

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[Part7: 触媒物質の観察]」編

株式会社 Advanced Algorithm & Systems

2018.03.27

1・目次

[Part7: 触媒物質の観察]が提示する**計算事例（1～14）**は、用途別市場において
https://www.aasri.jp/pub/spm/pdf/catalog/imagepamphlet/SPM_ApplicationField.pdf
https://www.aasri.jp/pub/spm/SPM_simulator_application_examples.html

研究テーマでは、 触媒

用途別市場では、

用途区分 自動車 化学プラント

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「触媒物質の観察」向けです。**

以下に参考事例モデルの各ソルバによる計算例のリストを示します。

（注：本計算事例シリーズは、SPMシミュレータの使い方を説明したテキストである「SPMチュートリアル」で、使い方の基礎を習得された方が、応用例である計算事例を扱う際の注意点を記してあります。）

1・目次（本ページ）

- 2・DFTB_STM（量子論的SPM像シミュレータ）
 - ConstHeightSTM（高さ一定STM画像シミュレーション）
 - ConstCurrentSTM（コンスタントカレント、STMトポグラフィ像）
 - 1・高さ一定モードによるRuO₂(110)表面のトンネル電流像STMシミュレーション（**計算事例1**）
 - 2・電流一定モードによるRuO₂(110)表面のSTMトポグラフィ像シミュレーション（**計算事例2**）

- 3・DFTB_STM (量子論的SPM像シミュレータ) ConstHeightSTM (高さ一定STM画像シミュレーション)
FreqShift (周波数シフトAFM画像シミュレーション)
 - 1・Au(111)基板上的の水分子のSTM像観察 (計算事例3)
 - 2・Au(111)基板上的の水分子のSTM像観察2 (計算事例4)
 - 3・Au(111)基板上的の水分子のSTM像観察3 (計算事例5)
 - 4・Au(111)基板上的の水分子のSTM像観察4 (計算事例6)
 - 5・Au(111)基板上的の水分子のAFM像観察 (計算事例7)

- 4・DFTB_STM (量子論的SPM像シミュレータ) ConstHeightSTM (高さ一定STM画像シミュレーション)
 - 1・ZrO₂(ジルコニア) 単斜晶(001)面(空間群番号:14)[常温の場合]の観察 (計算事例8)
 - 2・ZrO₂(ジルコニア) 単斜晶(110)面(空間群番号:14)[常温の場合]の観察 (計算事例9)
 - 3・ZrO₂(ジルコニア) 立方晶(001)面(空間群番号:225)[高温の場合]の観察 (計算事例10)
 - 4・ZrO₂(ジルコニア) 立方晶(110)面(空間群番号:225)[高温の場合]の観察 (計算事例11)

- 5・DFTB (量子論的SPM像シミュレータ) ConstCurrentSTM (コンスタントカレント、STMトポグラフィ像)
ConstHeightSTM (高さ一定STM画像シミュレーション)
 - 1・Pt(111)表面のトンネル電流像観察 (計算事例12)
 - 2・Pt(111)表面のトポグラフィ像観察 (計算事例13)
 - 3・Pt(110)-(1x2)表面のトポグラフィ像観察 (計算事例14)

- 6・本編でのSPMシミュレータにおけるソルバー一覧

2. DFTB_STM (量子論的 SPM 像シミュレータ) ConstHeightSTM (高さ一定 STM 画像シミュレーション)

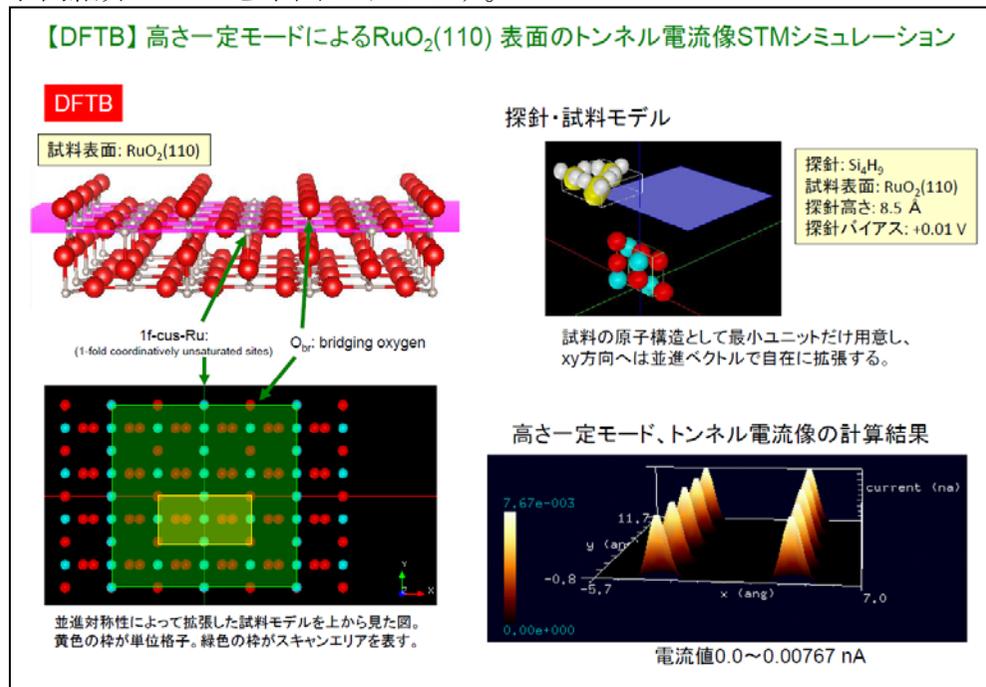
2-1 ●DFTB_STM・高さ一定モードによる RuO₂ (110) 表面のトンネル電流像 STM シミュレーション 計算事例①

計算モード識別番号: [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_012]

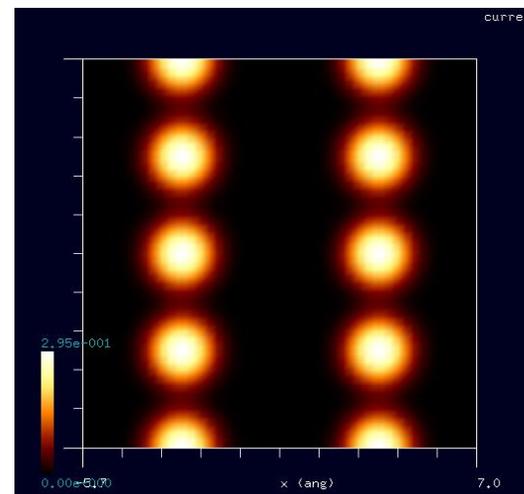
ソルバ・モード・計算例アドレス https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php

分類: DFTB_STM (高さ一定 STM 画像シミュレーション)、Åオーダー、触媒

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ



シミュレーション結果 TOP 図 (Gradation 表示)

① 概要

本事例は、酸化ルテニウム RuO₂(110) 表面を、DFTB 高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。

本計算事例の入力条件について記載します。

SPMシミュレータを起動して、上記ソルバ・モード・計算例アドレスより、AASホームページにアクセスし、計算モード識別番号:

[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_012]のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください。プロジェクト・ファイルはZIPファイルとして圧縮されていますので、解凍してください。メニューバーの[File]→[Open]をクリックすると、[Open project]というタイトルのボックスが現れます。そこで、解凍したファイルフォルダを選択すると、projectファイル "*.pro"があるので、選択し“開く”ボタンを押します。これで、紹介事例のプロジェクトがファイルが読み込まれます(本事例以降の事例では、「SPMシミュレータを起動」以降の説明を割愛します)。

② セットアップ条件 (Project・Editor Setup・Tab)

