I D E 表示より回転)



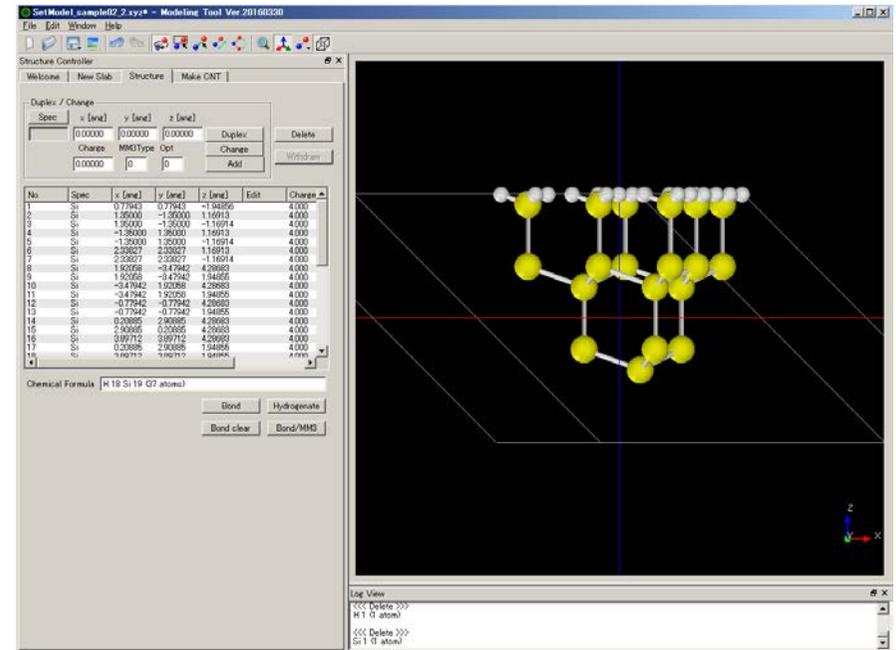
S I D E 表示回転



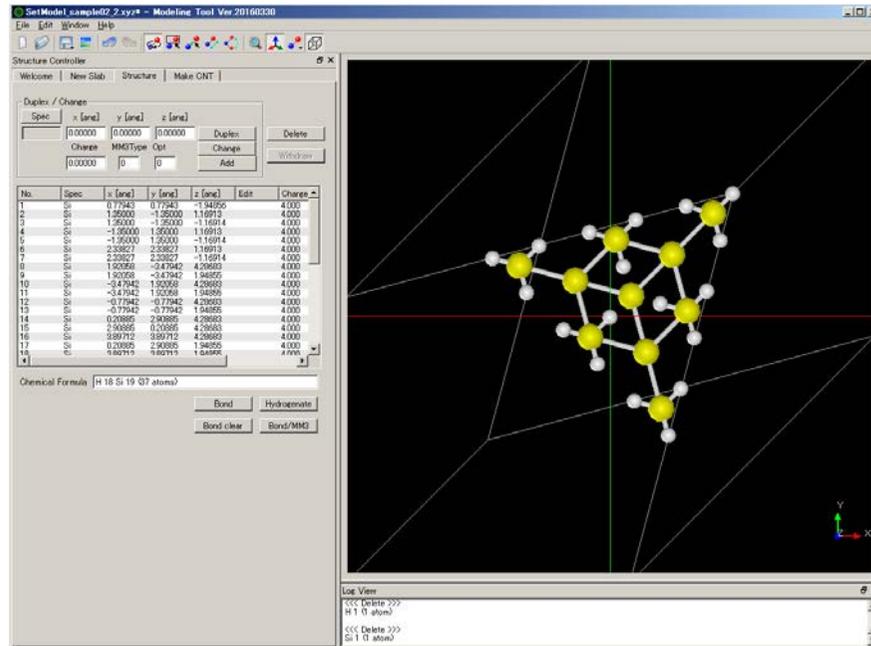
FRONT表示



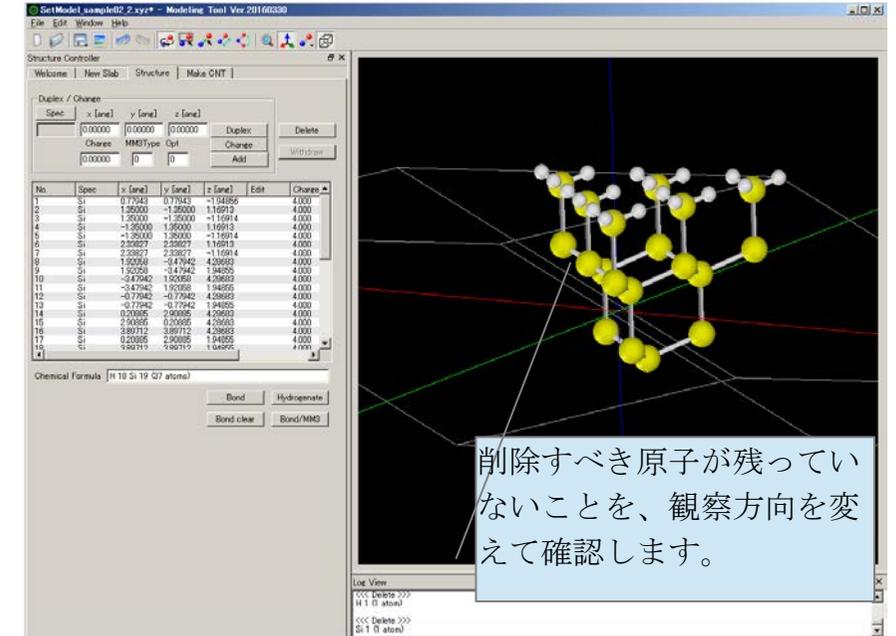
SIDE表示



TOP表示



俯瞰図



## 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\\_part6](#)

#### 【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、なるべく単純な形状の試料モデルを作成します。

シリコンの面心立方構造 空間群番号 227

Space Group: Fd-3m (#227)

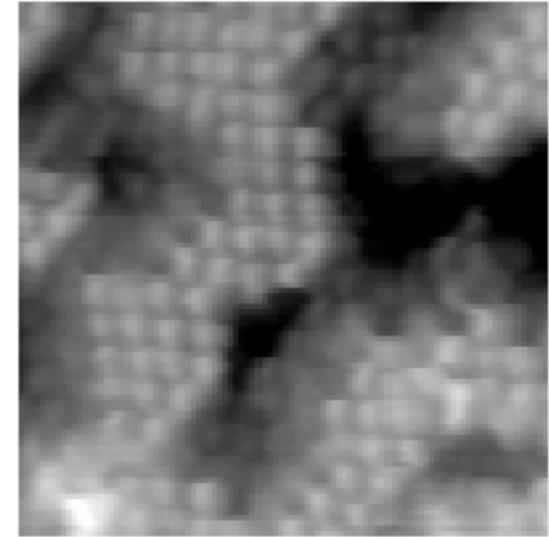
「Si1\_ICSD\_652265(011)(12).xyz」としてデータ作成しました。

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。

The screenshot shows the Modeling Tool interface with several annotations:

- 空間群番号 227 (Fd-3m) を選ぶ**: Points to the Space Group dropdown menu.
- 格子定数を  $a = 5.4673393427$  (Å) とする。**: Points to the Lattice Parameters section where 'a [ang]' is set to 5.467339.
- 単位格子中の代表的な構成原子を指定する**: Points to the Atom Positions table.
- ミラー指数を  $x=0, y=1, z=1$  とする。**: Points to the Miller Index input fields.
- 単位胞のサイズを  $x=1, y=2, z=1$  とする。**: Points to the Number of Cell input fields.
- 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。**: Points to the Hydrogenation dropdown menu where 'back surface' is selected.
- 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。**: Points to the 'Make Surface' button.
- 単位胞のサイズがÅで表示されます。**: Points to the Log View output showing lattice vectors in Angstroms.

**Atom Positions Table:**

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 Output:**

```
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.
```



「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。

The screenshot shows the 'temp.xyz - Modeling Tool' window. The 'Structure' tab is selected in the 'Structure Controller' panel. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a silicon structure with yellow spheres for silicon atoms and white spheres for hydrogen atoms. The 'Log View' panel at the bottom right shows the following data:

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

The 'Log View' panel also displays the following information:

```
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。

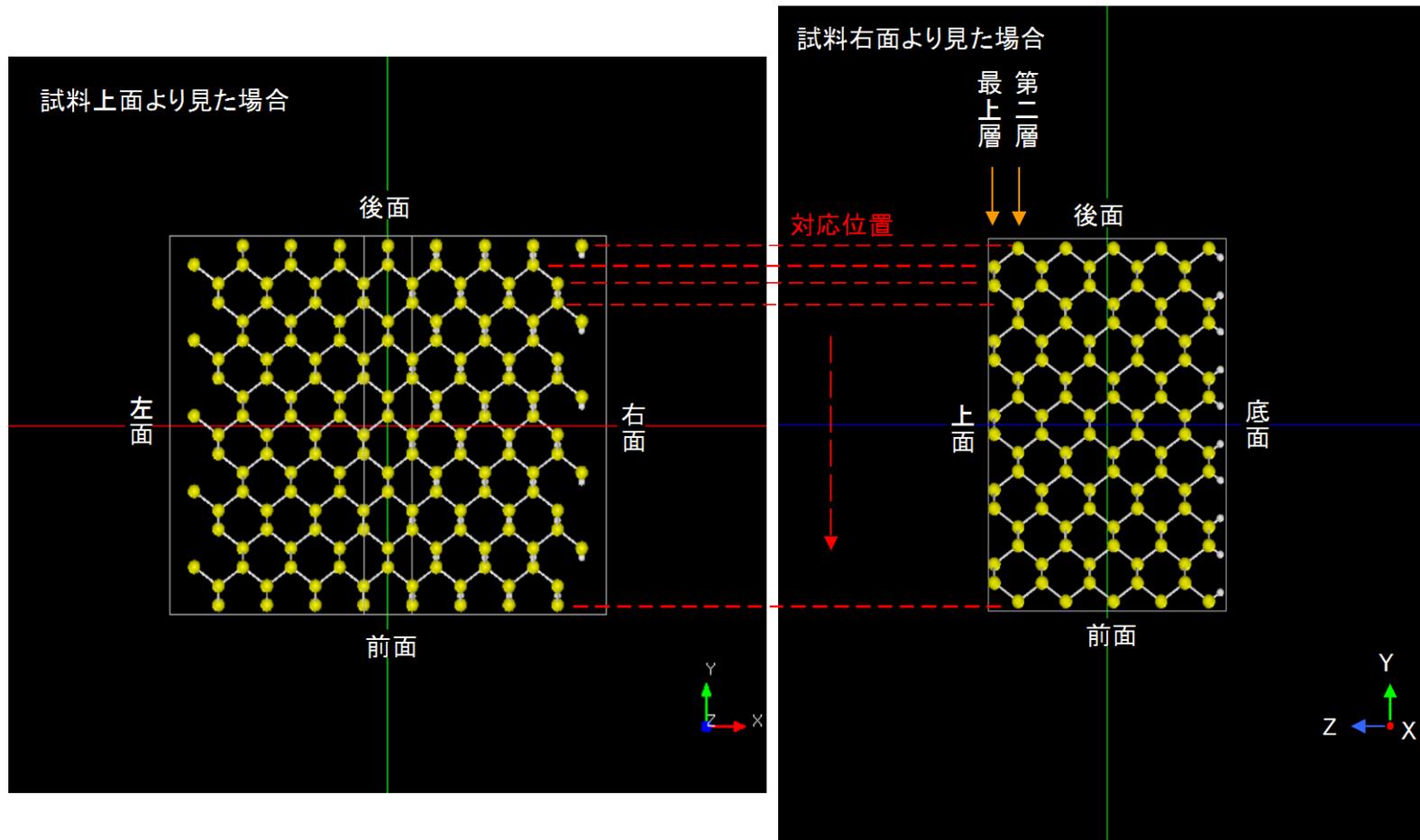
試料構成 Si 原子の配置について次に説明します。

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 )

### ●DFTB ConstHeightSTM : Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とSi(001)-c(4x2)表面のシミュレーション 計算事例④

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](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

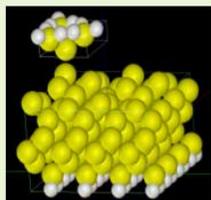
事例紹介ページを下左図に示します。

#### 【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション

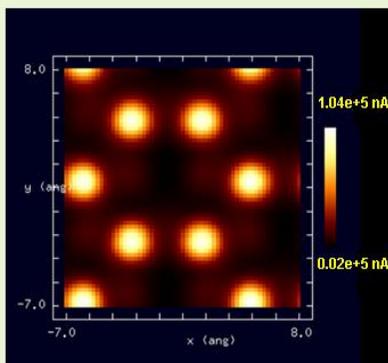
DFTB

探針・試料モデル

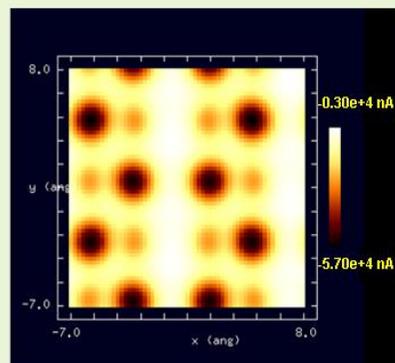
探針:  $\text{Si}_4\text{H}_9$   
試料表面: Si(001)-c(4x2)  
探針-試料間の距離: 2.32 Å



STM像の計算結果



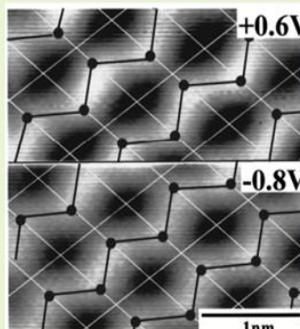
バイアス電圧 +1.0V



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、非対称ターマーを持つ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。

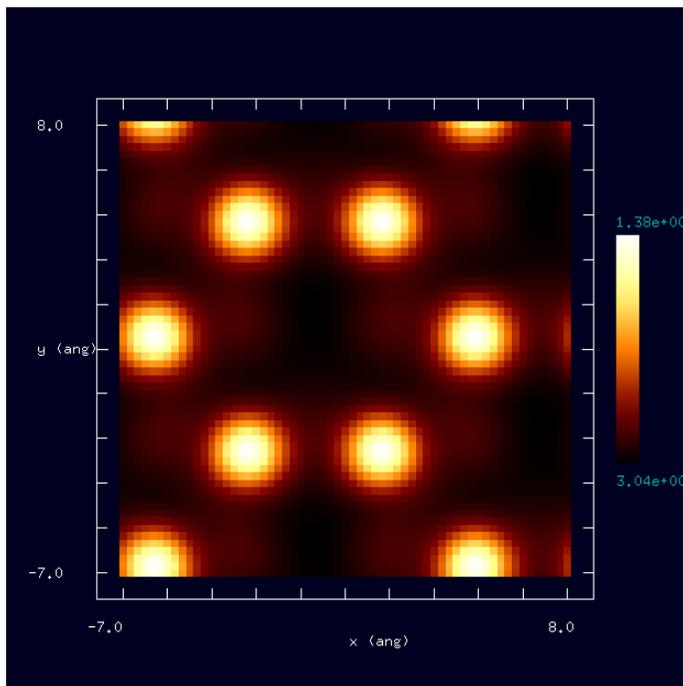
並列化処理設定を行っていません (1 スレッド対応)

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)。

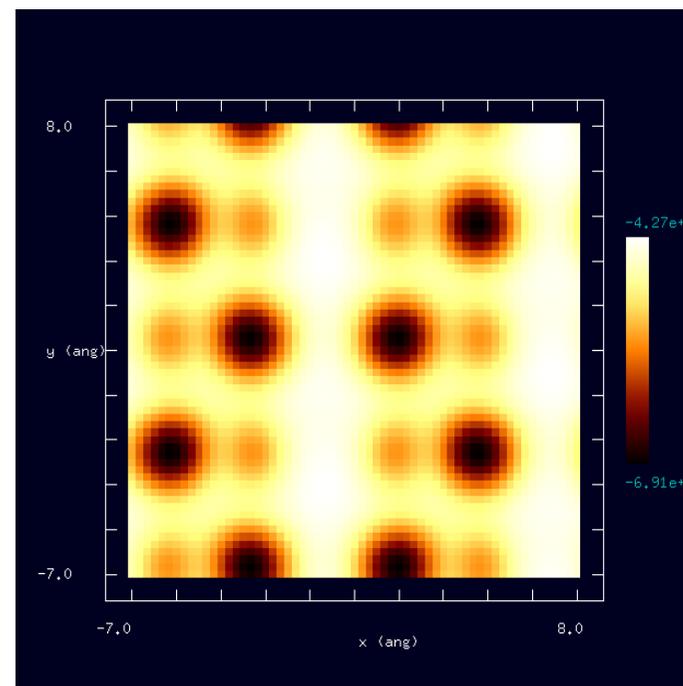
バイアス電圧 +1.0V では、最上層Si原子が最も明るくなり (下左図)、バイアス電圧 -1.0V では第二層のSi原子が最も暗くなります (下右図)。

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)。

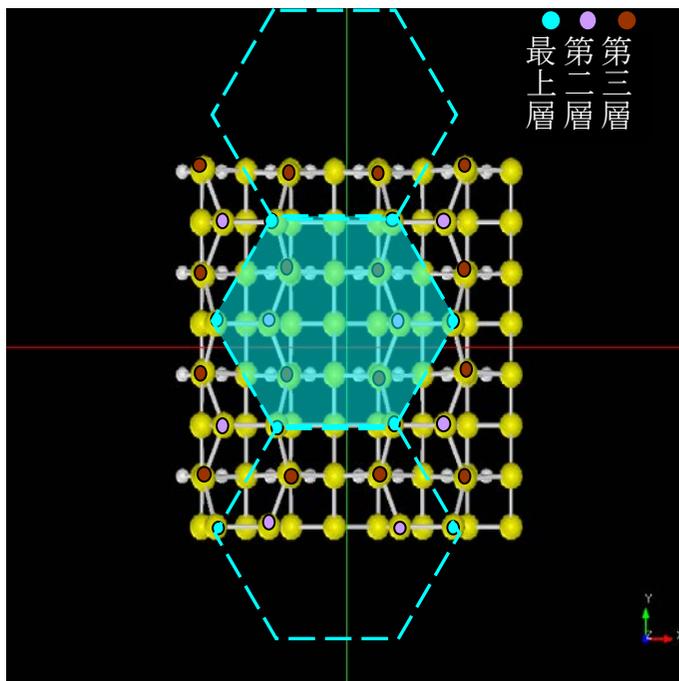


バイアス電圧 +1.0Vでのシミュレーション像



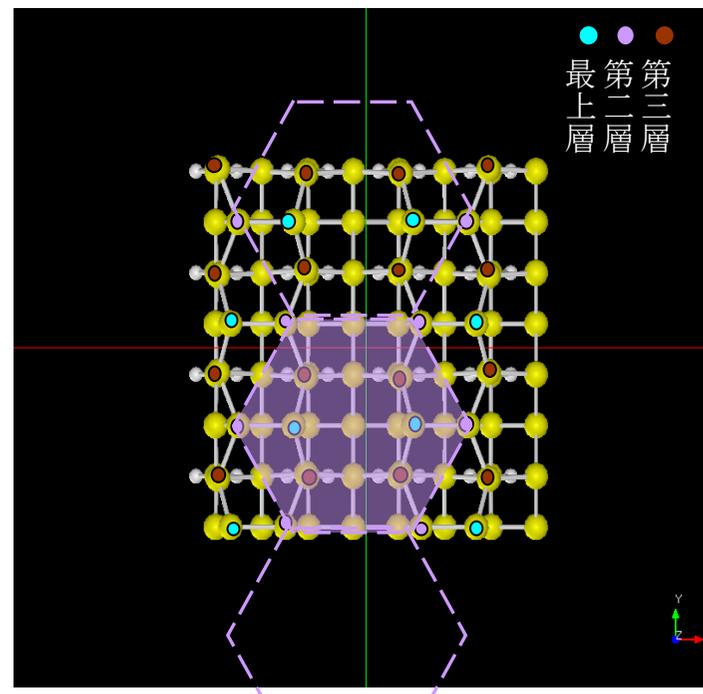
バイアス電圧 -1.0Vでのシミュレーション

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 <sup>-6</sup> eV	
output_eigenvalue	off		on/off
Fvdr			
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	-10	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.  $2 \times 1$  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  $\pi$  結合準位 (Filled states) と  $\pi^*$  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. A* **41**, 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 計算事例⑤

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「**1.5 Å**」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「**0 Å**」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)

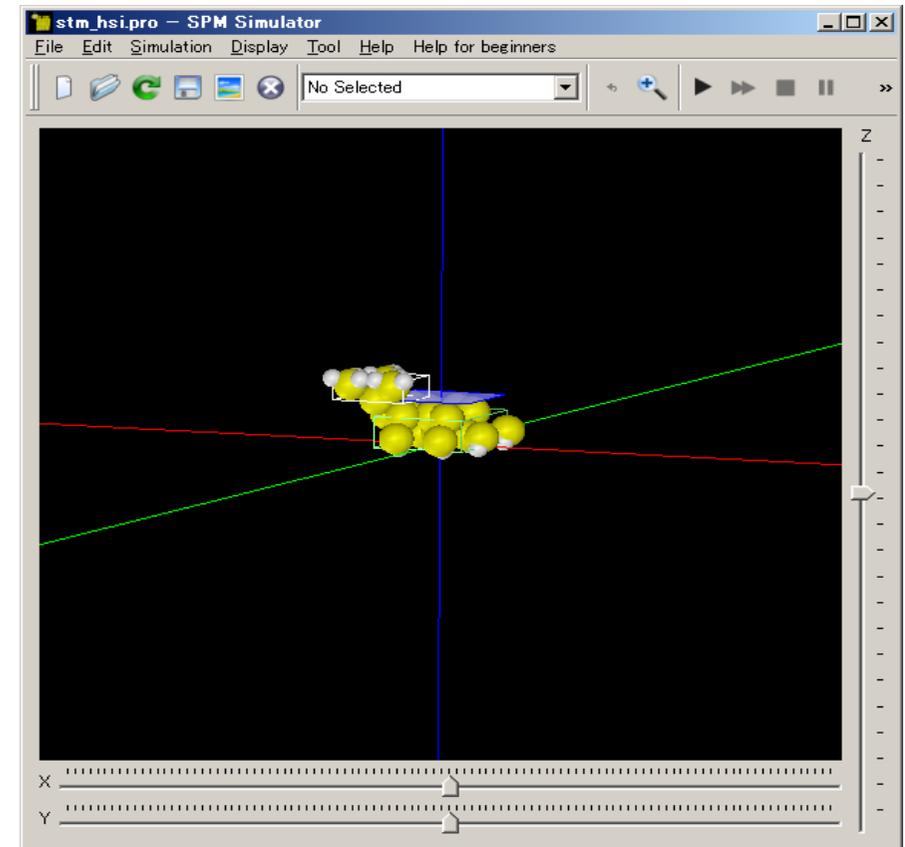
バイアス電圧 +1.0V とバイアス電圧 -1.0V での計算を設定条件で行わせました (下図左右)。

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。

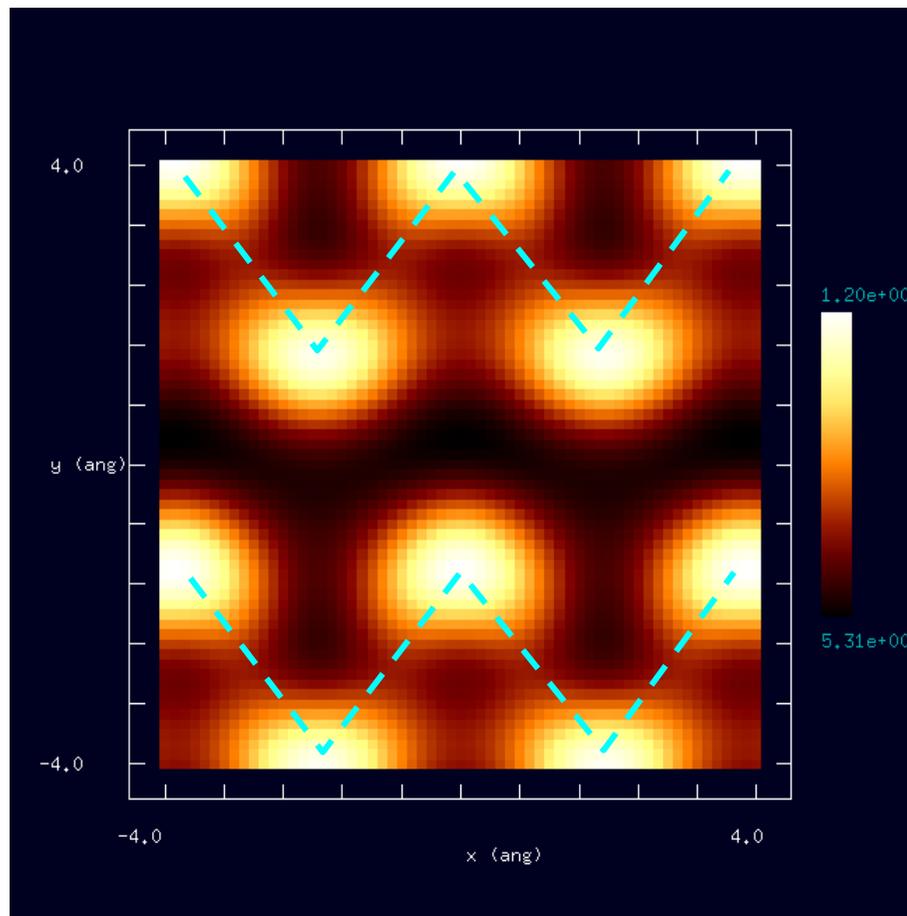
下図右 にバイアス電圧 -1.0Vでのシミュレーション像を示しており、最上層Si原子が暗くなっています。

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)。

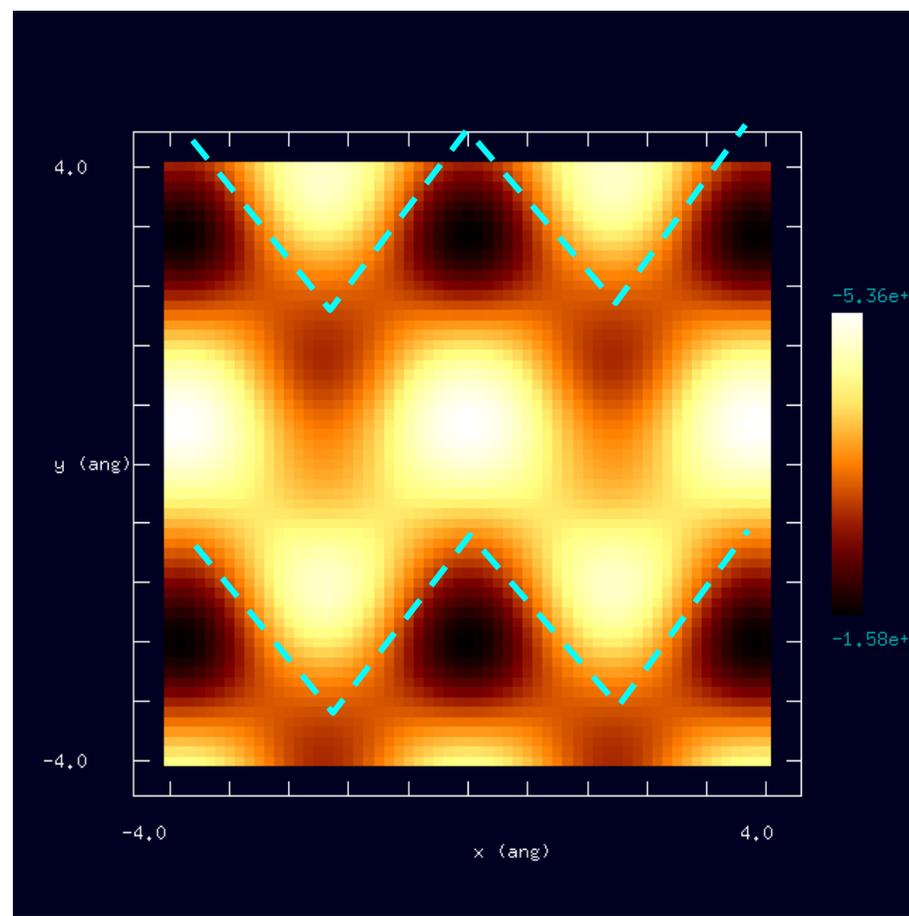
バイアスの正負によって構造が反転することは、Si (001)-c (4x2) と共通しています。



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.	$10^{(-6)}\text{eV}$	
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

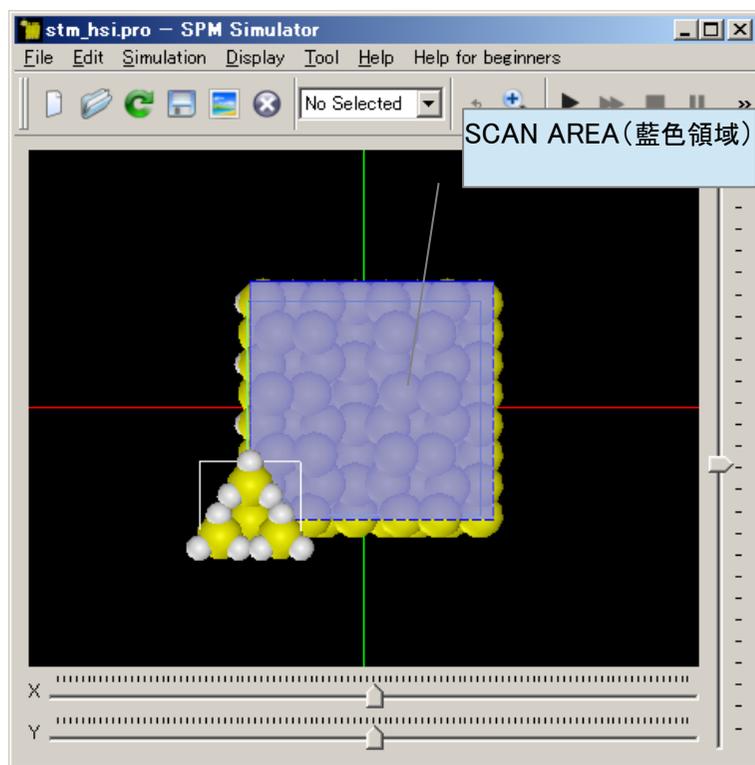
Si(001)-c(4x2)は、Si(001)の表面処理後、終端同士が結合しており、一部五角形状をした安定構造（非対称ダイマー構造）とされています。

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）。

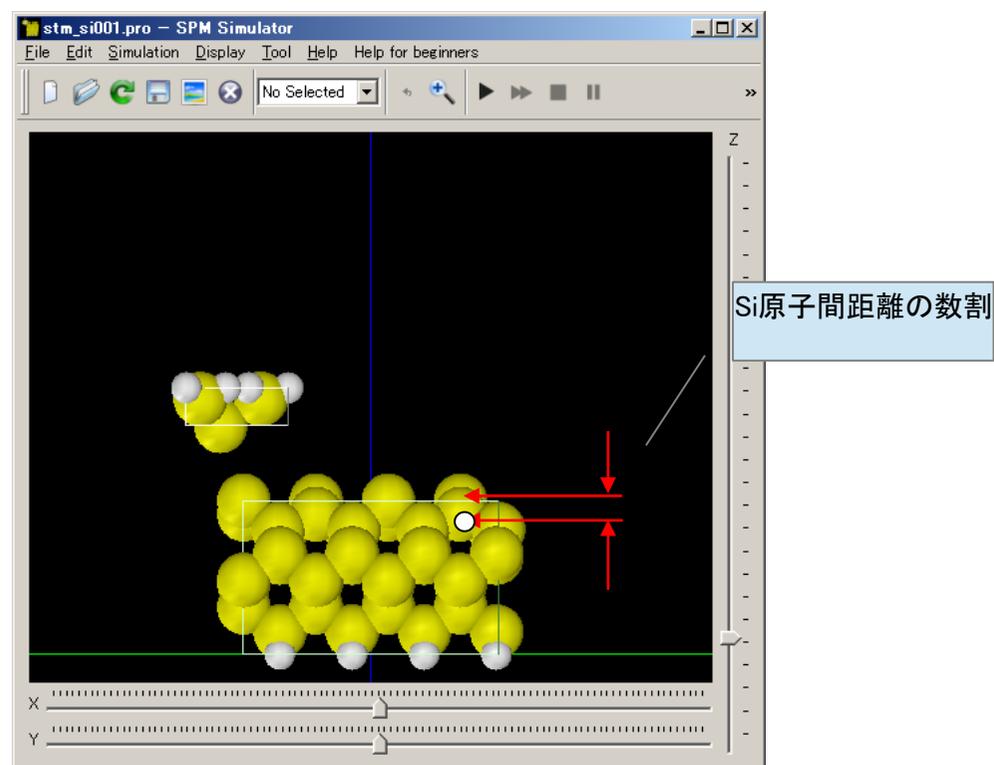
高さ一定シミュレーションでは、スキャンエリアの高さは一定で、厚みは0となります（2つ下左図）。

スキャンエリアは、試料TOP面をほぼ覆っています（下左図）。

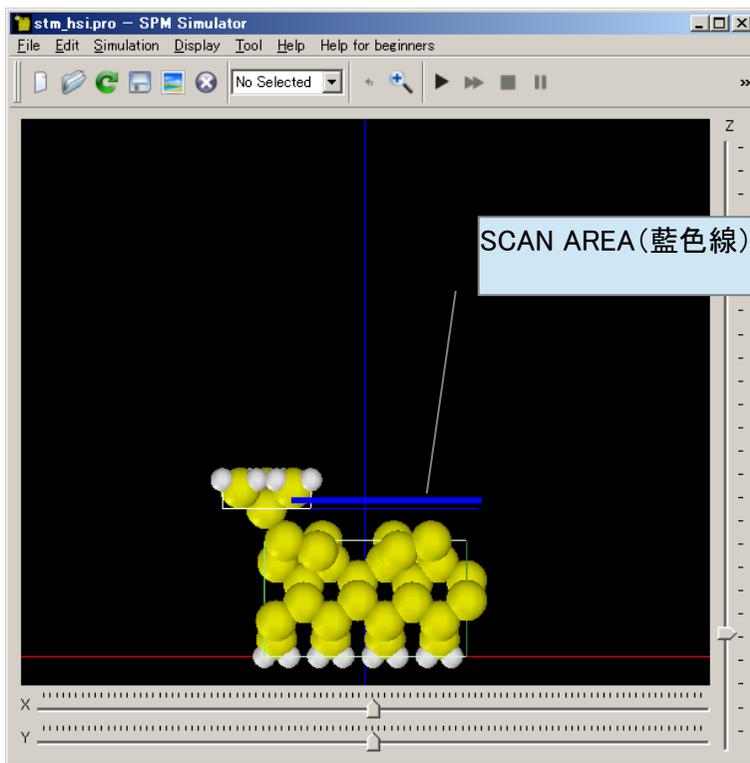
Si(001)-c(4x2)については作成済みデータとして「si001.xyz」が用意されており、利用可能です。



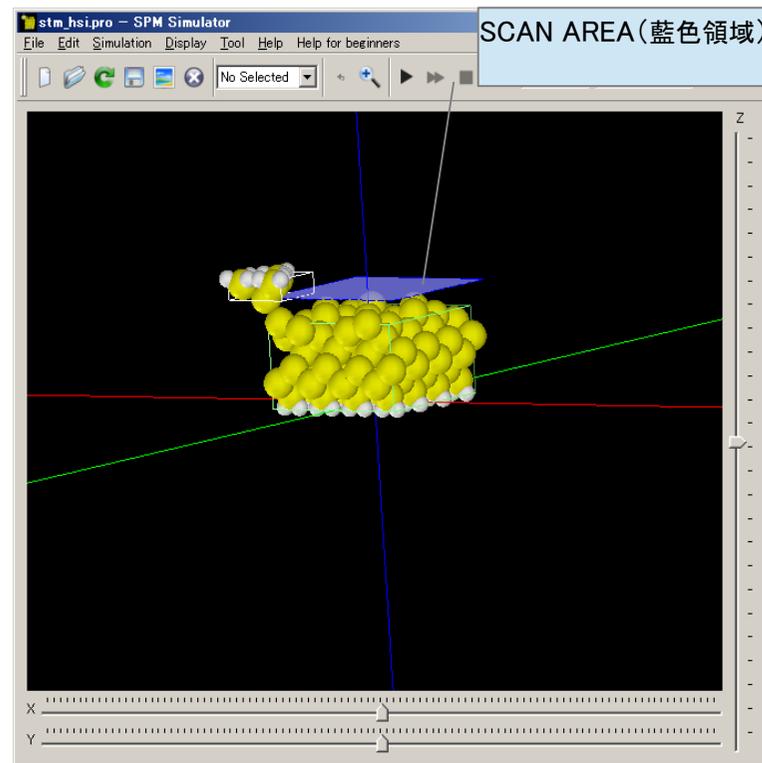
TOP表示でのSCAN AREA（藍色領域）



FRONT



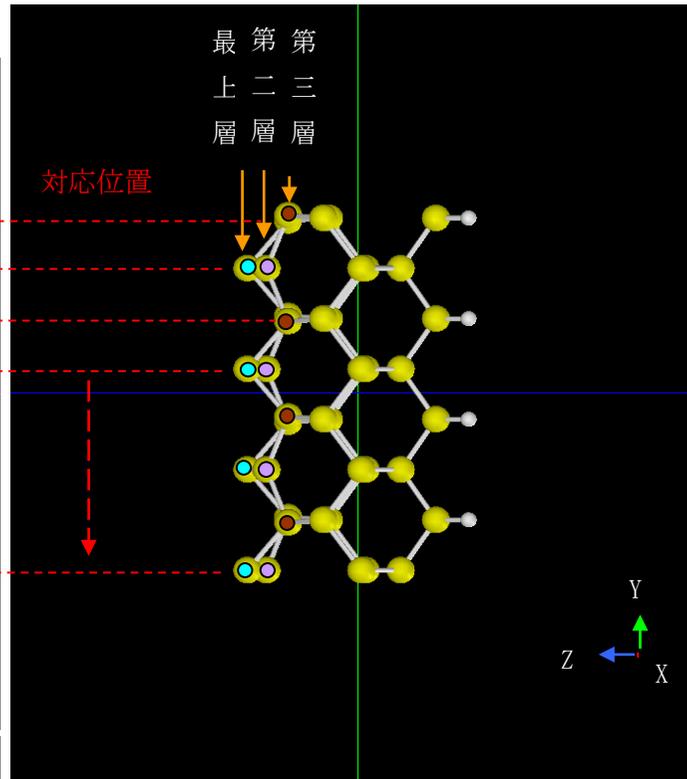
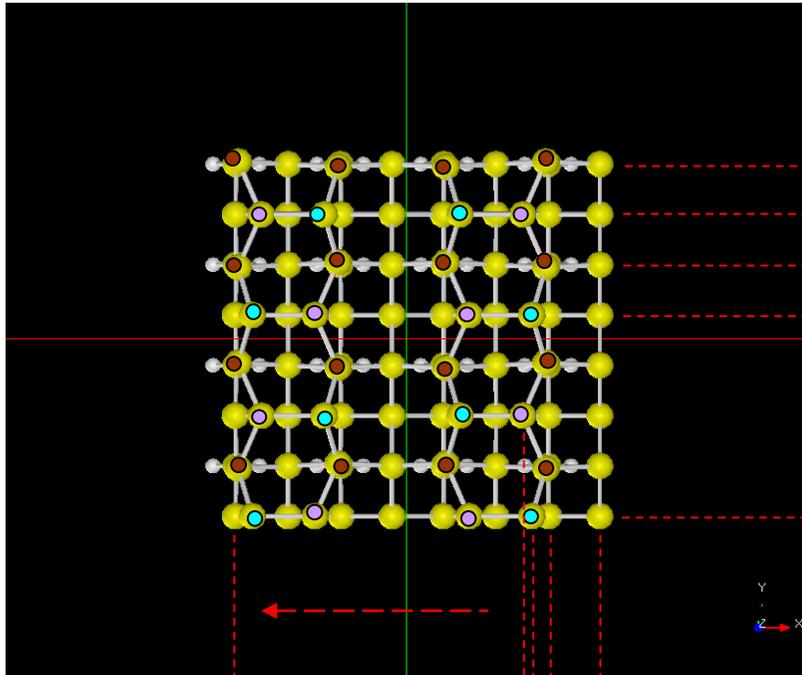
SIDEでのSCAN AREA (藍色線)



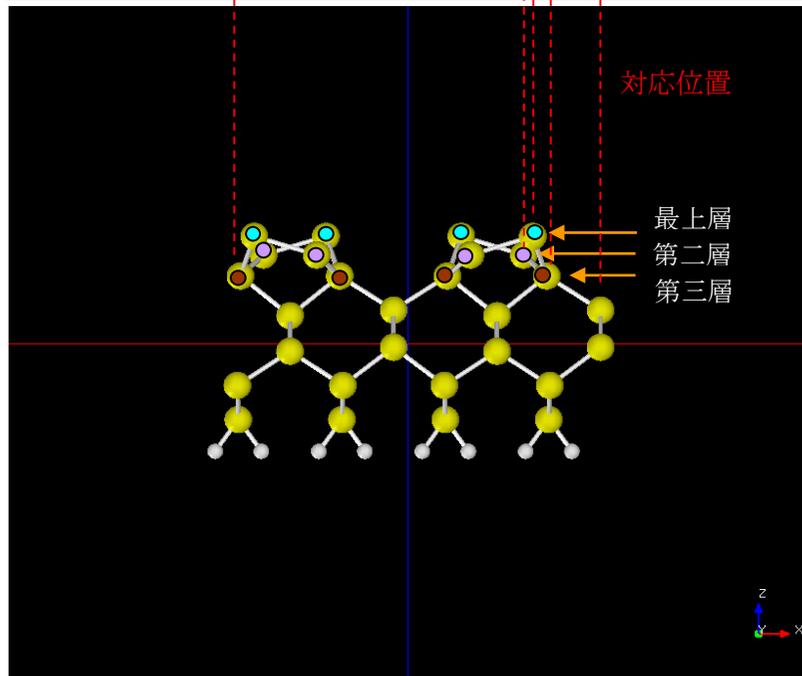
俯瞰図表示でのSCAN AREA (藍色領域)

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( ConstCurrent )

### ●DFTB ConstCurrentSTM : Si (001)-c(4x2)表面のSTM観察と Si (001)-c(4x2)表面のシミュレーション 計算事例⑥

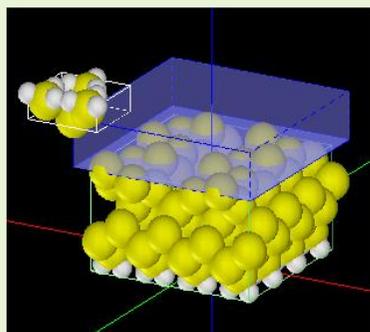
計算モード識別番号 : [DFTB\_ConstCurrentSTM\_Inorganic\_001]

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](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstCurrentSTM/DFTB_ConstCurrentSTM.php)

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

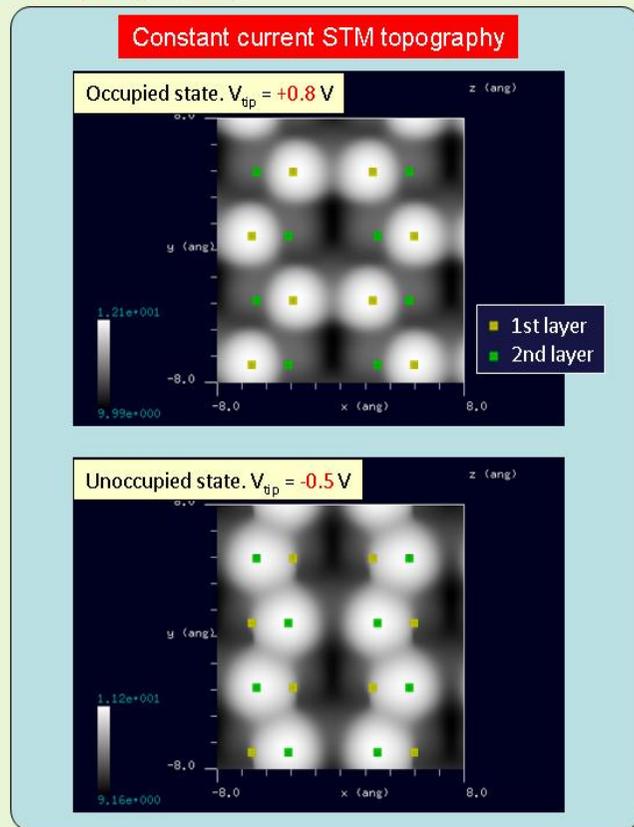
事例紹介ページを下左図に示します。

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



探針:  $\text{Si}_4\text{H}_9$   
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トポグラフィー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、

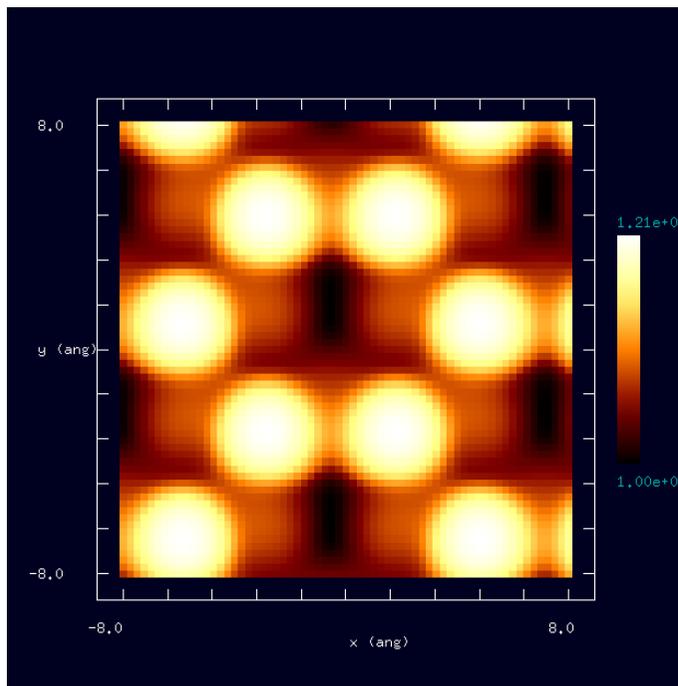
また2つ下右図にモデル形状第二層における六角形構造の位置を示しました。

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。

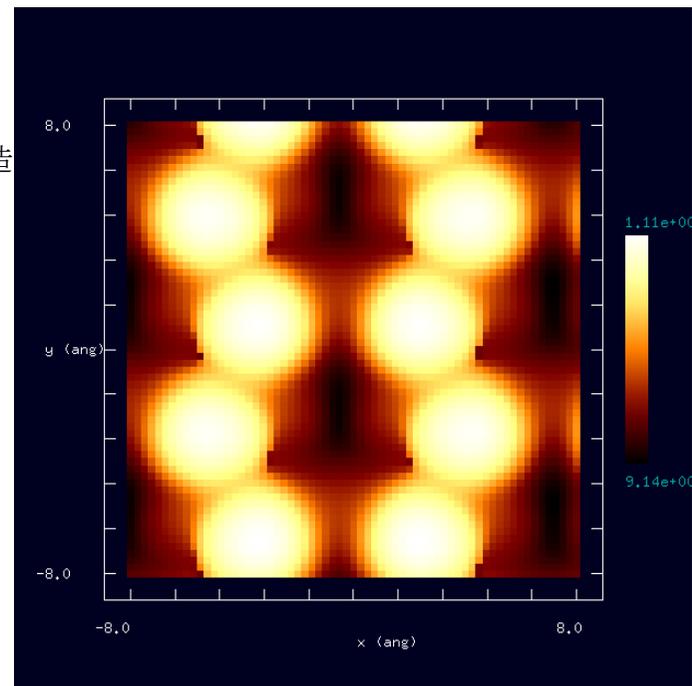
試料の原子数が多いので、設定したスキャン領域では、処理に時間が掛かります。(数時間)

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。

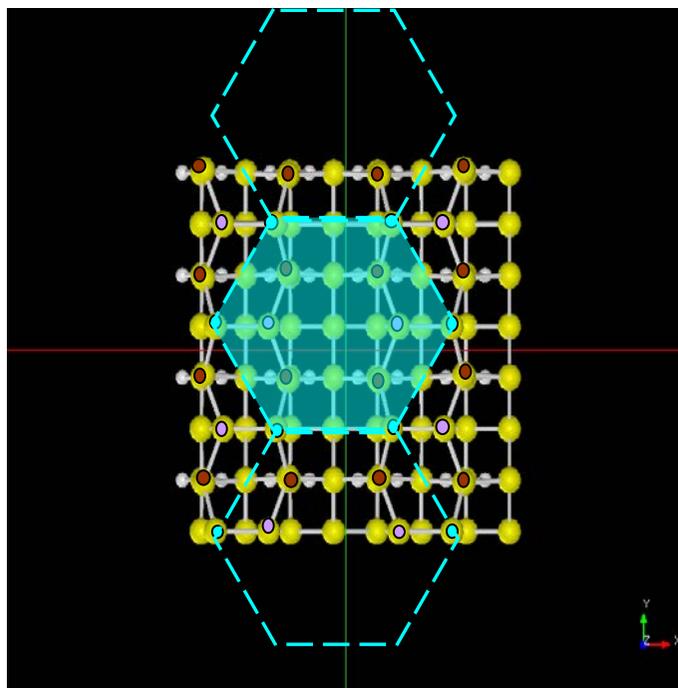


バイアス電圧 +0.8Vでのシミュレーション像

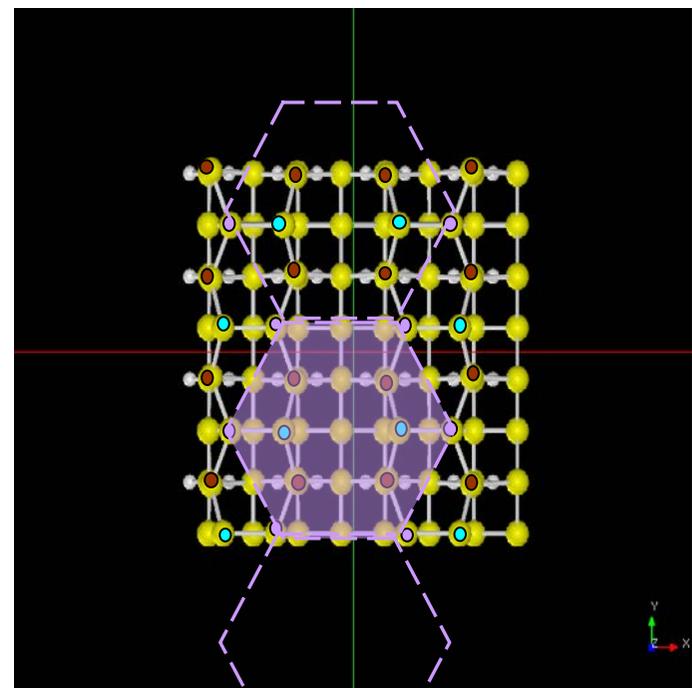
バイアス電圧 -0.5Vでは、  
第二層における6角形構造  
が際立つ。



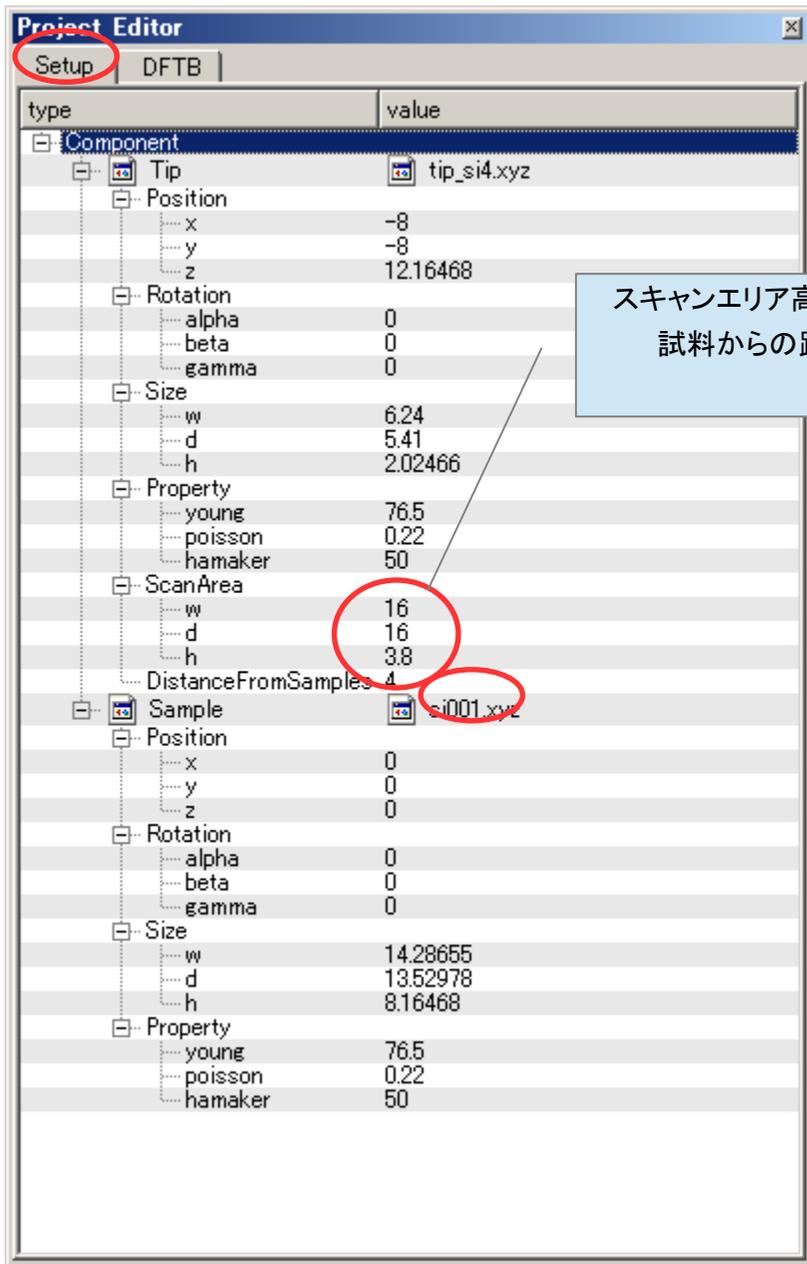
バイアス電圧 -0.5Vでのシミュレーション像



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

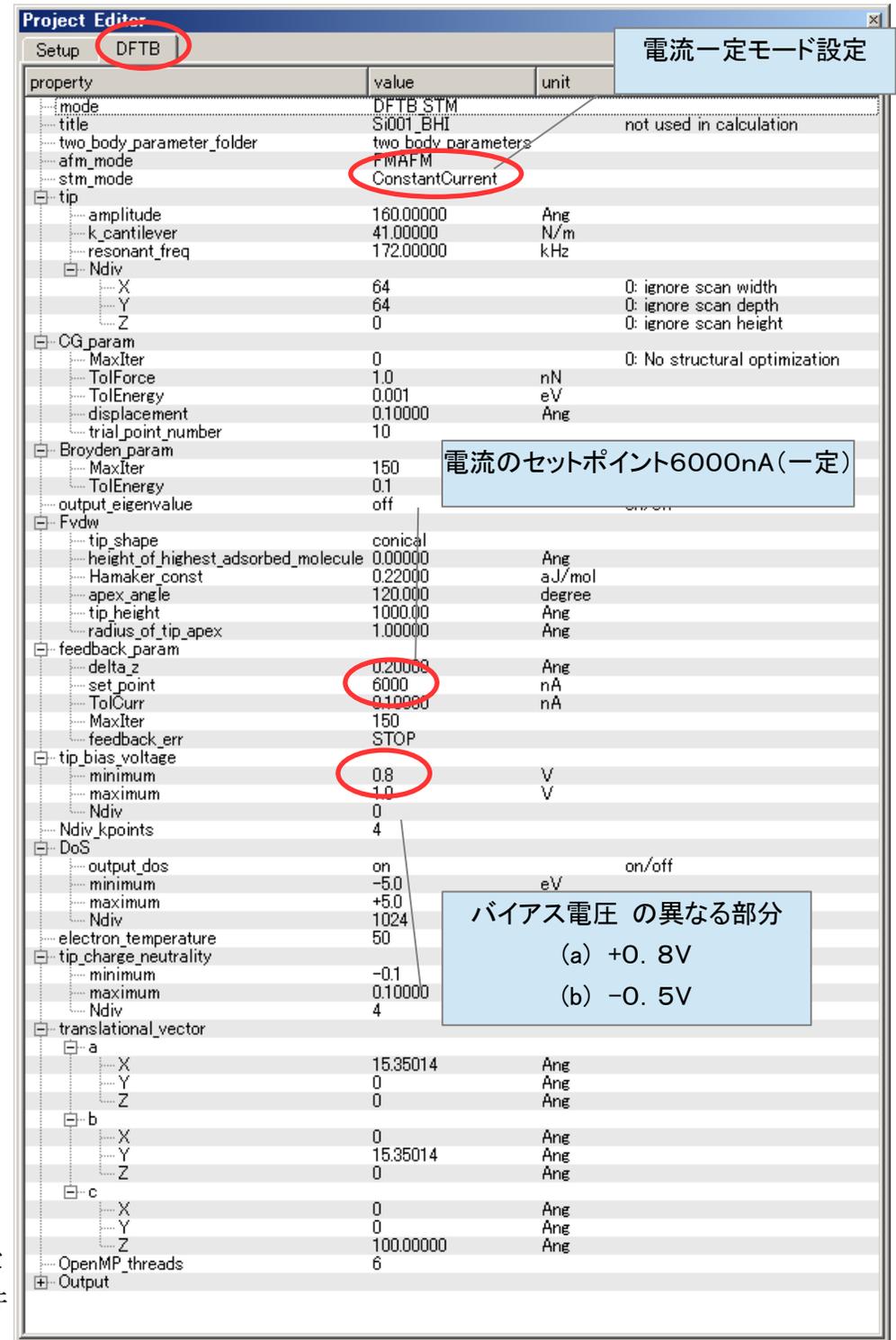


スキャンエリア高さ 3.8 Å  
試料からの距離4 Å

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



電流一定モード設定

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 計算事例⑦

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。

**s t m\_m o d e** 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)

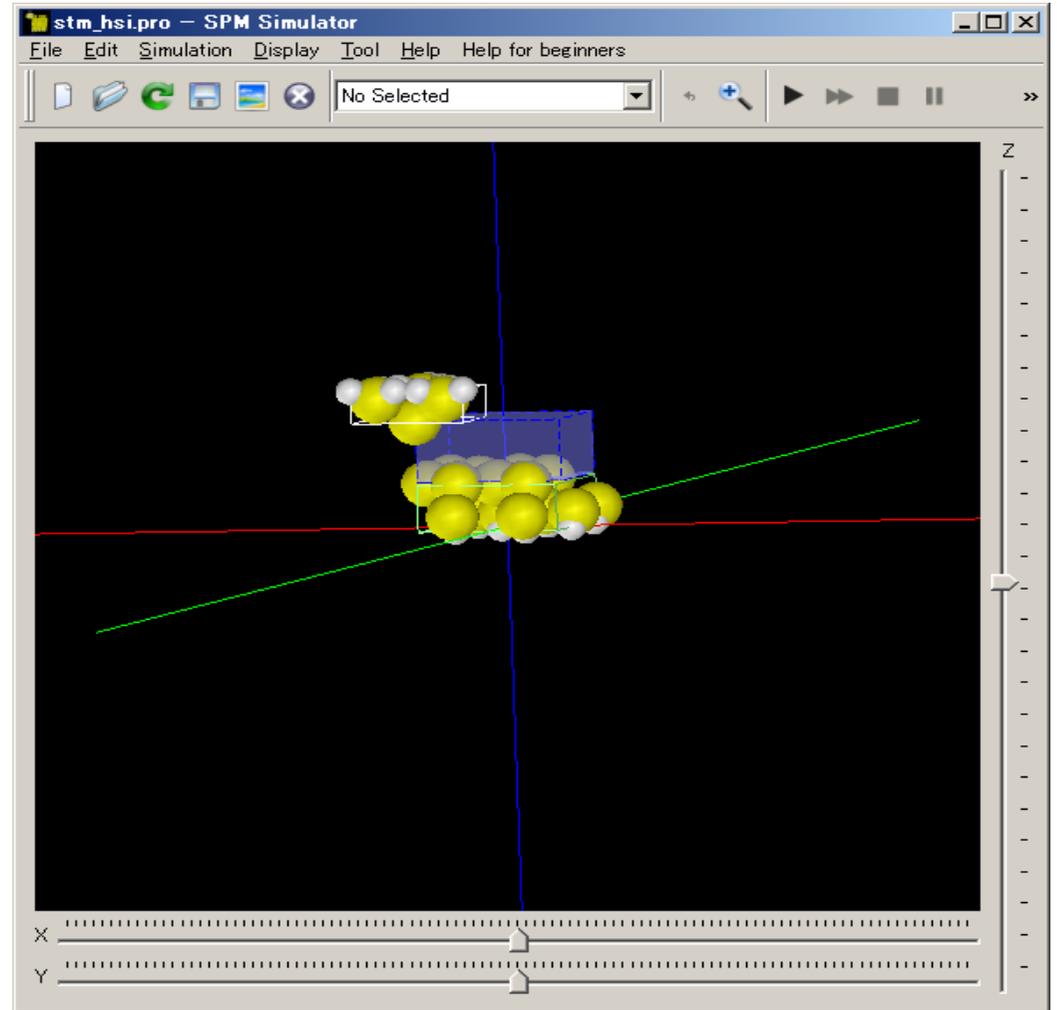
バイアス電圧 +0.8V とバイアス電圧 -0.5V での計算を設定条件で行わせました (下左右表)。

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。

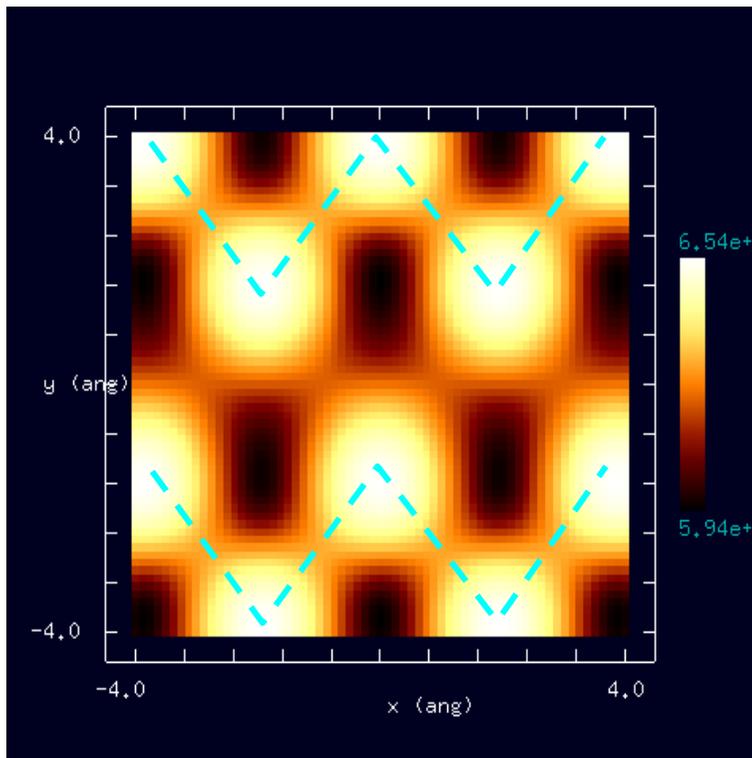
下右図のバイアス電圧 -0.5V では、最上層のジグザグ構造が消失します。

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。

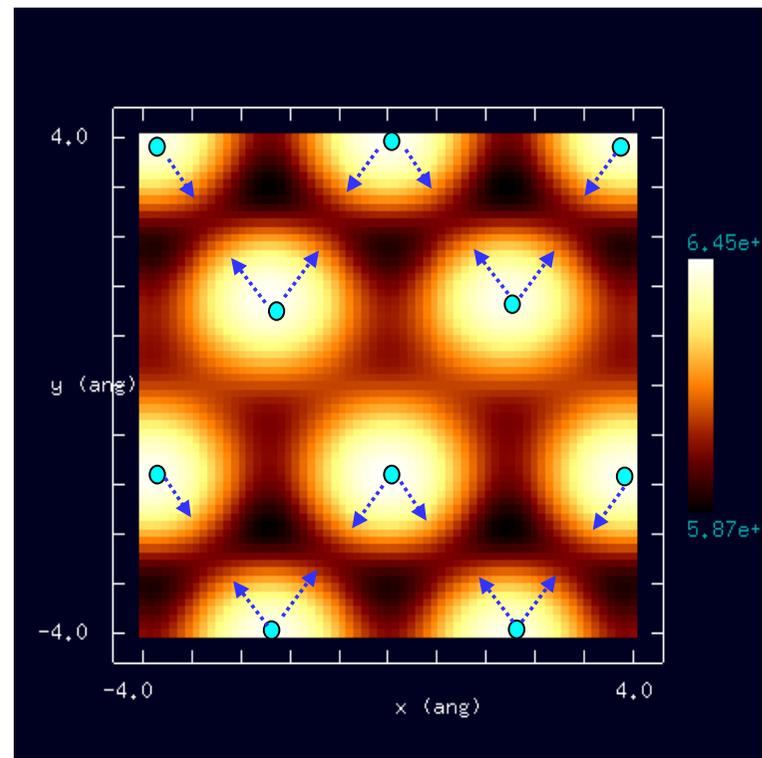
バイアスの正負によって構造が異なることは、Si (001)-c (4x2) と似ています。



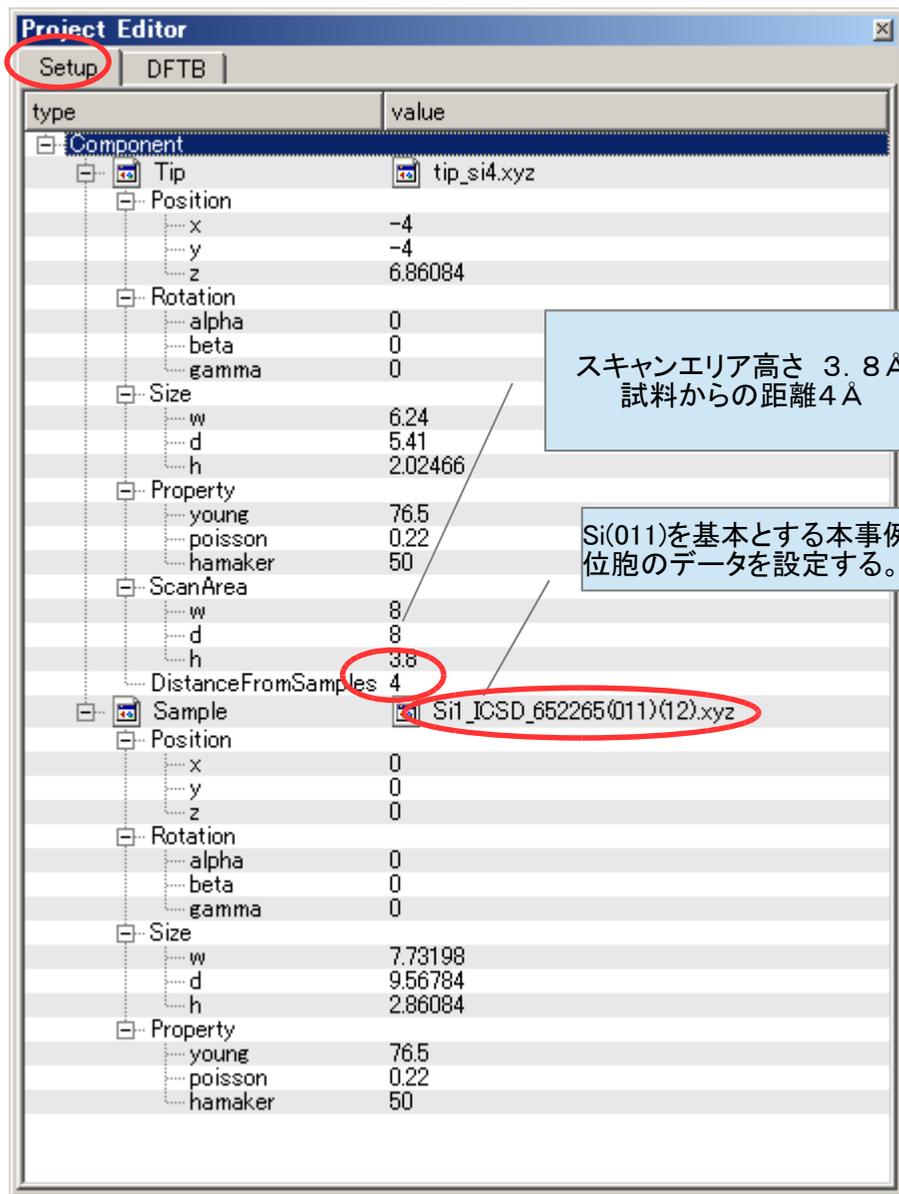
本計算事例のスキャン領域俯瞰図



バイアス電圧 +0.8V



バイアス電圧 -0.5V

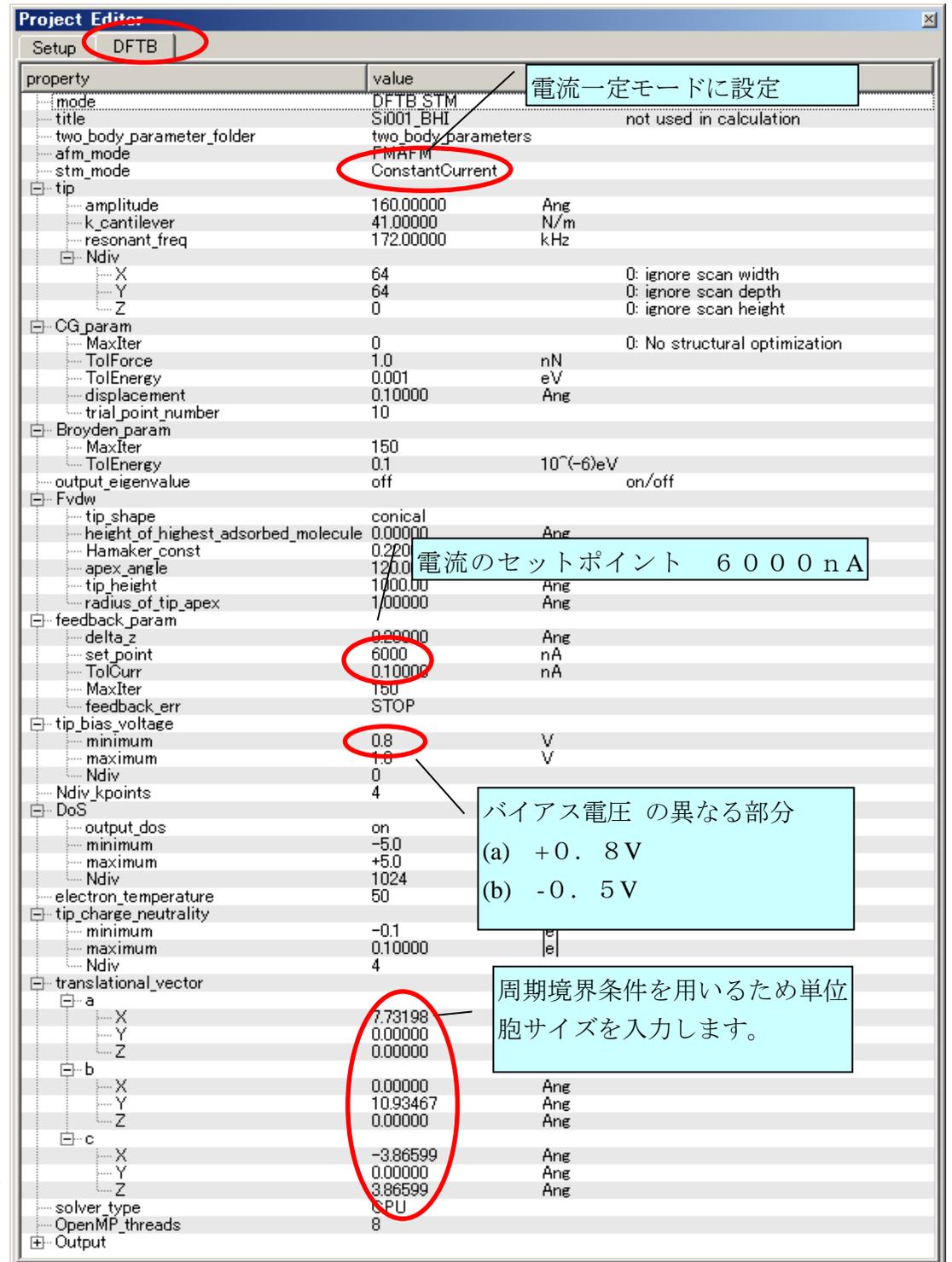


スキャンエリア高さ 3.8 Å  
試料からの距離 4 Å

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。

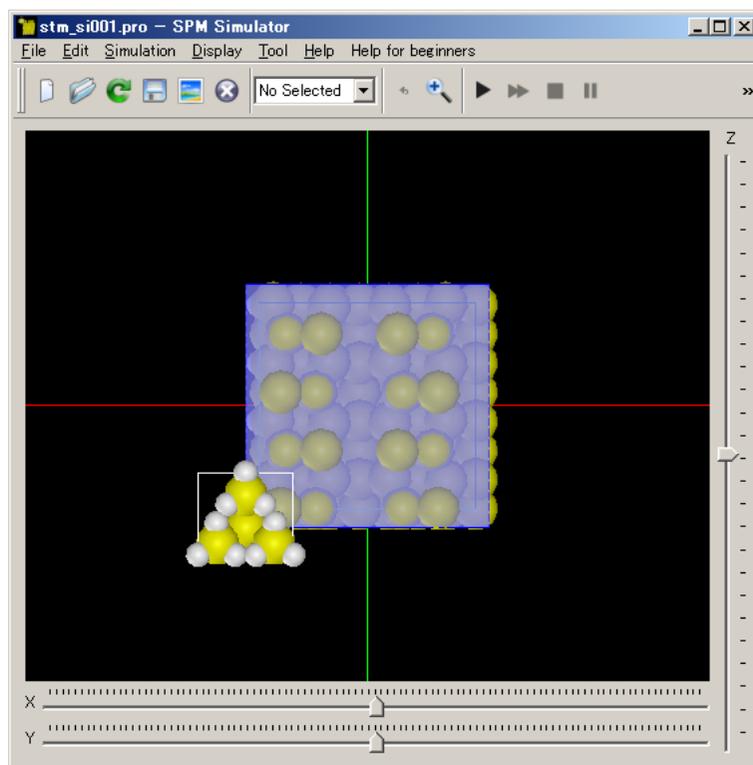
Si(001)-c(4x2)は、Si(001)の表面処理後、終端同士が結合しており、一部5角形形状をした安定構造（非対称ダイマー構造）とされています。

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）。

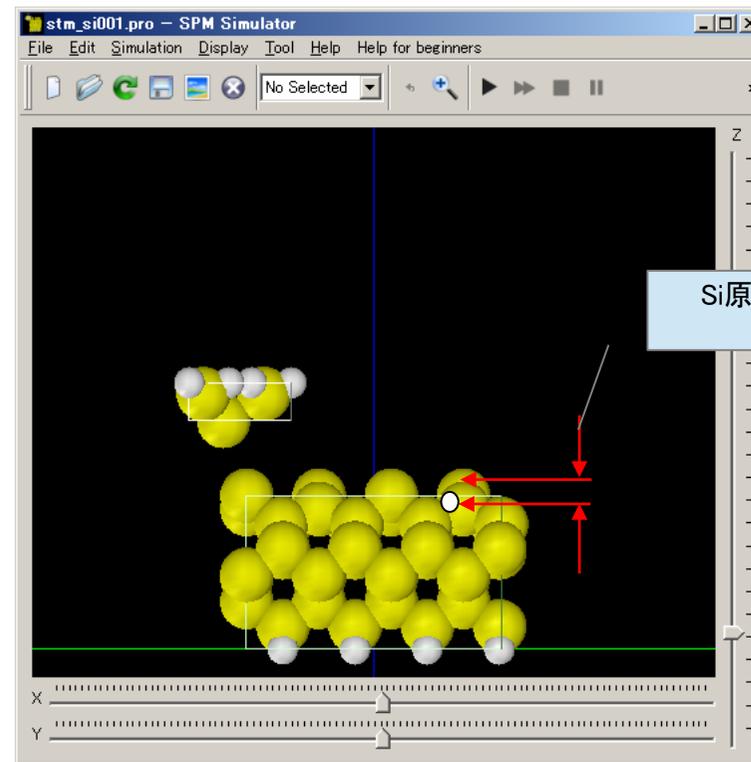
電流一定シミュレーションでは、高さ一定シミュレーションと異なり、スキャンエリアの厚みに幅（ $> 0$ ）があります（2つ下左図）。

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。

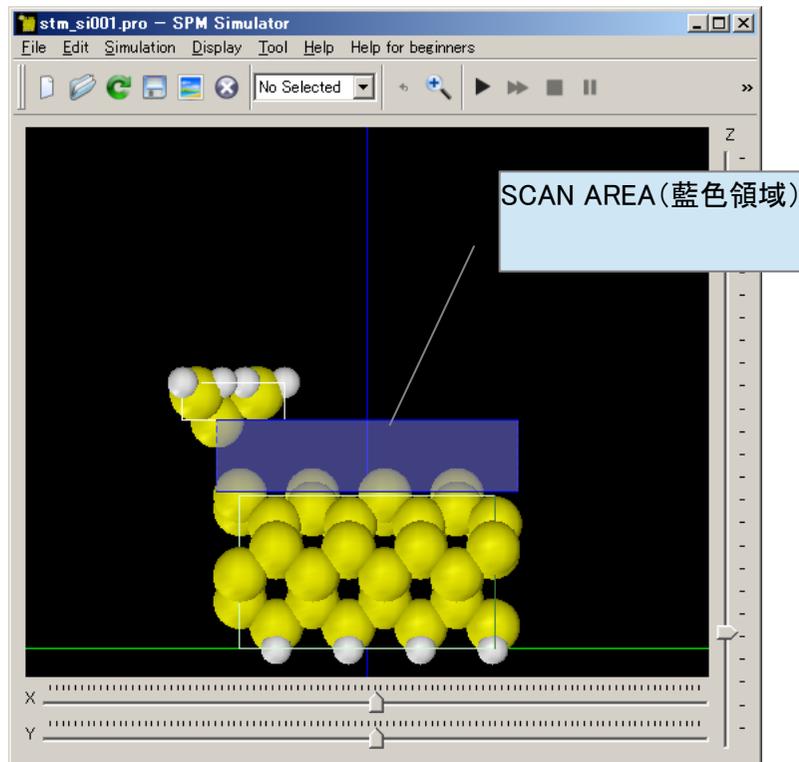


TOP表示でのSCAN AREA（藍色領域）

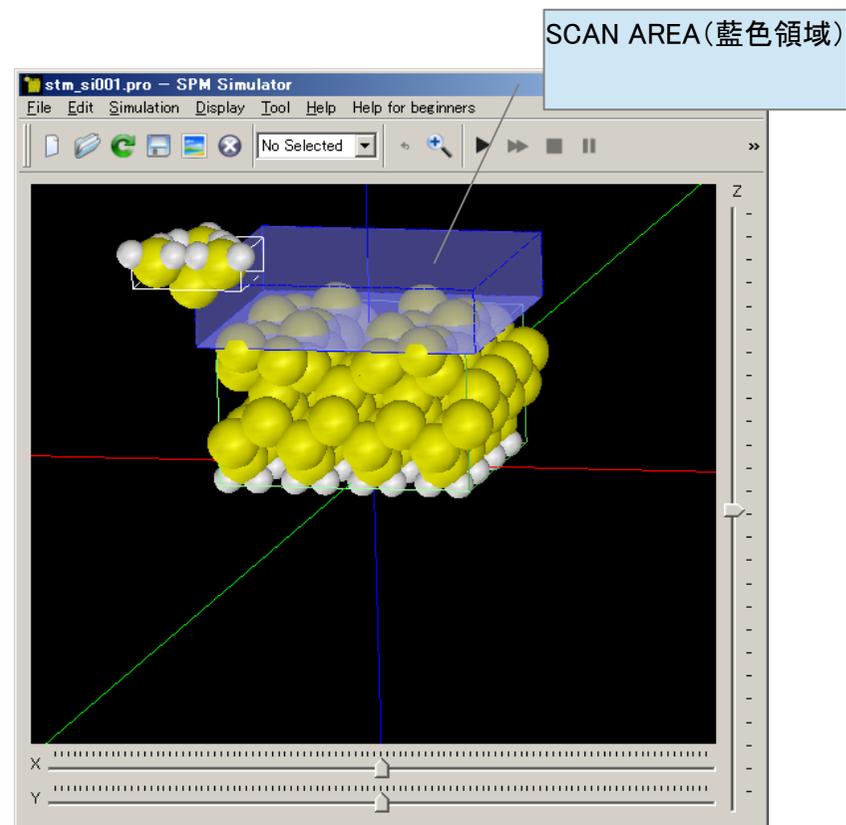


Si原子間距離の数割

FRONT



SIDEでのSCAN AREA (藍色領域)



俯瞰図表示でのSCAN AREA (藍色領域)

## 7・DFTB\_STM( ConstantHeight、ConstCurrent)

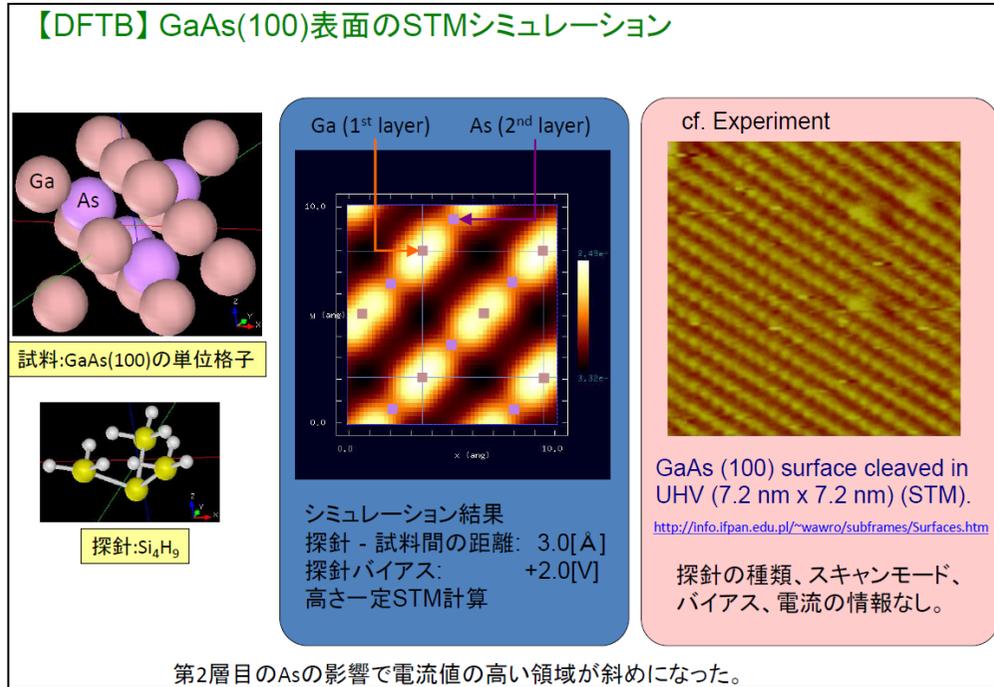
### ●DFTB ConstHeightSTM : GaAs 結晶(100)面の constant height STM 像観察シミュレーション 計算事例⑧

計算モード識別番号 : [DFTB\_ConstCurrentSTM\_Inorganic\_008]

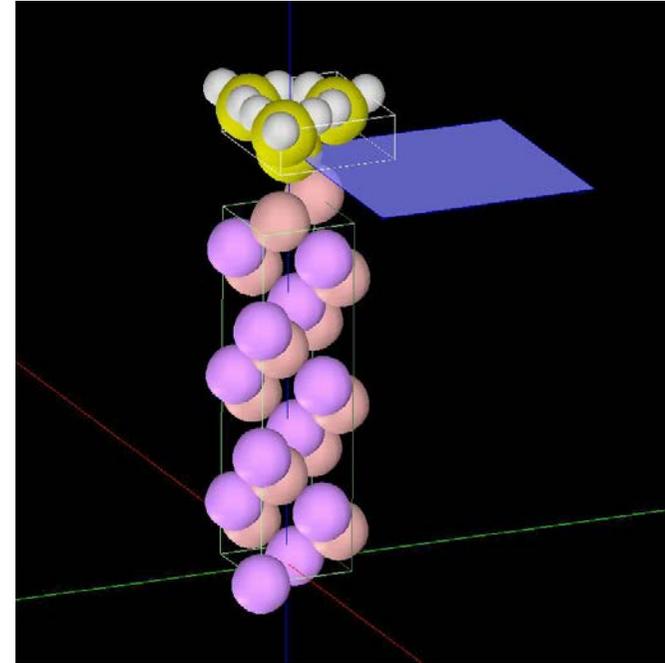
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/DFTB/ConstCurrentSTM/DFTB\\_ConstCurrentSTM.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstCurrentSTM/DFTB_ConstCurrentSTM.php)

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。



事例紹介ページ



解析モデルとスキャンエリア

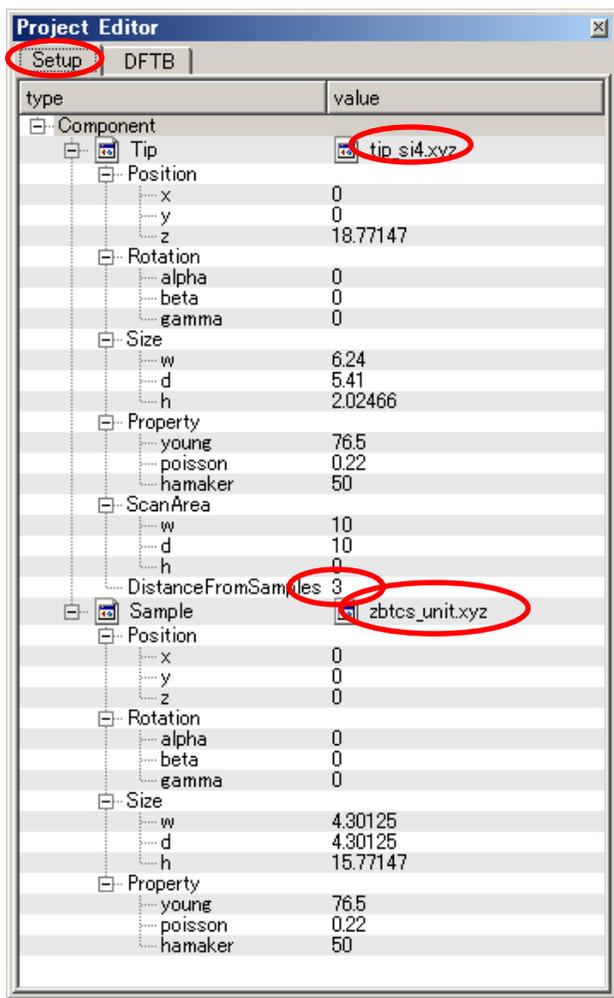
本事例は、GaAS 結晶(100)面を、DFTB ConstantHeight のトンネル電流像でシミュレートします。

「ガリウム砒素とは、ガリウム (Ga) と砒素 (As) の元素からなる化合物である (III-V 族半導体)。半導体の材料となる物質として知られている。ガリウム砒素を材料に用いた半導体素子は、従来もっぱら半導体材料に用いられてきたシリコンに比べて、強度が低く、高価であるといった難点があるが、電子移動度が高いため動作の高速化が可能で、また消費電力も低いという長所がある。やがて、研究・技術の進歩によってガリウム砒素の低価格化、量産化が実現されると、携帯電話をはじめとしたモバイル機器などにおいて、ガリウム砒素を材料とした半導体が多く搭載されるようになってきている。」