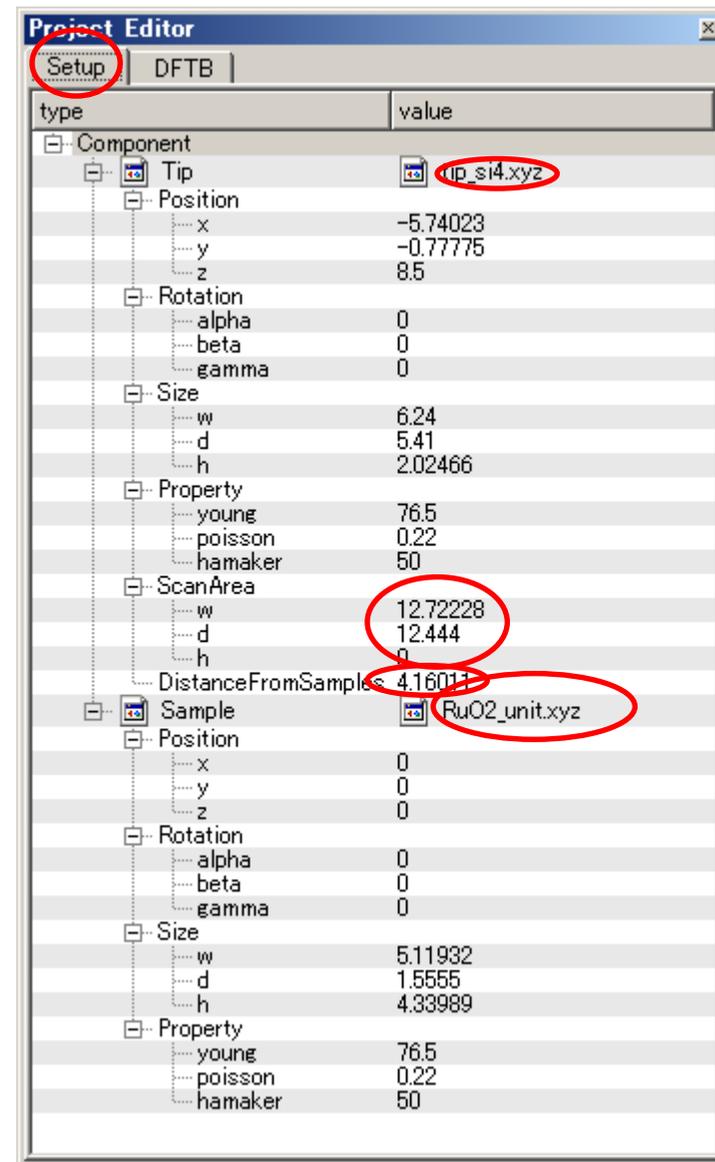
[Project Editor]の[Setup]タブをクリックします。

スキャンエリアは「**W12.7Å×D12.4Å×H0.0Å**」と設定されています。

探針試料間距離は **4.16Å**としています。

探針は登録済みデータ「**Si4H9**」を用います。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



事例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。

③ DFTB解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

[Project Editor]の[DFTB]タブをクリックします。

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

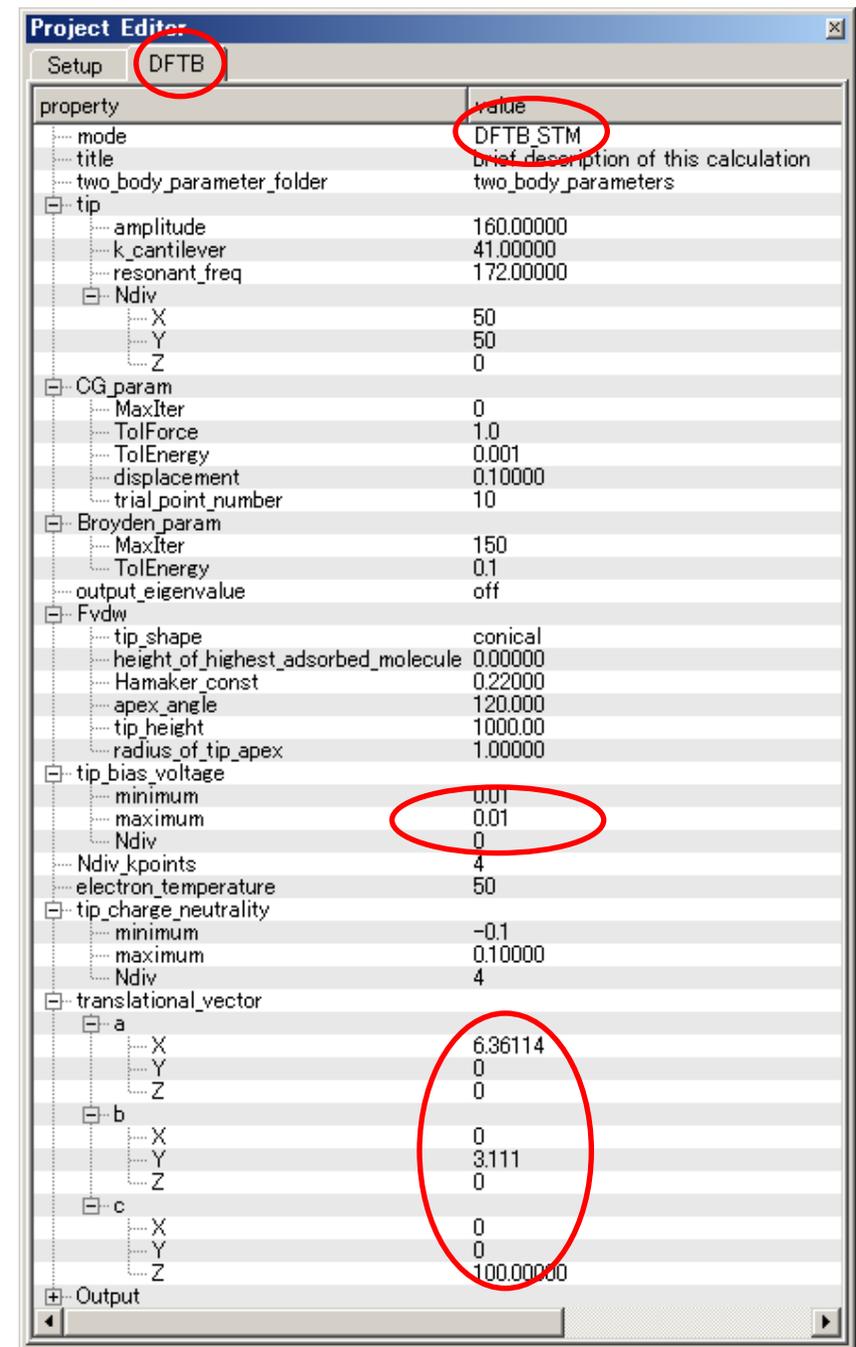
「stm_mode」は、「ConstantHeight」(デフォルト設定となり、記述がない場合があります)とします。

周期境界を考慮します(但し、単位格子ベクトル $c = (0, 0, 100)$ とし、 x - y 方向のみ有効です)。

TIPバイアス電圧を0.01Vでの計算を設定条件で行わせました。

並列化処理設定を行っていません(設定記載なしの場合1スレッド対応)。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

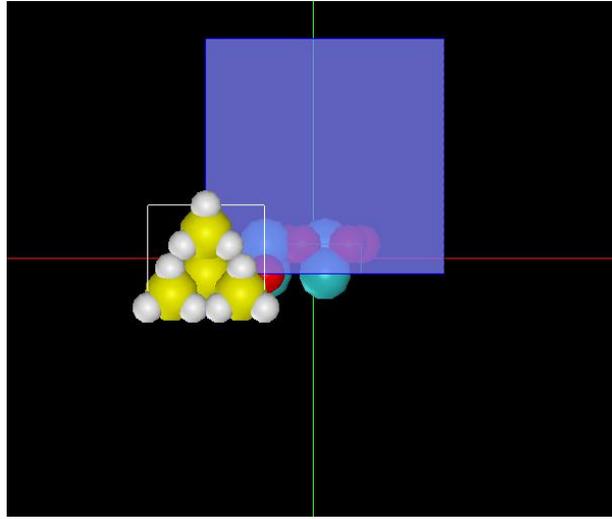


設定条件

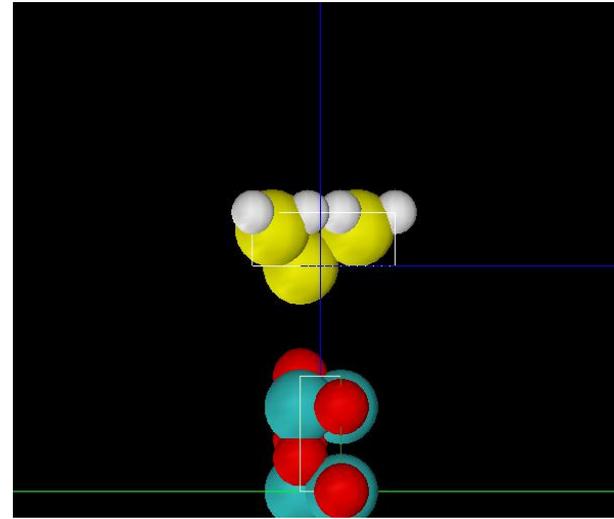
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

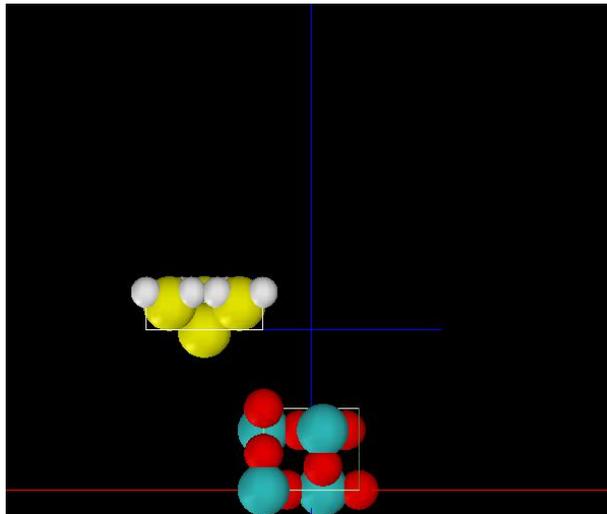
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