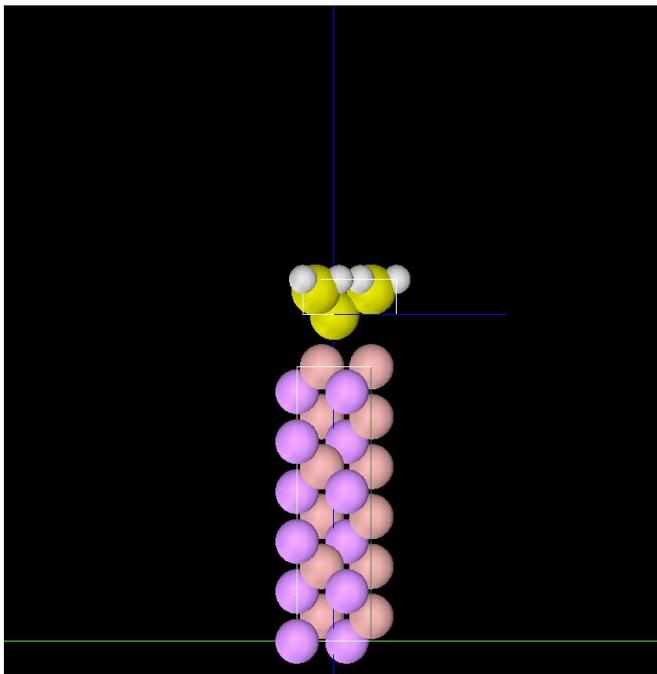
(IT用語辞典バイナリ)。本計算事例の入力条件について記載します。スキャンエリアの設定は有効です。周期境界条件を考慮します。

探針は登録済みデータ「Si4H9」を用います。探針試料間距離は 3.0 Å としています。

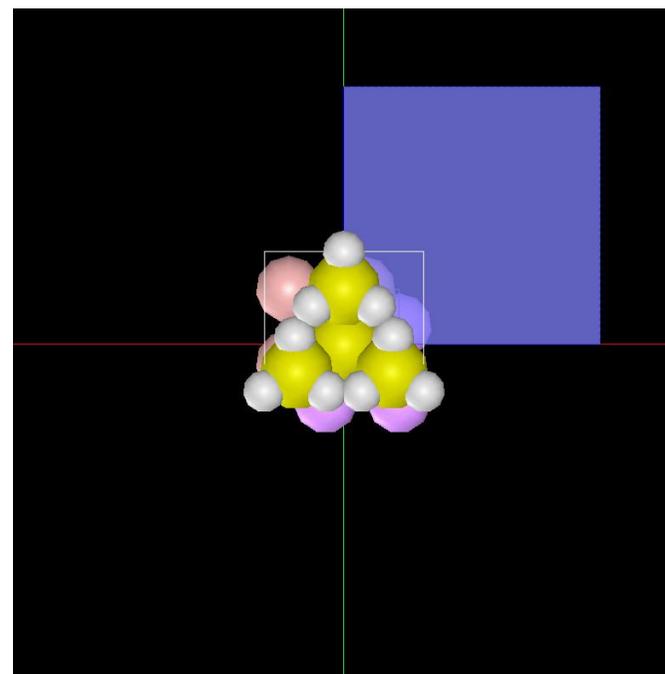
以下に、紹介事例のセットアップ条件（下左図）とシミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



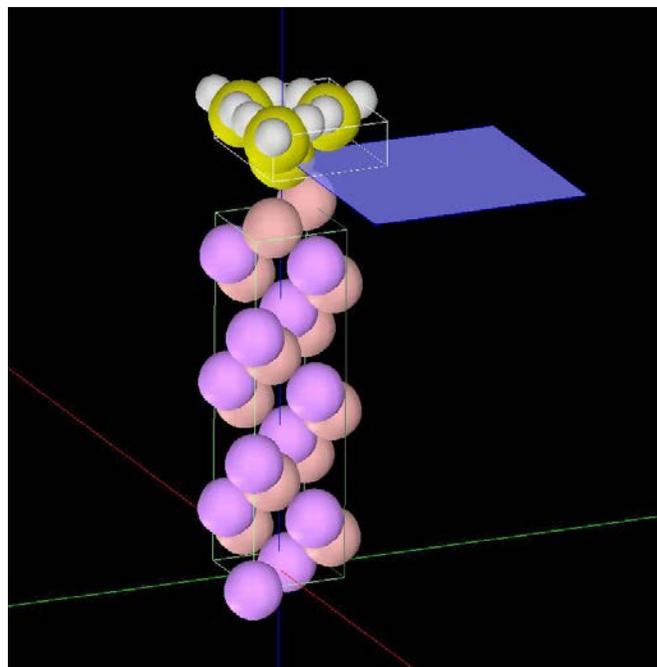
事例モデルのセットアップ条件



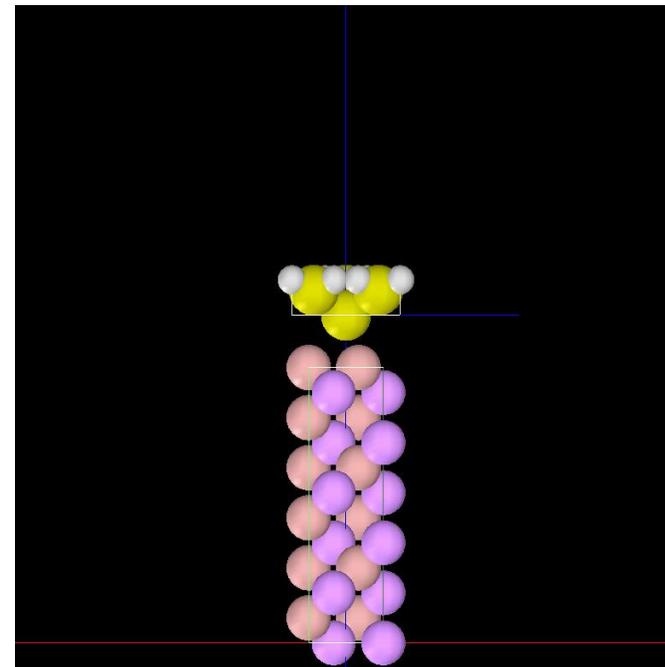
SIDE



TOP



俯瞰



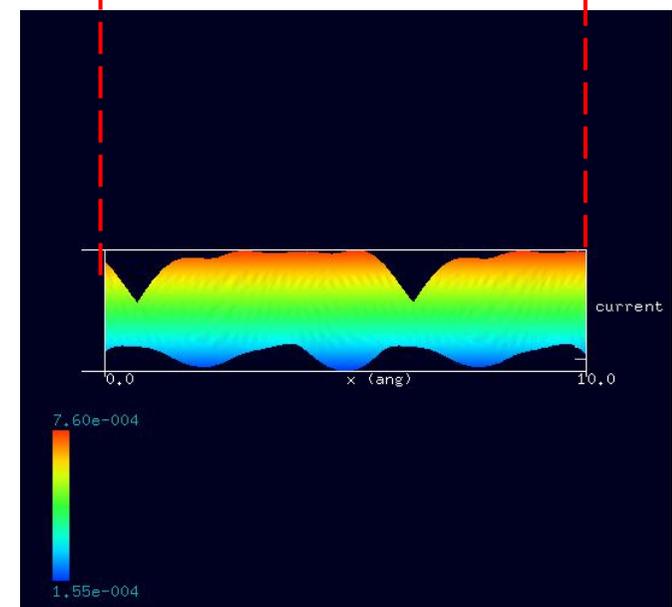
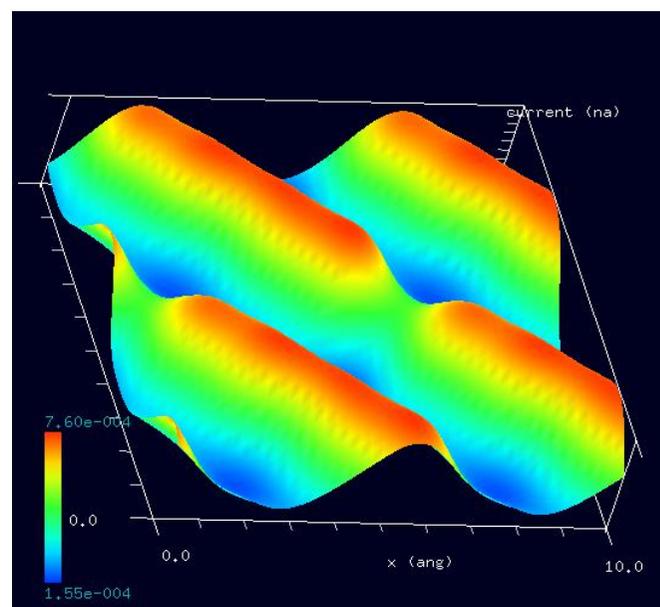
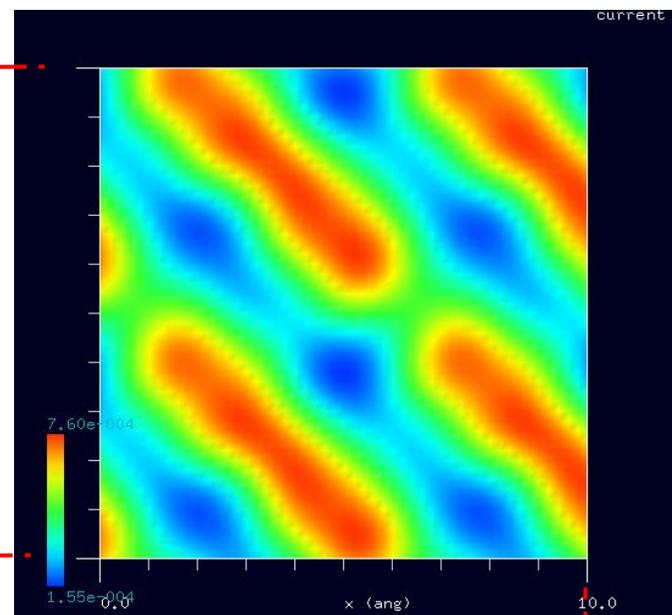
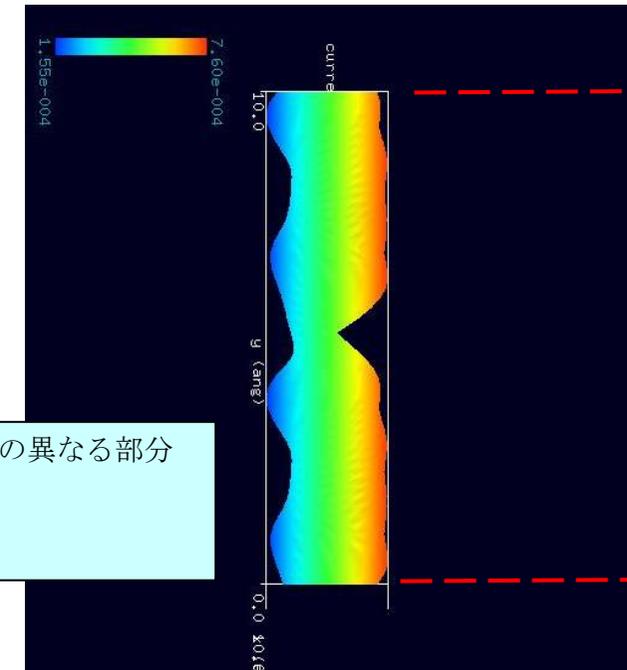
FRONT

Project Editor

Setup DFTB

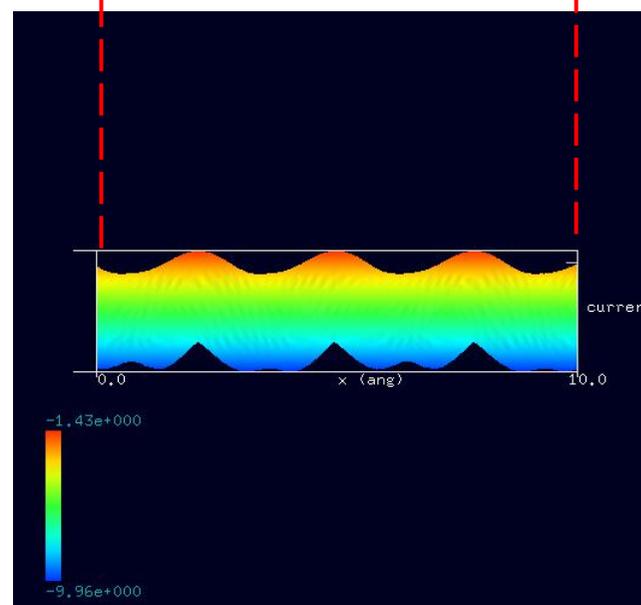
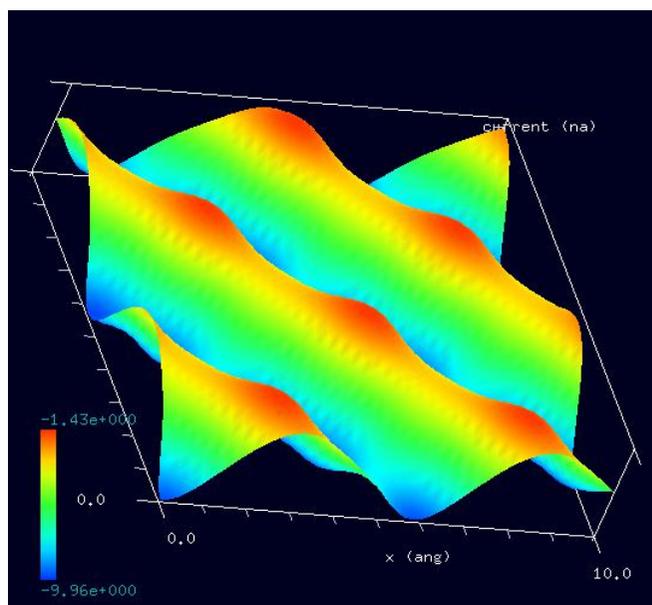
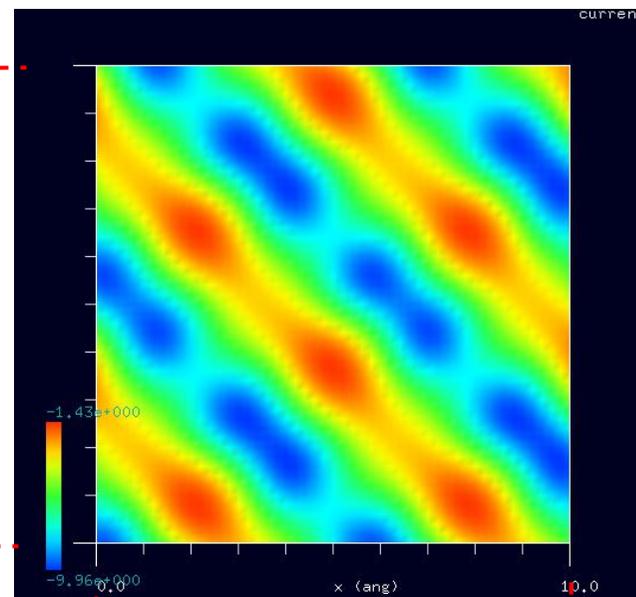
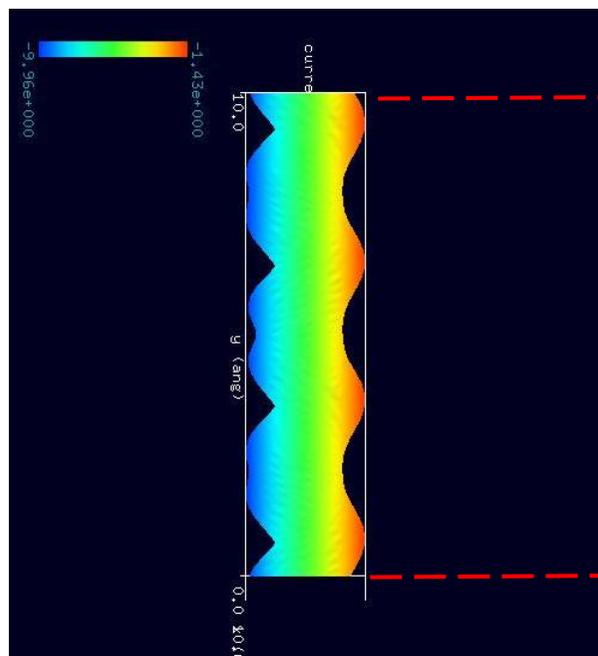
property	value
mode	DFTB_STM
title	brief description of this c
two_body_parameter_folder	two body parameters
stm_mode	ConstantHeight
tip	
amplitude	160.00000
k_cantilever	41.00000
resonant_freq	172.00000
Ndiv	
X	50
Y	50
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1.0
TolEnergy	0.001
displacement	0.10000
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	150
TolEnergy	0.1
output_eigenvalue	off
Fvbw	
tip_shape	conical
height_of_highest_adsorbed_molecule	0.00000
Hamaker_const	0.22000
apex_angle	120.000
tip_height	1000.00
radius_of_tip_apex	1.00000
feedback_param	
delta_z	0.20000
set_point	1000
TolCurr	0.10000
MaxIter	150
tip_bias_voltage	
minimum	2
maximum	2
Ndiv	100
Ndiv_kpoints	4
DoS	
output_dos	on
minimum	-5.0
maximum	+5.0
Ndiv	1024
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	5.73501
Y	0
Z	0
b	
X	0
Y	5.735
Z	0
c	
X	0
Y	0
Z	100
solver_type	CPU
OpenMP_threads	4
Output	

TIPバイアス電圧の異なる部分  
 (a) +2.0V  
 (b) -2.0V



TIPバイアス電圧+2Vでの、シミュレーション結果・Rainbow色表示モデルをSIDE (左上図) TOP (右上図)、FRONT (右下図)、として示します。

TIPバイアス電圧  $-2V$ での、シミュレーション結果・Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



閃亜鉛鉱構造 (Zincblende Structure) : 立方硫化亜鉛構造 (Cubic Zinc Sulfide Structure) ともいう。面心立方格子からダイヤモンド構造を作るときの操作において、(0, 0, 0) と (1/4, 1/4, 1/4) に置く原子の種類を変えると閃亜鉛 鉱構造ができる。この 構造はまた、格子定数  $a$  の等しい Ga 及び As から成る二つの面心 立方格子を重ねておき、体対角線の方に (a/4, a/4, a/4) だけずらして重ねたものと見ることもできる。このとき、それぞれの面心 立方格子を副格子と呼ぶ。正六面体の中央の原子の周りには、正四面体の頂点位置に別種の原子が隣の原子として存在することが分かる。  
 (電子情報通信学会「知識ベース」 © 電子情報通信学会 2012 より)

GaAs(ガリウム砒素)は閃亜鉛型結晶構造をもつ直接遷移型IV-IX族化合物半導体の代表的存在、光デバイスやマイクロ波デバイスには欠かせない半導体材料となっている。(株式会社ネオトロン・HPより)

用途 Diode, Transistor, LED, Hall element, Laser element

クラス/ 結晶構造 Zincblende

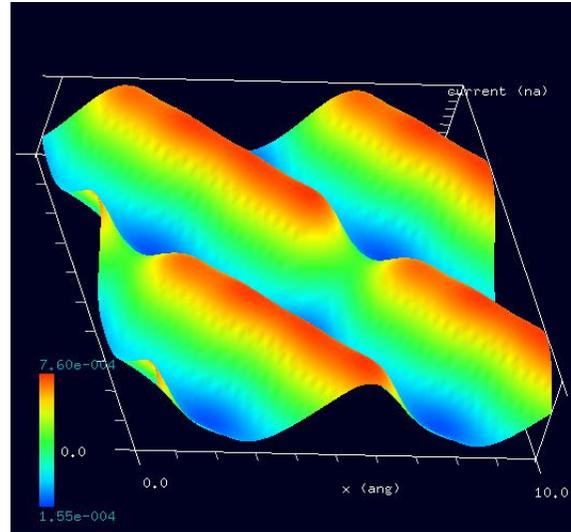
育成方法 LEC

格子定数, Å 5.6535

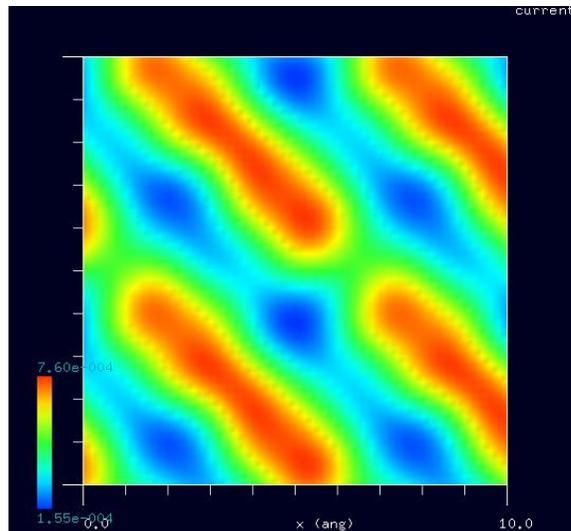
バンドギャップ,  $E_g$ (eV) 1.4 (直接遷移型)

融点, °C 1237

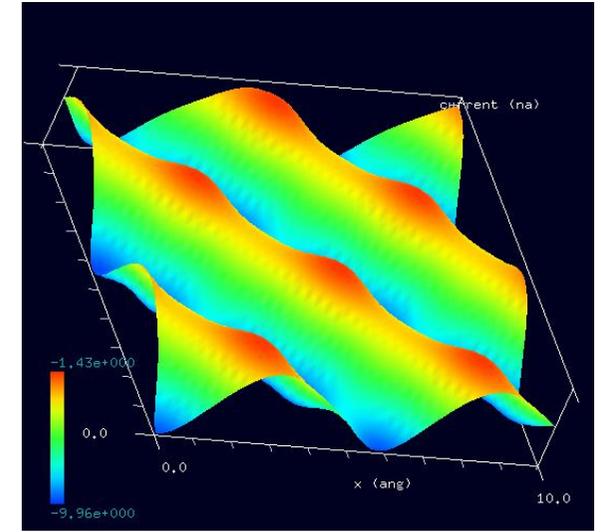
俯瞰図 バイアス電圧 +2V



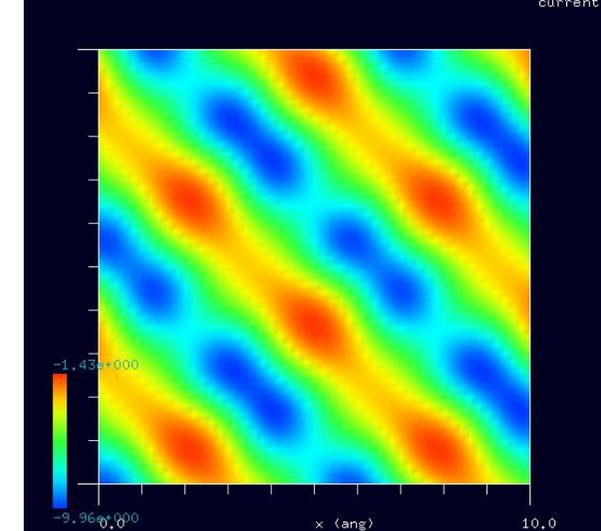
TIP バイアス電圧 +2V



俯瞰図 バイアス電圧 -2V



TIP バイアス電圧 -2V



化合物半導体とは

シリコン半導体がシリコンというひとつの元素を材料にしているのに対し、複数の元素を材料にしている半導体のことを言います。その組み合わせは色々ありますが、代表的なものとして周期律表のIII族とV族（GaAs、GaP、InP等）、或いはII族とVI族（CdTe、ZnSe等）、IV族同士（SiC）の組み合わせがあり、それぞれ異なった機能を発揮します。（住友電工 Webサイトより）

III-V族半導体（さんごぞくはんどうたい）は、III族元素とV族元素を用いた半導体である。2種類以上の元素を組み合わせた半導体を化合物半導体と呼び、III-V族化合物半導体とも呼ぶ。代表的なIII族(13族)元素としてはアルミニウム(Al)・ガリウム(Ga)・インジウム(In)、V族(15族)元素としては窒素(N)・リン(P)・ヒ素(As)・アンチモン(Sb)である。この他、ボロン(B)、タリウム(Tl)、ビスマス(Bi)もそのIII-V族化合物半導体を構成する元素である。またV族元素として窒素を用いたGaN（窒化ガリウム）、AlN（窒化アルミニウム）、InN（窒化インジウム）等を特に窒化物半導体と呼ぶ。代表的な半導体であるシリコン(Si)と比較して、III-V族化合物半導体はその多くが直接遷移型の半導体であるため、発光ダイオード(LED)や、レーザーダイオード(LD)をはじめとする発光素子に用いられる。またSiとはバンドギャップエネルギーが異なっているため、フォトダイオードといった受光素子にも用いられることがある。例えば現在の赤・緑・青色などの発光ダイオードは、ほぼすべてIII-V族半導体を材料としている。また、高い電子移動度を利用して、極超短波以上の増幅には、GaAsを用いた電界効果トランジスタ（FET）が広く使われている。（wikipedia）

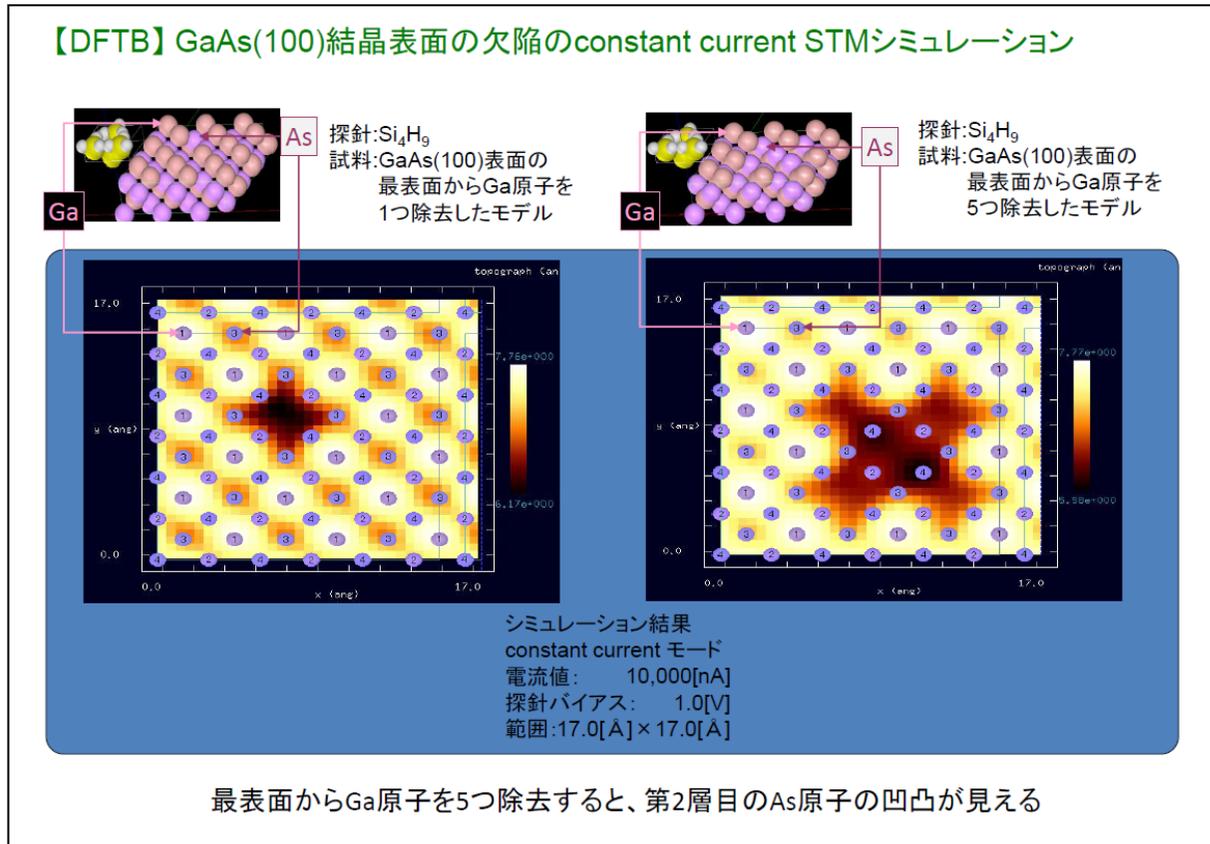
## ●DFTB ConstCurrentSTM : GaAs 結晶(100) 欠陥面の STM 観察シミュレーション 計算事例⑨

計算モード識別番号 : [DFTB\_ConstCurrentSTM\_Inorganic\_009a]、[DFTB\_ConstCurrentSTM\_Inorganic\_009b]

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](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstCurrentSTM/DFTB_ConstCurrentSTM.php)

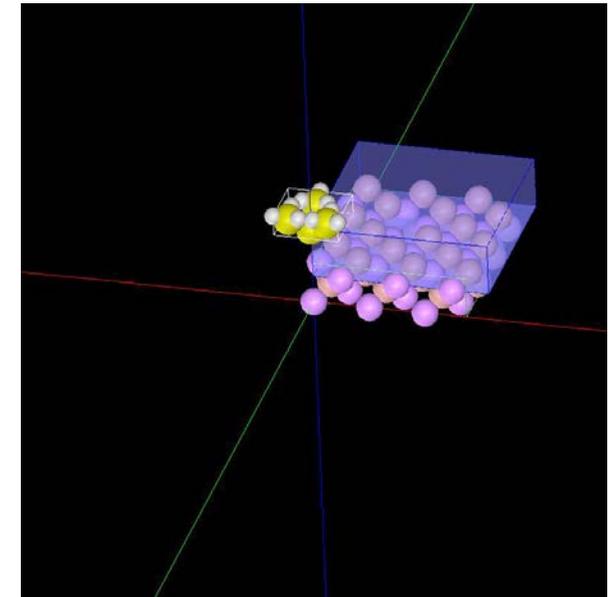
分類 : DFTB ConstCurrentSTM (電流一定、STM トポグラフィ像)、Å オーダー、無機半導体

事例紹介ページを下左図に示します。

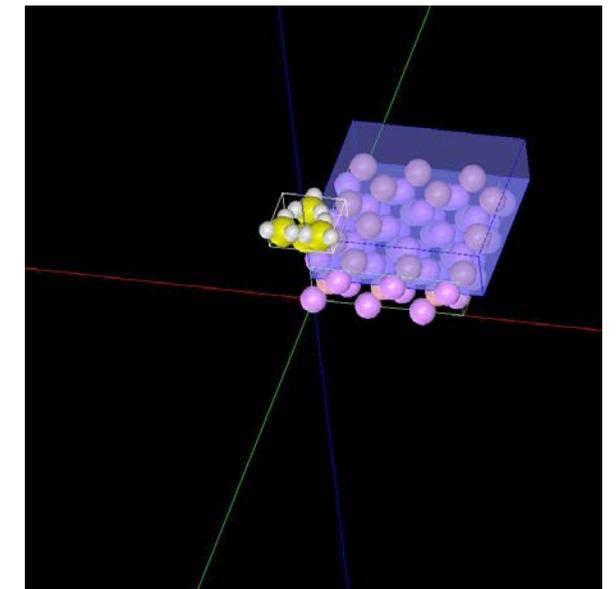


事例紹介ページ 1

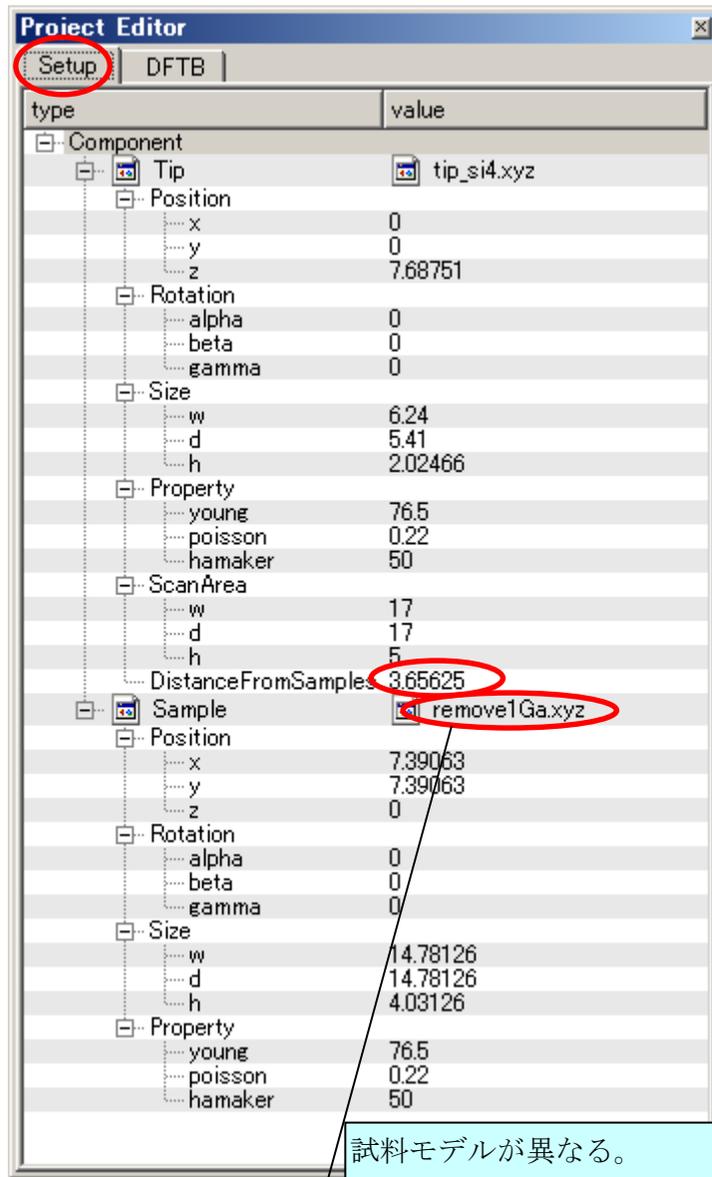
本事例は、GaAs 結晶(100)面を、DFTB ConstantCurrent のトンネル電流一定像でシミュレートします。「ガリウム砒素とは、ガリウム (Ga) と砒素 (As) の元素からなる化合物である (III-V 族半導体)。半導体の材料となる物質として知られている。ガリウム砒素を材料に用いた半導体素子は、従来もっぱら半導体材料に用いられてきたシリコンに比べて、強度が低く、高価であるといった難点があるが、電子移動度が高いため動作が高速化が可能で、また消費電力も低いという長所がある。」(IT 用語辞典バイナリ)。本計算事例の入力条件について記載します。スキャンエリアの設定は有効です。周期境界条件を考慮します。探針は登録済みデータ「Si4H9」を用います。探針試料間距離は **3.65625 Å** としています。電流は **10000 nA** としています。



Ga原子1つ除去したモデルとスキャンエリア

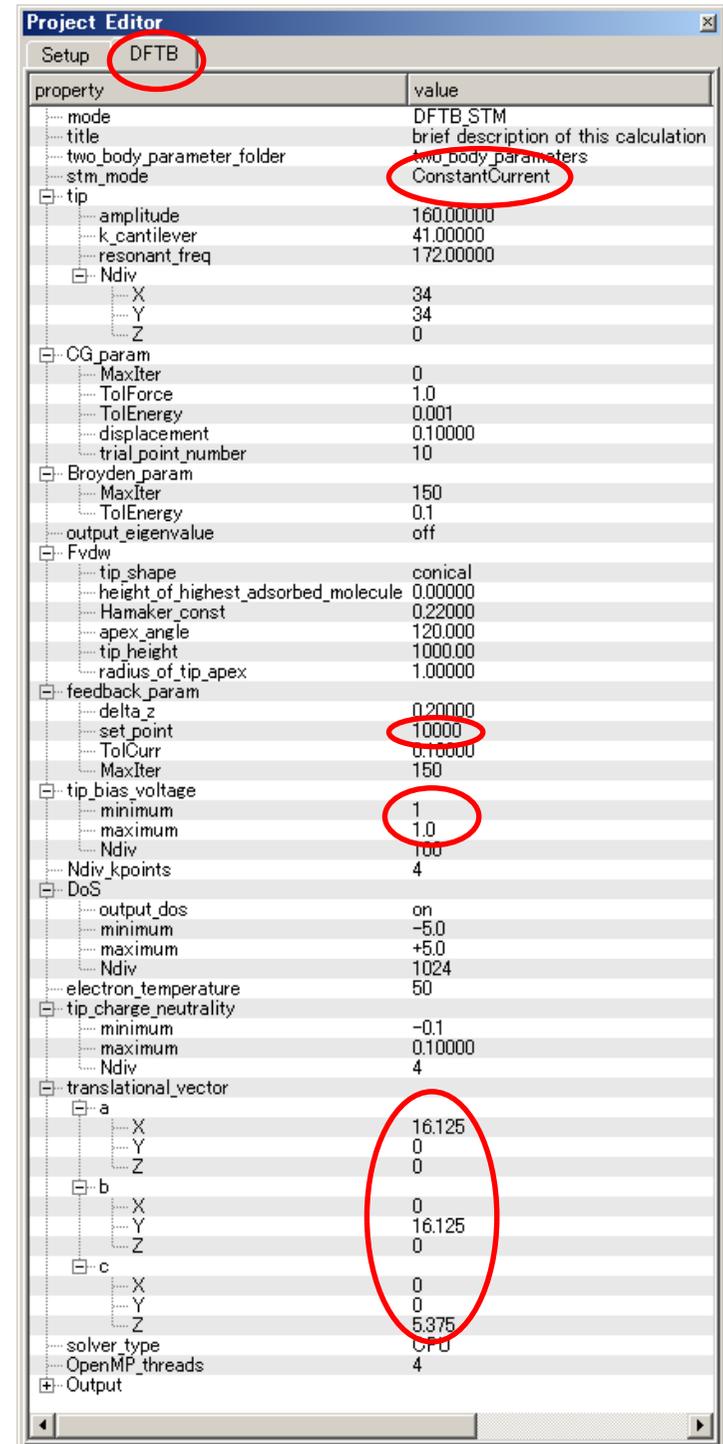


Ga原子5つ除去したモデルとスキャンエリア



事例モデルのセットアップ条件

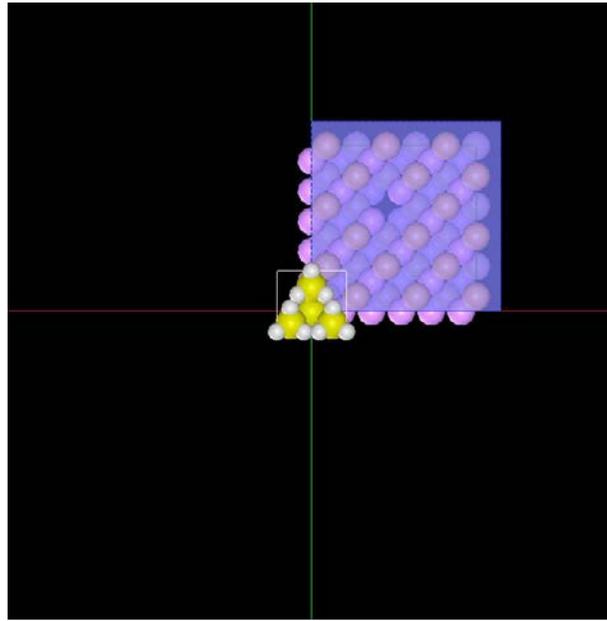
- 試料モデルが異なる。
- (a) Ga原子 1つ除去  
(remove1Ga.xyz)
  - (b) Ga原子 5つ除去  
(GaAs\_3x3x1\_defect.xyz)



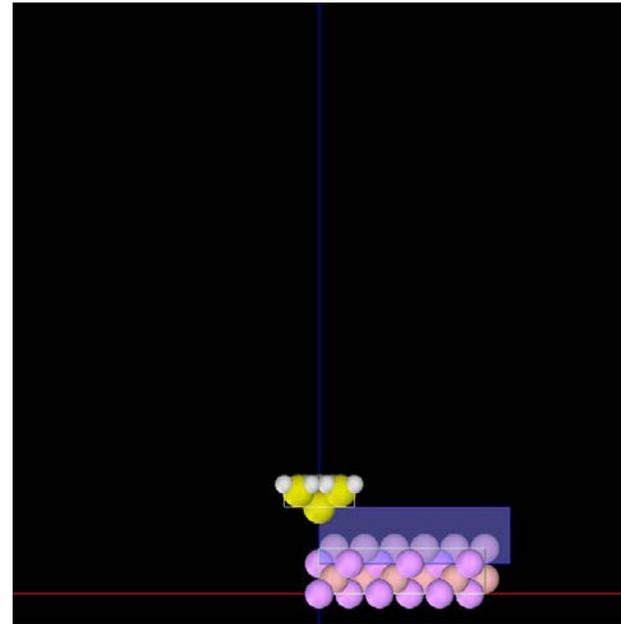
設定条件

注) translational\_vector: c は DFTB\_BAND モードの三次元計算のみで使用されます。

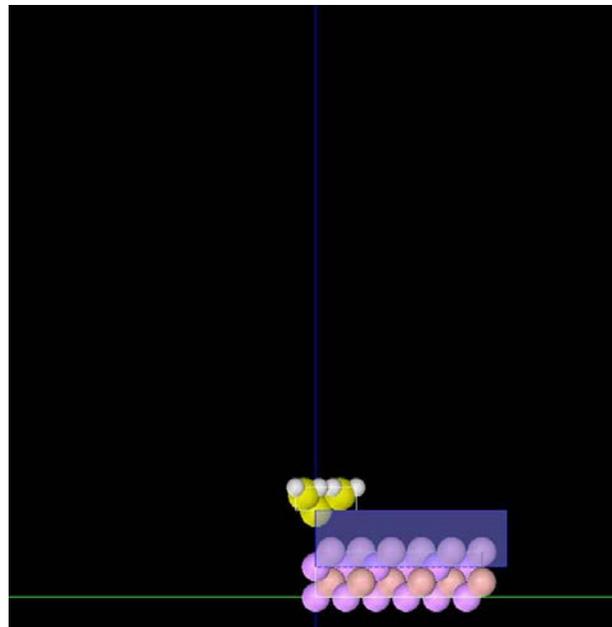
以下に、Ga 原子 1 つ除去した紹介事例のシミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



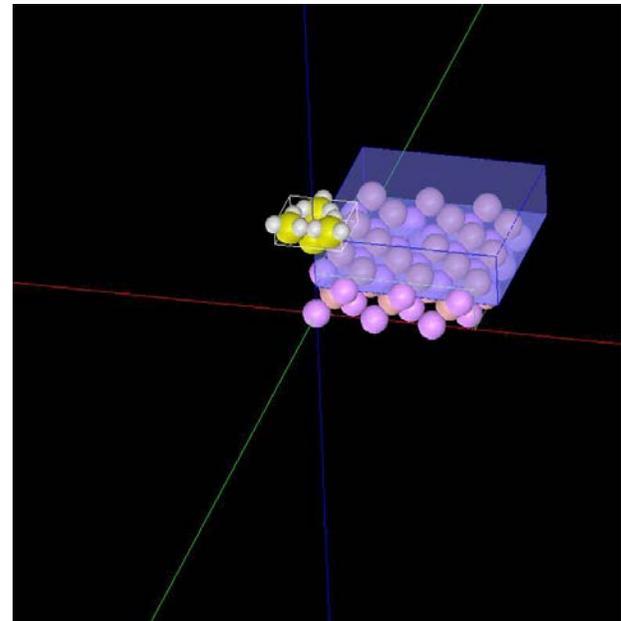
TOP



SIDE

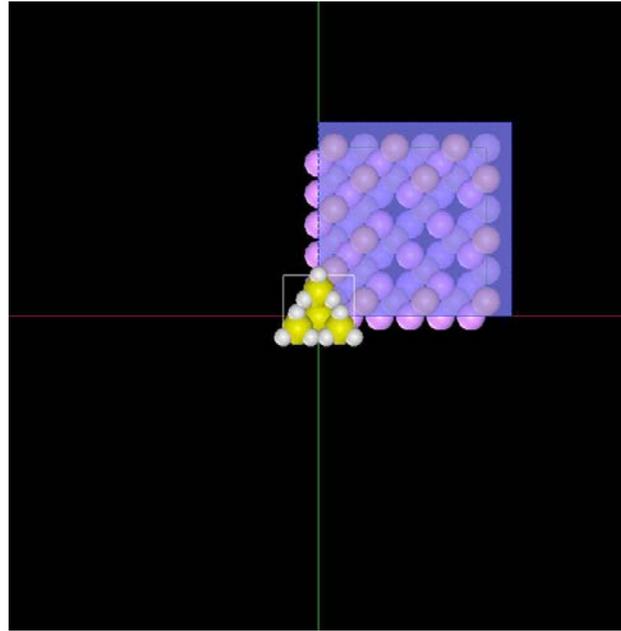


FRONT

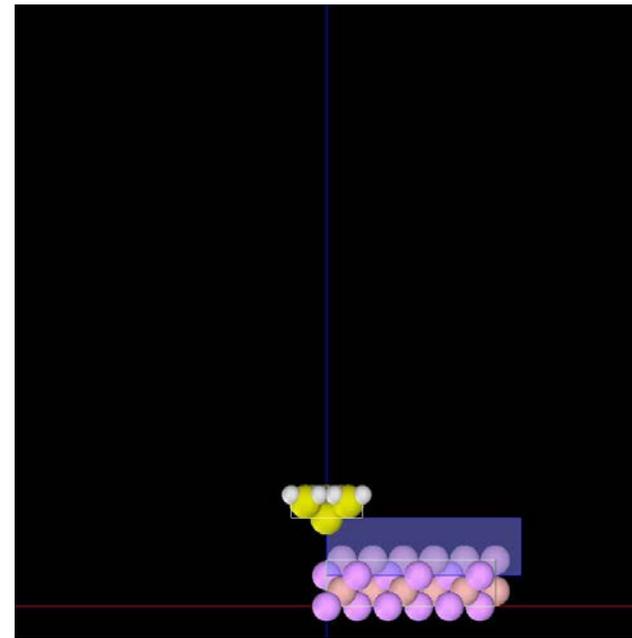


俯瞰

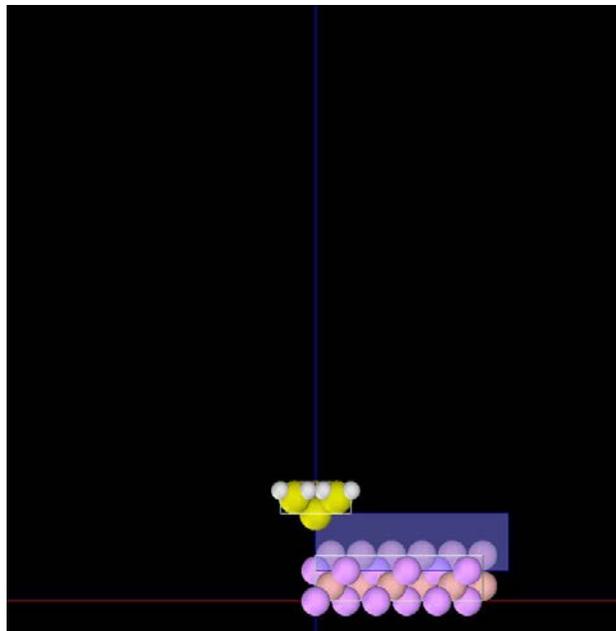
以下に、Ga 原子 5 つ除去した紹介事例のシミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



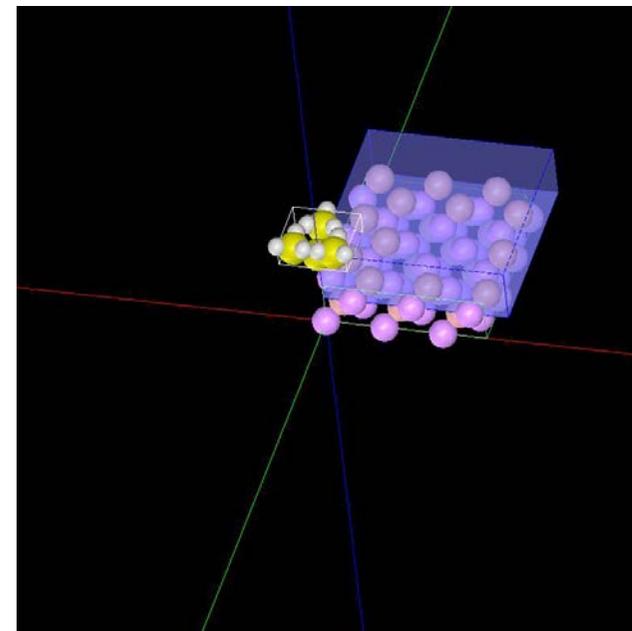
TOP



SIDE

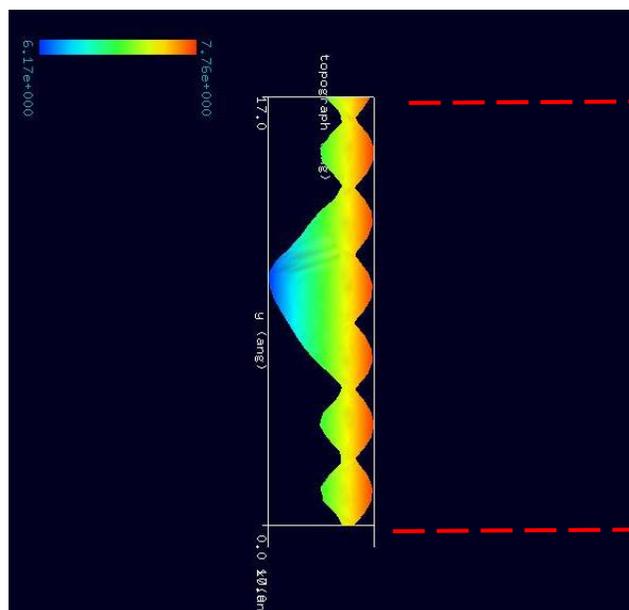


FRONT

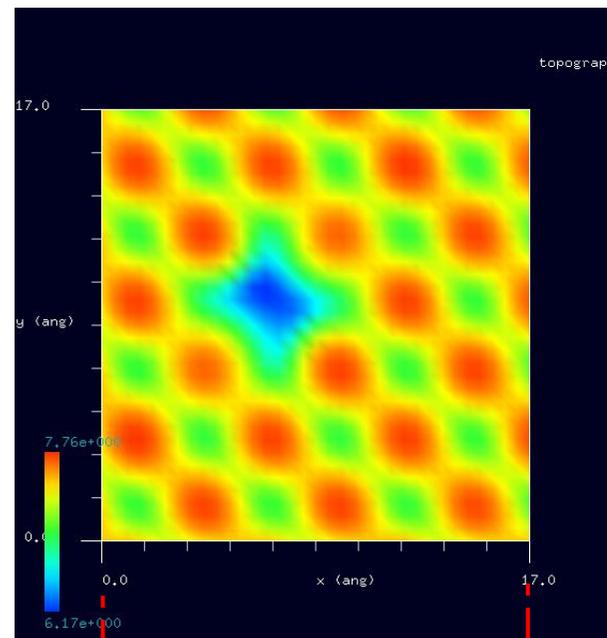


俯瞰

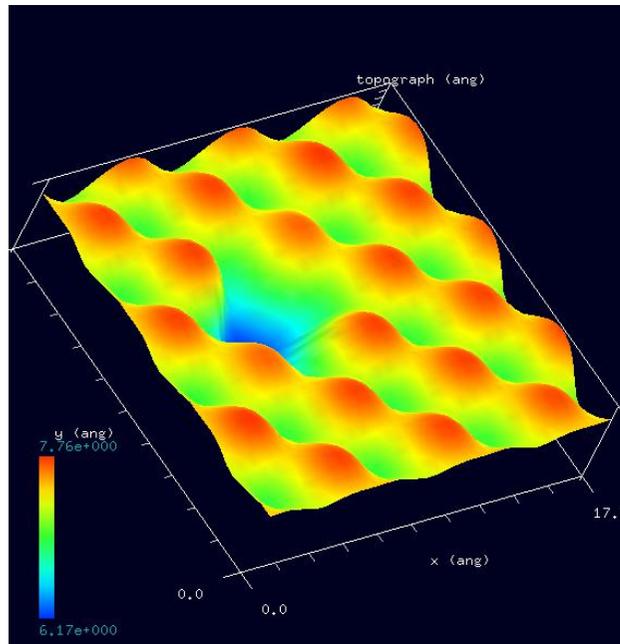
以下に、Ga原子1つ除去した紹介事例のシミュレーション結果を3D-ViewのRainbow色表示で、TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



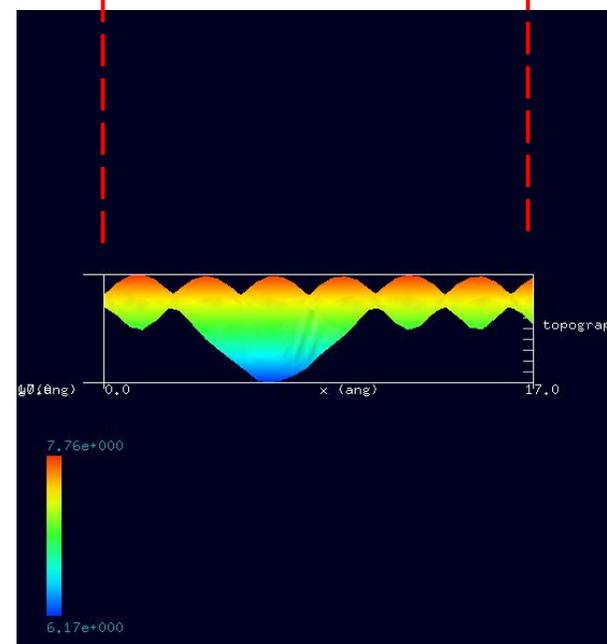
SIDE



TOP



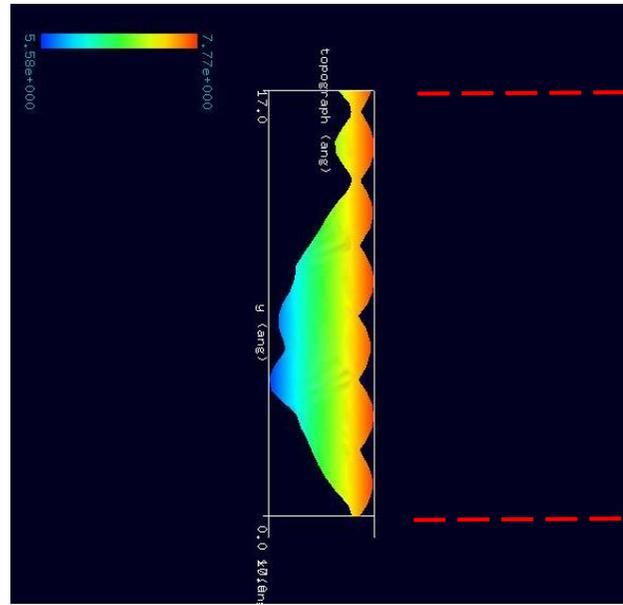
俯瞰



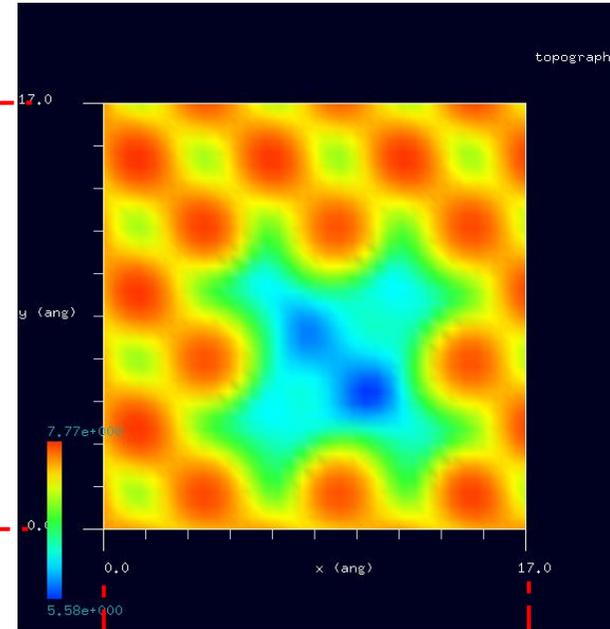
FRONT

以下に、Ga原子5つ除去した紹介事例のシミュレーション結果を3D-ViewのRainbow色表示で、TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

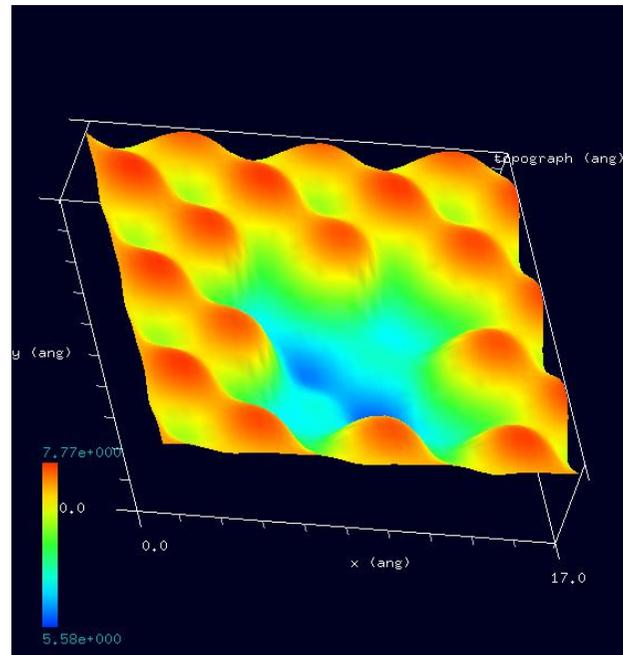
電流一定モードでは、STM  
トポグラフィー像として、  
試料表面の高さ方向の変化が  
計算できることが、本事例で  
示されている。



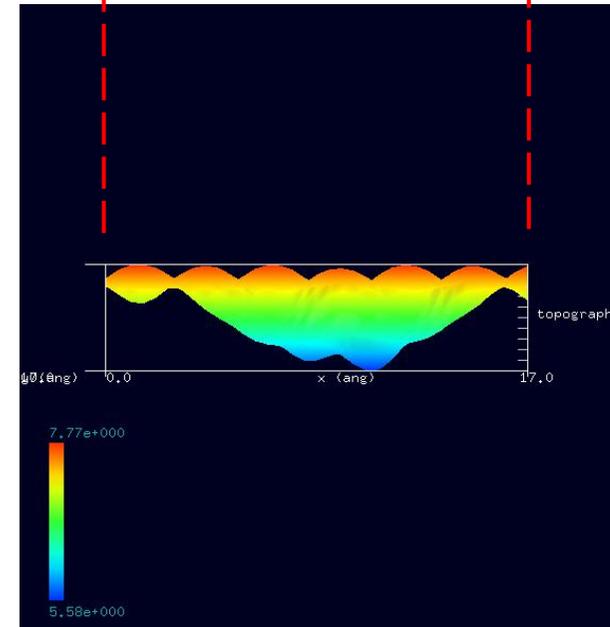
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

(STM 電流一定モード計算の場合)ScanArea-h タグにより、フィードバックループにおける探針の初期位置から見た最も低い位置を指定する必要があります。電流のセットポイントに対応する探針高さを見いだせない場合、トポグラフィ像に於いて探針の高さは(探針の初期高さ) - (“ScanArea-h”) となります。

## 8・DFTB\_KPFFM、DFTB\_AFM

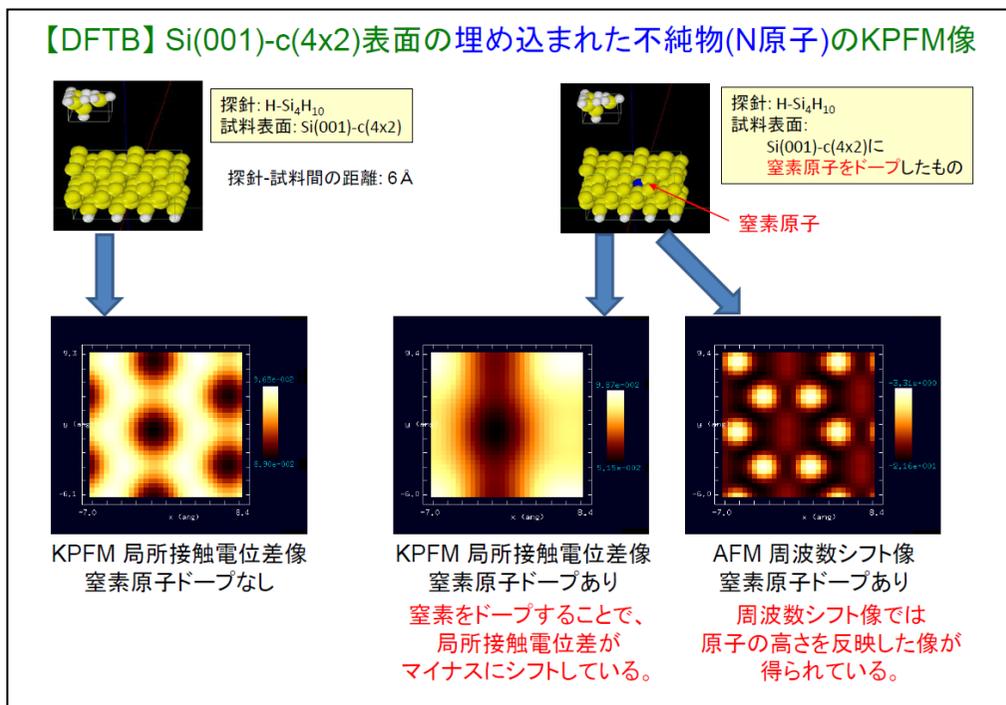
### ●DFTB KPFFM：シリコン結晶表面のKPFFM像観察シミュレーション 計算事例⑩、⑪

計算モード識別番号：[DFTB\_KPFFM\_Inorganic\_006]、[DFTB\_KPFFM\_Inorganic\_007]

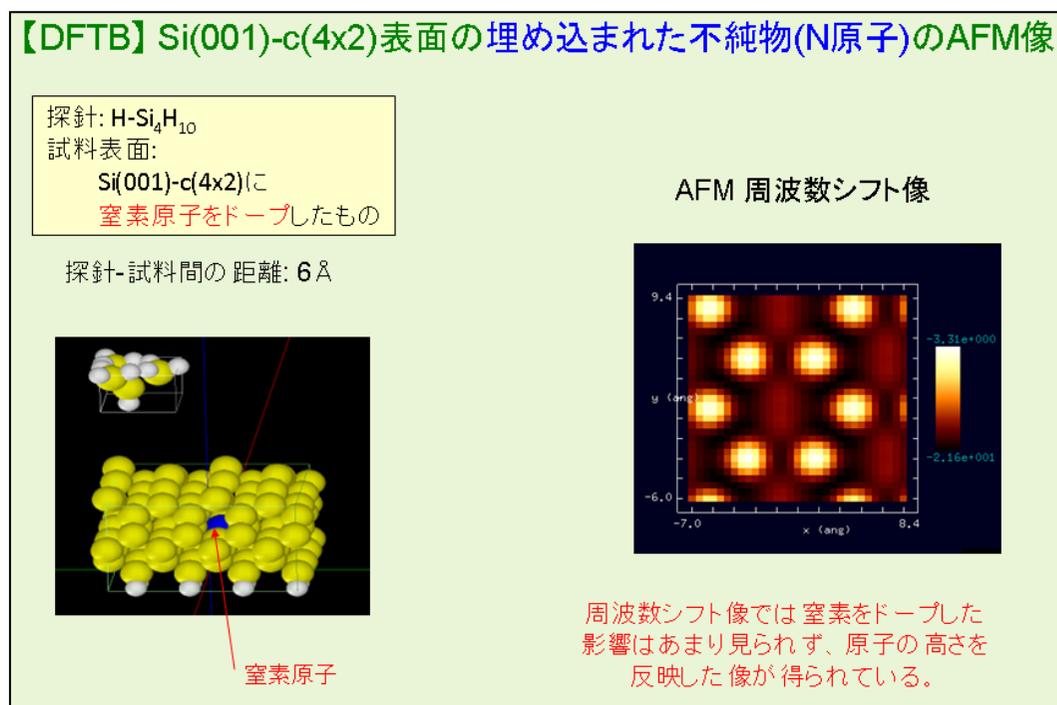
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/DFTB/KPFFM/DFTB\\_KPFFM.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/KPFFM/DFTB_KPFFM.php)

分類：DFTB KPFFM、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。



事例紹介ページ 1



事例紹介ページ 2

本事例は、Si(001)-c(4×2)面を、DFTB KPFFM 局所接触電位差(LCPD)像およびDFTB AFM 周波数シフト像でシミュレートします。

本計算事例の KPFFM 入力条件について記載します。スキャンエリアの設定は有効です。周期境界を考慮します。探針は登録済みデータ「tip\_hsi4.xyz」を用います。探針試料間距離は 6.0 Å としています。スキャンエリアは「W15 Å × D15 Å × H0.0 Å」と設定されています。