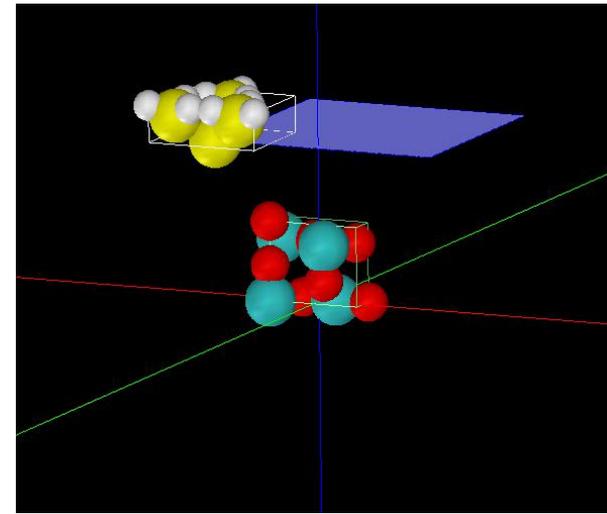
TOP



SIDE



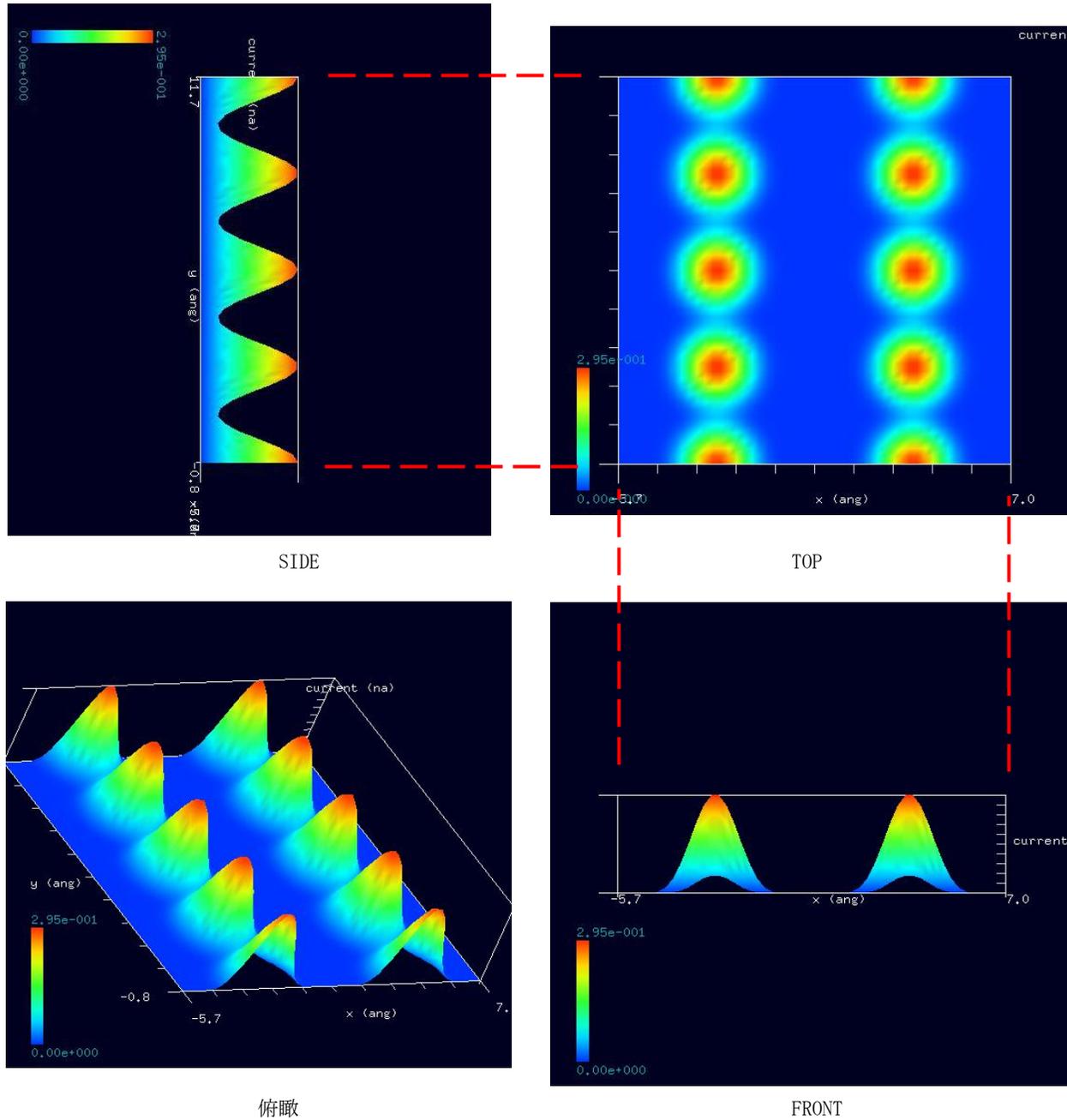
FRONT



俯瞰

⑤ シミュレーション結果

以下に、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。



⑥ 二酸化ルテニウム RuO₂ について

触媒（しょくばい）とは、特定の化学反応の反応速度を速める物質で、自身は反応の前後で変化しないものをいう。（wikipedia）

ルテニウム（英：ruthenium）は原子番号 44 の元素。元素記号は Ru。漢字では釘（かねへんに了）と表記される。白金族元素の 1 つ。貴金属にも分類される。銀白色の硬くて脆い金属（遷移金属）で、比重は 12.43、融点は 2500 ° C、沸点は 4100 ° C（融点、沸点とも異なる実験値あり）。常温、常圧で安定な結晶構造は、六方最密充填構造（HCP）。酸化力のある酸に溶ける。王水とはゆっくり反応。希少金属である。（wikipedia）

触媒としての利用：オスミウムとの合金が、万年筆などのペン先（ニブポイント）に使われる。有機化学分野においては不飽和結合を水素化する際の触媒として多用される。不斉要素を持った配位子を配位させることによって面選択的な水素化も実現しており、この技術を開発した野依良治教授が 2001 年のノーベル化学賞を受賞している。四酸化ルテニウムや過ルテニウム酸塩などは酸化剤として多用される。またルテニウムのカルベン錯体は二重結合同士を組み替えるメタセシス反応の触媒となり、中でも近年開発されたグラブス触媒は近年の有機合成分野に革命的な変化をもたらしている。グラブスらは、メタセシス反応により有機合成化学のみならず、多様な分野に与えた革新的な業績が評価され、2005 年のノーベル化学賞を受賞した。また、アンモニア合成の際の三重促進鉄触媒に代わる触媒として利用されている。（wikipedia）

電解工業での利用：DSA電極にRuO₂の形でコーティングされ電解の効率化に役立っている。これは塩素過電圧、酸素過電圧が他と比べ低い事、耐食性が優れている性質を利用している。（wikipedia）

酸化ルテニウム(IV) (RuO₂) の利用： 低温での抵抗温度計や、チップ抵抗器として用いられる。（wikipedia）

⑦ 触媒となる条件について

- ・構造的、電子的な不連続サイトが水素を解離する触媒活性点として機能するが、ステップサイトは多くの触媒反応の活性点であると考えられている。
- ・2種類の金属から成る合金では、単一成分の場合に比べて触媒活性が飛躍的に向上する場合がある。その原因として、異種金属の合金化による格子ひずみ、電気陰性度の違いによる電荷移動のような電子状態の変化、異種金属の配置によるアンサンブルの形成などがあげられる。
- ・正の電荷をもった金属原子と負の電荷をもった酸素原子から成る金属酸化物の表面は金属表面とは全く異なる化学活性を示す。金属酸化物表面では、金属表面に比べ多くの金属欠陥や酸素欠陥などが存在することが一般的で、触媒作用を論じる時、欠陥の働きが無視できず、むしろ欠陥サイトの存在が反応性をきめている場合も多いと言われている。
- ・「表面特有の金属錯体の反応性を利用する」場合もある。

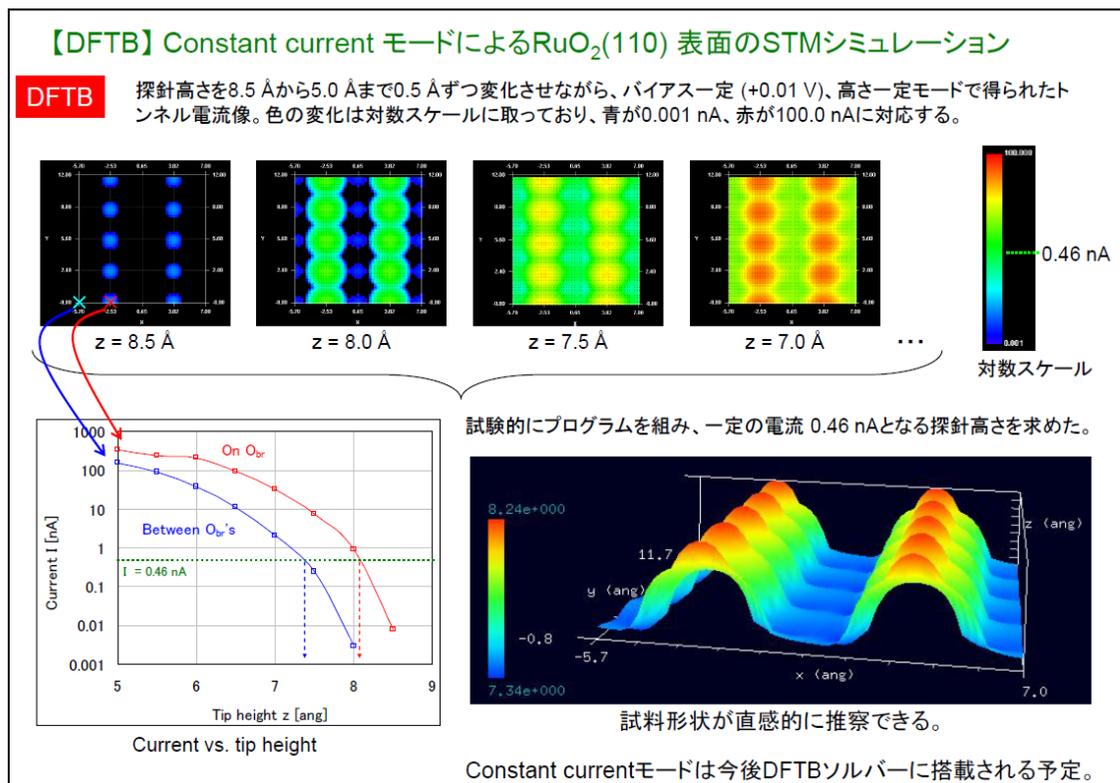
（表面科学 Vol. 31, No. 2, pp. 73-80, 2010、原子分子レベルの触媒表面科学、電気通信大学 岩澤康裕 様より抜粋）

2-2 ● DFTB_STM・電流一定モードによるRuO₂ (110) 表面のトポグラフィー像STMシミュレーション 計算事例②

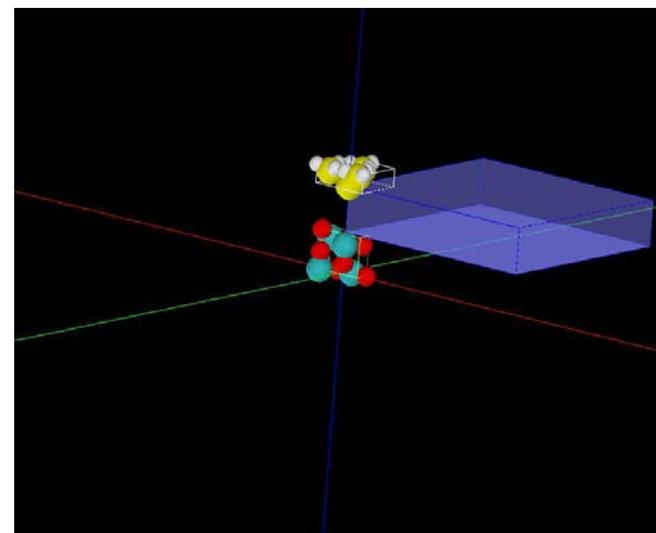
ソルバ・モード・計算例アドレス [DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_RuO2_execute.zip](#)

分類：DFTB_STM（電流一定STM画像シミュレーション）、Åオーダー、触媒

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ



試料モデルとスキャンエリアの俯瞰図

① 概要

本事例は、酸化ルテニウム RuO₂(110) 表面を、DFTB 電流一定のトポグラフィー像でシミュレートします。

本計算事例の入力条件について記載します。

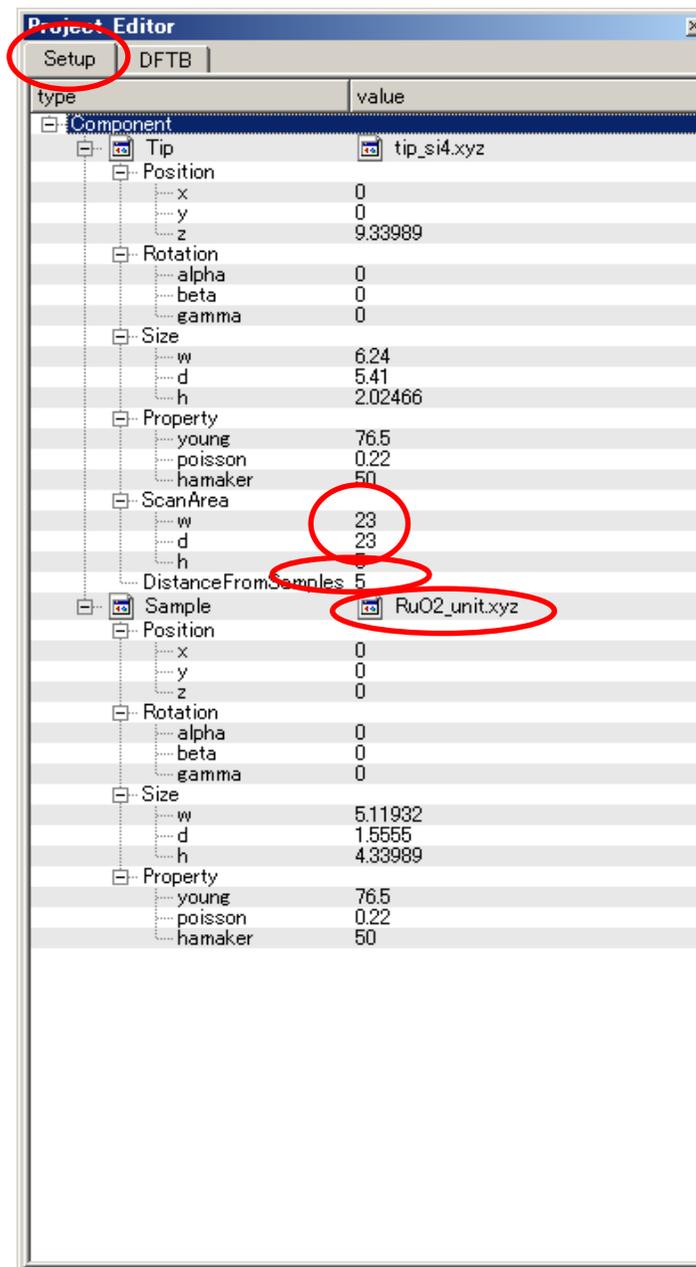
② セットアップ条件 (Project・Editor Setup・Tab)

[Project Editor]の[Setup]タブをクリックします。

試料探針間距離は、「5Å」、

スキャンエリアは「W23Å×D23Å×H5.0Å」と設定されています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

③ DFTB解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

「stm_mode」は、「ConstantCurrent」とします。

電流設定「feedback_param」の「set_point」を0.47 nA電流一定とします。

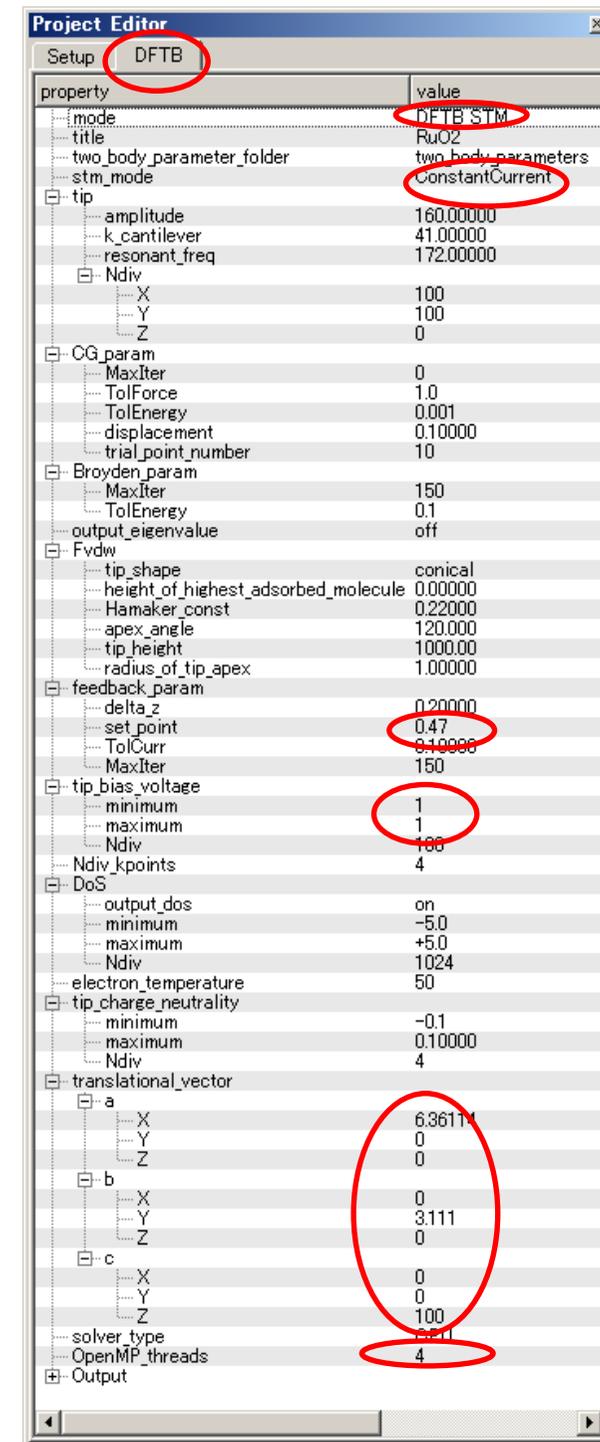
TIPバイアス電圧+1Vをminimum, maximum共に設定します (電圧固定)。

周期境界を考慮します (但し、単位格子ベクトル $c = (0, 0, 100)$ とし、 x - y 方向のみ有効です)。

並列化処理設定を行っています (4スレッド対応)。

(探針振動の共鳴周波数「172KHz」はDFTB_AFM モードで周波数シフトを計算するとき利用します。)