ケルビン法はマクロな観測方法ですが、このケルビン法を AFM に応用して探針・試料間のマイクロ局所電位差を計測できるようにしたものが KPFFM です。KPFFM では探針を試料表面上走査させた時の局所接触電位差(LCPD, Local Contact Potential Difference)を探針位置に対する像として出力します。

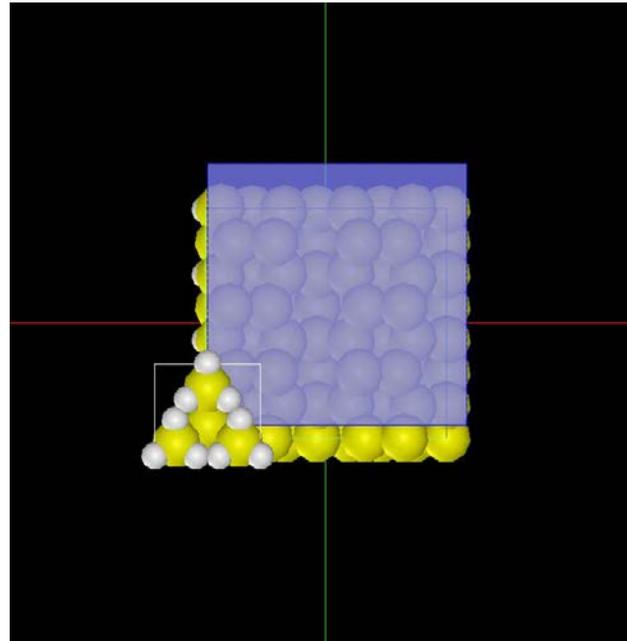
以下に、窒素原子ドープなし紹介事例のシミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

Project Editor

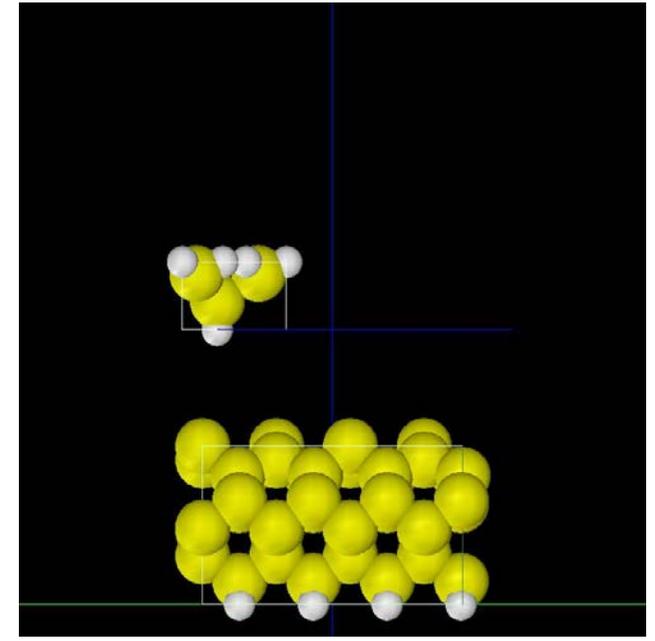
Setup DFTB

type	value
Component	
Tip	tip_hsi4.xyz
Position	
x	-7
y	-6
z	14.16468
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	624
d	5.41
h	3.50466
ScanArea	
w	15.35014
d	15.35014
h	0
DistanceFromSamples	6
Geometry	
radius	0.0
angle	0.0
Sample	si1001.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

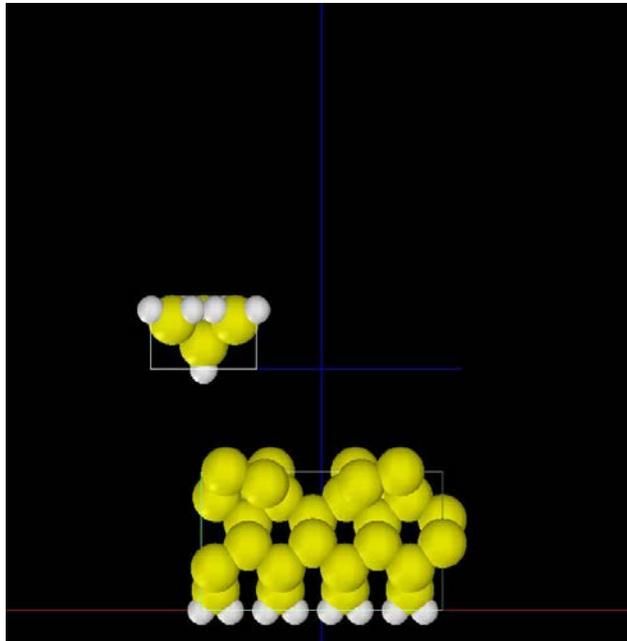
事例モデルのセットアップ条件



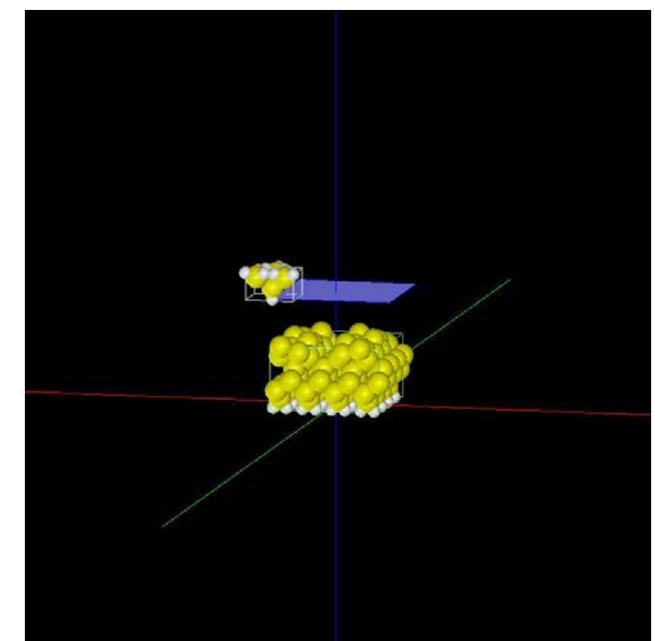
TOP



SIDE



FRONT



俯瞰

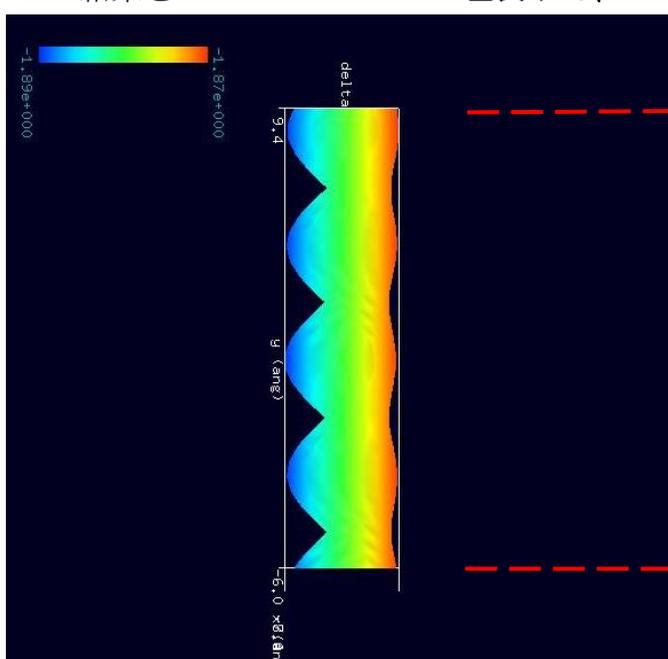
以下に、窒素原子ドープなし紹介事例のシミュレーション結果を3D-ViewのRainbow色表示で、TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

Project Editor

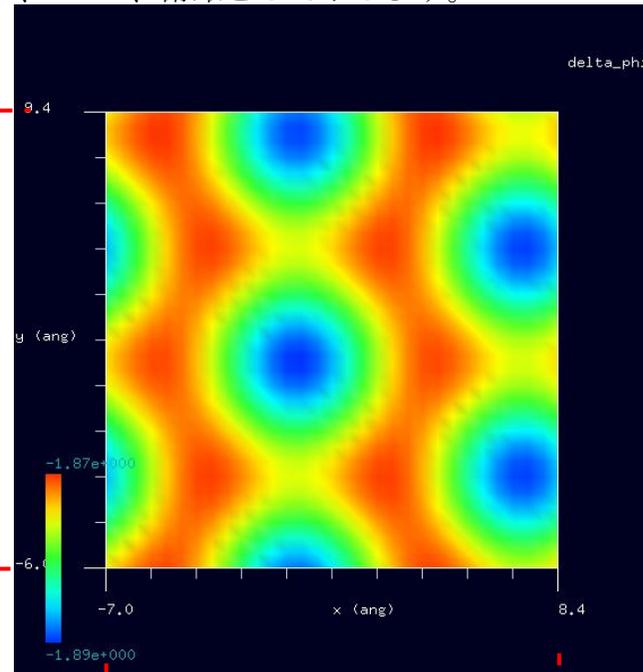
Setup **DFTB**

property	value
mode	<b>DFTB KPFM</b>
title	Si(001)-c(2x4)
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	100
k_cantilever	40.00000
resonant_freq	170.00000
Ndiv	
X	30
Y	30
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1.0
TolEnergy	0.001
displacement	0.10000
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	300
TolEnergy	0.1
output_eigenvalue	off
Fwdw	
tip_shape	conical
height_of_highest_adsorbed_molecule	0.00000
Hamaker_const	2.20000
apex_angle	160.0000
tip_height	1000.00
radius_of_tip_apex	1.00000
tip_bias_voltage	
minimum	-1.00000
maximum	1
Ndiv	0
Ndiv_kpoints	4
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	15.35014
Y	0.00000
Z	0.00000
b	
X	0.00000
Y	15.35014
Z	0.00000
c	
X	0.00000
Y	0.00000
Z	100.00000
OpenMP_threads	4
Output	

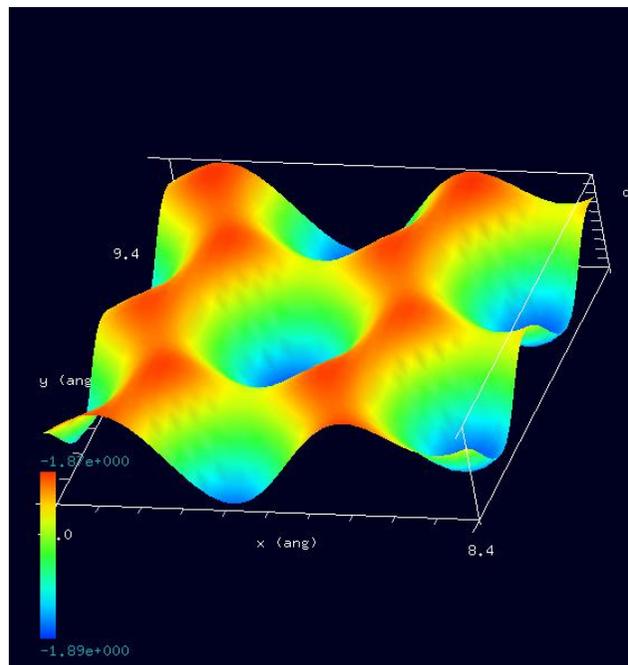
設定条件



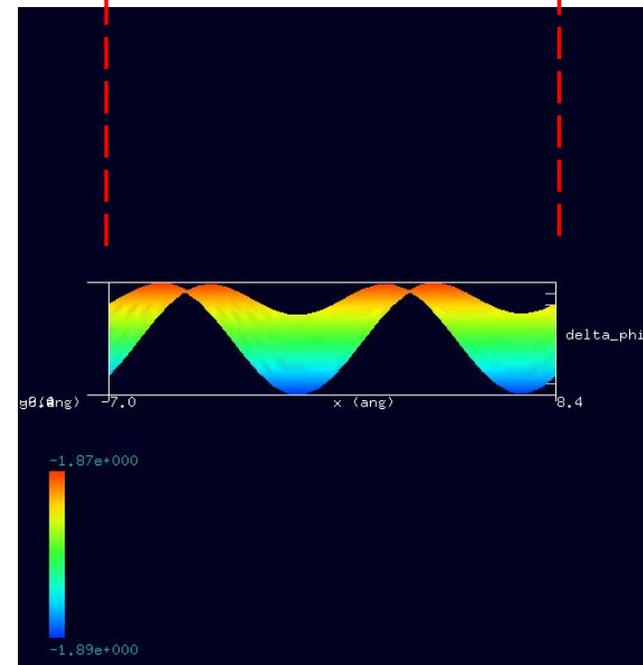
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

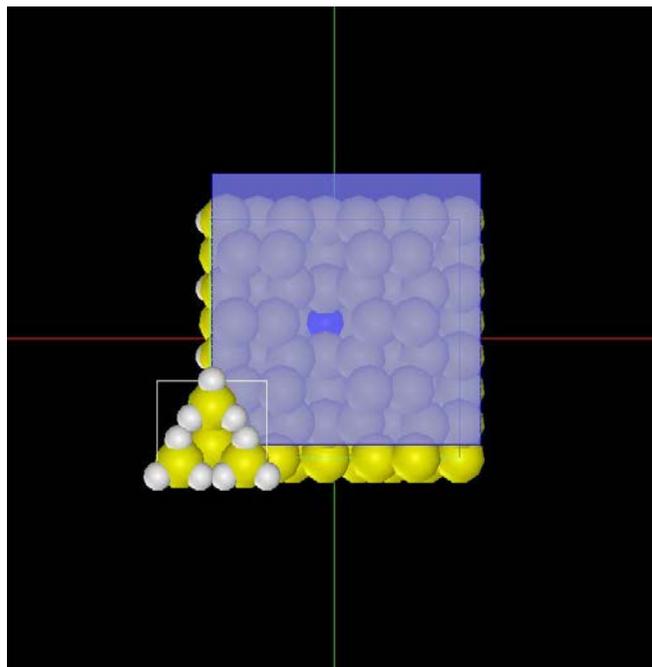
以下に、窒素原子ドープあり紹介事例のシミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

Project Editor

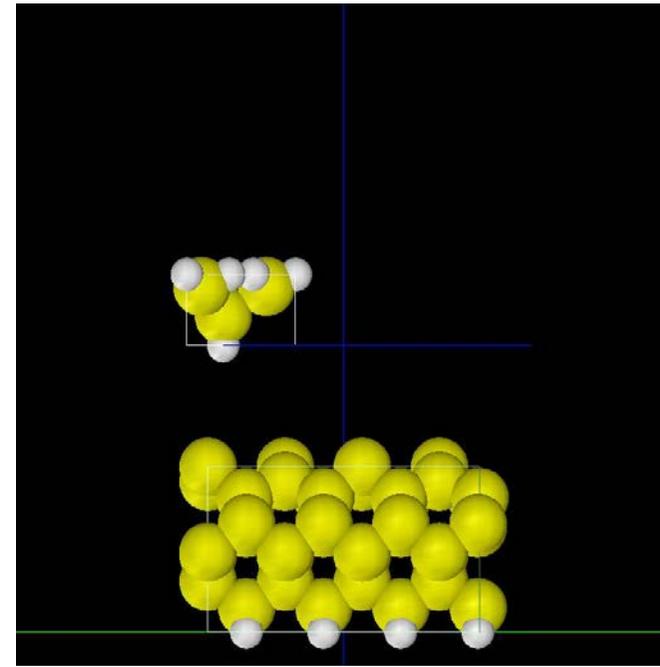
Setup DFTB

type	value
Component	
Tip	tip_hsi4.xyz
Position	
x	-7
y	-6
z	14.16468
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	624
d	5.41
h	3.50466
ScanArea	
w	15.35014
d	15.35014
h	0
DistanceFromSamples	6
Geometry	
radius	0.0
angle	0.0
Sample	surf_si001n.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

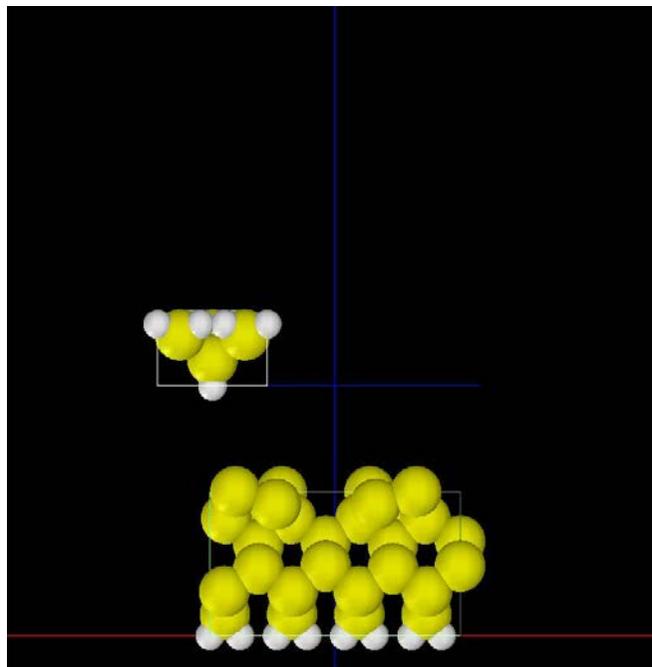
事例モデルのセットアップ条件



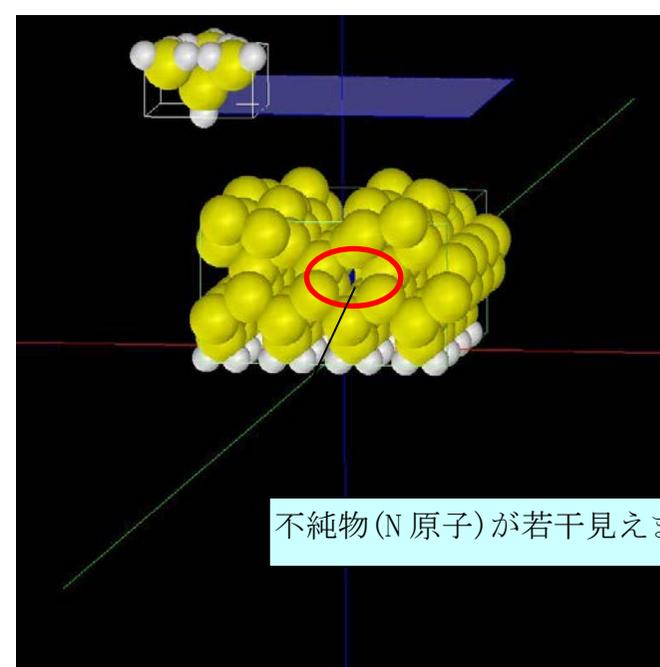
TOP



SIDE



FRONT



不純物 (N 原子) が若干見えます。

俯瞰

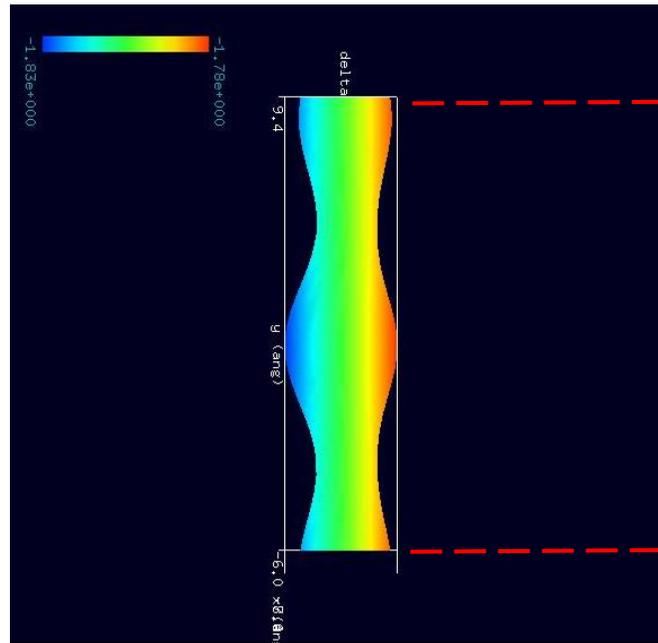
以下に、窒素原子ドープあり紹介事例のシミュレーション結果を3D-ViewのRainbow色表示で、TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

**Project Editor**

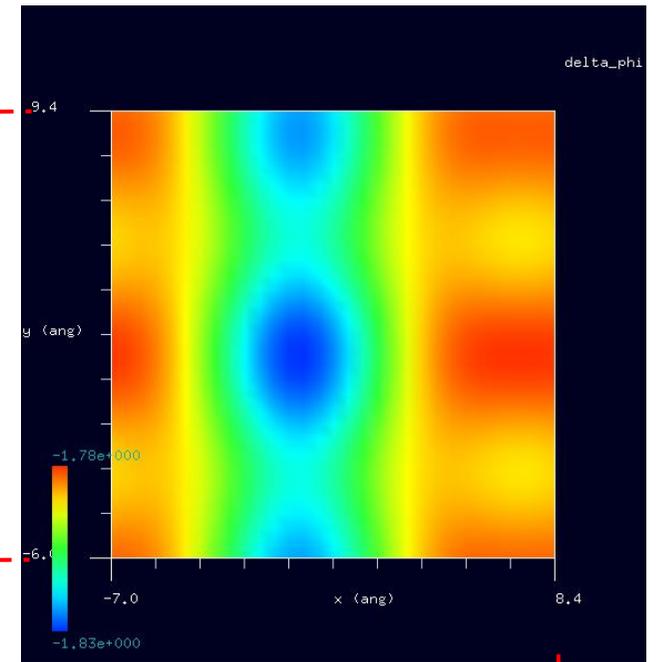
Setup **DFTB**

property	value
mode	DFTB KPFFM
title	Si(001)-c(2x4)
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	100.00000
k_cantilever	40.00000
resonant_freq	170.00000
Ndiv	
X	30
Y	30
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1.0
TolEnergy	0.001
displacement	0.10000
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	300
TolEnergy	0.1
output_eigenvalue	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	-1.00000
maximum	1
Ndiv	0
Ndiv_kpoints	4
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	15.35014
Y	0.00000
Z	0.00000
b	
X	0.00000
Y	15.35014
Z	0.00000
c	
X	0.00000
Y	0.00000
Z	100.00000
OpenMP_threads	4
Output	

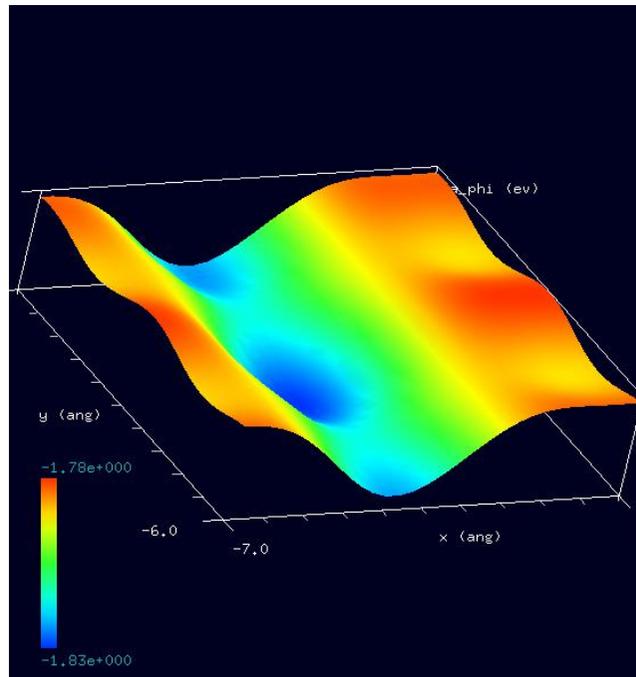
設定条件



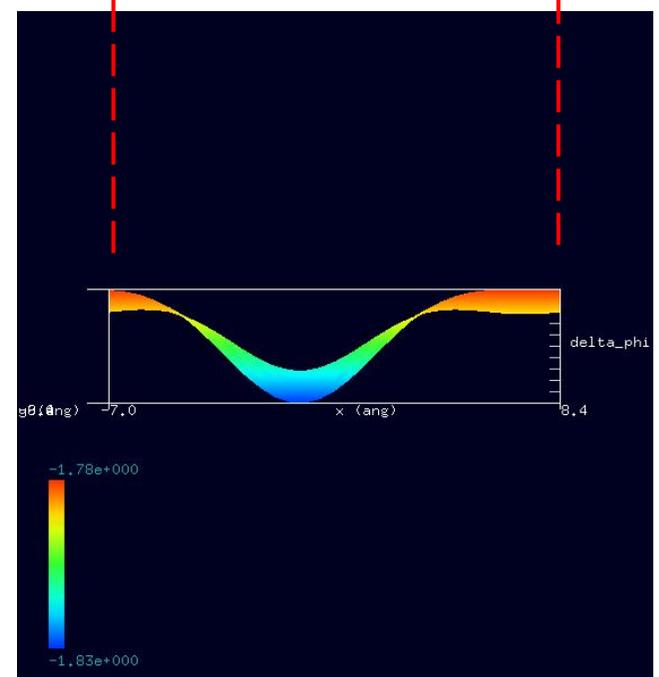
SIDE



TOP

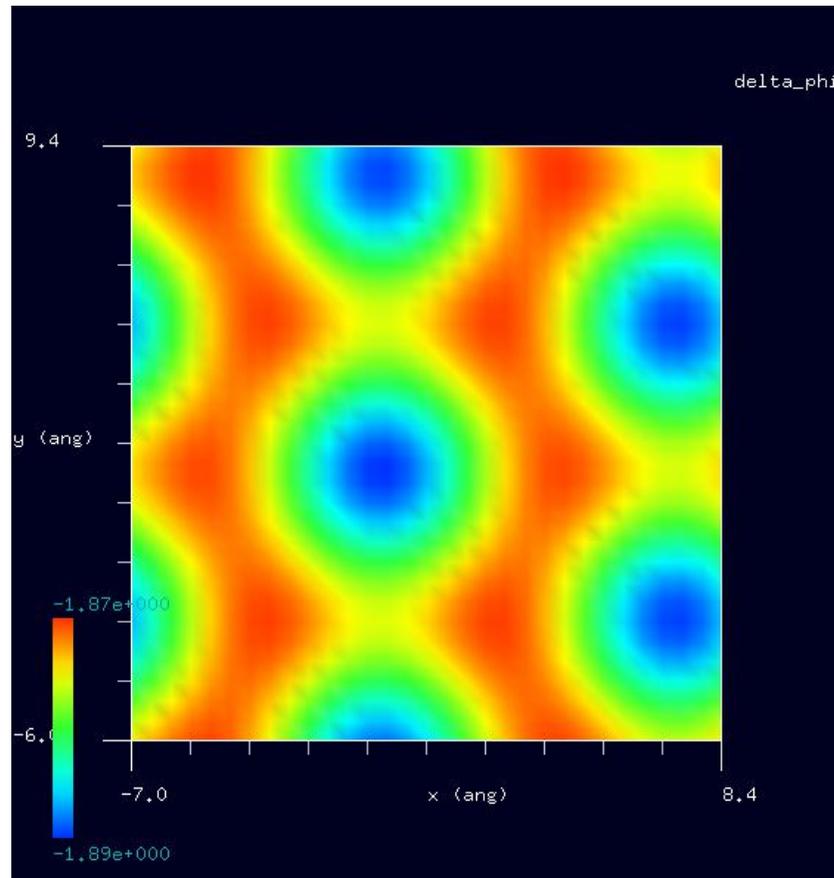


俯瞰

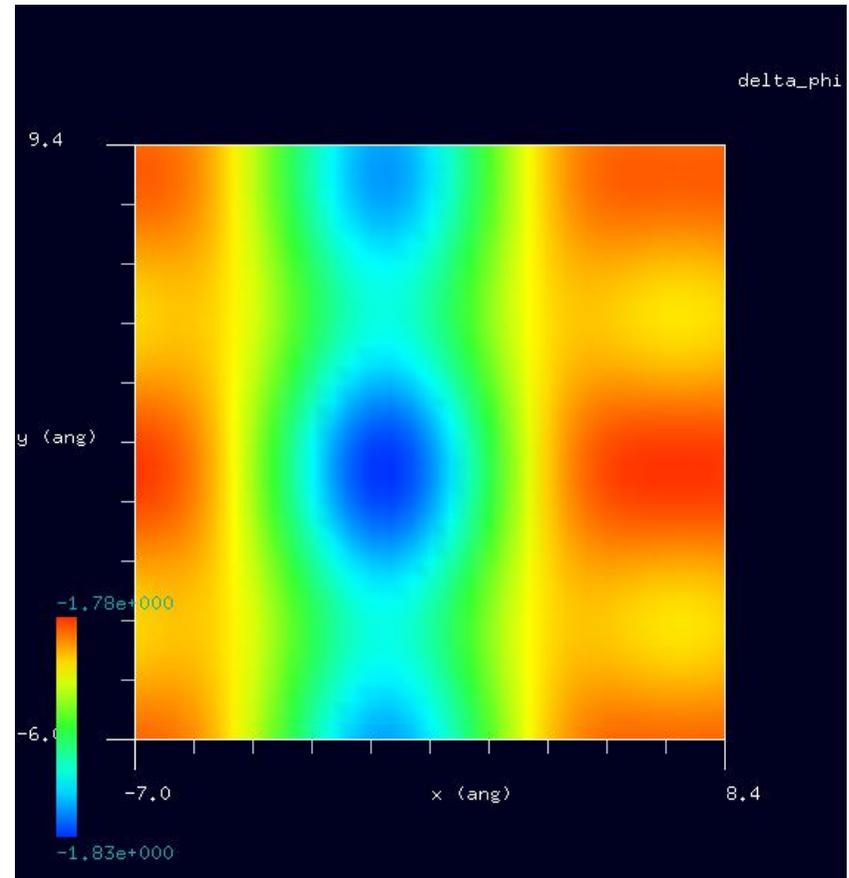


FRONT

探針試料間距離は  $6.0 \text{ \AA}$  とした場合のLCPD像シミュレーション結果  
窒素原子ドープなし



窒素原子ドープあり



“Si” に、価数の多い元素 “N” をドープする事により、電子の移動が容易となり、N型半導体となります。

## ●DFTB AFM : Si(001)-c(4x2) 表面の埋め込まれた不純物(N原子)のAFM像の解析モデル 計算事例⑫

計算モード識別番号 : [DFTB\_FreqShift\_Inorganic\_001]

ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/DFTB/FreqShift/DFTB\\_FreqShift.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/FreqShift/DFTB_FreqShift.php)

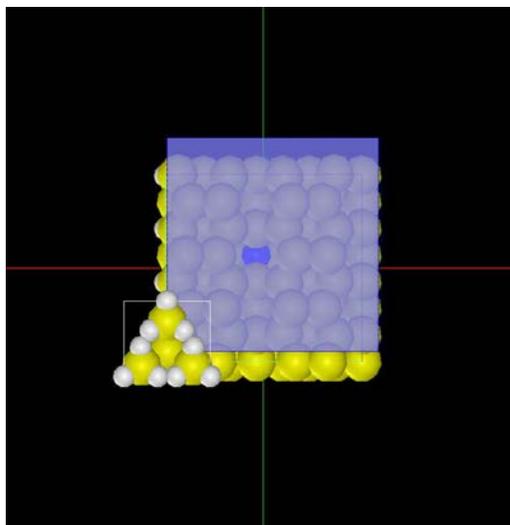
「DFTB\_AFM : 原子間力顕微鏡 (周波数シフト) 像計算」では、試料探針間距離は、約「 $6.0 \text{ \AA}$ 」、スキャンエリアは「 $W15 \text{ \AA} \times D15 \text{ \AA} \times H3.5 \text{ \AA}$ 」と設定されています。探針振動の共鳴周波数を「 $170 \text{ KHz}$ 」と設定しています。

DFTB\_AFM では、DFTB 法に基づいた化学的な力とファンデルワールス力の和によって、試料表面から探針への力を算出します。

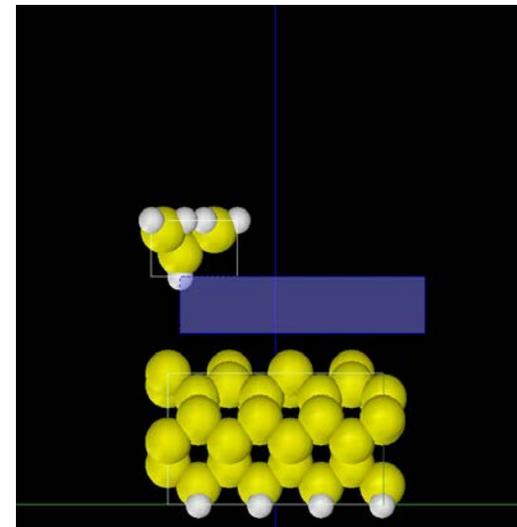
以下に、紹介事例のセットアップ条件 (下左図) とシミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

type	value
Component	
Tip	tip_hsi4.xyz
Position	
x	-7
y	-6
z	14.16468
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	6.24
d	5.41
h	3.50466
ScanArea	
w	15.35014
d	15.35014
h	3.5
DistanceFromSamples	6
Geometry	
radius	0.0
angle	0.0
Sample	surf_si001n.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

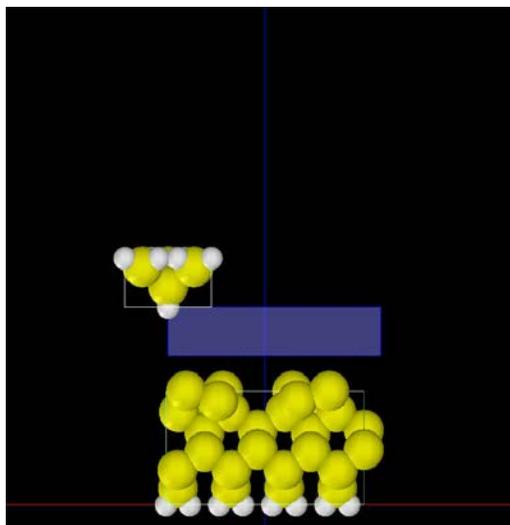
事例モデルのセットアップ条件



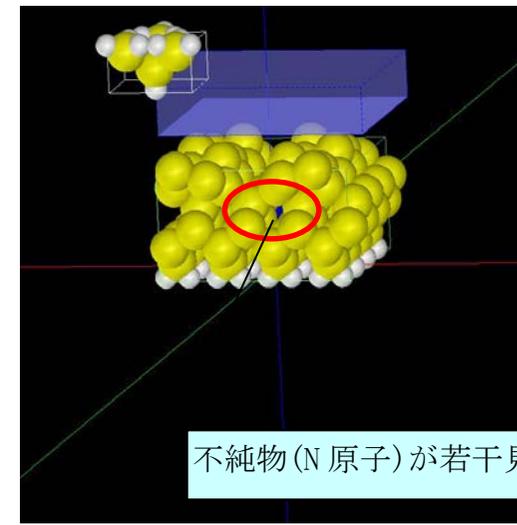
TOP



SIDE



FRONT



俯瞰

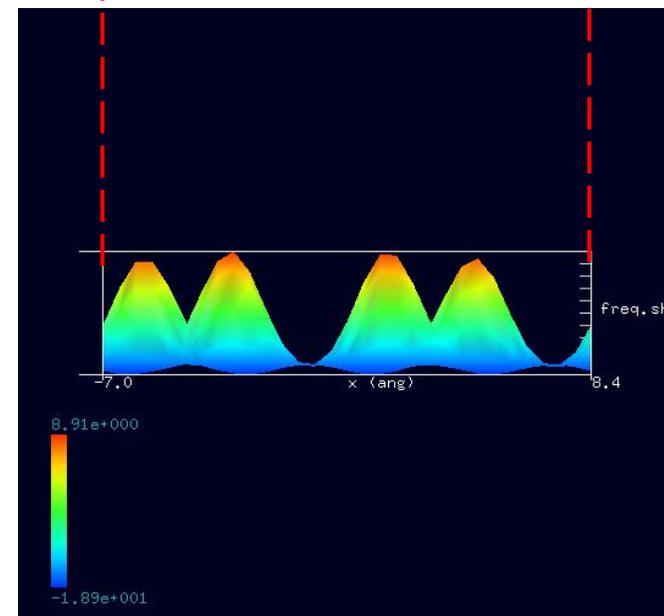
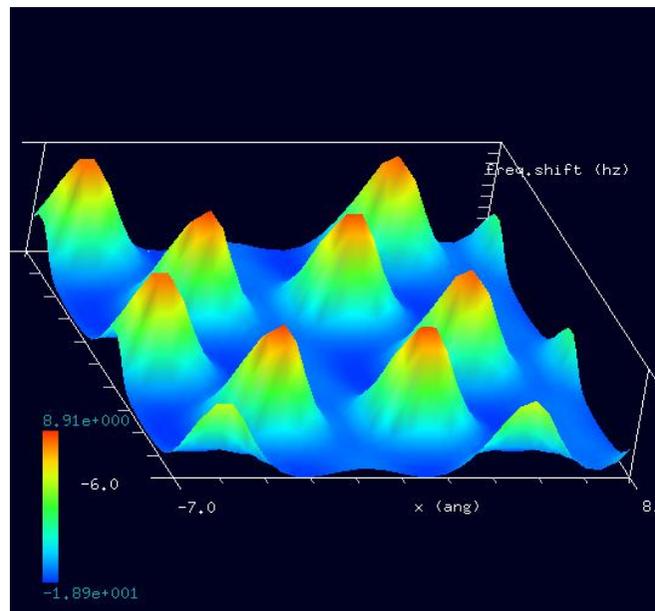
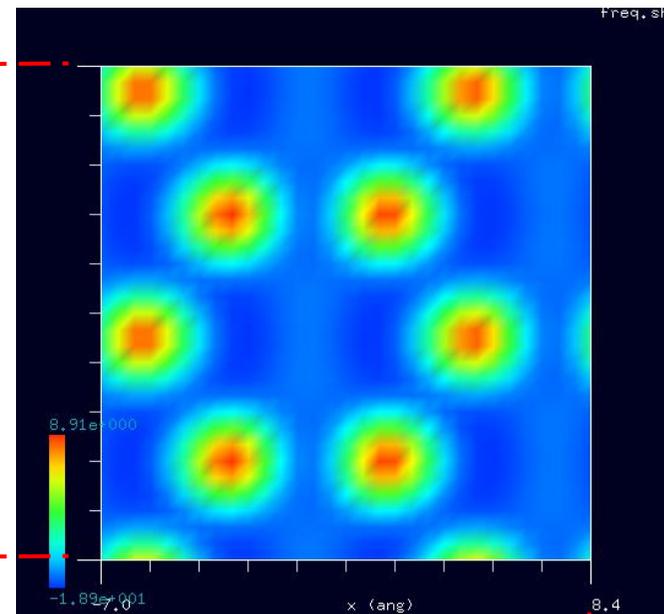
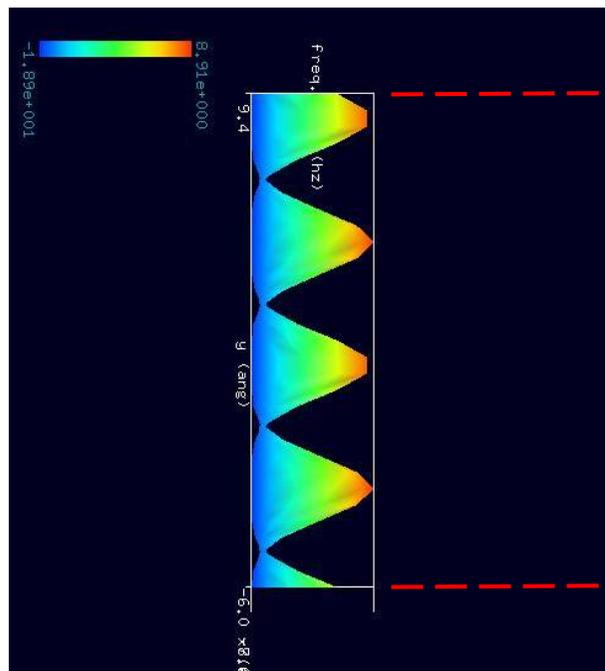
Si (001)-c(4x2) 表面の埋め込まれた不純物(N原子)のシミュレーション結果を3D-ViewのRainbow色表示で、TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

Project Editor

Setup **DFTB**

property	value
mode	<b>DFTB AFM</b>
title	Si(001)-c(2x4)
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	100.00000
k_cantilever	40.00000
resonant_freq	<b>170.00000</b>
Ndiv	
X	30
Y	30
Z	8
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1.0
TolEnergy	0.001
displacement	0.10000
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	300
TolEnergy	0.1
output_eigenvalue	off
Fydw	
tip_shape	conical
height_of_highest_adsorbed_molecule	0.00000
Hamaker_const	0.22000
apex_angle	120.000
tip_height	1000.00
radius_of_tip_apex	1.00000
tip_bias_voltage	
minimum	-1.00000
maximum	1
Ndiv	0
Ndiv_kpoints	4
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	15.35014
Y	0.00000
Z	0.00000
b	
X	0.00000
Y	15.35014
Z	0.00000
c	
X	0.00000
Y	0.00000
Z	100.00000
OpenMP_threads	4
Output	

設定条件



DFTB\_AFМ (周波数シフト) 像シミュレートでは、ドーピングされた窒素原子の影響は出ていません。

- ・ (AFM 計算の場合) ScanArea-h タグの値は、DFTB タブの tip-amplitude タグの 2 倍より小さくなければなりません。また、周波数シフト値を計算する場合には 0 より大きい値に設定する必要があります。(SPMシミュレータ・リファレンスマニュアルP32)
- ・ tip\_bias\_voltage (TIPバイアス電圧) : 探針の電位に関するパラメータ。DFTB\_STM/DFTB\_STS のときにのみ有効。(試料の電位は 0 と仮定しています)

#### ・ n型半導体について

n型半導体 (negative semiconductor) とは、電圧がかけられると伝導電子や自由電子、ほとんど自由な電子とも呼ばれる電子の移動によって電荷が運ばれる半導体である。価数の多い元素をドーピングすることで作られる。例えばシリコンやゲルマニウム (4 価の元素) の結晶に、ヒ素などの 5 価の原子を混ぜることでn型となる。

不純物の導入によって生成されたキャリアは、導入された不純物原子から受けるクーロン引力により束縛される。ただしその束縛は弱く、ゲルマニウムのn型半導体では、電子束縛エネルギー = -0.01 eV、ボーア半径 = 4.2 nm 程度であるため、結晶内の原子間距離 0.25 nm、室温での熱励起は約 0.025 eV 程度では単独原子の束縛を離れて結晶の原子同士間を自由に動き、これらの原子は互いの電子を共有する状態となる。バンド構造で言えば通常、ドーパント原子は禁制帯の上端付近にドナー準位を形成し、そこから熱エネルギーにて伝導帯へ励起される。フェルミ準位は禁制帯中のドナー準位に近い位置になる。(wikipedia)