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

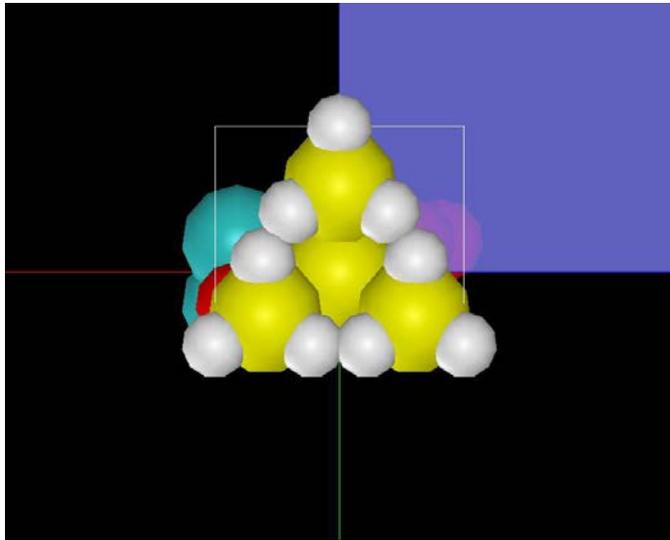


※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

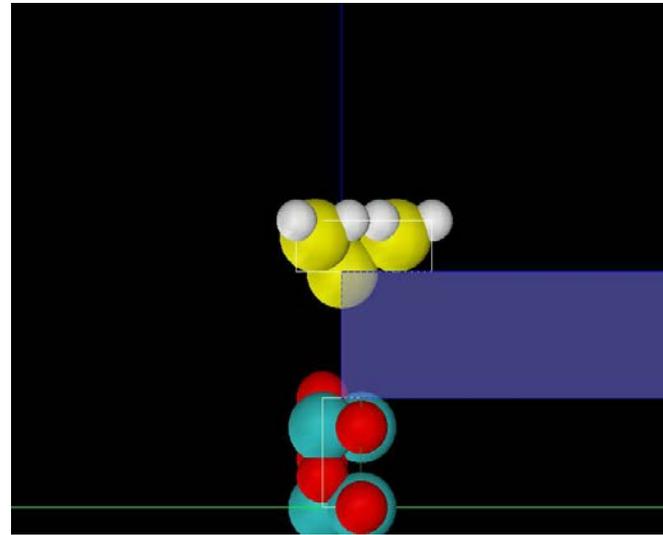
設定条件

④ 探針、試料モデル

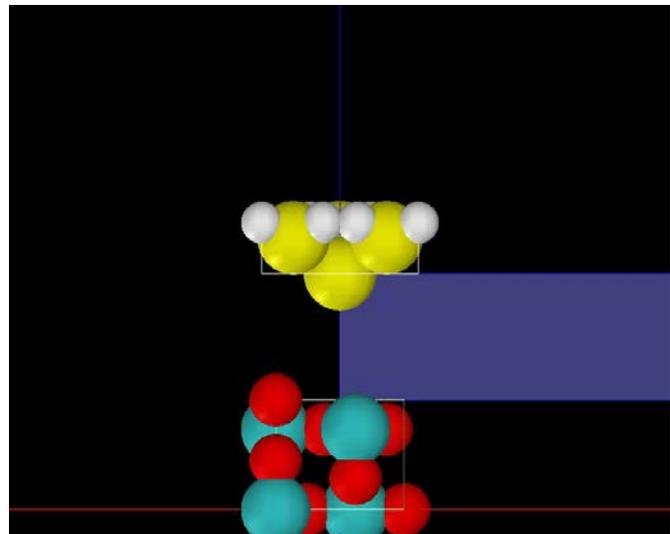
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



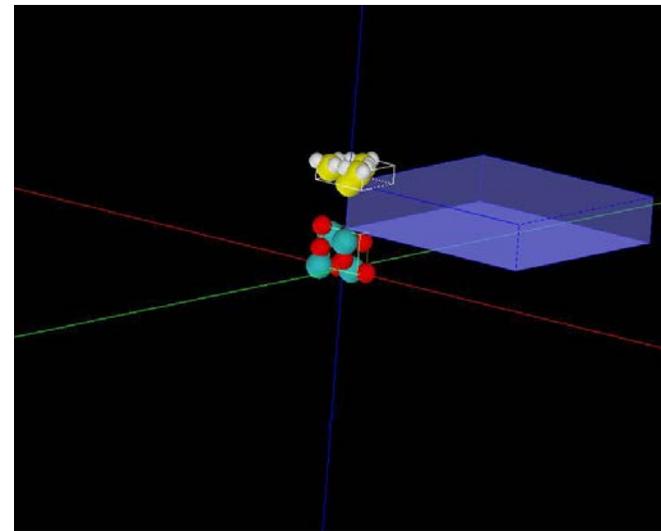
TOP



SIDE



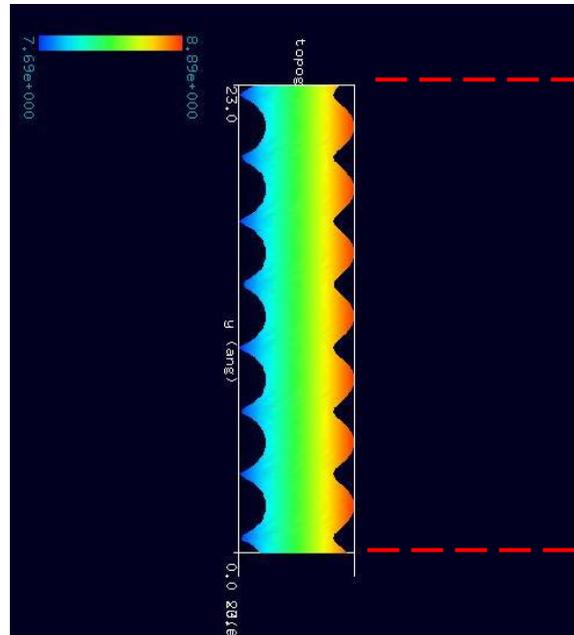
FRONT



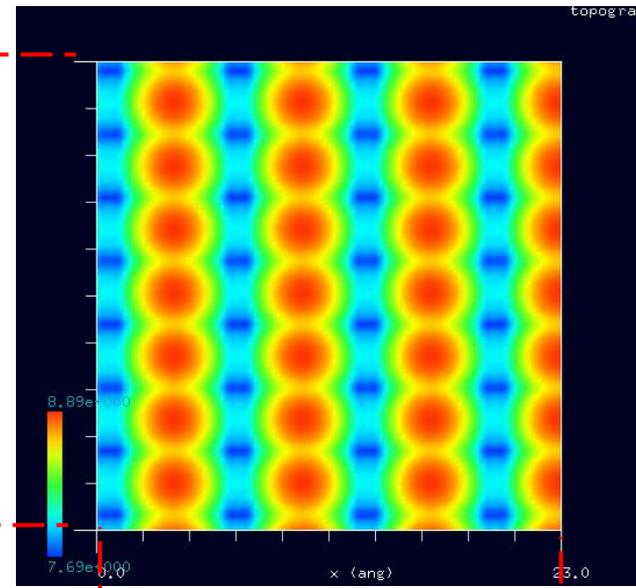
俯瞰

⑤シミュレーション結果・

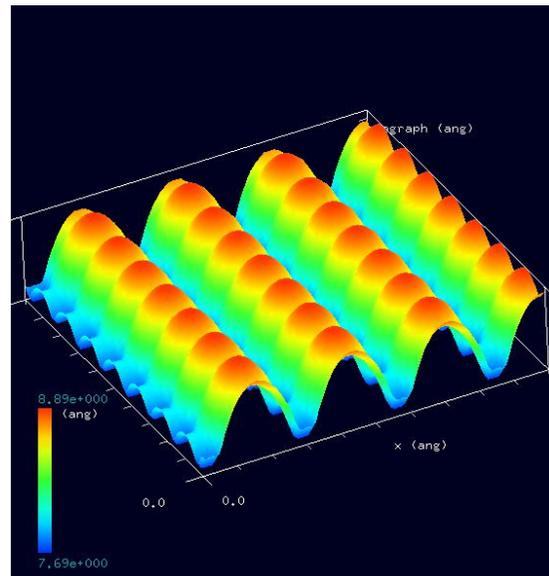
Rainbow色表示モデルをSIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



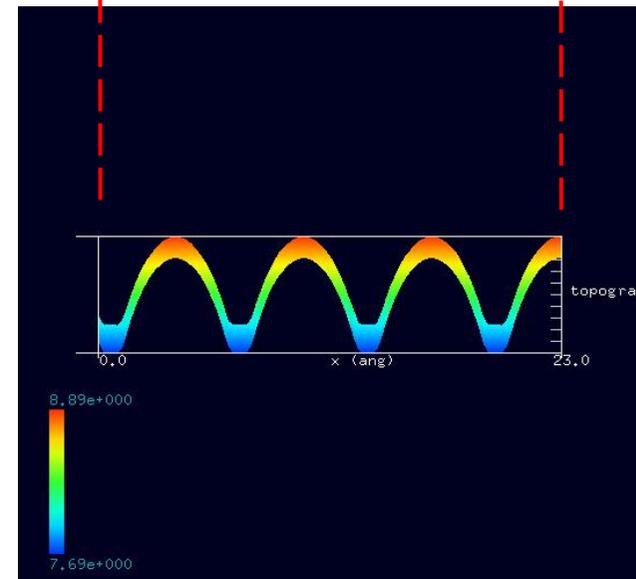
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