#### ・ p型半導体について

p 型半導体 (positive semiconductor) とは、電圧がかけられると正孔の移動によって電荷が運ばれる半導体である。価数の少ない元素をドーピングすることで作られる。例えばシリコン (4 価) の結晶にホウ素などの 3 価の原子を混ぜることでp型となる。

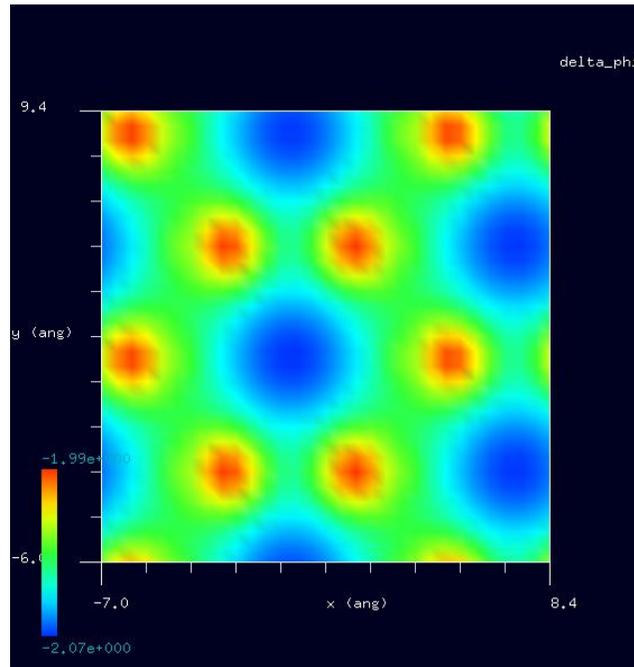
電子が伝導帯側に遷移して価電子帯側の電子が不足することで生じる電子軌道上の空隙が正孔となる。結晶の原子同士間の自由電子が隣の正孔に移動することで正孔の位置は自由に移動でき、電圧に応じて電子とは逆方向へ流れる。移動度は電子に比べて劣る。バンド構造で言えば、ドーパント原子は禁制帯の下端付近にアクセプター準位と呼ばれる空の準位を形成し、アクセプター準位へ価電子帯から熱エネルギーによって価電子が励起されることで、価電子帯に正孔が生じる。フェルミ準位は禁制帯中のアクセプター準位に近い位置になる。(wikipedia)

#### ・ KPFM 像シミュレータについて

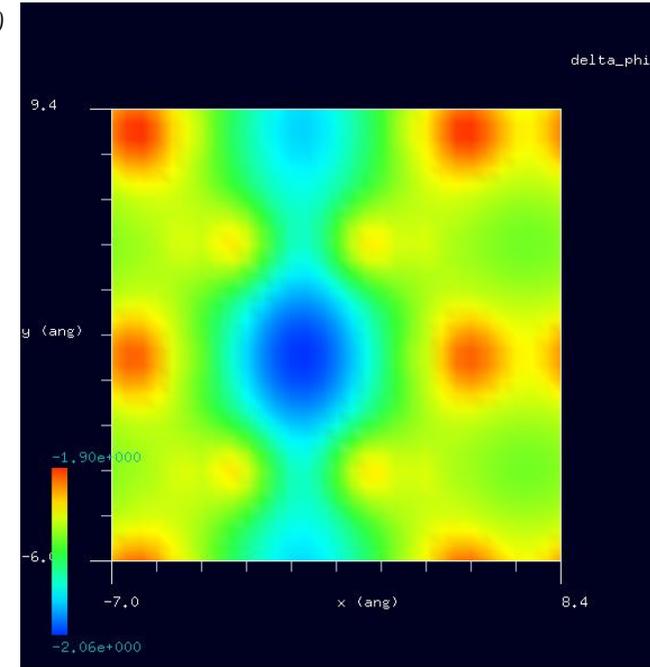
KPFM 像シミュレータは、探針と試料の間に実際に電圧を印加したうえで、電子状態を計算します。そして、探針に働く力の大きさが最小になるときの電圧を、各探針位置でプロットすることで、KPFM 像 (局所接触電位差像) をシミュレートします。

本計算において、探針と試料の間へ印加する電圧を表現するために、分割実空間 (PRDF) 法を用いました。この方法では、探針と試料を含む全体の空間を、探針だけの空間と、試料だけの空間に分割します。そして、両者の間に軌道の混成がないとすることで、それぞれの空間にフェルミレベルを定義して、電圧を表現するという手法です。ただし、フェルミレベルを入力値として与えることができないため、印加電圧の初動を与えるために、初期状態として電荷を探針試料間で分極させます。この状態で、探針空間および試料空間で個別に電子状態を求めます。ただし、クーロン相互作用 (DFTB 法第二項) は、全空間で解きます。探針試料間の移動電荷から印加電圧の大きさを逆算し、局所接触電位差を求めます。この方法では、KPFM で観測される原子解像度が再現されません。研究の結果、KPFM における原子解像度は、探針試料間の軌道混成によって生じることが判りました。そのため、探針試料間の軌道混成を摂動項として取り入れることで、原子解像度を再現することに成功しました。(SPMシミュレータ・チュートリアルデザイン)

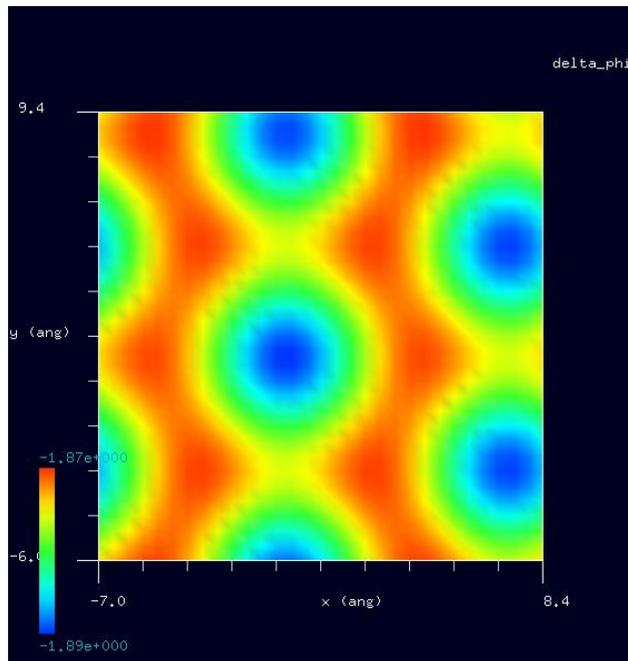
探針試料間距離は  $4.0 \text{ \AA}$  とした場合のLCPD像シミュレーション結果  
窒素原子ドーピングなし



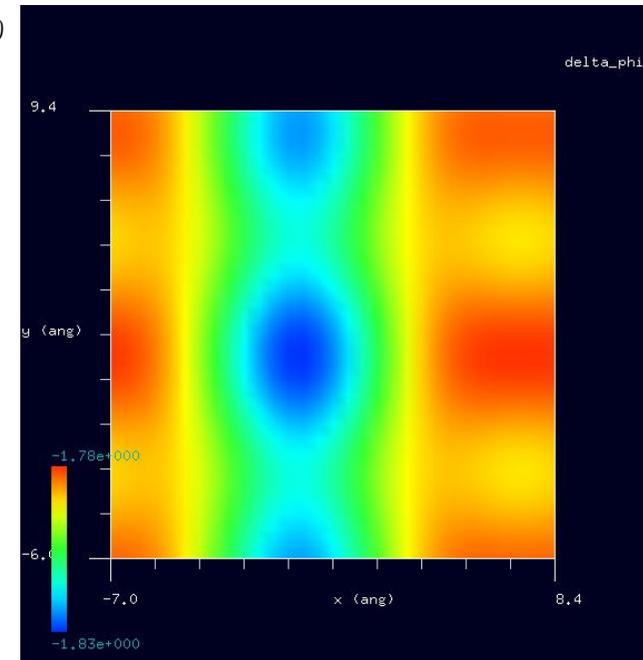
窒素原子ドーピングあり



探針試料間距離は  $6.0 \text{ \AA}$  とした場合のLCPD像シミュレーション結果  
窒素原子ドーピングなし



窒素原子ドーピングあり



探針試料間距離は  $6.0 \text{ \AA}$  の場合の方が、探針試料間距離は  $4.0 \text{ \AA}$  の場合よりも、窒素原子ドーピングの効果がよく再現できています。

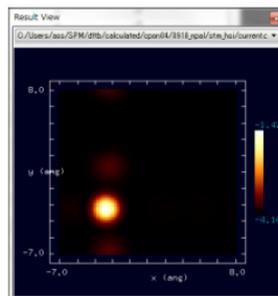
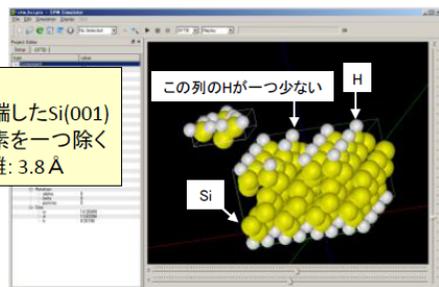
## 9・DFTB STM( ConstantHeight) 、DFTB STS

事例紹介ページを下左図に示します。

### 【DFTB】トンネル電流像、トンネル電流スペクトルの計算例

#### DFTB トンネル電流像(STM)のシミュレーション

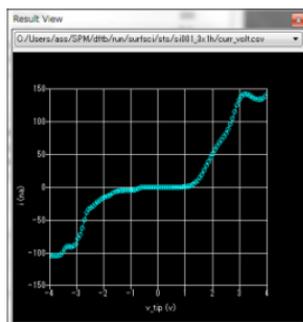
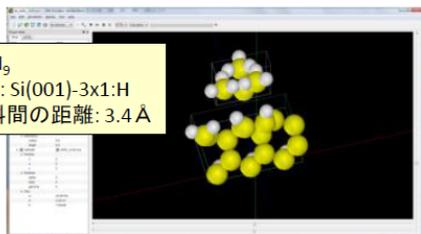
探針:  $\text{Si}_4\text{H}_9$   
試料表面: 水素終端したSi(001)  
表面から水素を一つ除く  
探針-試料間の距離: 3.8 Å



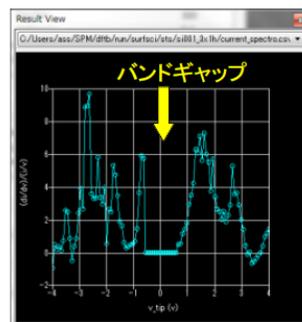
水素が抜けている位置にダングリングボンドがあることにより、電流値が大きくなること分かる。

#### DFTB トンネル電流スペクトル(STS)の計算

探針:  $\text{Si}_4\text{H}_9$   
試料表面: Si(001)-3x1:H  
探針-試料間の距離: 3.4 Å



I-V特性曲線



(dI/dV)/(I/V) vs. V

横軸は試料に対する探針の電圧

事例紹介ページ

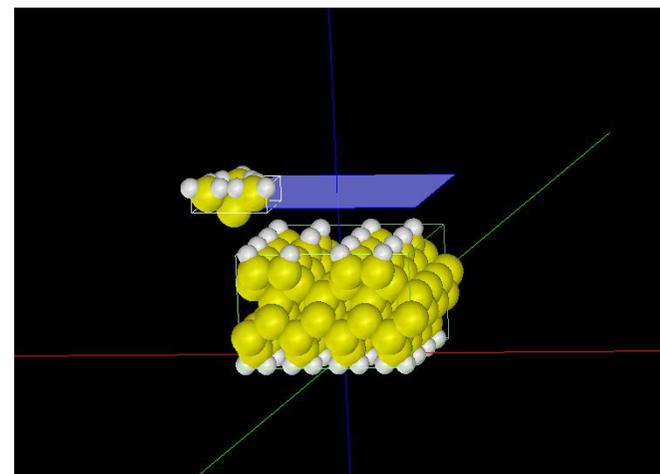
第1事例は、水素終端されたシリコン(001)表面から水素を一つ取り除いたものを、高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。

SPMチュートリアル (P114) に 「STM 計算の例」として「トンネル電流像の計算」についての詳しい説明があります。

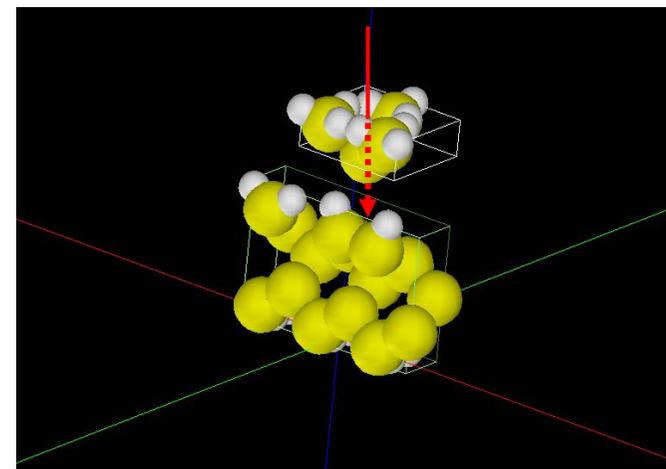
第2事例は、シリコン(001)-3x1:H 表面での、トンネル電流分光の計算例です。

SPMチュートリアル (P118) に 「STS 計算の例」として「トンネル電流分光の計算」についての詳しい説明があります。

探針はシリコン探針の先端をモデル化したもので、作成済みデータ「tip\_si4.xyz」を用います。



トンネル電流像解析モデルとスキャンエリア



走査トンネル分光 解析モデルと探針ポイント位置

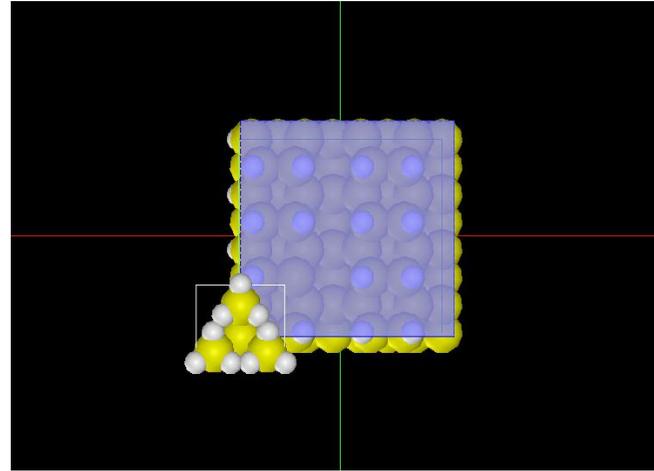
●DFTB\_STM( ConstantHeight ) : シリコン(001)表面から水素を一つ取り除いたもののトンネル電流像シミュレーション 計算事例⑬

計算モード識別番号 : [DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_021]

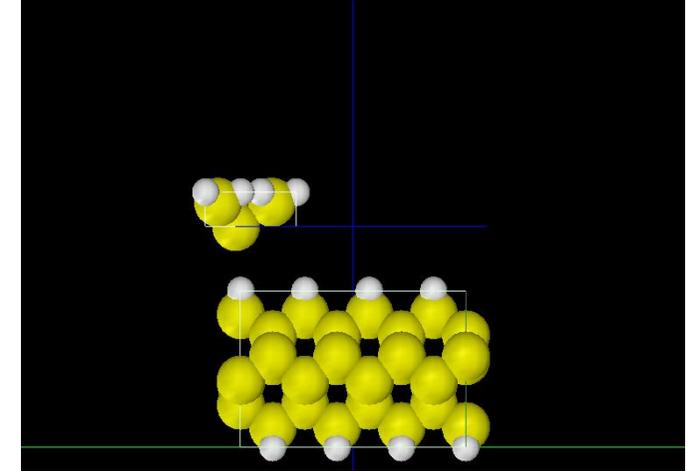
ソルバ・モード・計算例アドレス [project\\_file\\_for\\_beginners\\_version\\_DFTB\\_ConstHeightSTM\\_Inorganic\\_021\\_execute](#)

分類 : DFTB\_STM、Å オーダー、無機半導体

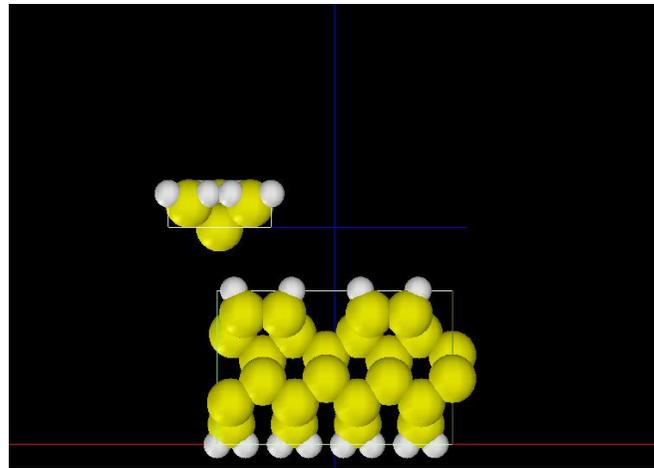
type	value
Component	
Tip	tip_si4.xyz
Position	
x	-7
y	-7
z	13.05748
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	6.24
d	5.41
h	2.02466
ScanArea	
w	15
d	15
h	0
DistanceFromSamples	3.8
Geometry	
radius	0.0
angle	0.0
Sample	hsi001-dfh.xyz
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	14.28498
d	13.43396
h	9.25748



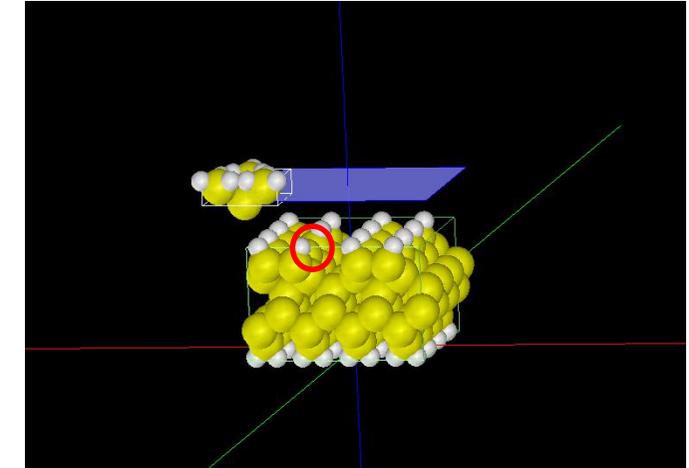
TOP



SIDE



FRONT



俯瞰

事例モデルのセットアップ条件

スキャンエリアは、「 $W15\text{\AA} \times D15\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」になっています。探針試料間距離を「 $3.8\text{\AA}$ 」とします。並列化処理設定を行っています（4スレッドに対応）。TIPバイアス電圧  $-1.0V$  での計算を行わせました。

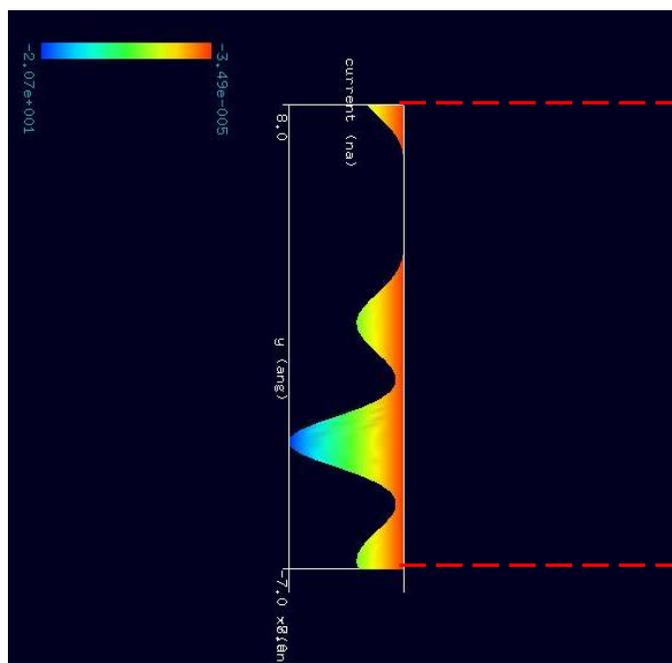
# トンネル電流像のシミュレーション結果

Project Editor

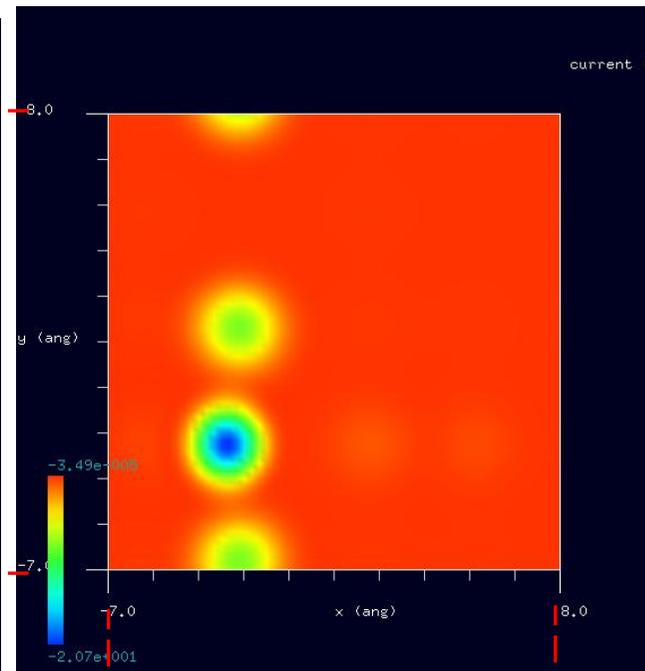
Setup **DFTB**

property	value
mode	<b>DFTB_STM</b>
title	n-Si(100) with defect
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	100.00000
k_cantilever	40.00000
resonant_freq	170.00000
Ndiv	
X	60
Y	60
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1.0
TolEnergy	0.001
displacement	0.10000
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	30
TolEnergy	10.
output_eigenvalue	off
Fvbw	
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	<b>-1</b>
maximum	<b>-1</b>
Ndiv	8
Ndiv_kpoints	4
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	15.35014
Y	0.00000
Z	0.00000
b	
X	0.00000
Y	15.35014
Z	0.00000
c	
X	0.00000
Y	0.00000
Z	100.00000
solver_type	CPU
OpenMP_threads	4
Output	

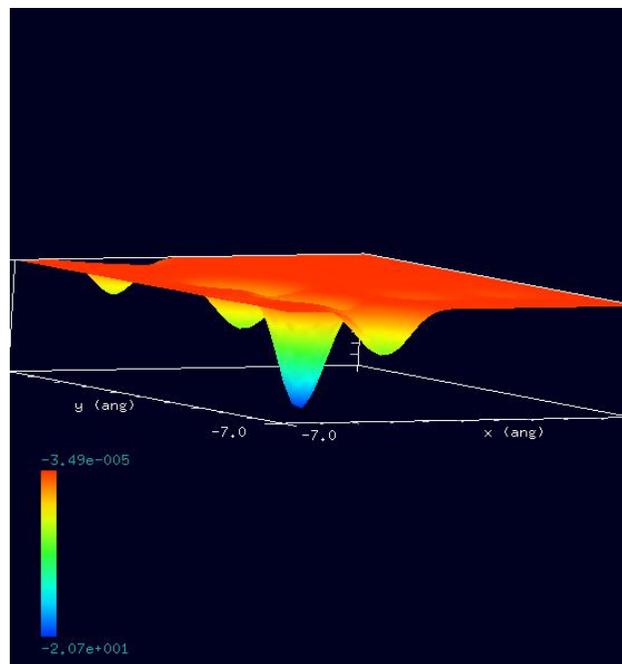
設定条件



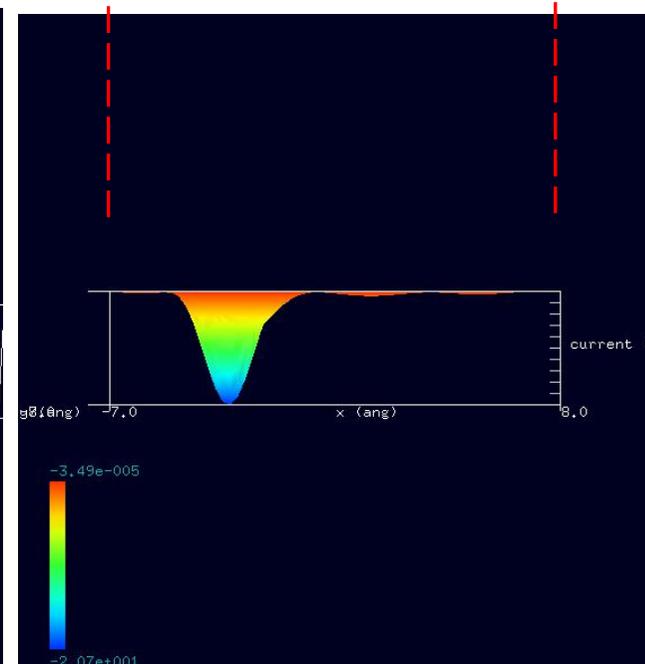
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

ダンダリングボンドのある位置において、トンネル電流値がマイナス方向に極めて大きくなっている事がわかります。

ダングリングボンド (英: dangling bond) は、原子における未結合手のこと。半導体結晶に於いては、結晶の表面や格子欠陥付近では、原子は共有結合の相手を失って、結合に関与しない電子(不対電子)で占められた結合手が存在する。この手をダングリングボンドと呼ぶ。

ダングリングボンド上の電子は不安定なため化学的に活性となり、特に結晶表面の物性には重要な役割を果たす。

シリコン (ダイヤモンド構造) の(001)理想表面の表面第一層のシリコン原子は2個のダングリングボンドを持ち、そのままでは非常に不安定になっている。実際のシリコン表面はダングリングボンドを減らすためにダイマー化した構造を形成する (→表面再構成)。このようにダングリングボンドが存在する表面では、ダングリングボンドを減らす (なくす) ために再構成 (リコンストラクション) などの構造の変化が起こる。(wikipedia)

## ●DFTB STS : シリコン(001)-3x1:H 表面でのトンネル電流分光シミュレーション 計算事例⑭

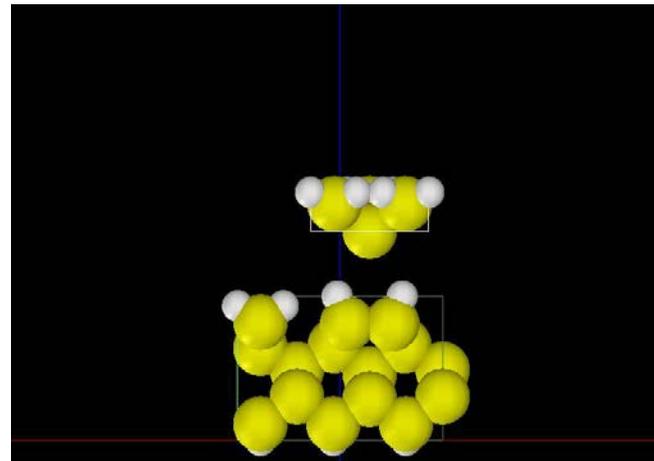
計算モード識別番号 : [DFTB\_STS\_Inorganic\_005]

ソルバ・モード・計算例アドレス [project\\_file\\_for\\_beginners\\_version\\_DFTB\\_STS\\_Inorganic\\_005\\_execute](#)

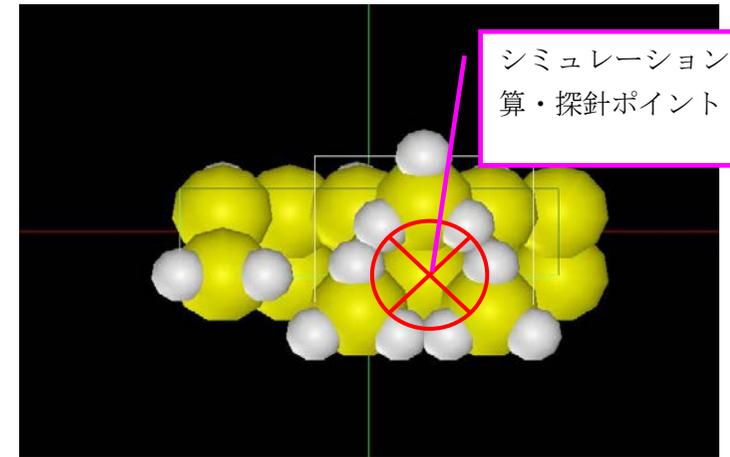
分類 : DFTB STS、Å オーダー、無機半導体

type	value
Component	
Tip	tip_si4.xyz
Position	
x	1.564105
y	-1.31559
z	10.93618
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	6.24
d	5.41
h	2.02466
ScanArea	
w	0
d	0
h	0
DistanceFromSamples	3.4
Geometry	
radius	0.0
angle	0.0
Sample	si001_3x1h.xyz
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	10.80738
d	2.63117
h	7.53618

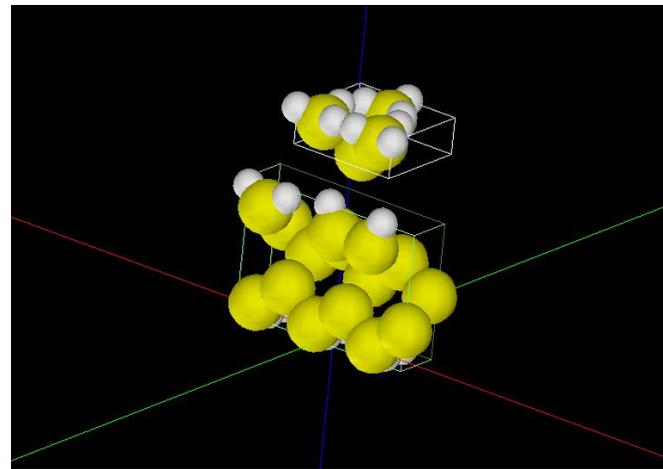
事例モデルのセットアップ条件



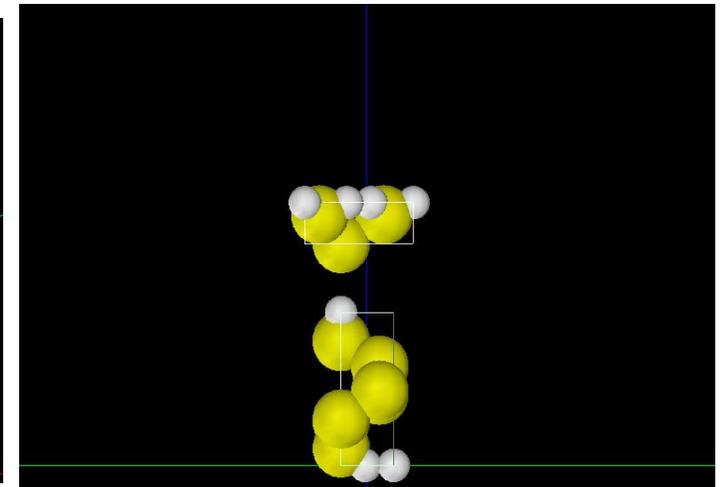
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

スキャンは行わず、1座標での位置固定計算となります。

探針試料間距離を「**3.4 Å**」とします。並列化処理設定を行っています(4スレッドに対応)。TIPバイアス電圧を-4.0Vより4.0Vまで変化させます。バンドギャップが**±0.7V**で、挟まれた部分辺りに発生していることがわかります。

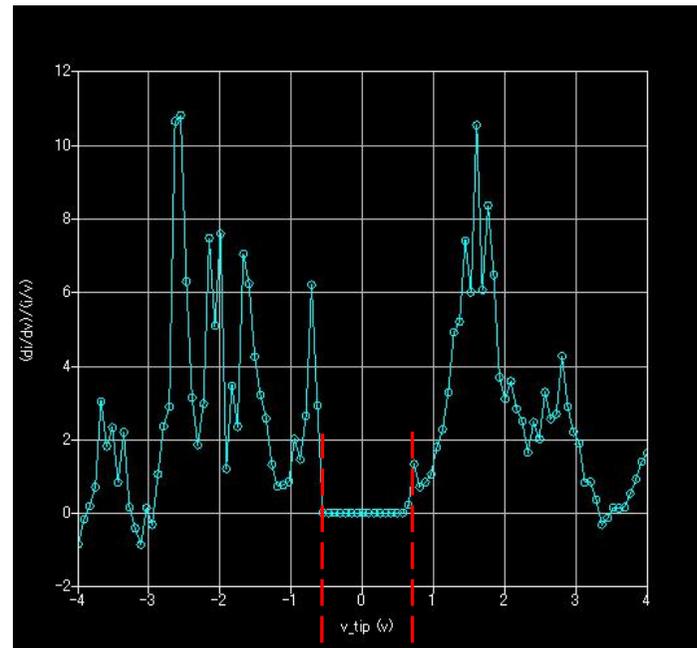
Project Editor

Setup **DFTB**

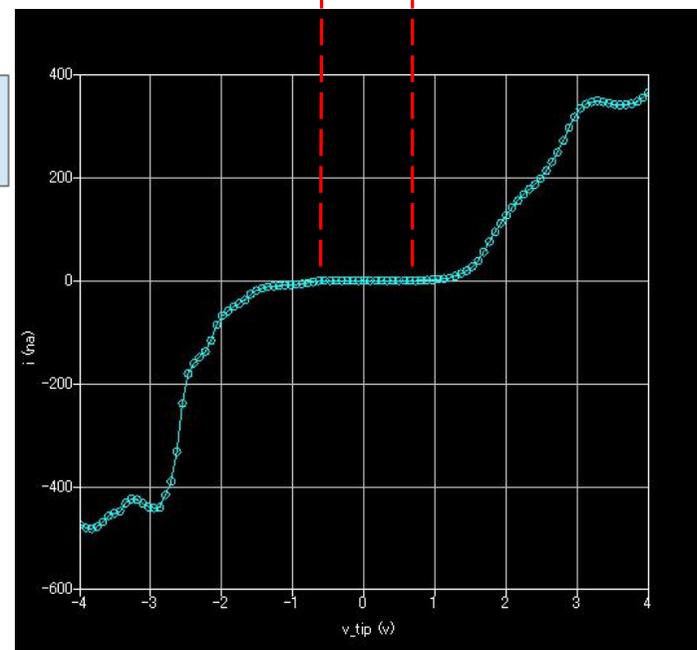
property	value
mode	<b>DFTB_STS</b>
title	Si0017-3x1h
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	100.00000
k_cantilever	40.00000
resonant_freq	170.00000
Ndiv	
X	0
Y	0
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1.0
TolEnergy	0.001
displacement	0.10000
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	300
TolEnergy	0.1
output_eigenvalue	on
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	<b>-4</b>
maximum	<b>4</b>
Ndiv	100
Ndiv_kpoints	4
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	11.51877
Y	0
Z	0
b	
X	0
Y	3.83959
Z	0
c	
X	0
Y	0
Z	100
Output	

設定条件

バイアス電圧を-4Vより+4Vまで変化させます。



スペクトル曲線



電圧・電流曲線