3・(量子論的SPM像シミュレータ) ConstHeightSTM (高さ一定STM画像シミュレーション)

FreqShift (周波数シフトAFM画像シミュレーション)

3-1●DFTB_STM・高さ一定モードによる Au(111)基板上的の水分子のトンネル電流像 STM シミュレーション 計算事例③

計算モード識別番号：[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_018]

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

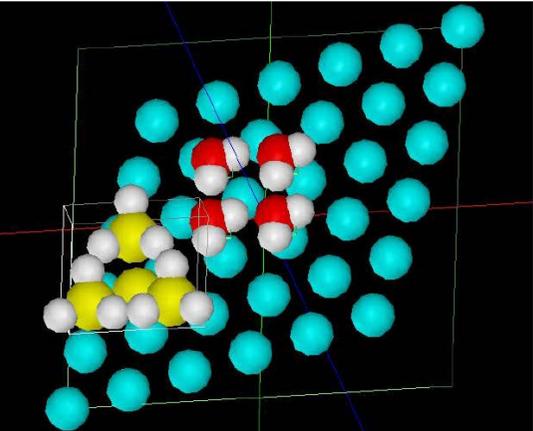
分類：DFTB_STM (高さ一定 STM 画像シミュレーション)、Åオーダー、触媒

事例紹介ページを下左図に示します。

エレクトロニクス

【DFTB】Au(111)基板上的の水分子のSTM像およびAFM像

水素終端されたシリコン探針を使用



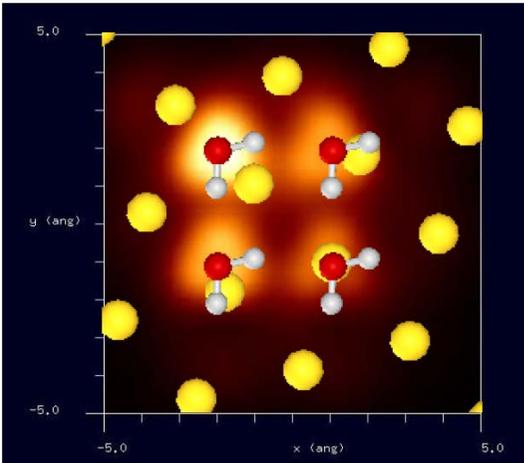
•Au(111)面の形状データは SetModelで作成します
•水分子の形状データは、フリーソフトChemSketchで作成します

事例紹介ページ1

エレクトロニクス

【DFTB】Au(111)基板上的の水分子のconstant height STM像

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離1.2 Å
最大電流 1.91×10^5 nA、最小電流 9.49×10^3 nA



金属表面上に水分子が数個付着したような系でも、STM像シミュレーション可能です

事例紹介ページ2

① 概要

本事例は、Au(111)基板上的の水分子を、DFTBトンネル電流像でシミュレートします。
本計算事例の入力条件について記載します。

水分子は、セットアップ条件の中で、4分子を追加します。

② セットアップ条件 (Project・Editor Setup・Tab)

[Project Editor]の[Setup]タブをクリックします。

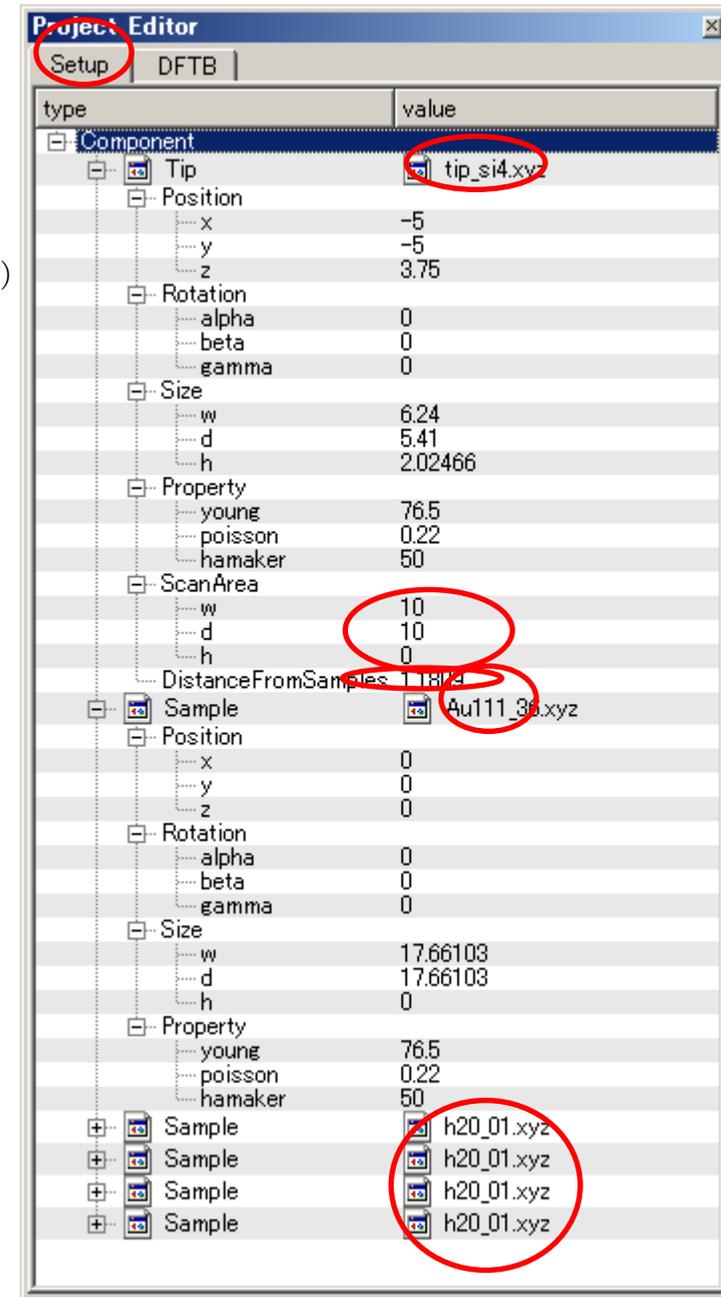
スキャンエリアの設定は有効です。

スキャンエリアは「 $W10\text{\AA} \times D10\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針は登録済みデータ「Si4H9」を用います。

探針試料間距離は 1.1809\AA としています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

③ DFTB 解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

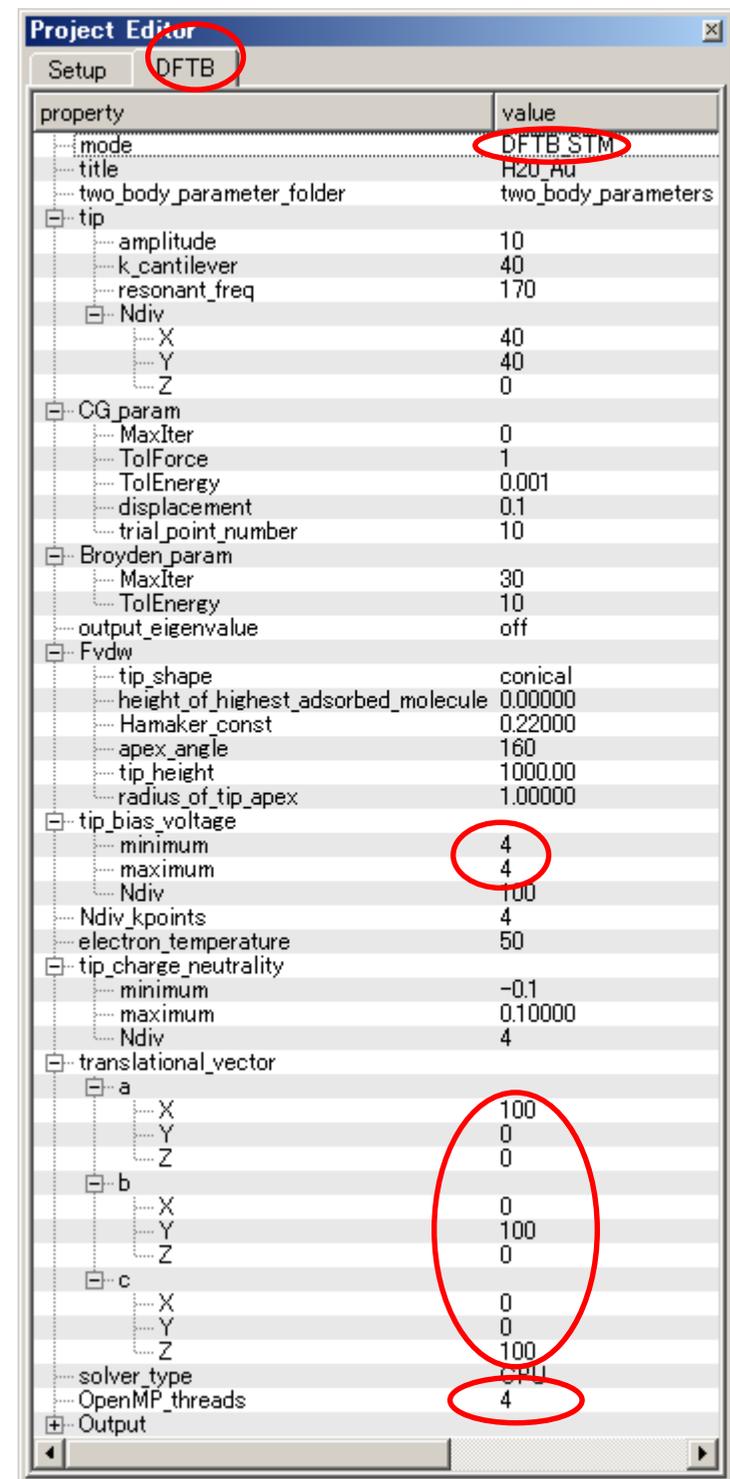
「stm_mode」は、「ConstHeight」(デフォルト設定となり、記述がない場合があります) とします。