# 10・DFTB\_STM (ConstantHeight) 計算事例15

## ●DFTB STM (ConstantHeight) : ZnSe の立方晶の(001)面の constant height STM 像シミュレーション

計算モード識別番号 : [DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_025 a]、[DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_025 b]

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](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php)

分類 : DFTB STM (ConstantHeight)、Å オーダー、無機半導体

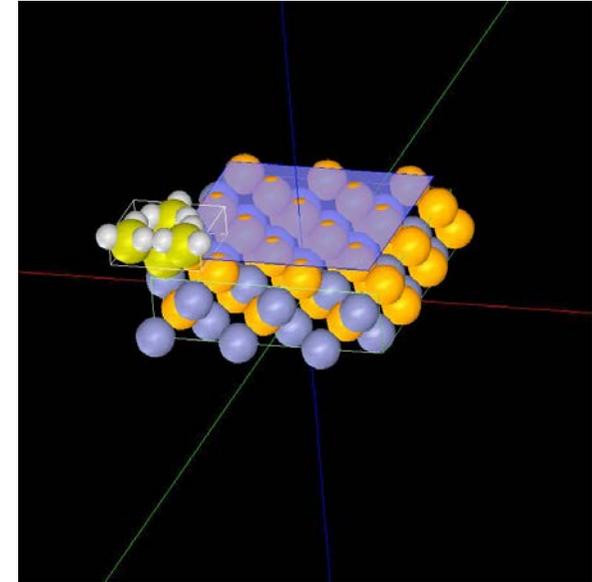
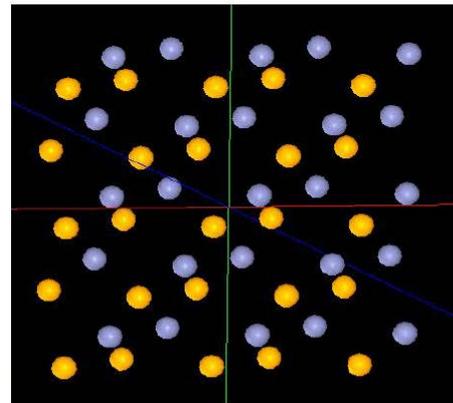
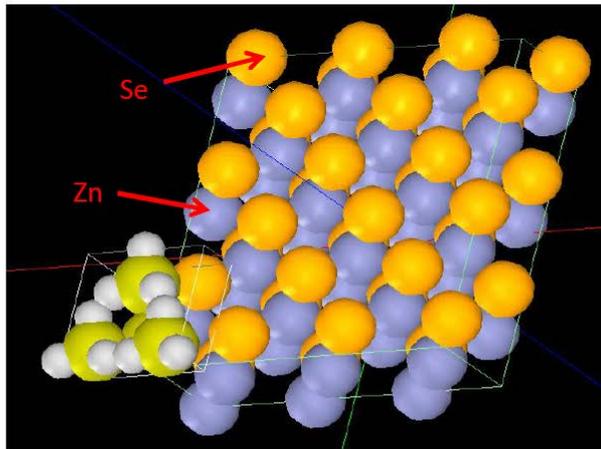
事例紹介ページを下左図に示します。

### 半導体関連トピック

DFTB ZnSe (セレン化亜鉛 発光ダイオード、半導体レーザーの材料)

水素終端されたシリコン探針を使用  
立方晶(空間群番号:216)  
(001)面

空間群番号や格子定数が分かっている  
ば、SetModelでどのような結晶形状データも作成可能です

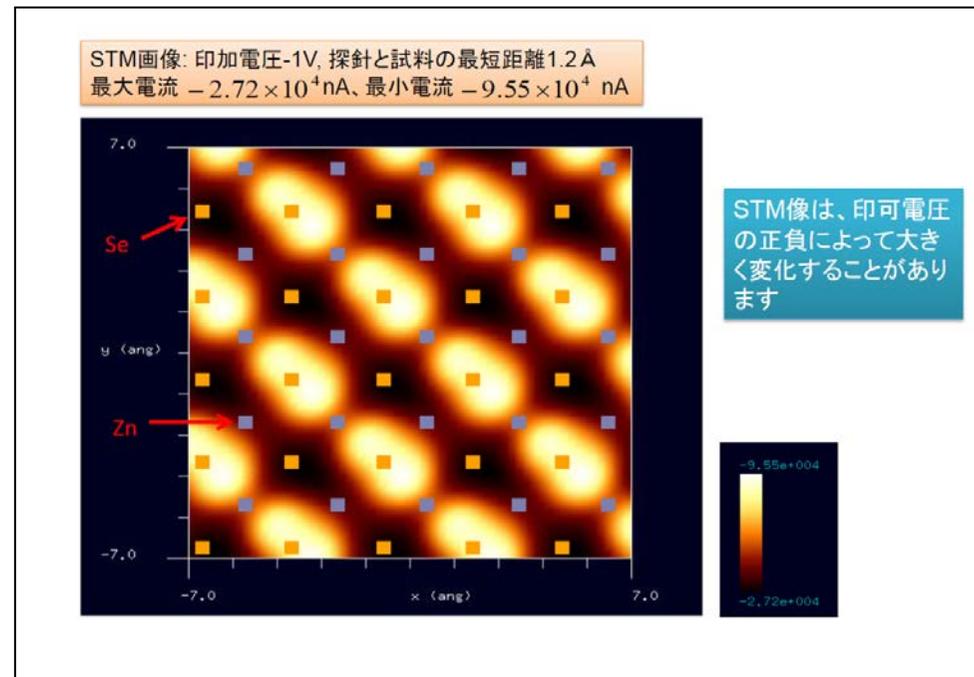
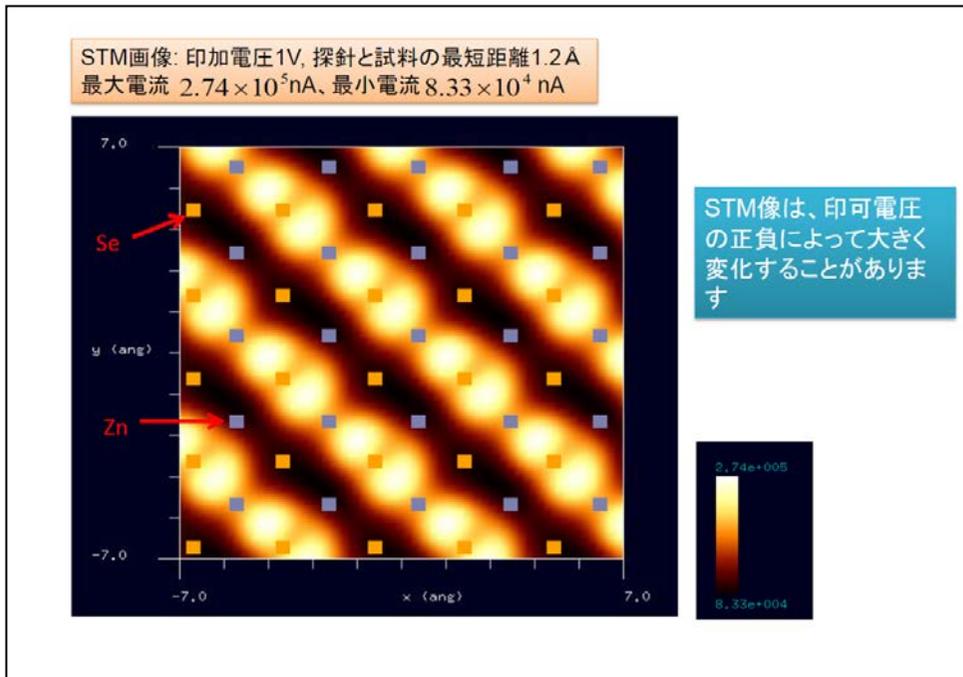


ZnSe(セレン化亜鉛) (001) 解析モデルとスキャンエリア

事例紹介ページ1

本事例は、発光素子や受光素子の材料として用いられるZnSe (001) の表面を、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。「STM\_MODE」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す(4スレッド対応)。スキャンエリアは「W14Å×D14Å×H0.0Å」と設定されています。周期境界条件を考慮できますが、モノマーとして解析します。探針試料間距離は1.243Åとしています。TIPバイアス電圧 +1.0V とTIP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。



事例紹介ページ2

事例紹介ページ3 (逆スケール表示、明:最小値、暗:最大値)

II-VI族半導体 (ZnO(酸化亜鉛)やCdTe(テルル化カドミウム)、ZnSe(セレン化亜鉛)など)

II-VI族半導体はイオン結晶性が強く、固いがもろいものが多い。また、組成を変えることでバンドギャップを大きく変化させることができる。可視光や赤外線領域に相当するバンドギャップを持つものは、発光素子や受光素子の材料として用いられている。(wikipedia)

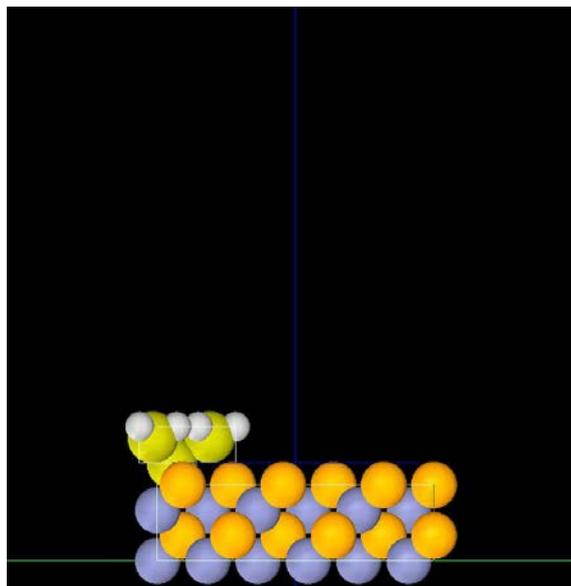
以下に、紹介事例のセットアップ条件（下左図）とシミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

Project Editor

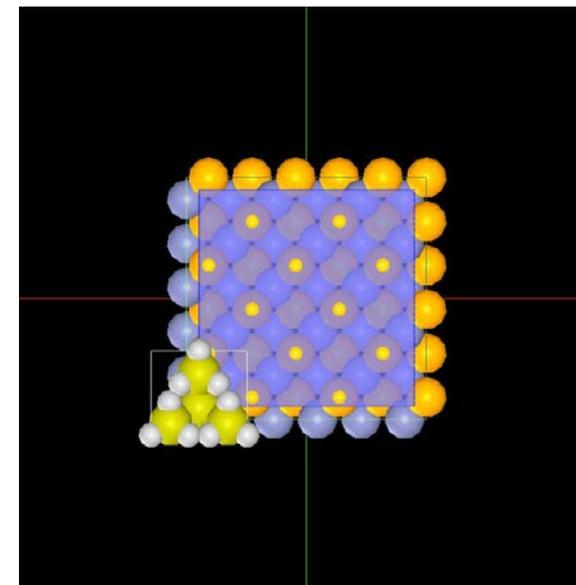
Setup DFTB

type	value
Component	
Tip	tip_si4.xyz
Position	
x	-7
y	-7
z	5.5
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	6.24
d	5.41
h	2.02466
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
ScanArea	
w	14
d	14
h	0
DistanceFromSamples	1.243
Sample	ZnSe_001_new.xyz
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	15.609
d	15.609
h	4.257
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50

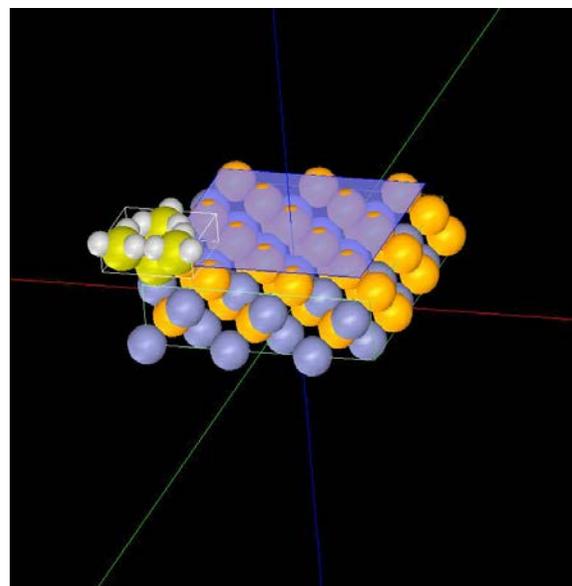
事例モデルのセットアップ条件



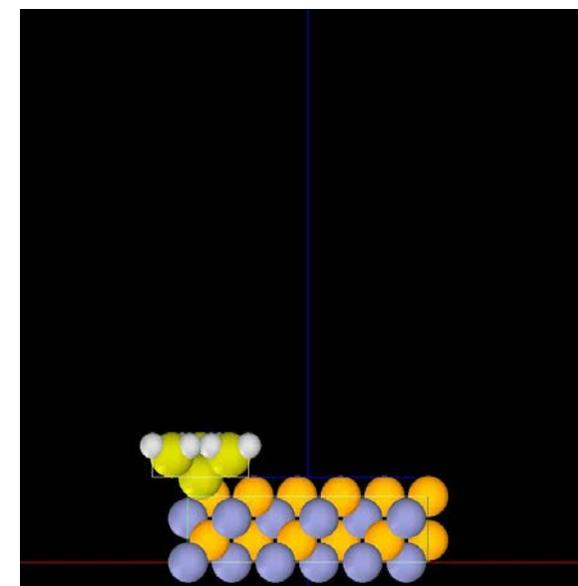
SIDE



TOP



俯瞰



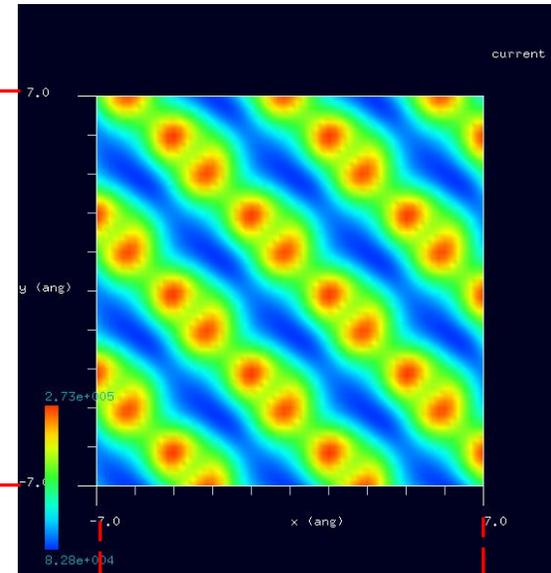
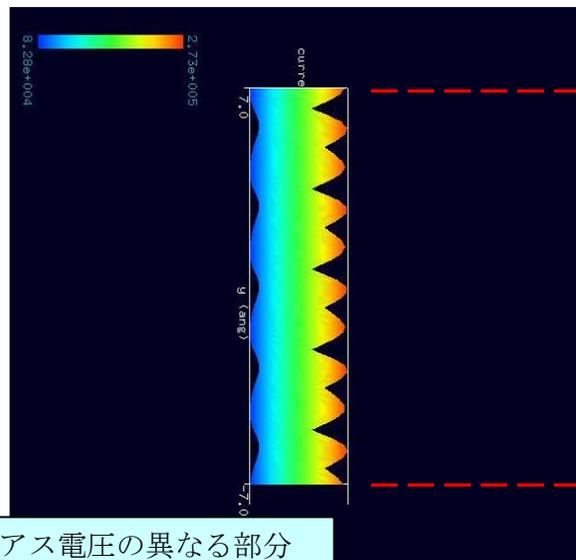
FRONT

Project Editor

Setup **DFTB**

property	value
mode	<b>DFTB_STM</b>
title	HOPG
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	10
k_cantilever	40
resonant_freq	170
Ndiv	
X	60
Y	60
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1
TolEnergy	0.001
displacement	0.1
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	30
TolEnergy	10
output_eigenvalue	off
Fvdw	
tip_shape	conical
height_of_highest_adsorbed_molecule	0.00000
Hamaker_const	0.22000
apex_angle	160
tip_height	1000.00
radius_of_tip_apex	1.00000
tip_bias_voltage	
minimum	<b>1</b>
maximum	<b>1</b>
Ndiv	100
Ndiv_kpoints	4
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	17.028
Y	0
Z	0
b	
X	0
Y	17.028
Z	0
c	
X	0
Y	0
Z	5.676
solver_type	CPU
OpenMP_threads	4
Output	

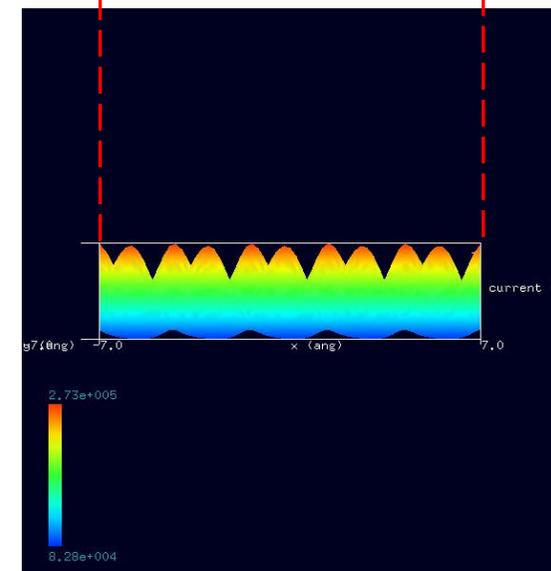
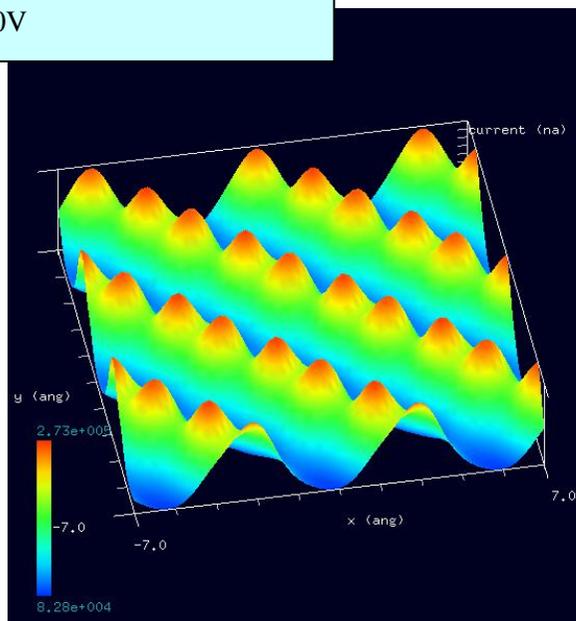
TIPバイアス電圧+1Vでの、シミュレーション結果・Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



TIPバイアス電圧の異なる部分

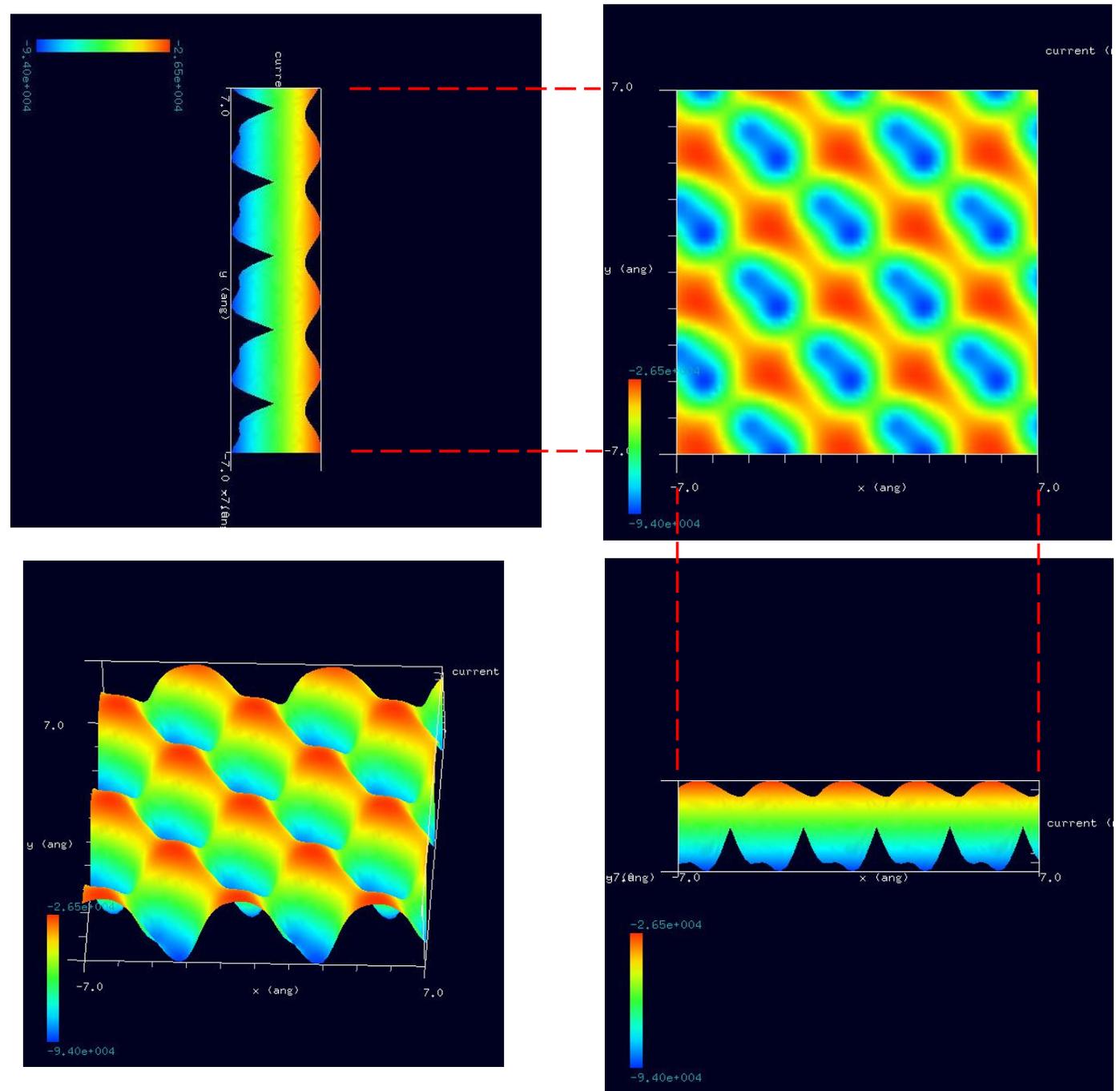
(a) +1.0V

(b) -1.0V

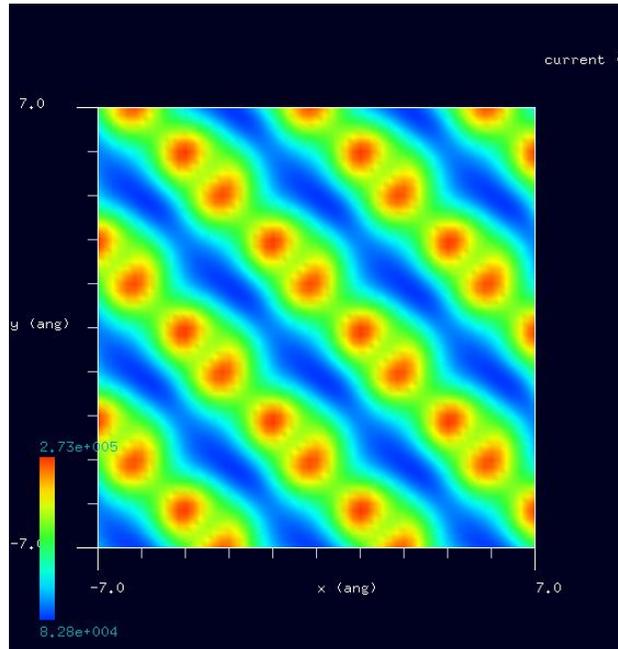


TIP バイアス電圧  $-1\text{V}$  での、シミュレーション結果

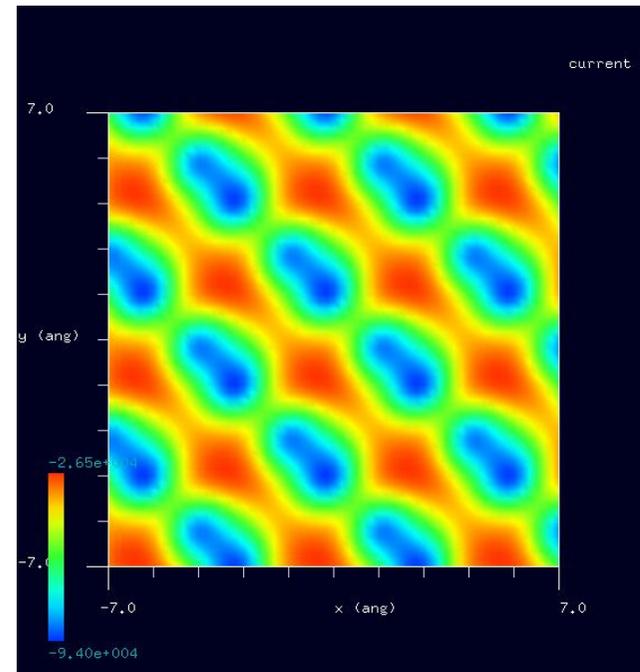
・Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、  
TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図)  
として示します。



TIP バイアス電圧+1 V



TIP バイアス電圧-1 V



[参考1 明暗の発生原理]により説明すると、TIPバイアス電圧の正負により、明暗が反転する事から、ZnSe(セレン化亜鉛) (001) 面は、半導体の性質が存在している事がわかります。

## 1 1 ・DFTB\_ STM ( ConstantHeight) 計算事例 1 6

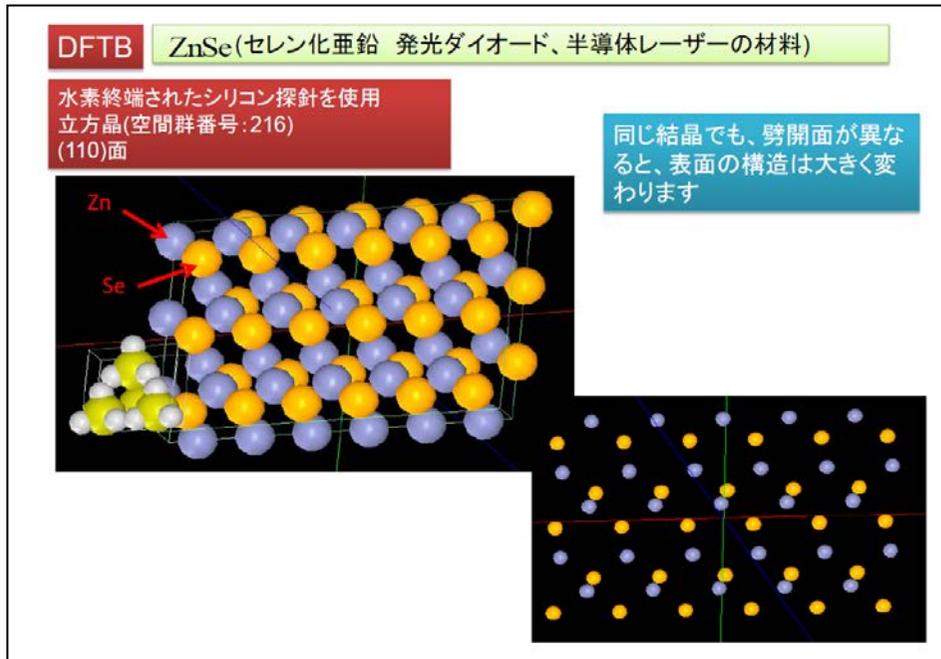
●DFTB STM : ZnSe 結晶観察シミュレーション ZnSe の立方晶の(110)面の constant height STM 像

計算モード識別番号 : [DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_026 a]、[DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_026 b]

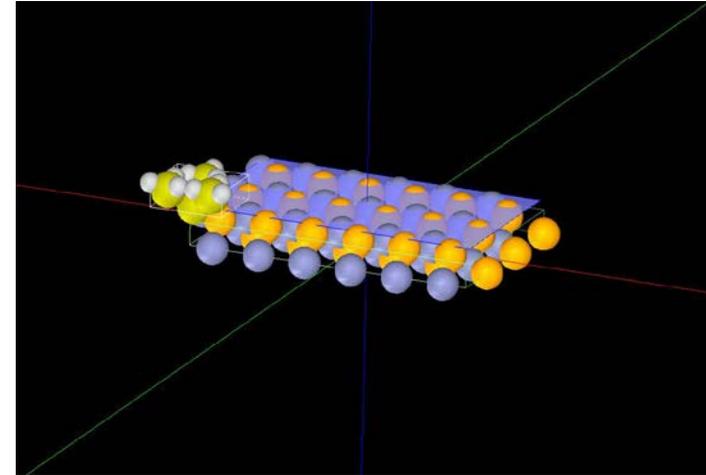
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project\\_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB\\_ConstHeightSTM.php](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php)

分類 : DFTB STM ( ConstantHeight)、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。



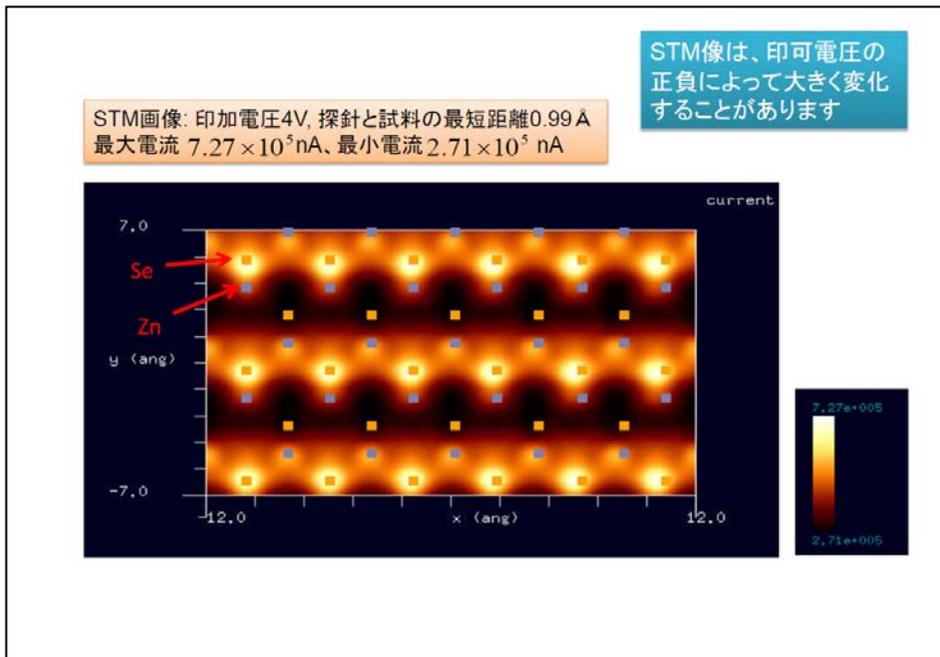
事例紹介ページ1



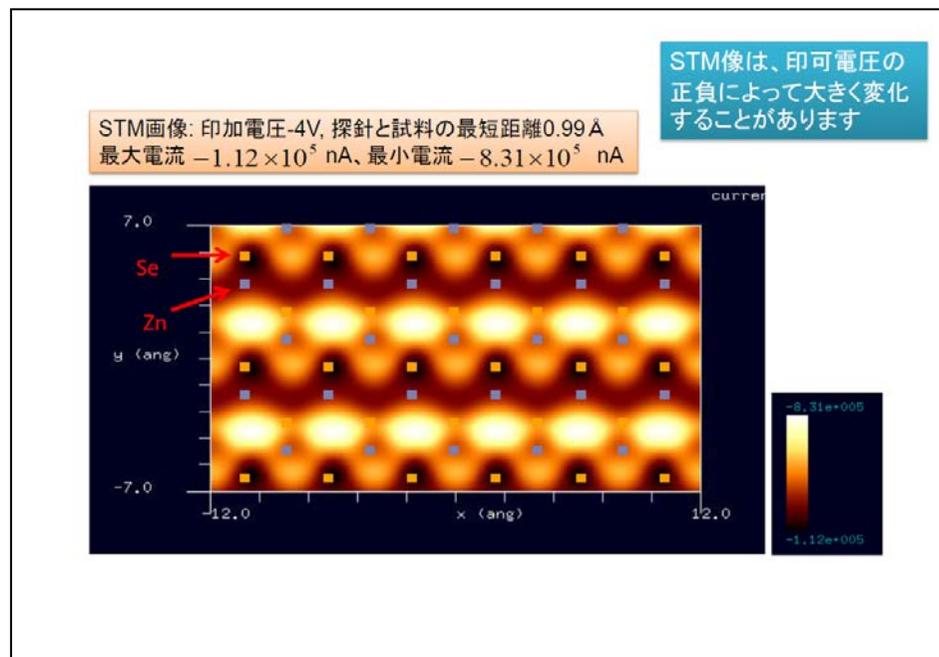
ZnSe(セレン化亜鉛) (1 1 0) 解析モデルとスキャンエリア

本事例は、発光素子や受光素子の材料として用いられるZnSe(110)面の表面を、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。「STM\_MODE」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す(4スレッド対応)。スキャンエリアは「W24Å×D14Å×H0.0Å」と設定されています。周期境界条件を考慮して解析します。探針試料間距離は0.99322Åとしています。TIPバイアス電圧+4.0VとTIPバイアス電圧-4.0Vでの計算を設定例条件で行わせました。



事例紹介ページ1 (TIPバイアス電圧4V)



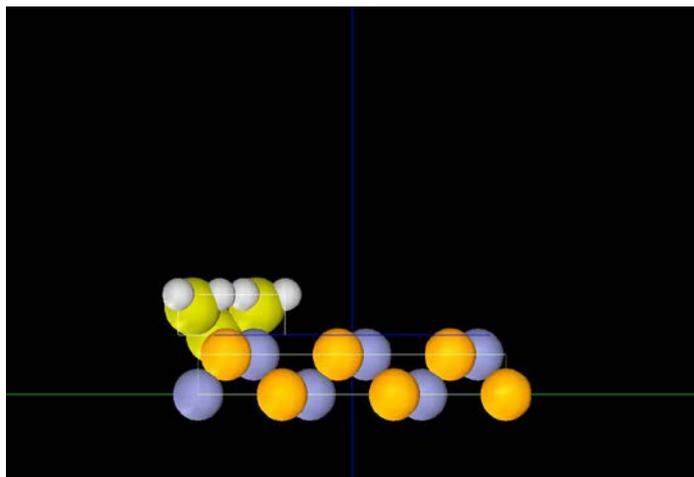
事例紹介ページ2 (TIPバイアス電圧-4V、逆スケール表示、明：最小値、暗：最大値)

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・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

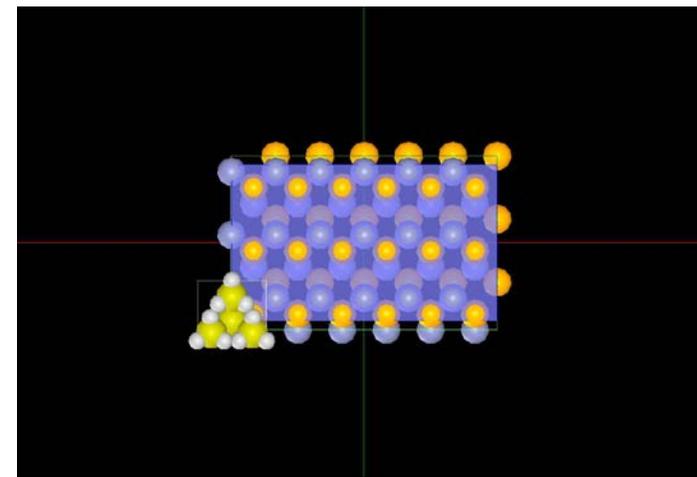
Project Editor

Setup DFTB

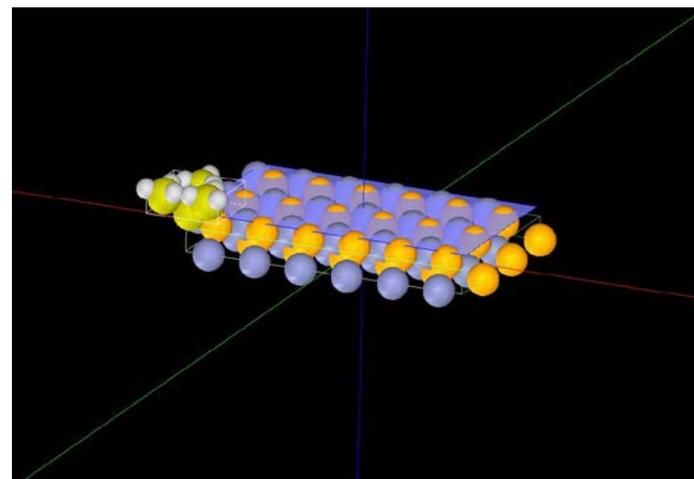
type	value
Component	
Tip	tip_si4.xyz
Position	
x	-12
y	-7
z	3
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	6.24
d	5.41
h	2.02466
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
ScanArea	
w	24
d	14
h	0
DistanceFromSamples	0.99322
Sample	ZnSe_110.xyz
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	24.08122
d	15.609
h	2.00678
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50



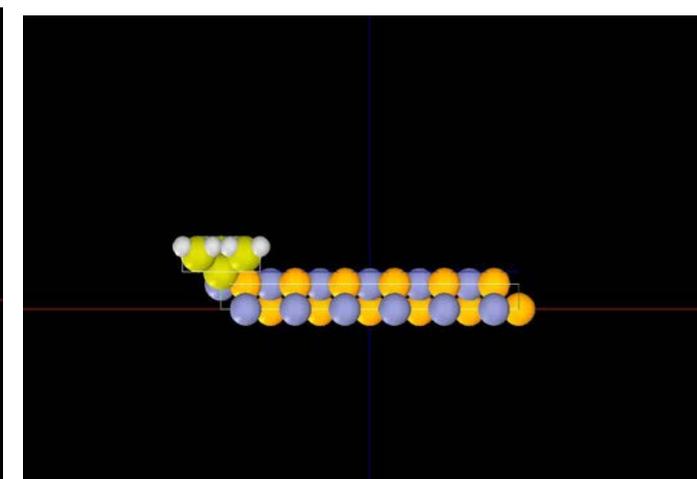
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

事例モデルのセットアップ条件

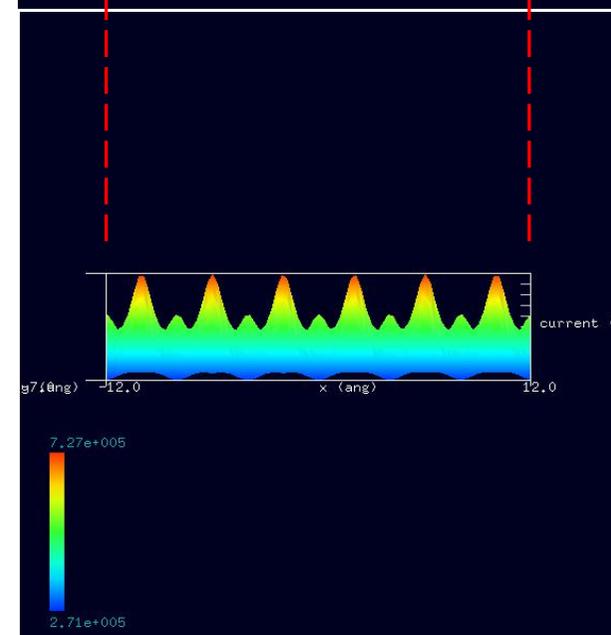
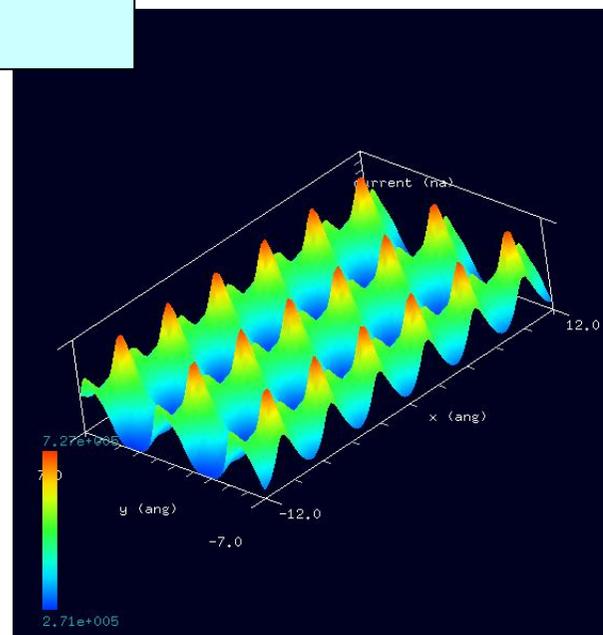
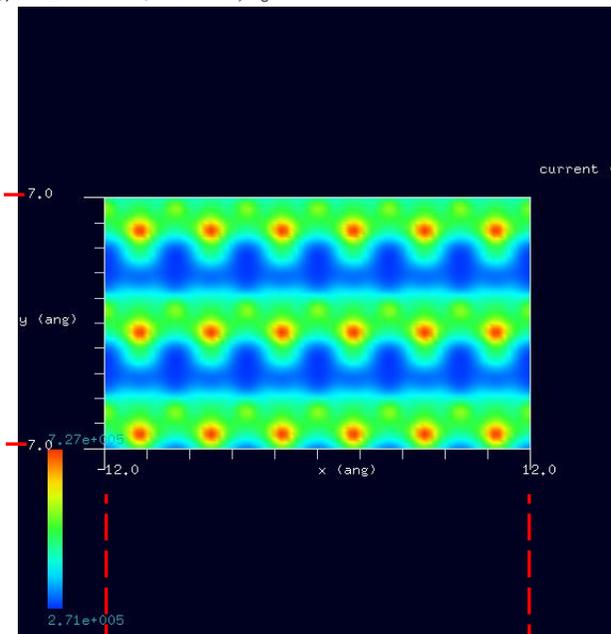
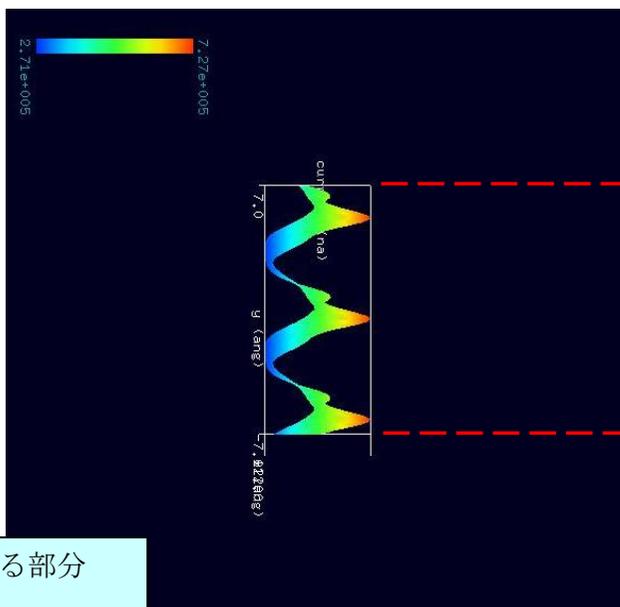
Project Editor

Setup **DFTB**

property	value
mode	<b>DFTB_STM</b>
title	HOPG
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	10
k_cantilever	40
resonant_freq	170
Ndiv	
X	80
Y	80
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1
TolEnergy	0.001
displacement	0.1
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	30
TolEnergy	10
output_eigenvalue	off
Fvdw	
tip_shape	conical
height_of_highest_adsorbed_molecule	0.00000
Hamaker_const	0.22000
apex_angle	160
tip_height	1000.00
radius_of_tip_apex	1.00000
tip_bias_voltage	
minimum	<b>4</b>
maximum	<b>4</b>
Ndiv	100
Ndiv_kpoints	4
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	2.00123
Y	0
Z	0
b	
X	0
Y	17.028
Z	0
c	
X	-4.01354
Y	0
Z	4.01354
solver_type	CPU
OpenMP_threads	
Output	

TIPバイアス電圧の異なる部分  
 (a) +4.0V  
 (b) -4.0V

TIPバイアス電圧+4Vでの、シミュレーション結果・Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



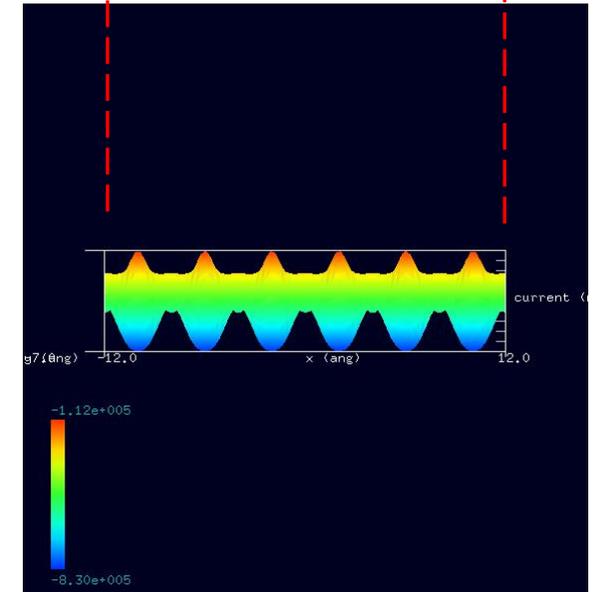
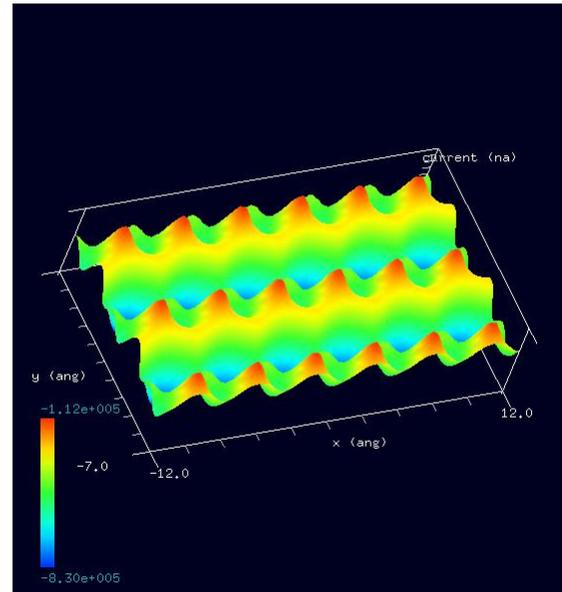
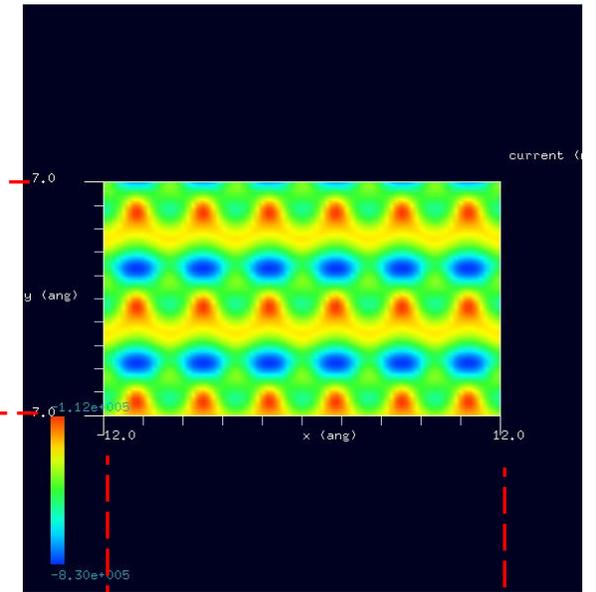
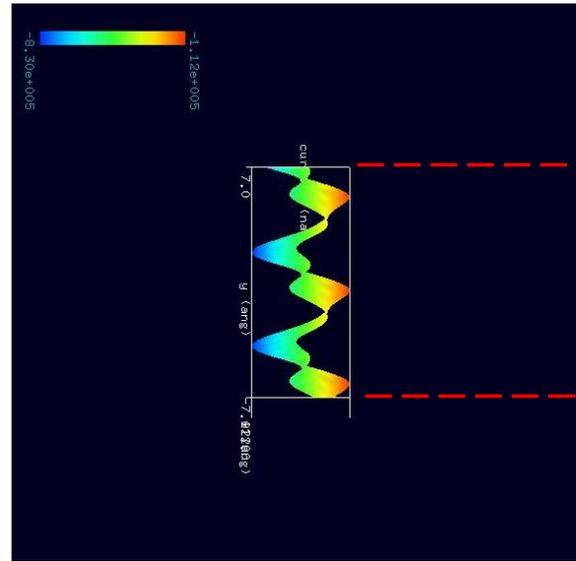
設定条件

TIPバイアス電圧 $-4V$ での、シミュレーション結果

・Rainbow色表示モデルをSIDE (左上図)、

TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図)

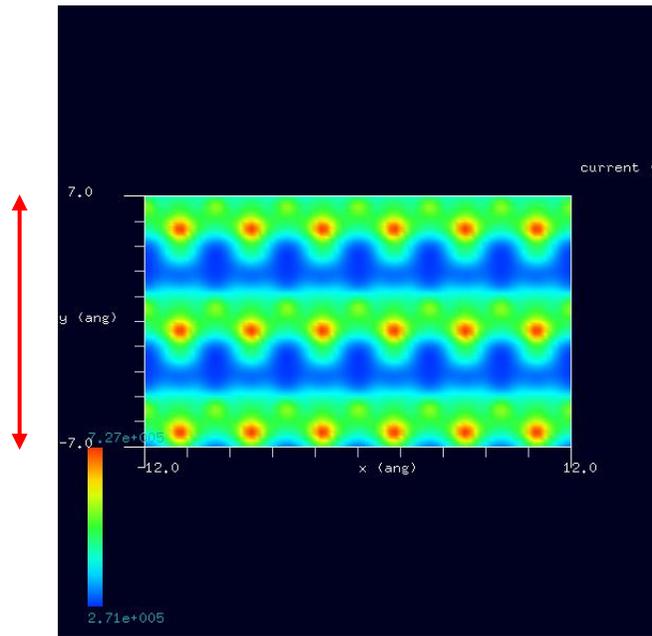
として示します。



ZnSe(セレン化亜鉛) (110) 面

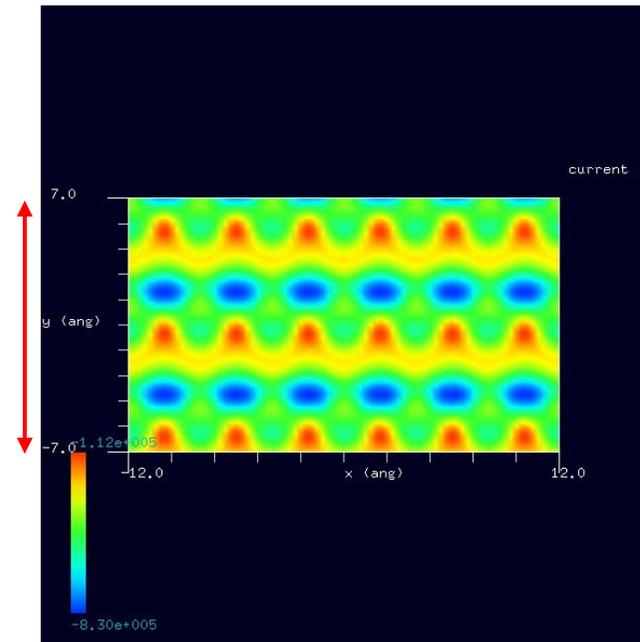
TIPバイアス電圧+4V

1.4 Å



TIPバイアス電圧-4V