周期境界は考慮されません。

TIP バイアス電圧 +4.0Vでの計算を設定条件で行わせました。

並列化処理設定を行っています (4スレッド対応)。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

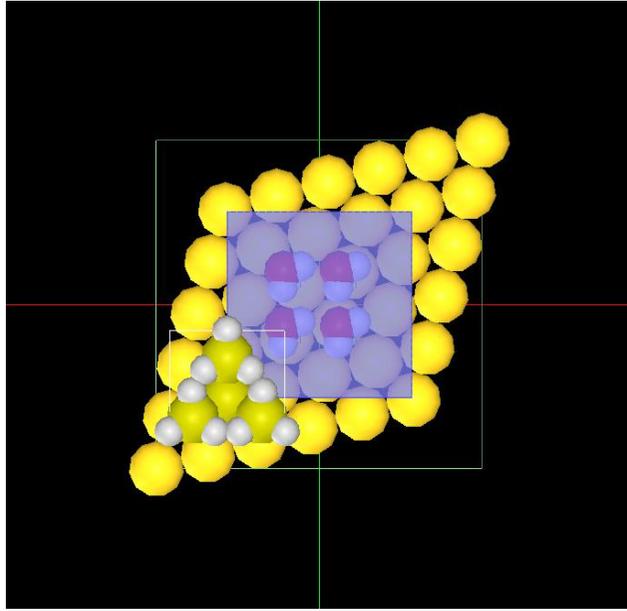


設定条件

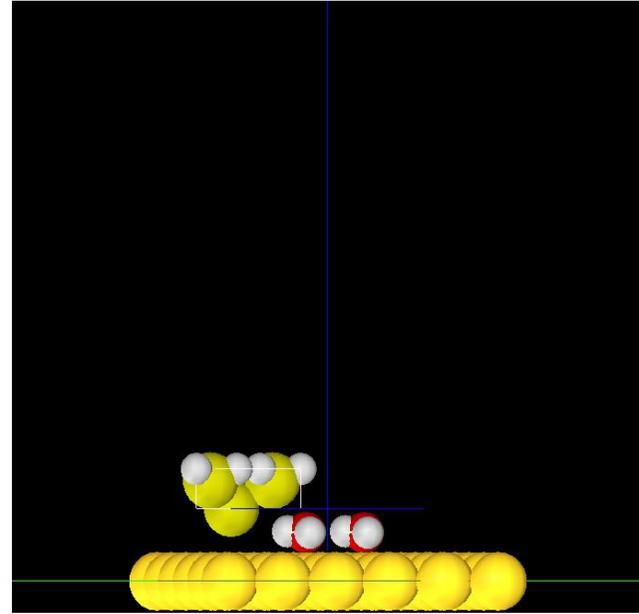
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

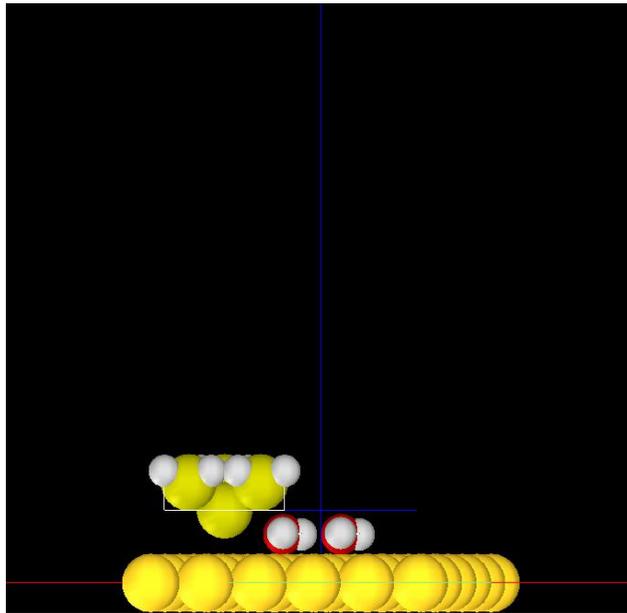
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



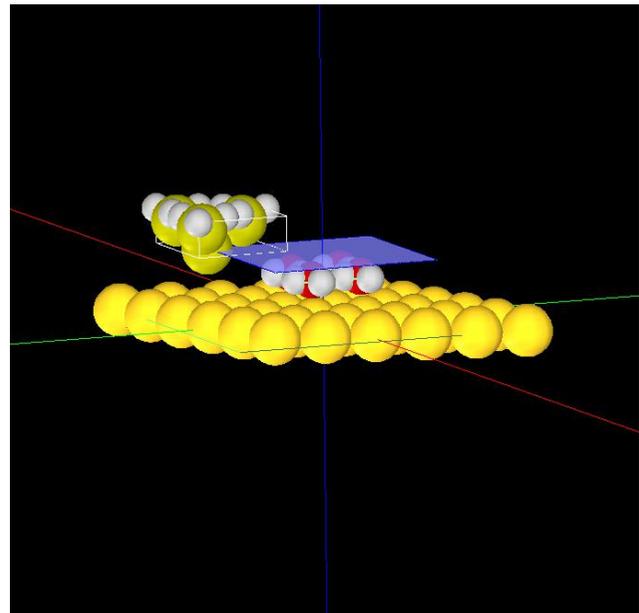
TOP



SIDE



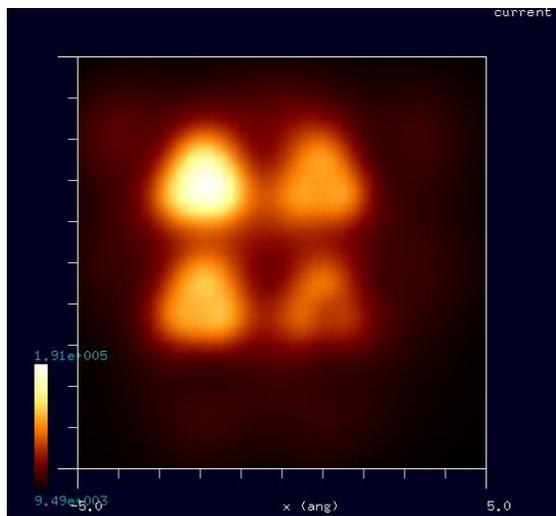
FRONT



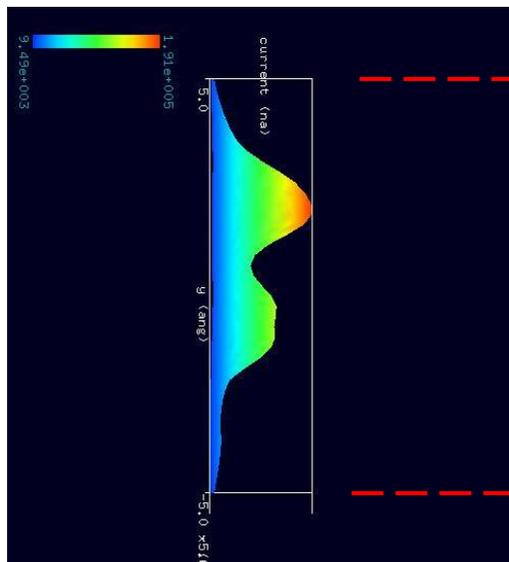
俯瞰

⑤ シミュレーション結果

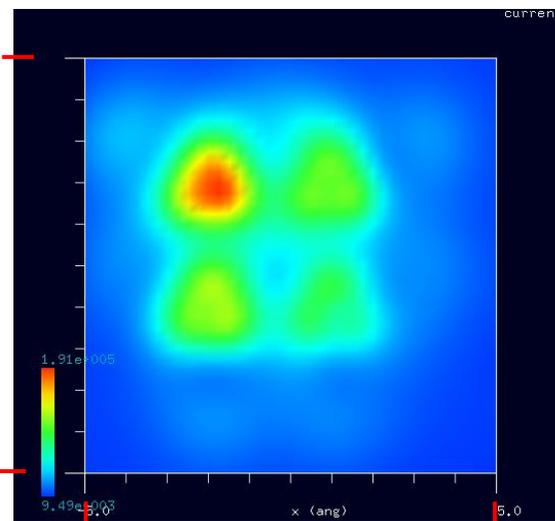
以下に、シミュレーション結果を3D-ViewのRainbow色表示で、TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。参考としてGradation表示TOP画像を示します。