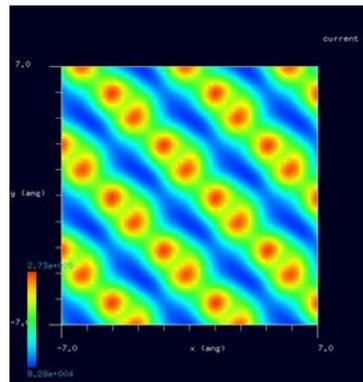
1.4 Å



ZnSe(セレン化亜鉛) (001) 面  
(1つ前の事例)

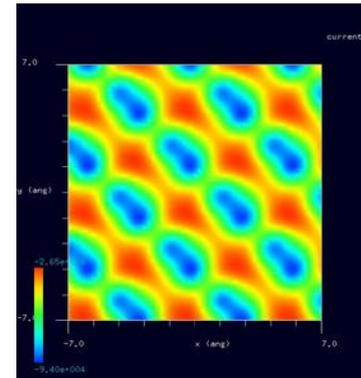
TIPバイアス電圧+1V

1.4 Å



TIPバイアス電圧-1V

1.4 Å



[参考1 明暗の発生原理]により説明すると、TIPバイアス電圧の正負により、明暗が反転する事から、ZnSe(セレン化亜鉛) (110) 面は、半導体の性質が存在している事がわかります。また、ZnSe(セレン化亜鉛) (001) 面と比較して、同程度のトンネル電流値が連続する部分が多い事がわかります。

## 1 2 ・DFTB\_ STM ( ConstantHeight) 計算事例 1 7

●DFTB STM : シリコンナイトライドの観察シミュレーション Si3N4 の六方晶の(001)面の constant height STM 像

計算モード識別番号 : [DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_035a]、[DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_035b]

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](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php)

分類 : DFTB STM ( ConstantHeight)、Å オーダー、無機半導体

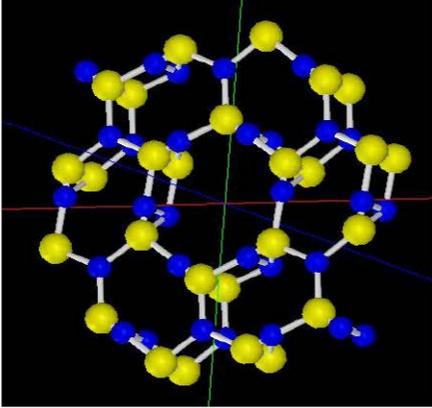
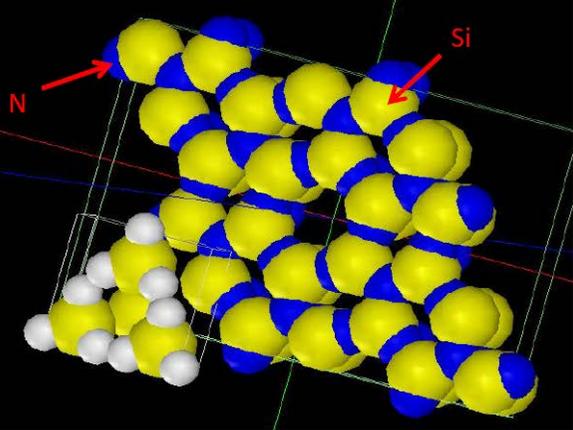
事例紹介ページを下左図に示します。

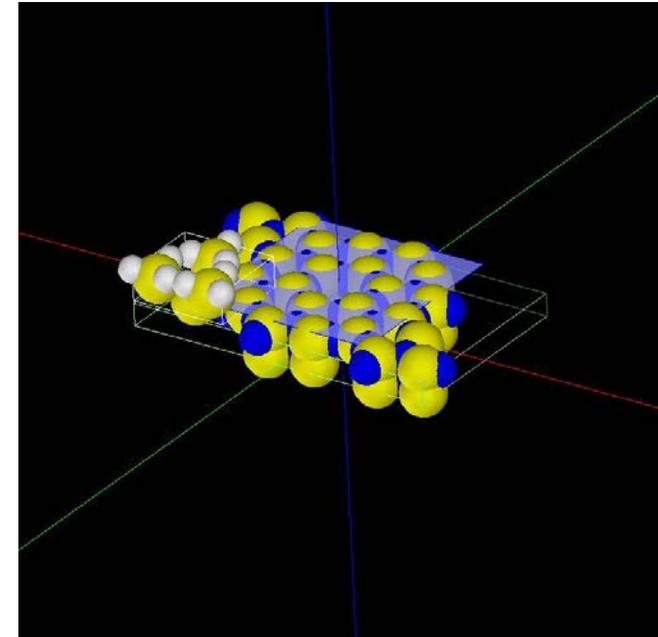
自動車関連分野

DFTB  $\text{Si}_3\text{N}_4$  (シリコンナイトライド、エンジン部品に使用されるファインセラミック)

水素終端されたシリコン探針を使用  
六方晶(空間群番号:176)  
(001)面

空間群番号や格子定数が分かっている場合、SetModelでどのような結晶形状データも作成可能です



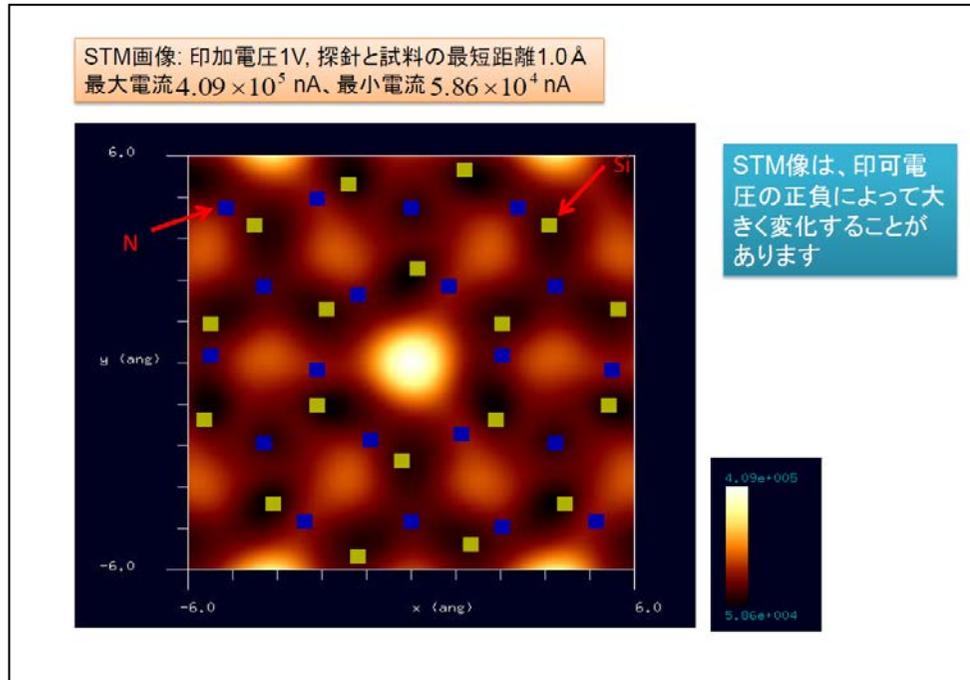


解析モデルとスキャンエリア

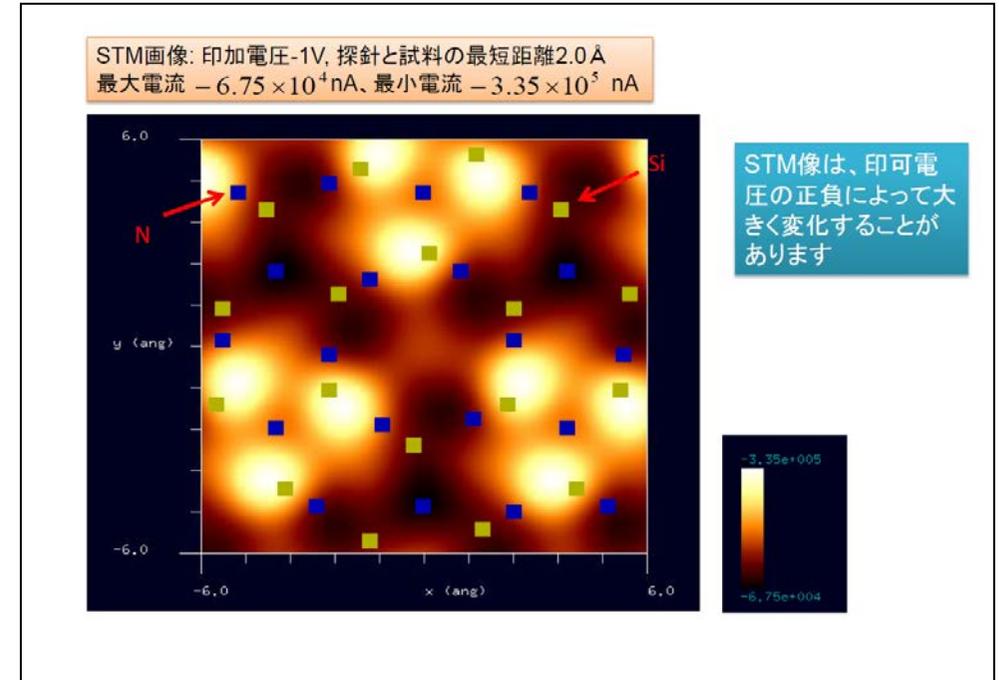
事例ページ 1

本事例は、優れた機械的特性を持つ**Si3N4** の**(001)面**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。「STM\_MODE」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す(4スレッド対応)。スキャンエリアは「 $W12\text{\AA} \times D12\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。周期境界条件を考慮して解析します。バイアス電圧 +1.0V、探針試料間距離は  $1.0375\text{\AA}$  と、バイアス電圧 -1.0V、探針試料間距離  $2.0375\text{\AA}$  での計算を設定例条件で行わせました。



事例ページ2



事例ページ3 (逆スケール表示、明:最小値、暗:最大値)

窒化ケイ素 (ちっかケイそ、silicon nitride) は、化学式  $\text{Si}_3\text{N}_4$  で表される無機化合物。非酸化物セラミックスの代表。シリコンナイトライド ともいう。非常に硬質であることなど、優れた機械的特性を持つことからベアリング、タービンブレード、切削工具などに応用されている。結晶構造は六方晶系で  $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$  と  $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$  がある。(wikipedia)

スピネル構造をもつ立方晶窒化ケイ素は、1999年に発見され、新しい直接遷移型のワイドバンドギャップ化合物と期待されている。

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・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

**Project Editor**

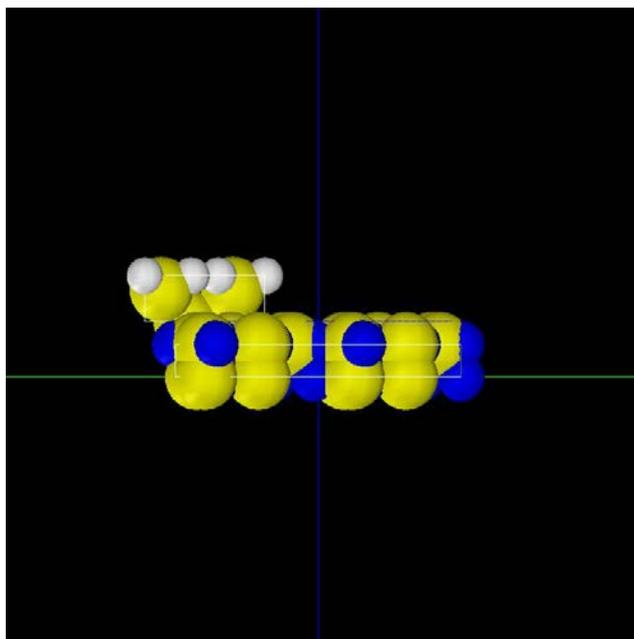
Setup | DFTB

type	value
Component	
Tip	tip_si4.xyz
Position	
x	-6
y	-6
z	2.5
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	6.24
d	5.41
h	2.02466
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
ScanArea	
w	12
d	12
h	0
DistanceFromSamples	1.0375
Sample	Si3N4_new_001.xyz
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	20.21688
d	12.85966
h	1.4625
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50

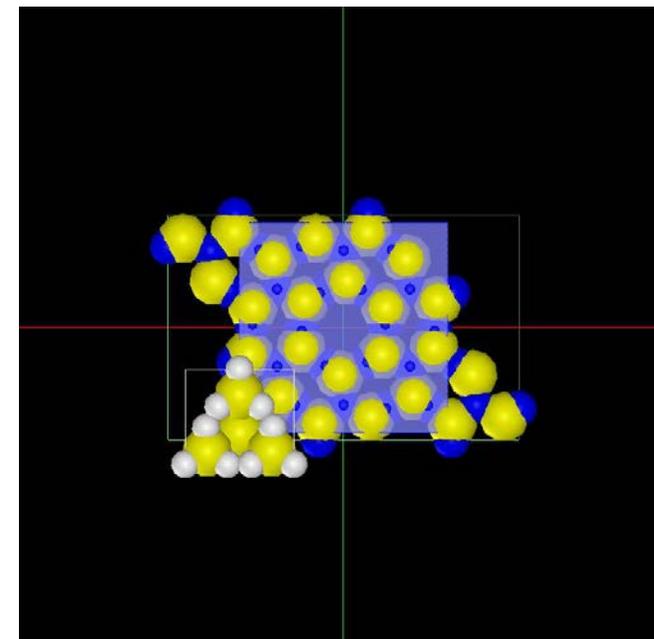
探針試料間距離の異なる部分

(a) 1.0375 Å

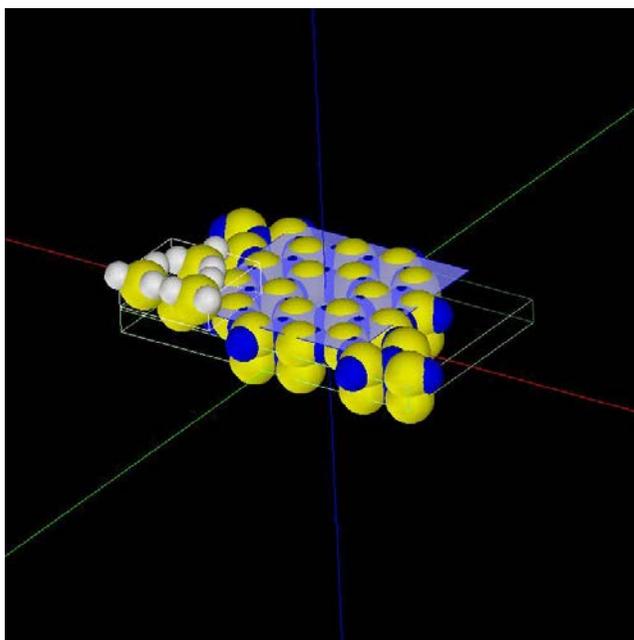
(b) 2.0375 Å



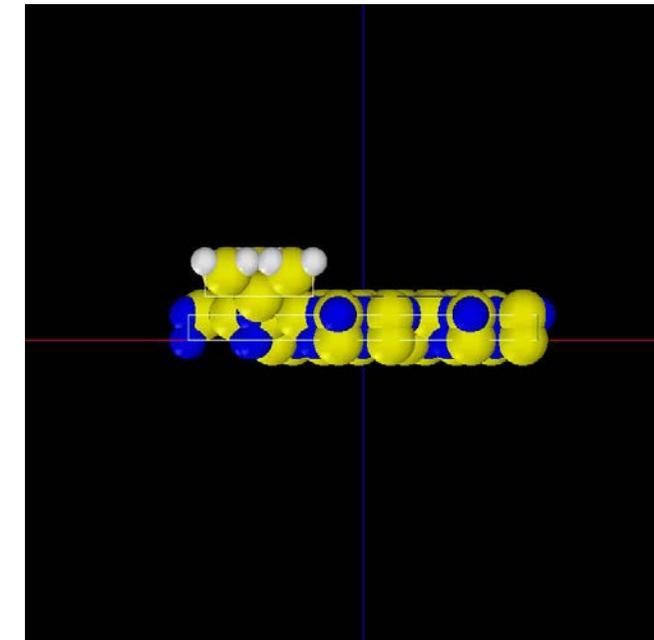
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

事例モデルのセットアップ条件

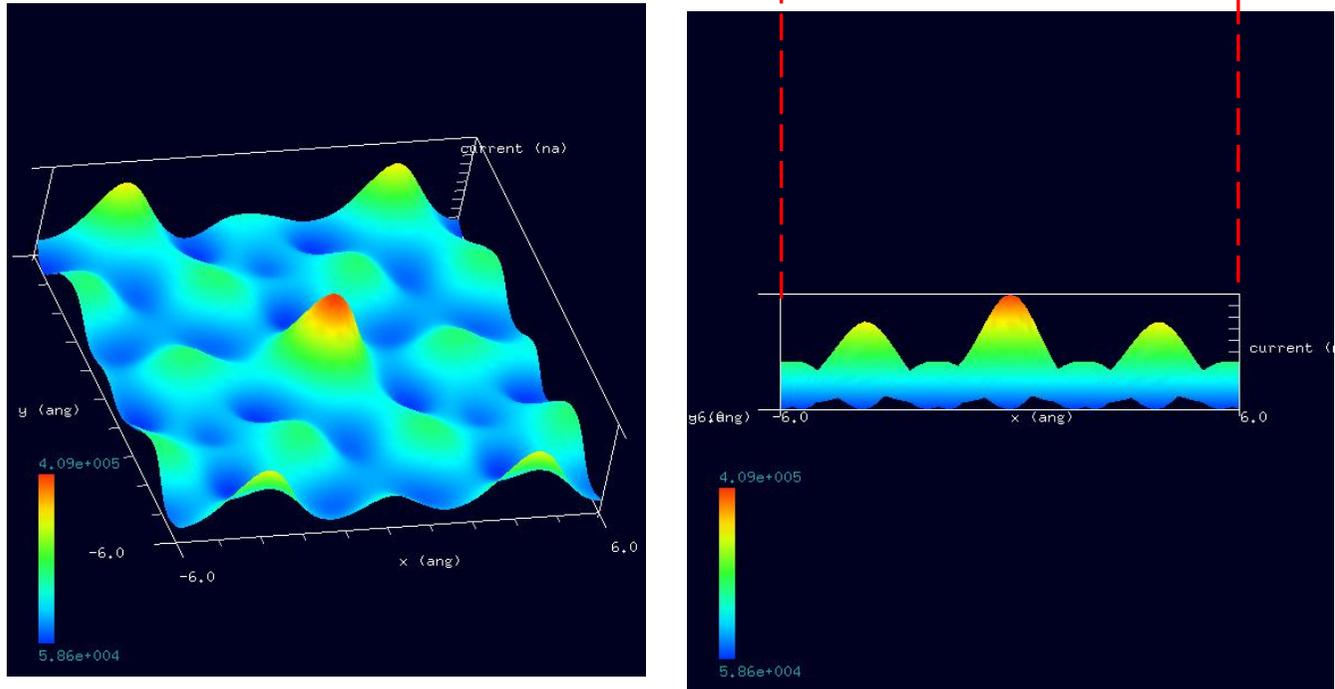
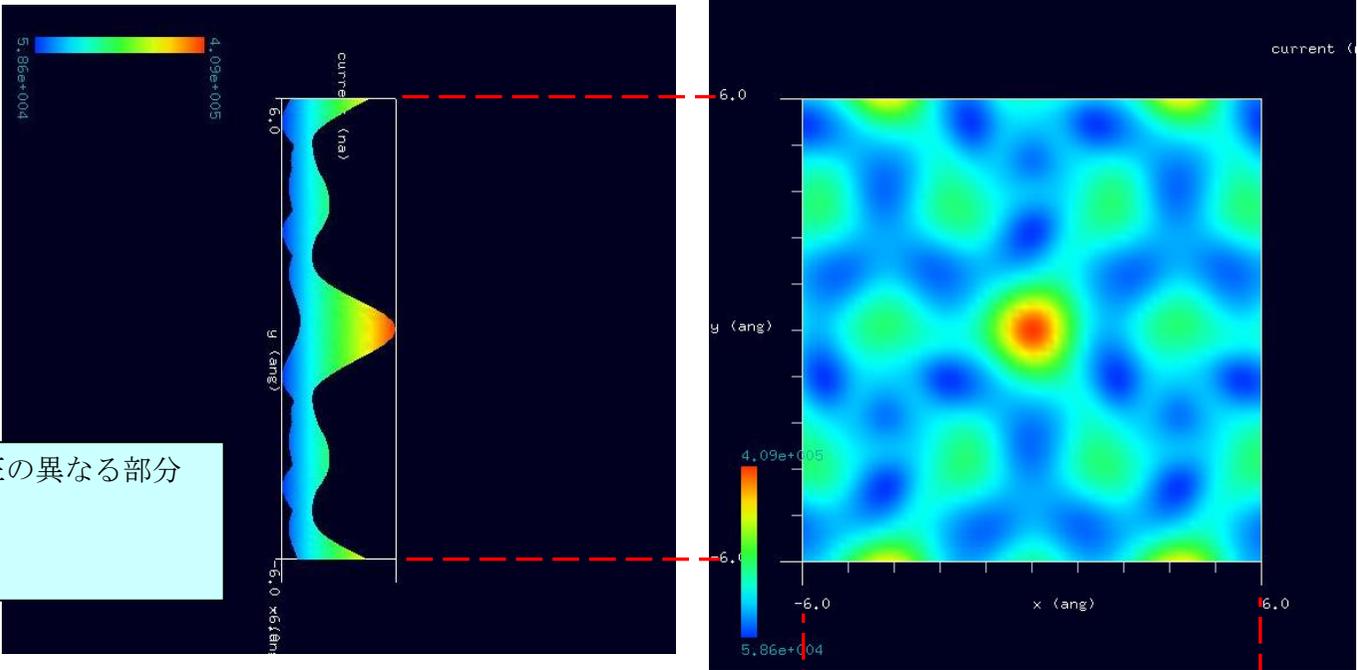
Project Editor

Setup **DFTB**

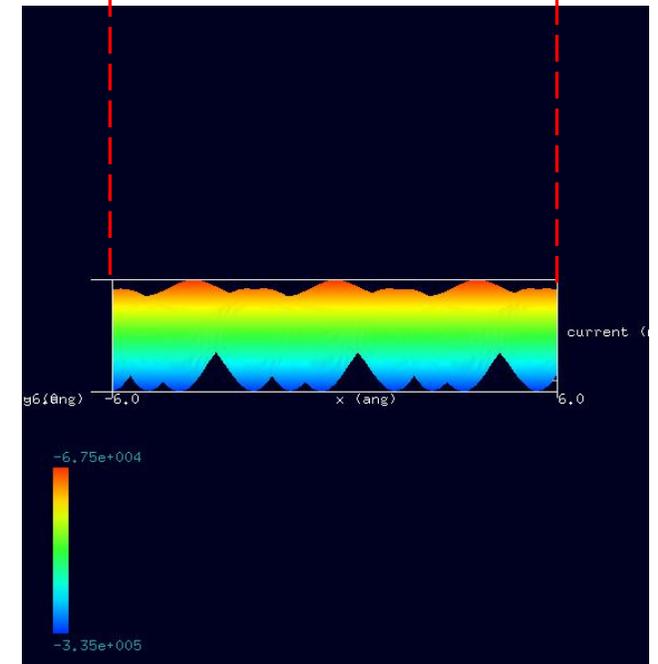
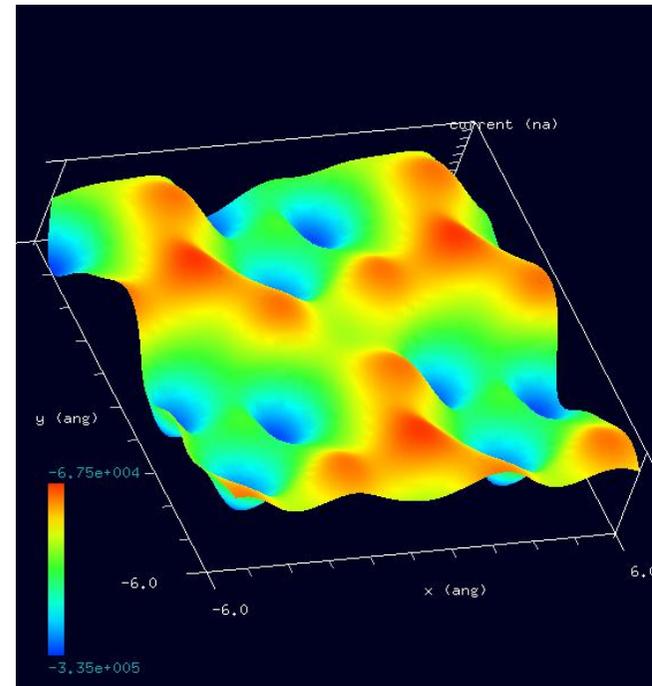
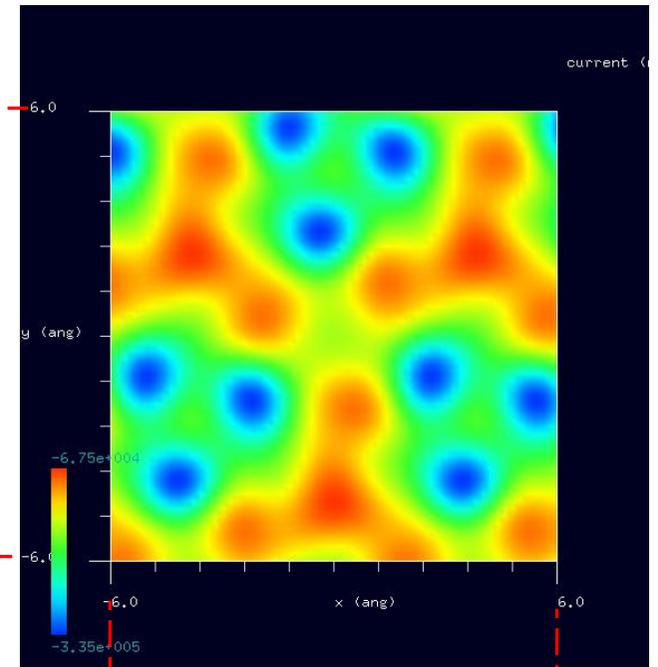
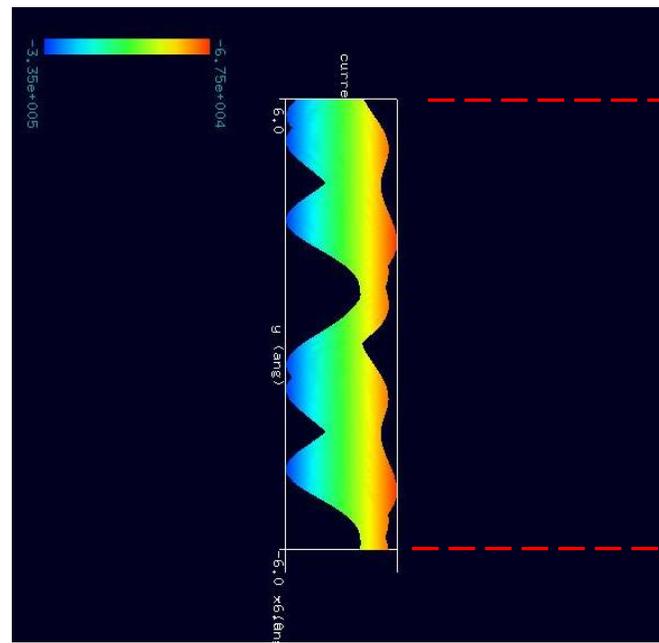
property	value
mode	<b>DFTB_STM</b>
title	HOPG
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	10
k_cantilever	40
resonant_freq	170
Ndiv	
X	60
Y	60
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1
TolEnergy	0.001
displacement	0.1
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	30
TolEnergy	10
output_eigenvalue	off
Fvdw	
tip_shape	conica
height_of_highest_adsorbed_molecule	0.0000
Hamaker_const	0.22000
apex_angle	160
tip_height	1000.00
radius_of_tip_apex	1.00000
tip_bias_voltage	
minimum	<b>1</b>
maximum	<b>1</b>
Ndiv	100
Ndiv_kpoints	4
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	15.32
Y	0
Z	0
b	
X	-7.66
Y	13.2675
Z	0
c	
X	0
Y	0
Z	2.925
solver_type	CPU
OpenMP threads	4
Output	

TIPバイアス電圧の異なる部分  
 (a) +1.0V  
 (b) -1.0V

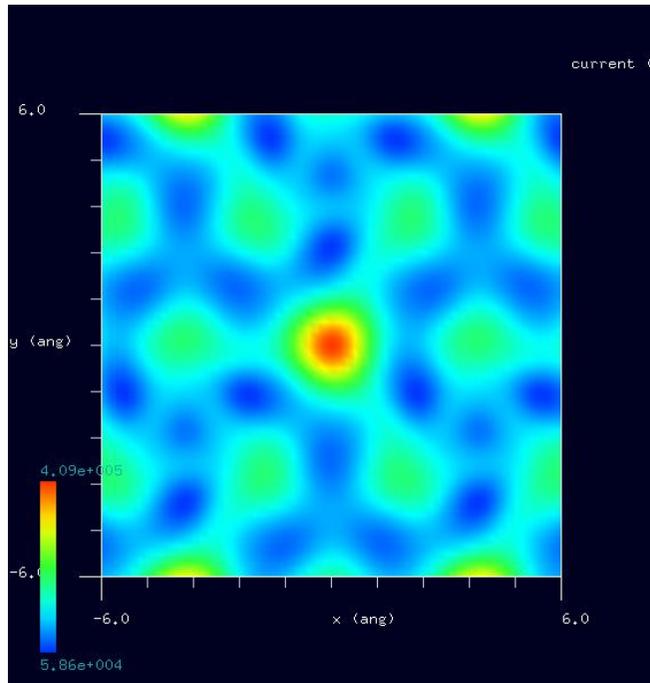
TIPバイアス電圧+1Vでの、シミュレーション結果・Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します



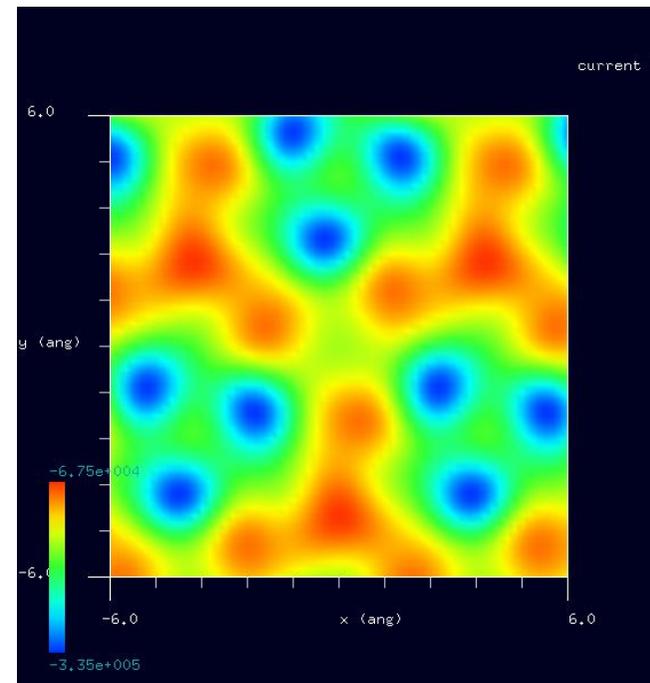
TIP バイアス電圧  $-1\text{V}$  での、シミュレーション結果  
・Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、  
TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図)  
として示します。



TIPバイアス電圧+1V



TIPバイアス電圧-1V



$\text{Si}_3\text{N}_4$  の(001)面表面においては、バンドギャップの特徴である、TIPバイアス電圧の正負による、明暗の反転がないことから、半導体としての性質は示さないといえる。スピネル構造をもつ立方晶窒化ケイ素は、半導体の性質である、バンドギャップを持つと思われる。

## 1 3 ・ DFTB\_ STM ( ConstantHeight) 計算事例 1 8

●DFTB STM : シリコンナイトライドの観察シミュレーション Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> の六方晶の(111)面の constant height STM 像

計算モード識別番号 : [DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_036a]、[DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_036b]

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](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php)

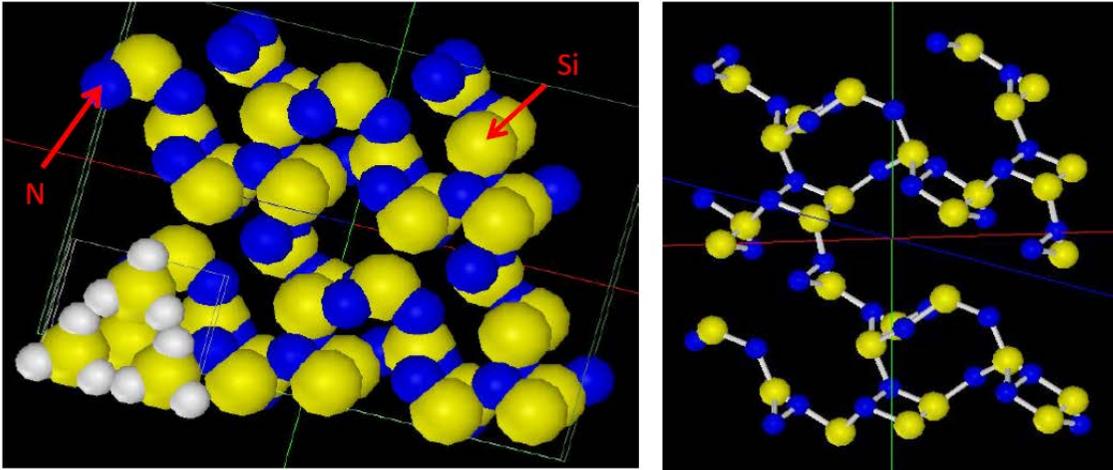
分類 : DFTB STM ( ConstantHeight)、Å オーダー、無機半導体

事例紹介ページを下左図に示します。

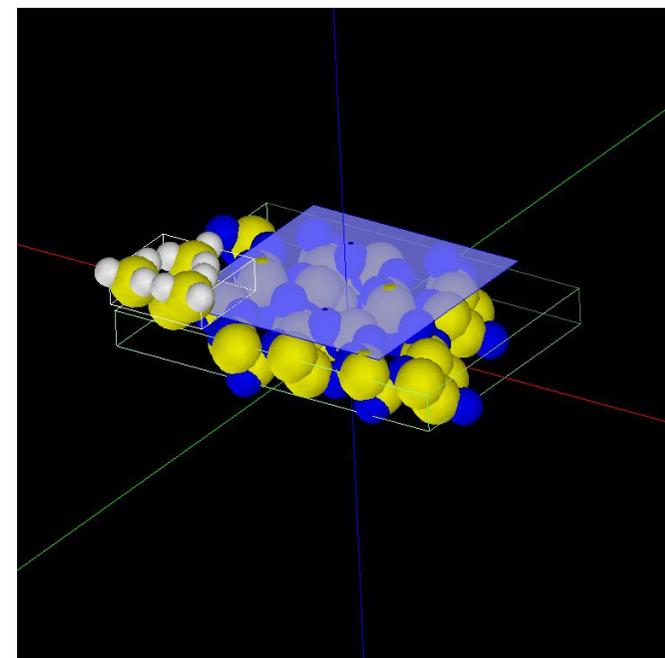
**DFTB** Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> (シリコンナイトライド、エンジン部品に使用されるファインセラミック)

水素終端されたシリコン探針を使用  
六方晶(空間群番号:176)  
(111)面

同じ結晶でも、劈開面が異なると、表面の構造は大きく変わります



事例ページ 1

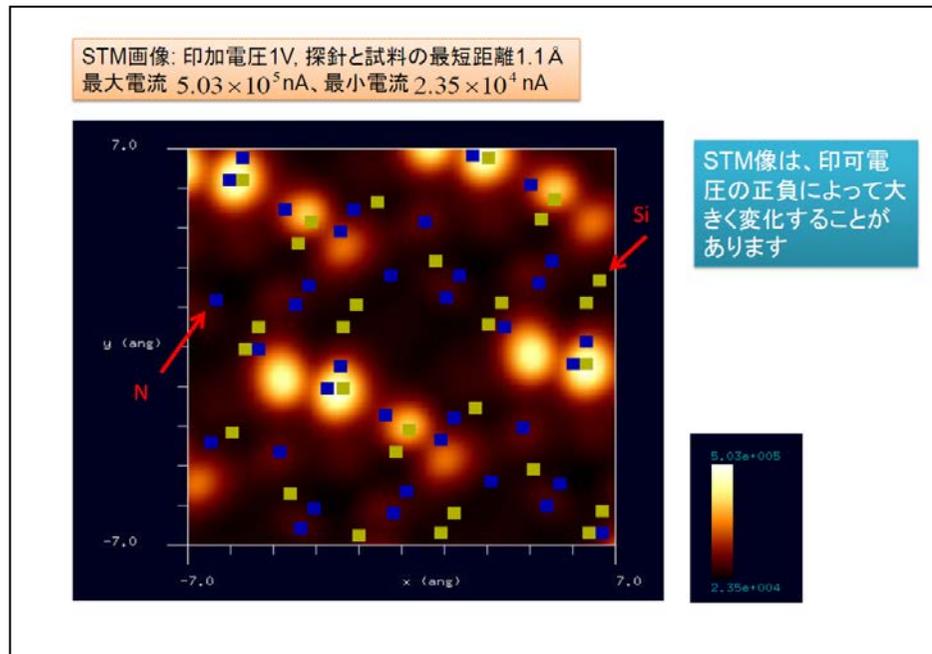


解析モデルとスキャンエリア

本事例は、優れた機械的特性を持つSi<sub>3</sub>N<sub>4</sub>の(111)面表面を、高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。

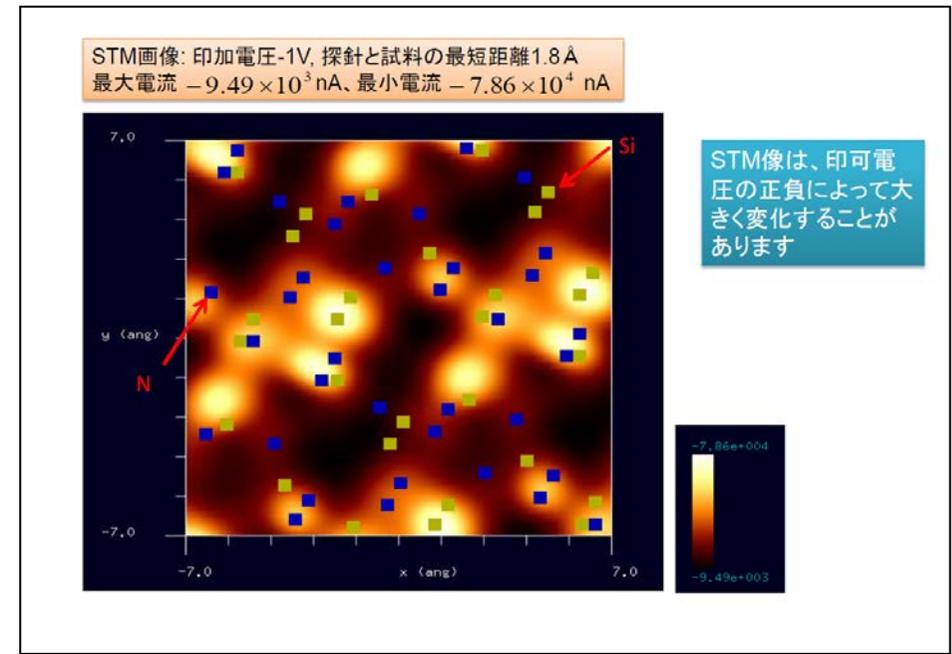
探針は作成済みデータ「tip\_si4.xyz」を用います。本計算事例の入力条件について記載します。「STM\_MODE」は「ConstantHeight」(Default、指定のない場合:探針の高さ一定モード)に設定しています。並列化処理設定を行っています(4スレッド対応)。スキャンエリアは「W14Å×D14Å×H0.0Å」と設定されています。周期境界条件を考慮して解析します。バイアス電圧 +1.0V、探針試料間距離は 1.0614Åと、バイアス電圧 -1.0V、探針試料間距離は 1.7614Åでの計算を設定例条件で行わせました。

TIPバイアス電圧 +1.0V



事例ページ2

TIPバイアス電圧 -1.0V



事例ページ3 (逆スケール表示、明: 最小値、暗: 最大値)

窒化ケイ素 (ちっかケイそ、silicon nitride) は、化学式  $\text{Si}_3\text{N}_4$  で表される無機化合物。非酸化物セラミックスの代表。シリコンナイトライド ともいう。非常に硬質であることなど、優れた機械的特性を持つことからベアリング、タービンプレード、切削工具などに応用されている。結晶構造は六方晶系で  $\alpha\text{-Si}_3\text{N}_4$  と  $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$  がある。(wikipedia)

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・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

**Project Editor**

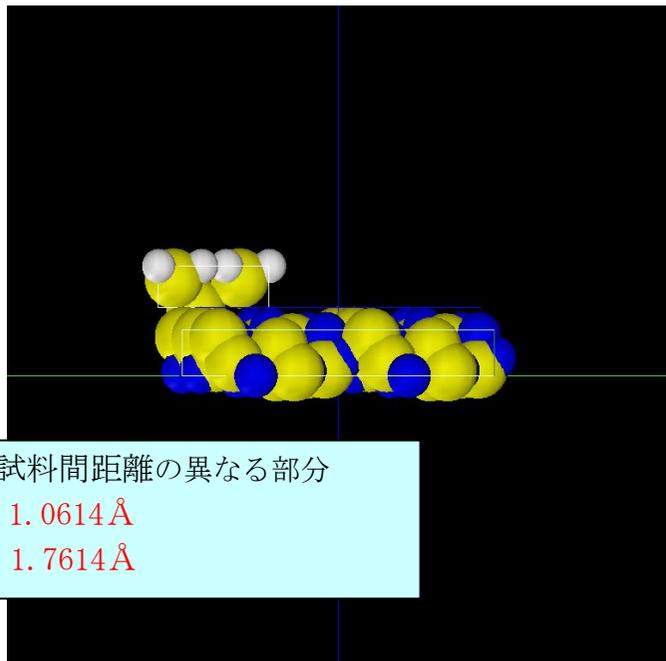
Setup | DFTB

type	value
Component	
Tip	tip_si4.xyz
Position	
x	-7
y	-7
z	33
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	624
d	5.41
h	202466
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
ScanArea	
w	14
d	14
h	0
DistanceFromSamples	1.0614
Sample	si3N4_new_111.xyz
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	21.3373
d	15.24
h	2.2386
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50

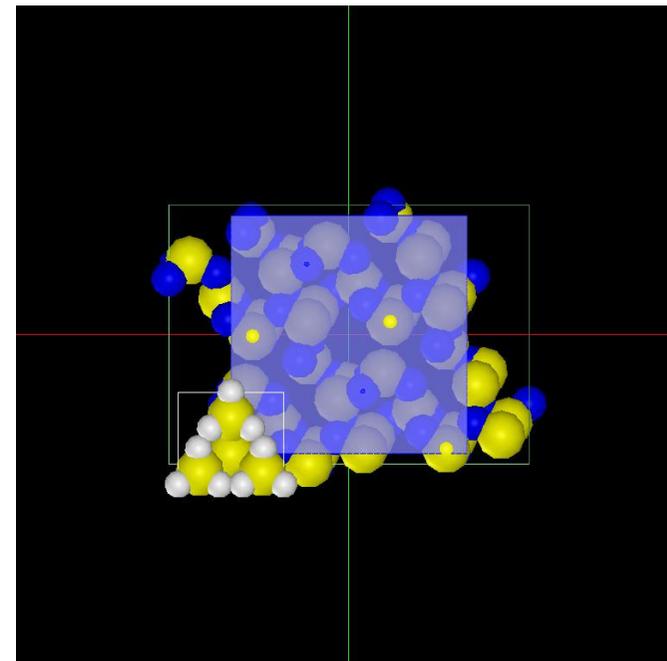
探針試料間距離の異なる部分

(a) 1.0614 Å

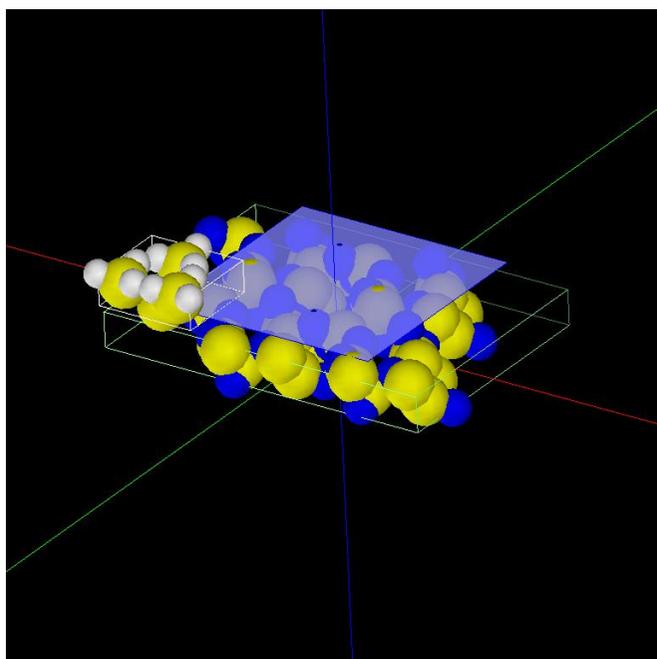
(b) 1.7614 Å



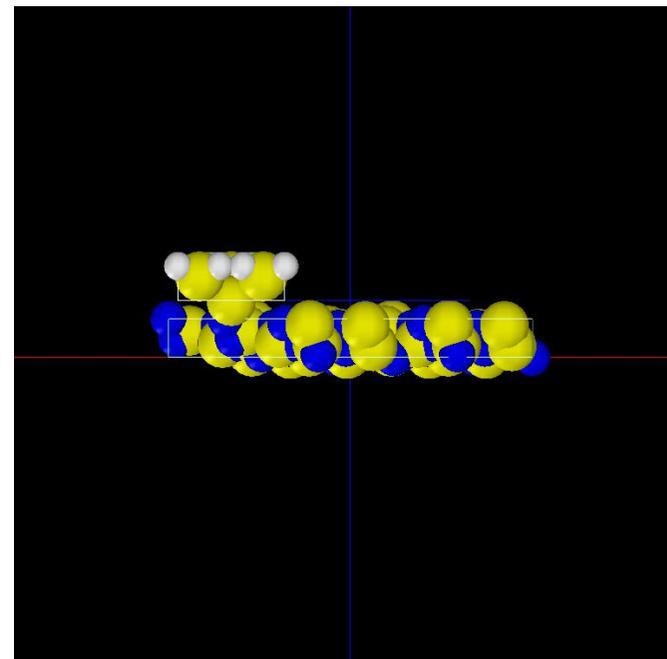
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

事例モデルのセットアップ条件

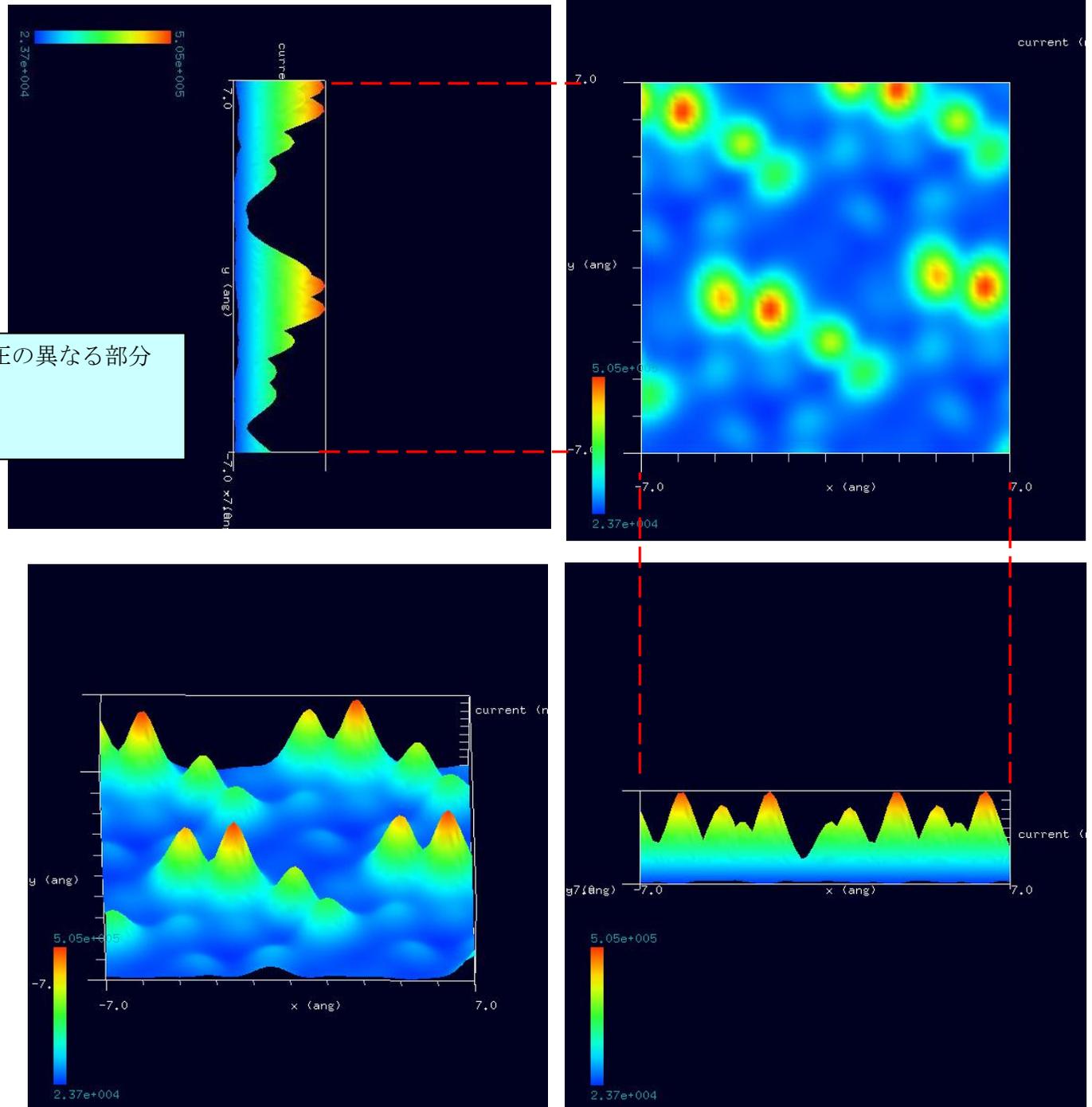
Project Editor

Setup **DFTB**

property	value
mode	DFTB_STM
title	HOPG
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	10
k_cantilever	40
resonant_freq	170
Ndiv	
X	60
Y	60
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1
TolEnergy	0.001
displacement	0.1
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	30
TolEnergy	10
output_eigenvalue	off
Fvdw	
tip_shape	conical
height_of_highest_adsorbed_molecule	0.00000
Hamaker_const	0.22000
apex_angle	160
tip_height	1.00000
radius_of_tip_apex	1.00000
tip_bias_voltage	
minimum	1
maximum	1
Ndiv	100
Ndiv_kpoints	4
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	16.30918
Y	1.71332
Z	0
b	
X	-6.67082
Y	14.98082
Z	0
c	
X	-0.88766
Y	-1.53748
Z	2.32462
solver_type	CPU
OpenMP_threads	2
Output	

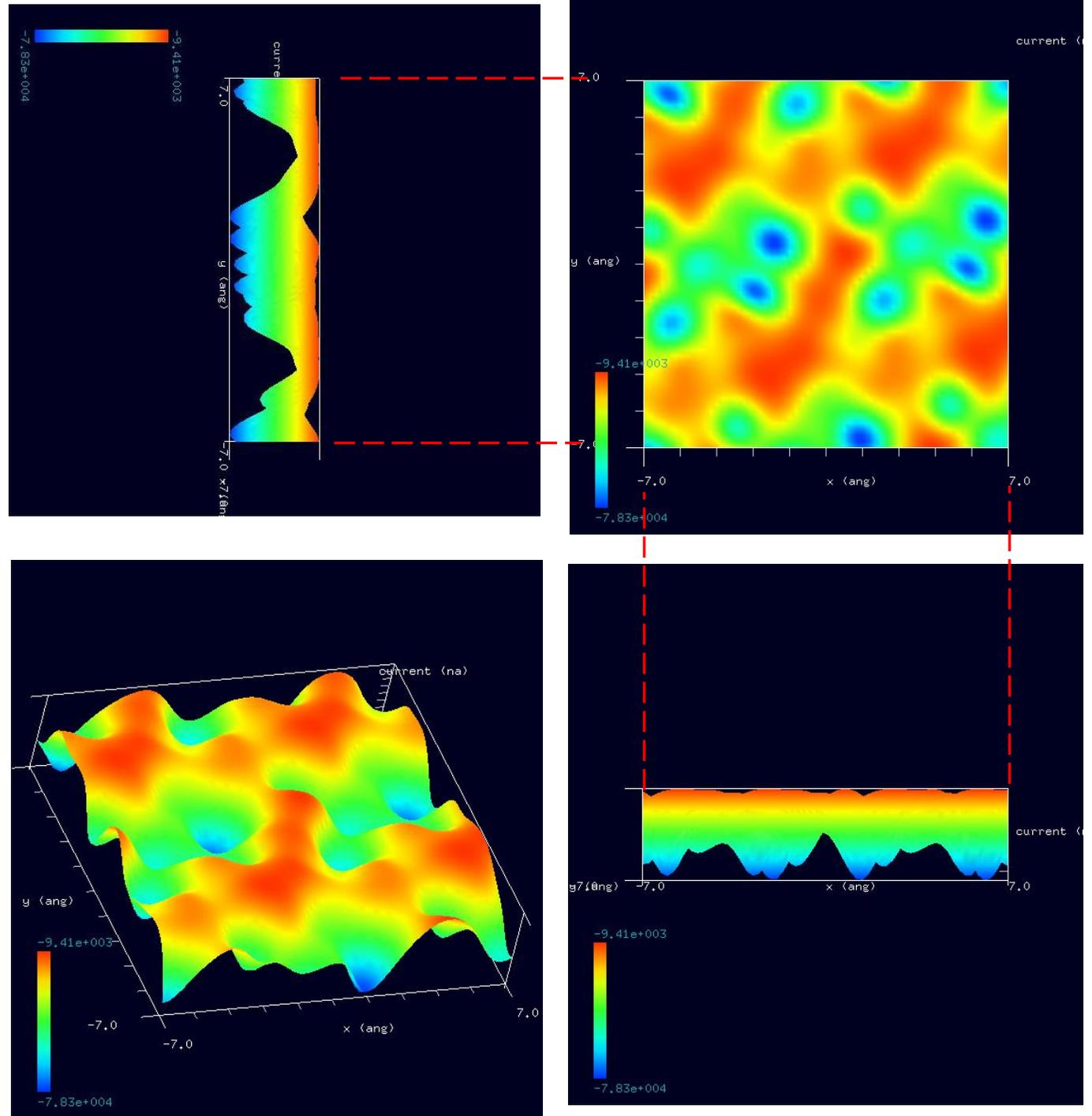
TIPバイアス電圧の異なる部分  
(a) +1.0V  
(b) -1.0V

TIPバイアス電圧+1Vでの、シミュレーション結果・Rainbow色表示モデルをSIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します

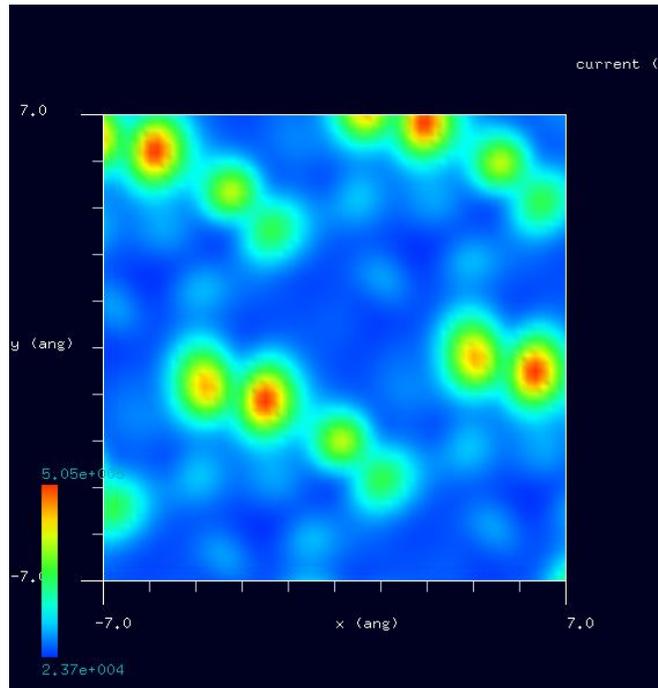


TIPバイアス電圧 $-1V$ での、シミュレーション結果

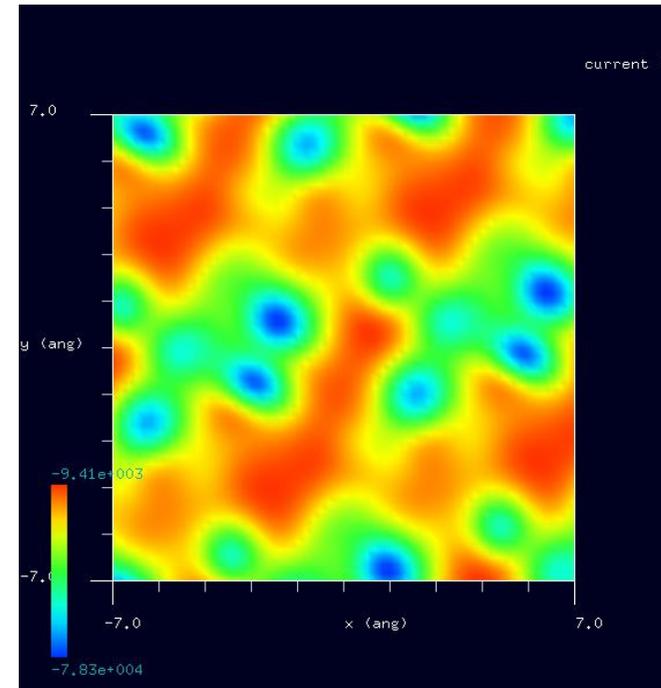
・Rainbow色表示モデルをSIDE (左上図)、  
TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図)  
として示します。



TIPバイアス電圧+1V



TIPバイアス電圧-1V



Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> の(111)面表面においては、バンドギャップの特徴である、TIPバイアス電圧の正負による、明暗の反転がないことから、半導体としての性質は示さないといえる。スピネル構造をもつ立方晶窒化ケイ素は、半導体の性質である、バンドギャップを持つと思われる。

## 1 4 ・ DFTB\_ STM ( ConstantHeight)

### ●DFTB STM : SiGe の観察シミュレーション SiGe の立方晶の(001)面の constant height STM像 計算事例⑱

計算モード識別番号 : [DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_027]a、 [DFTB\_ConstHeightSTM\_Inorganic\_027]b

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](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php)

分類 : DFTB STM ( ConstantHeight)、Å オーダー、無機半導体

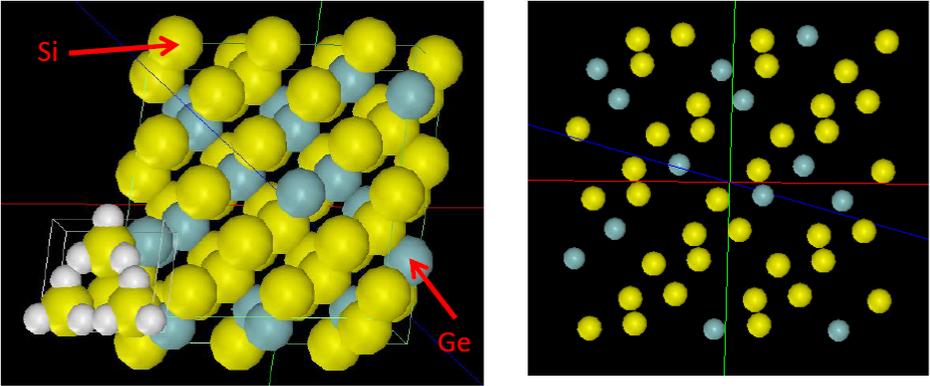
事例紹介ページを下左図に示します。

半導体関連トピック

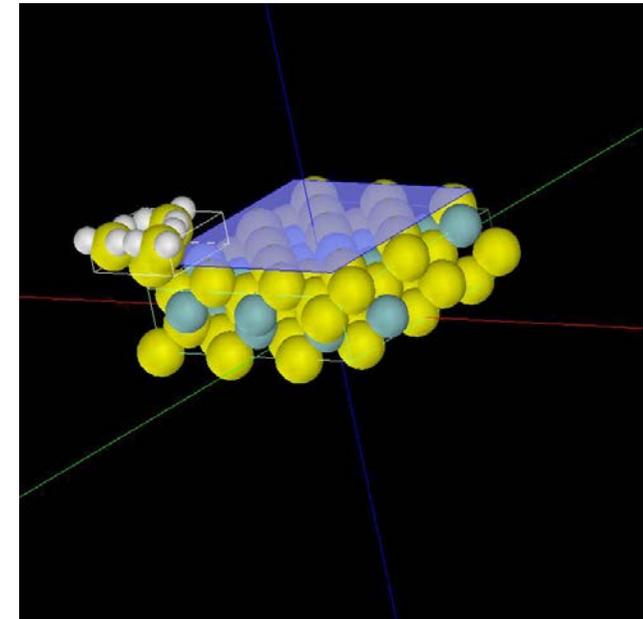
**DFTB** SiGe (トランジスタの材料)

水素終端されたシリコン探針を使用  
 $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$   
立方晶(空間群番号:227)  
(001)面  
Si結晶中のSi原子をランダムにGeと置き換えたもの

空間群番号や格子定数が分かれば、SetModelでどのような結晶形状データも作成可能です



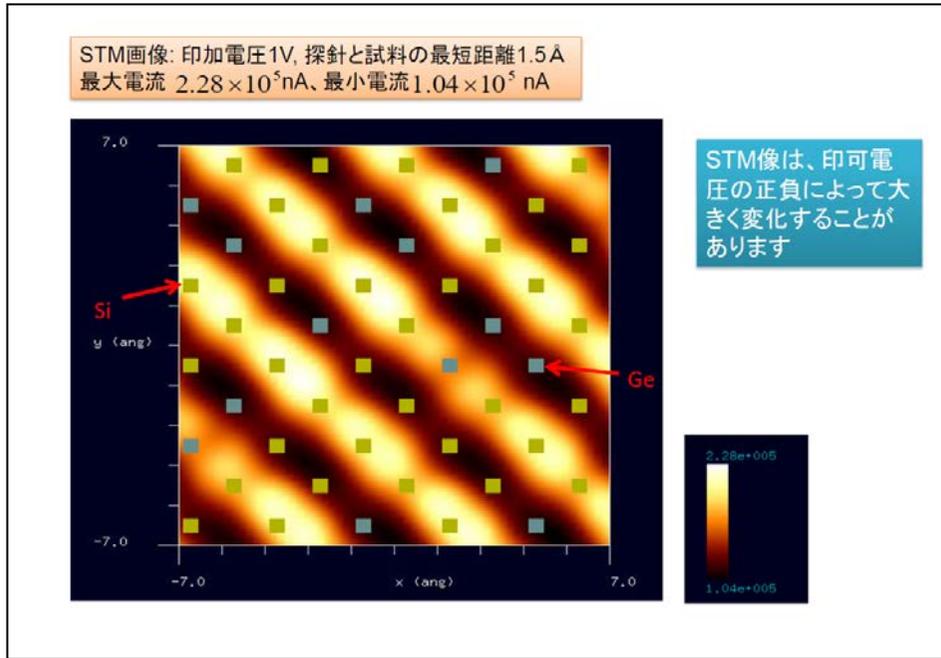
事例ページ1



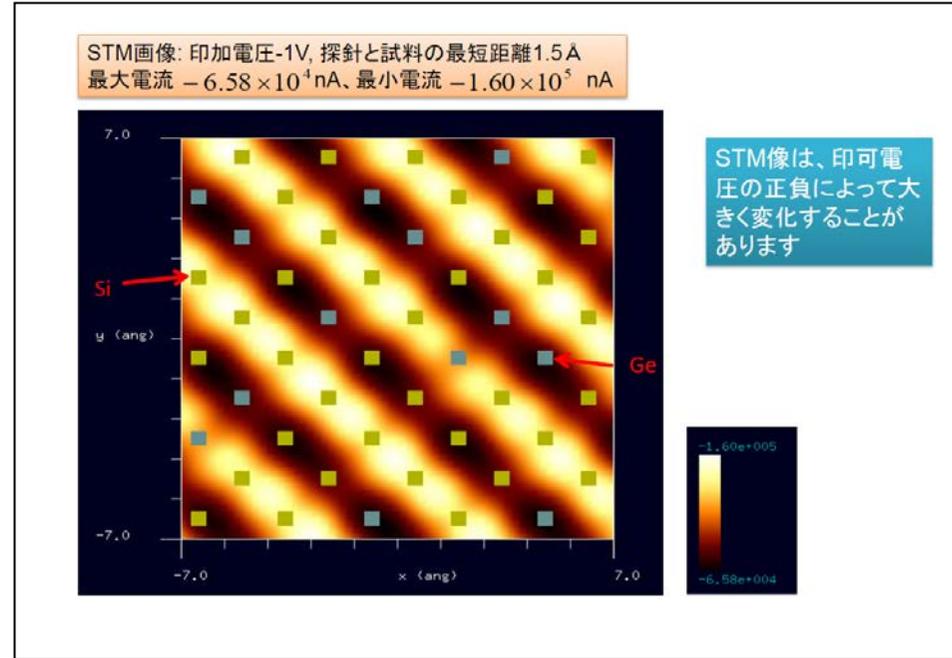
解析モデルとスキャンエリア

本事例は、電子移動度の優れた半導体である **SiGe**の(001)面表面を、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。「STM\_MODE」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す(4スレッド対応)。スキャンエリアは「W14Å×D14Å×H0.0Å」と設定されています。周期境界条件を考慮して解析します。探針試料間距離は1.45Åでの計算を設定例条件で行わせました。



事例ページ2



事例ページ3 (逆スケール表示、明:最小値、暗:最大値)

シリコンゲルマニウムは、珪素とゲルマニウムで構成される半導体。

珪素にゲルマニウムを添加することにより、電子移動度の優れた半導体になる。従来であればヒ化ガリウム等の化合物半導体でなければ対応が困難だった高周波でも対応できる。また、従来のシリコン半導体の製造で培われた微細加工技術を適用できるので集積度を高めることが比較的容易で次世代の集積回路で期待される。電子移動度が優れているのでマイクロ波以上の周波数帯での高周波デバイスとしての用途がある。また次世代の集積回路でも期待される。2014年にはドイツのIHPとジョージア工科大学の研究チームが、最大発振周波数 798GHzという世界最速で動作するシリコン-ゲルマニウム・トランジスタを作製した。またバンドギャップが狭いため、光の吸収がシリコン単体よりも多いので高効率の太陽電池にも使用される。(wikipedia)

SiGeとは、半導体素材の一種で、シリコン(Si)にゲルマニウム(Ge)を添加したもの。半導体材料として最も一般的なシリコン単体に比べ導電性が高く高速で動作し、低消費電力でノイズも生じにくい。シリコンより性能の高い半導体材料にはガリウムヒ素(GaAs)などの化合物半導体もあるが、これらに比べると材料や製造工程にかかるコストが安価で済むというメリットがある (IT用語辞典より)。

歪みシリコン: また、SiGe自体で回路を形成するのではなく、シリコン結晶上にSiGeの膜を形成し、その上にさらにシリコンの層を形成すると、シリコン結晶より格子の大きいSiGeと同じ長さ原子間の距離が引き伸ばされたシリコン層を得ることができる。このような層を「歪みシリコン」(ひずみシリコン)と呼び、ここに回路を形成することで素子を通常より高速に動作させることができる。(IT用語辞典より)

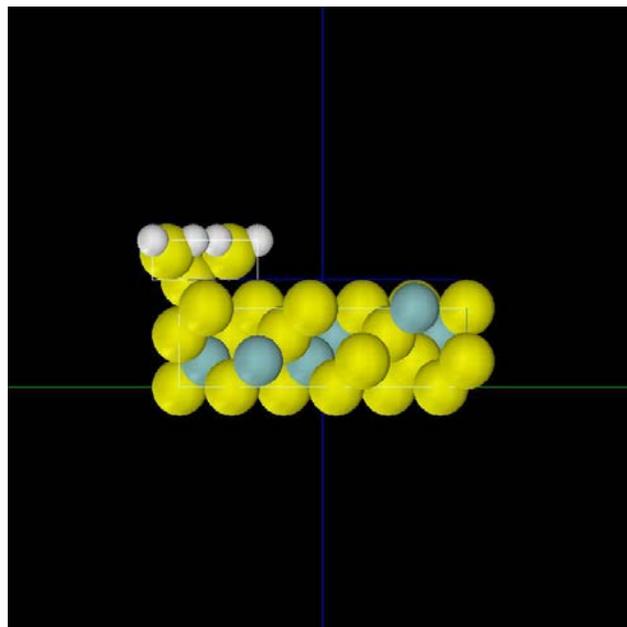
以下に、紹介事例のセットアップ条件（下左図）とシミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。

Project Editor

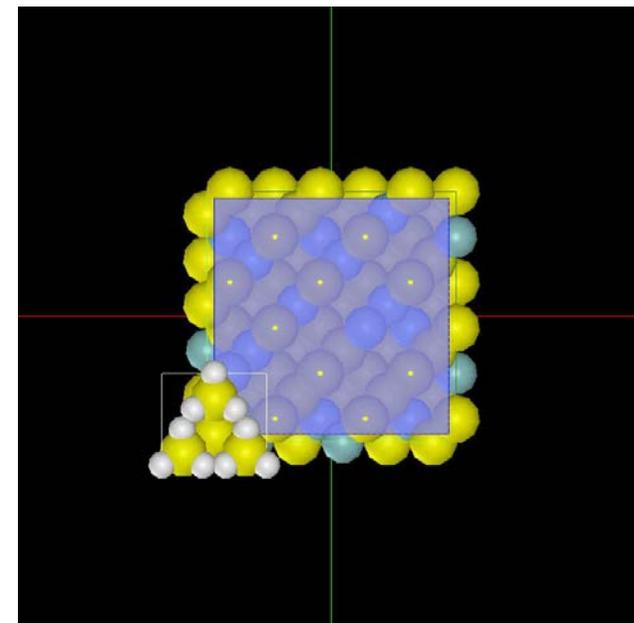
Setup DFTB

type	value
Component	
Tip	tip_si4.xyz
Position	
x	-7
y	-7
z	5.5
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	6.24
d	5.41
h	2.02466
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
ScanArea	
w	14
d	14
h	0
DistanceFromSample	1.45
Sample	SiGe_001.xyz
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	14.85
d	14.85
h	4.05
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50

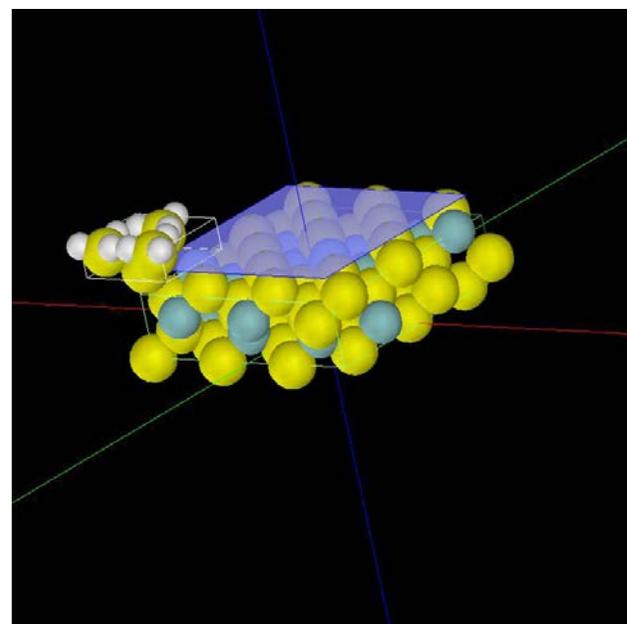
事例モデルのセットアップ条件



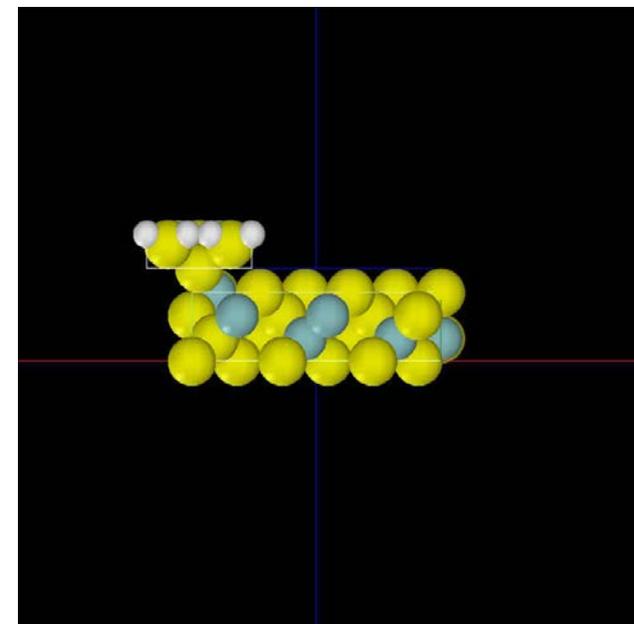
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

Project Editor

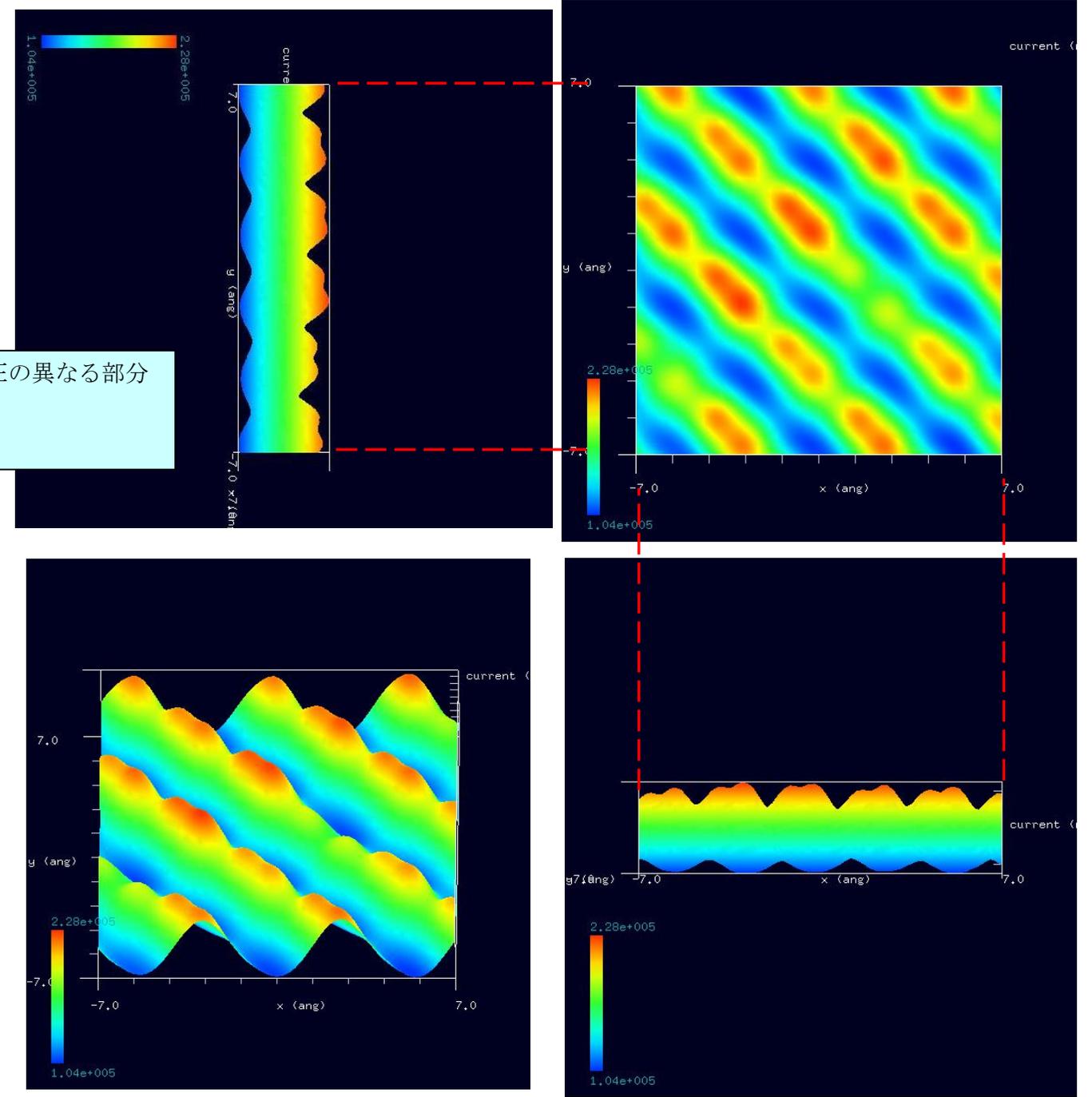
Setup **DFTB**

property	value
mode	<b>DFTB_STM</b>
title	HOPG
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	10
k_cantilever	40
resonant_freq	170
Ndiv	
X	60
Y	60
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1
TolEnergy	0.001
displacement	0.1
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	30
TolEnergy	10
output_eigenvalue	off
Fvdw	
tip_shape	conical
height_of_highest_adsorbed_molecule	0.00000
Hamaker_const	0.22000
apex_angle	160
tip_height	1000.00
radius_of_tip_apex	1.00000
tip_bias_voltage	
minimum	<b>1</b>
maximum	<b>1</b>
Ndiv	100
Ndiv_kpoints	4
electron_temperature	50
tip_charge_neutrality	
minimum	-0.1
maximum	0.10000
Ndiv	4
translational_vector	
a	
X	<b>16.2</b>
Y	<b>0</b>
Z	<b>0</b>
b	
X	<b>0</b>
Y	<b>16.2</b>
Z	<b>0</b>
c	
X	<b>0</b>
Y	<b>0</b>
Z	<b>5.4</b>
solver_type	CPU
OpenMP_threads	4
Output	

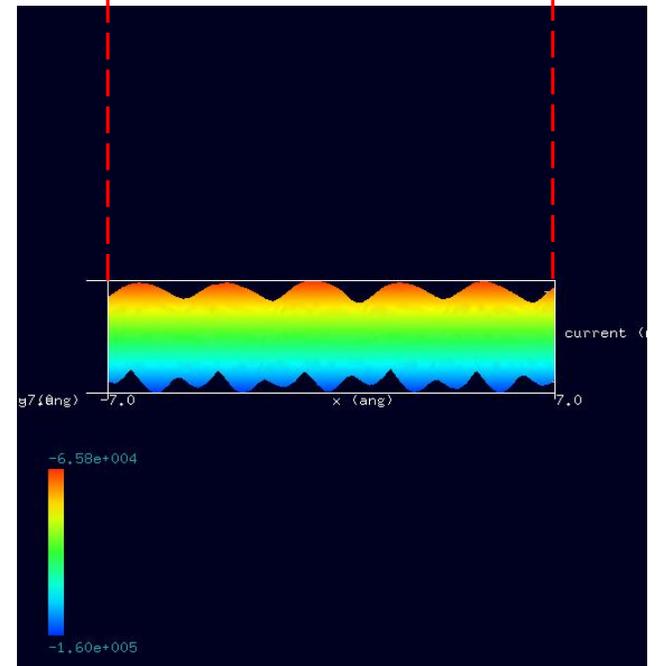
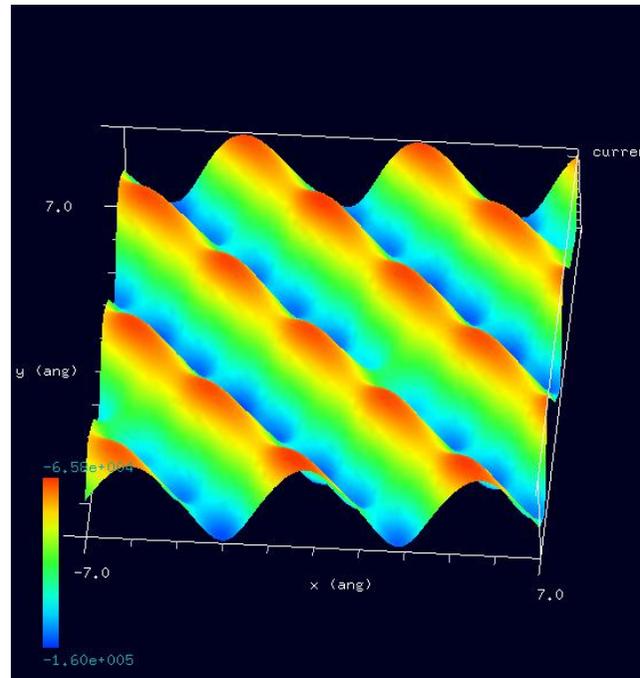
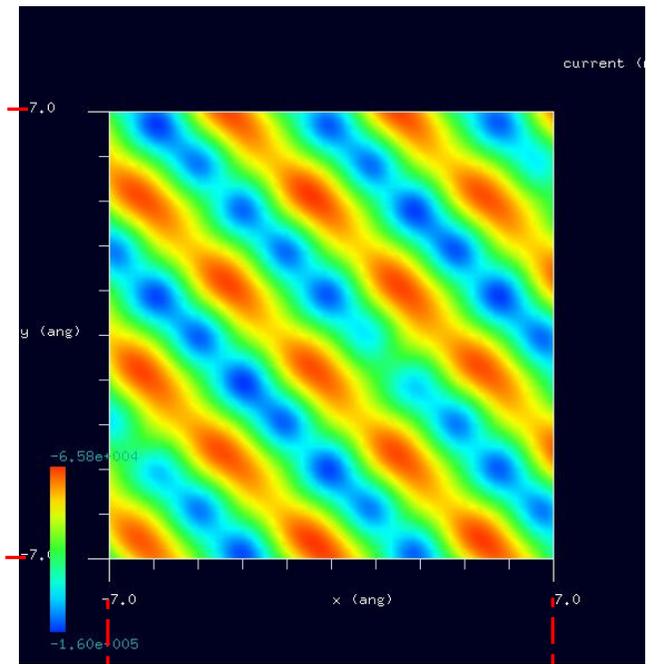
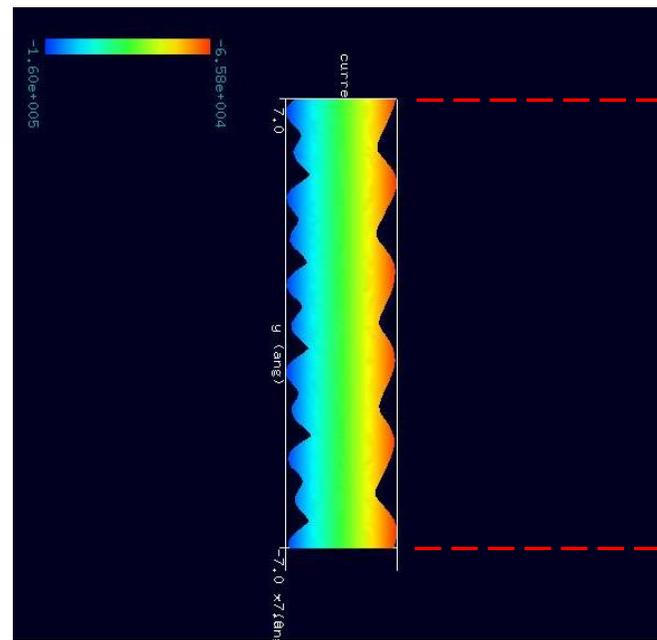
設定条件

TIPバイアス電圧の異なる部分  
 (a) +1.0V  
 (b) -1.0V

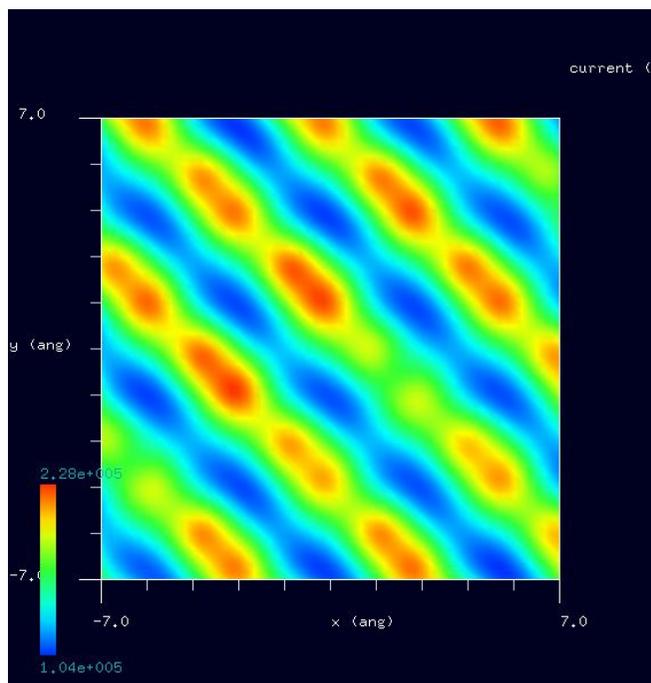
TIPバイアス電圧+1Vでの、シミュレーション結果・Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します



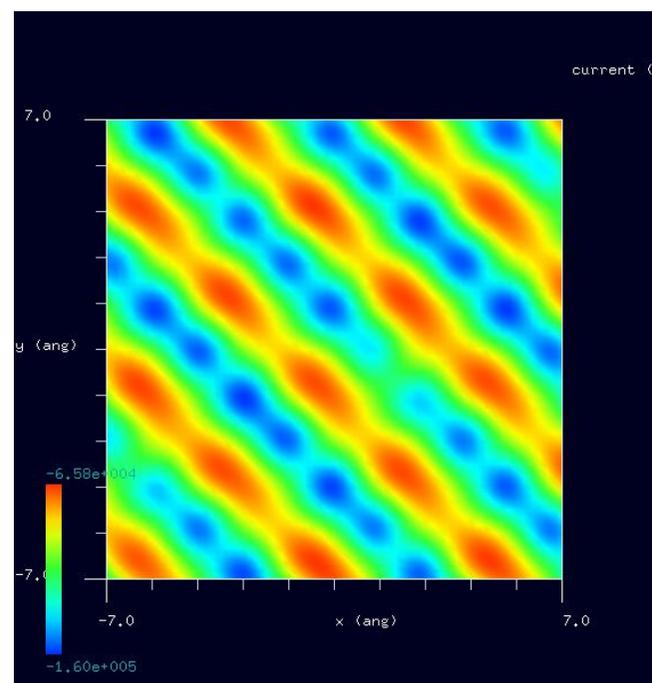
TIP バイアス電圧  $-1V$  での、シミュレーション結果  
・Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、  
TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図)  
として示します。



TIPバイアス電圧+1 V



TIPバイアス電圧-1 V

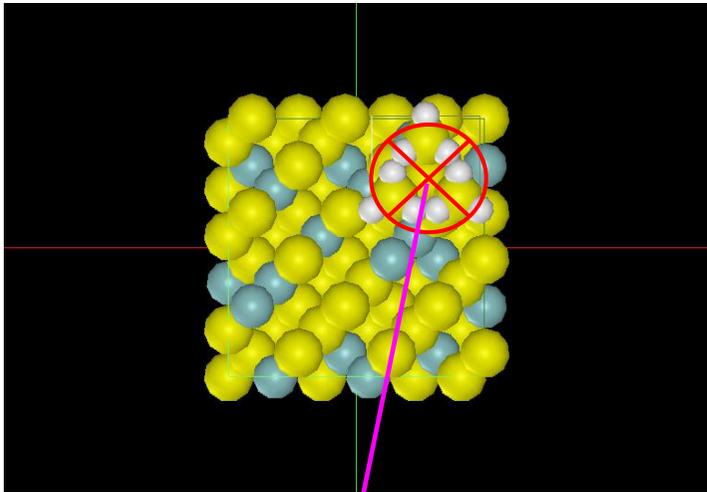


バンドギャップの特徴である、TIPバイアス電圧の正負による、明暗の反転があることから、半導体としての性質を示すといえます。

●DFTB STS : SiGe の観察シミュレーション SiGe の立方晶の(001)面のトンネル電流分光 計算事例②

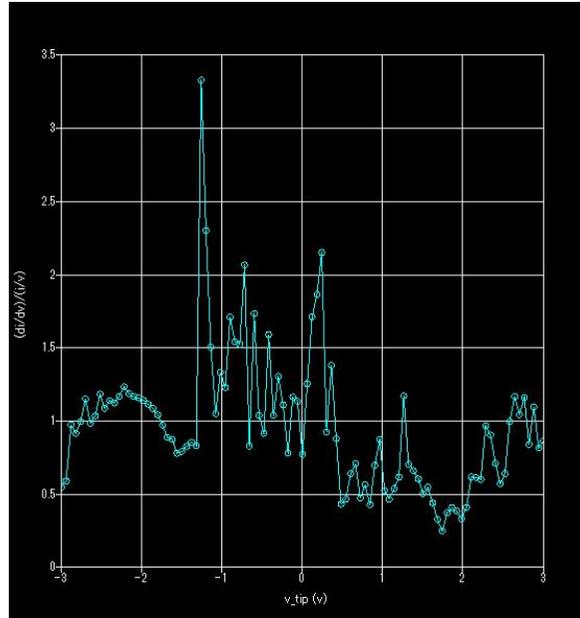
分類 : DFTB STS (トンネル電流分光)、Å オーダー、無機半導体

・シミュレーション計算・探針ポイント1

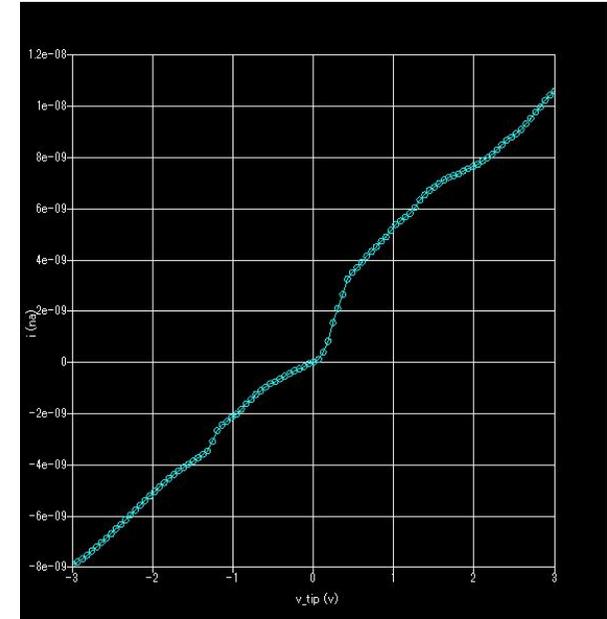


シミュレーション計算・探針ポイント1

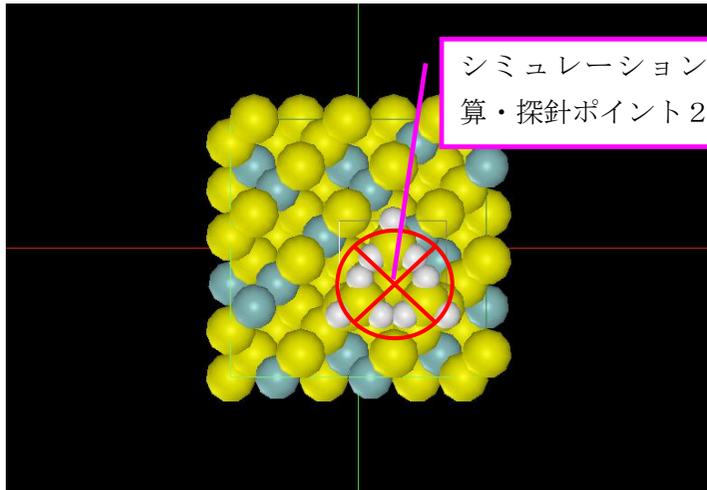
スペクトル曲線



電圧・電流曲線

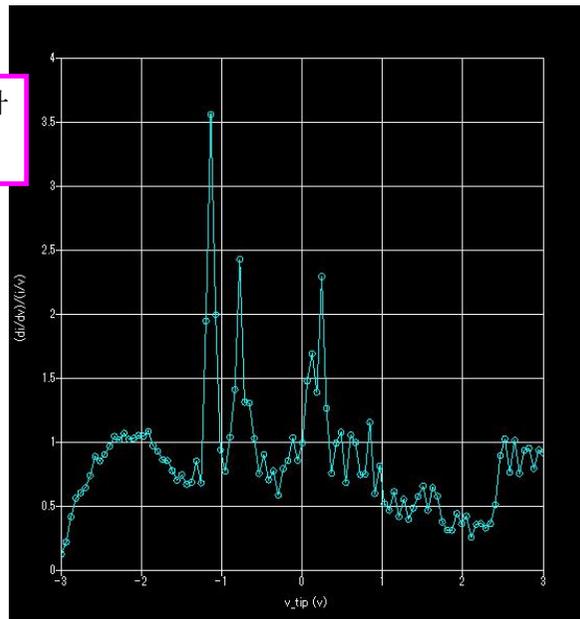


・シミュレーション計算・探針ポイント2

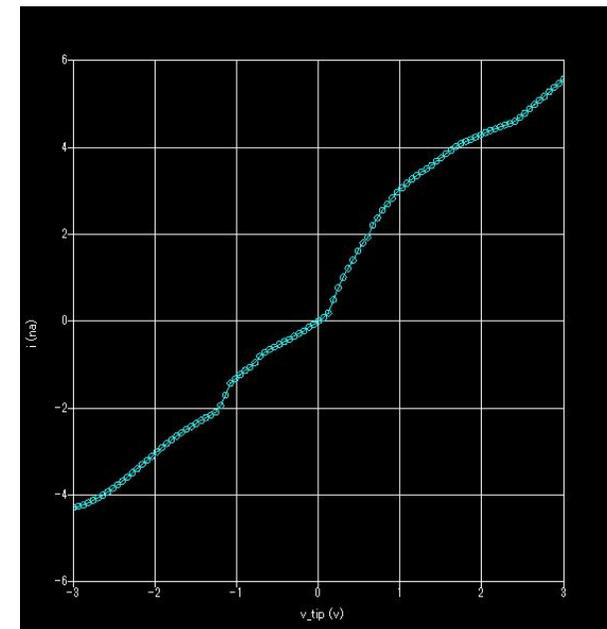


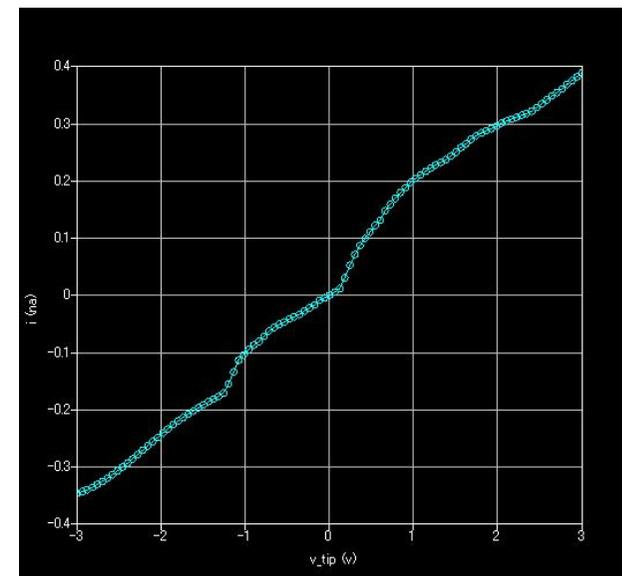
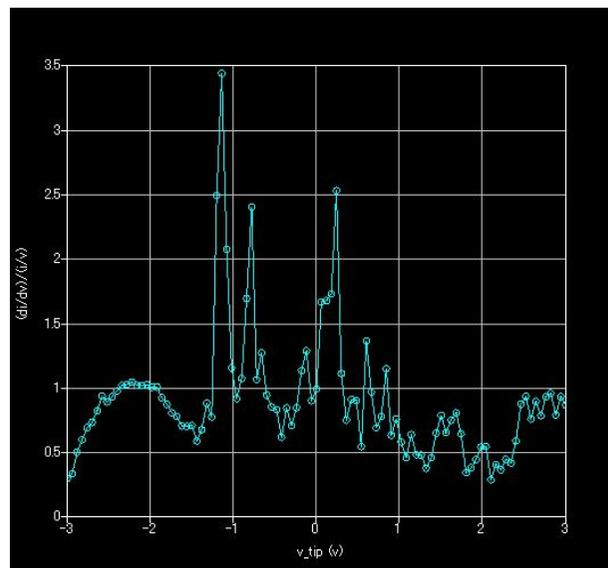
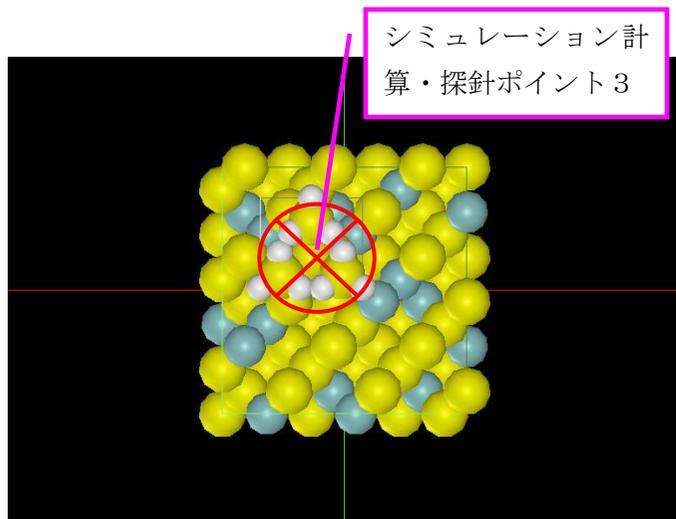
シミュレーション計算・探針ポイント2

スペクトル曲線



電圧・電流曲線





シミュレーション計算・探針ポイント1 - 3における「スペクトル曲線」および「電圧・電流曲線」に大きな変化はありません。Geの位置に関係なく、半導体としての性質が現れていると言えます。

探針ポイント1 : 計算モード識別番号 : [[project\\_file\\_for\\_beginners\\_version\\_DFTB\\_STS\\_Inorganic\\_SiGe\\_move1\\_hight\\_execute](#)]

探針ポイント2 : 計算モード識別番号 : [[project\\_file\\_for\\_beginners\\_version\\_DFTB\\_STS\\_Inorganic\\_SiGe\\_move2\\_hight\\_execute](#)]

探針ポイント3 : 計算モード識別番号 : [[project\\_file\\_for\\_beginners\\_version\\_DFTB\\_STS\\_Inorganic\\_SiGe\\_move3\\_hight\\_execute](#)]

# 15・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
●	●	DFTB	DFTB_STM	ConstantHeight	高さ一定、トンネル電流像:	量子力学的 SPM 像シミュレータ
			DFTB_STM	ConstantCurrent	コンスタントカレント、 STM トポグラフィイー像	
			DFTB_STS		トンネル電流分光	
			DFTB_AFM		周波数シフト AFM 像	
			DFTB_KPFM		ケルビンプローブ力顕微鏡像	
●	●	SetModel				試料と探針の原子モデル作成