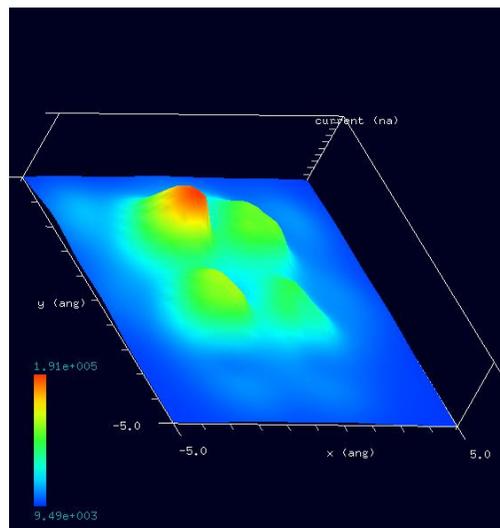
TOP (Gradation表示)



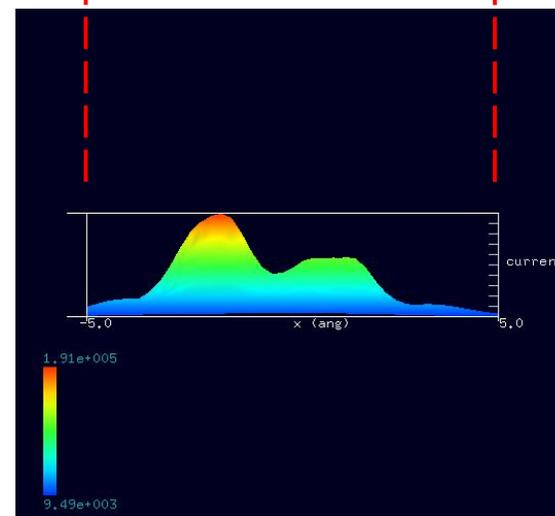
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

⑥AU（金）の触媒作用について

金を直径 10 nm以下のナノ粒子にして担体（TiO₂ 等）上に分散・固定すると、触媒の作用が現れます。

3-2 類例●DFTB_STM・高さ一定モードによる Au(111) 基板上的の水分子のトンネル電流像 STM 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_018+au]

ソルバ・モード・計算例アドレス [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_018+au.zip](#)

分類：DFTB_STM（高さ一定 STM 画像シミュレーション）、Åオーダー、触媒

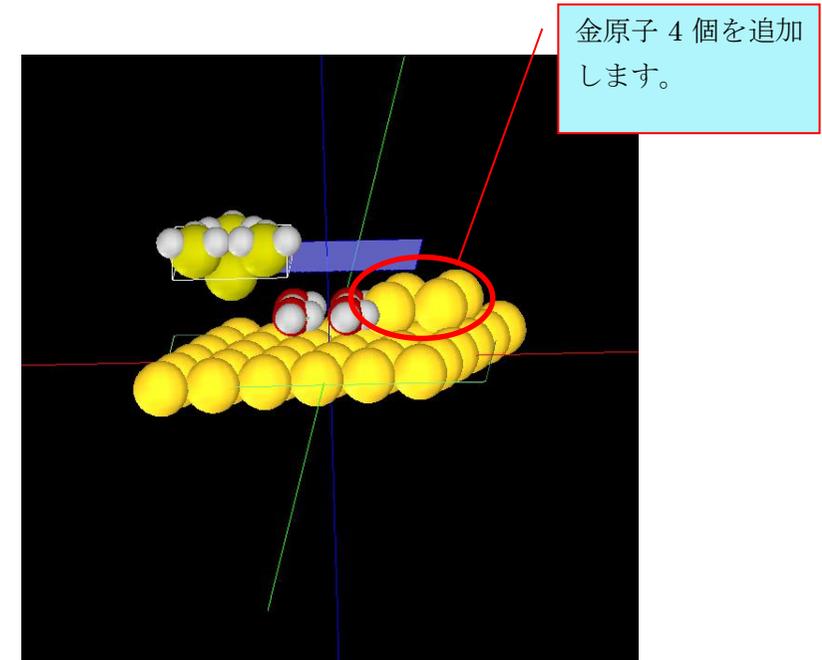
① 概要

前の事例の類例として AU（金）と H₂O（水）の位置関係を変えた場合のトンネル電流像を計算しました。

本計算事例の入力条件について記載します。

水分子と金原子は、セットアップ条件の中で、4分子ずつ追加します。

追加した4つの金原子データ「Au111_4.xyz」は、基板の金原子データ「Au111_36.xyz」を「SetModel」で読み込み、編集で、金原子を4個にし、ファイル名を「Au111_4.xyz」と変更したものを用いています。



シミュレーション・モデル TOP 画像とスキャンエリア

② セットアップ条件 (Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアの設定は有効です。

スキャンエリアは「 $W10\text{\AA} \times D10\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

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\AA としています。

金基板の上に、金原子4個 (Au111_4.xyz) を、中心位置が水分子と同じになるよう配置しました。水分子は前の事例と同位置です。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

type	value
Component	
Tip	tip_si4.xyz
Position	
x	-5
y	-5
z	5.5691
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	10
d	10
h	0
DistanceFromSample	3
Sample	Au111_36.xyz
Position	
x	0
y	0
z	0
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	17.66103
d	17.66103
h	0
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
Sample	h20_01.xyz
Sample	Au111_4.xyz
Position	
x	5
y	2.5
z	2.5
Rotation	
alpha	0
beta	0

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。

③ DFTB解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

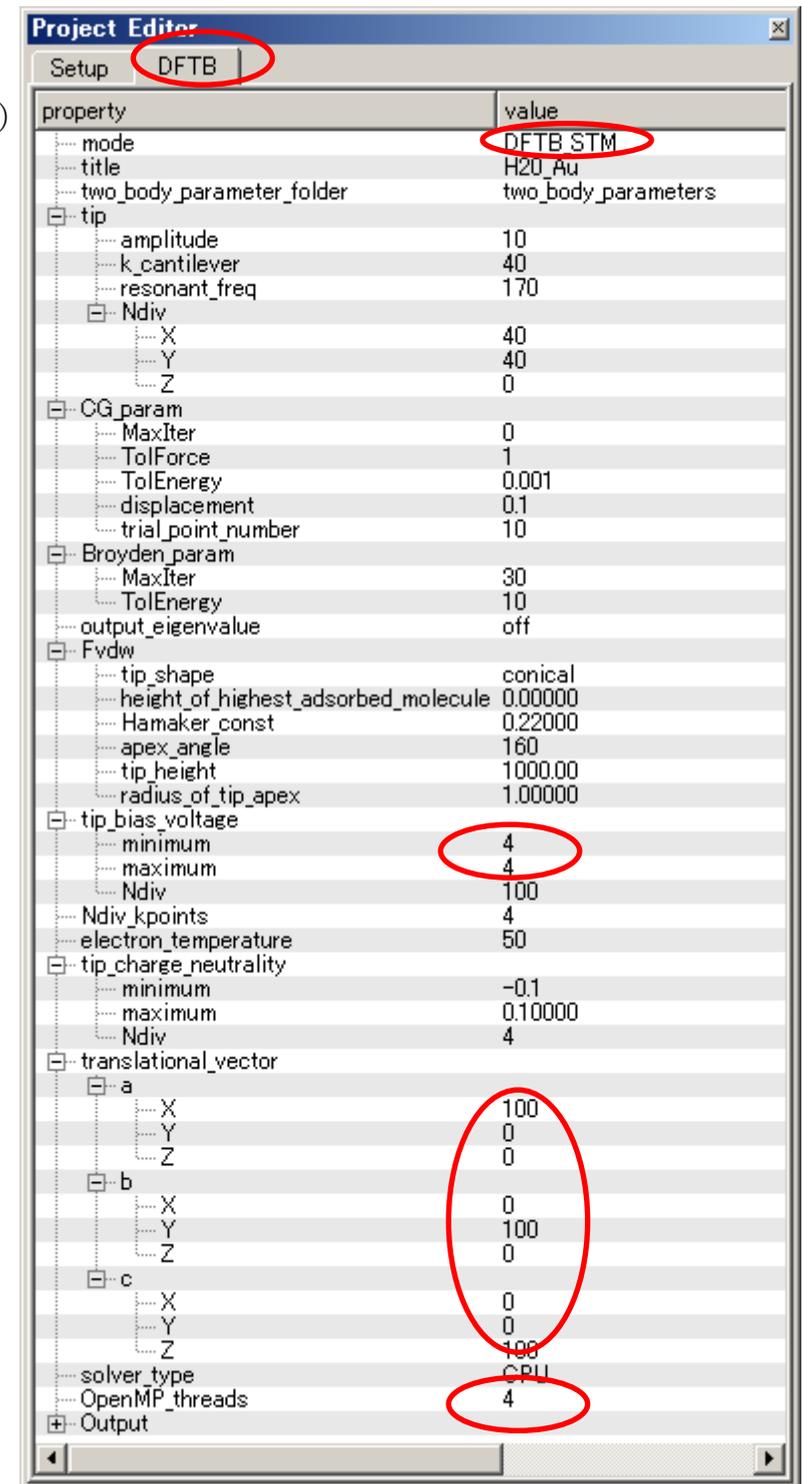
「stm_mode」は、「ConstHeight」(デフォルト設定となり、記述がない場合があります)

周期境界は考慮されません。

T I Pバイアス電圧 +4.0Vでの計算を設定条件で行わせました。

並列化処理設定を行っています(4スレッド対応)。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

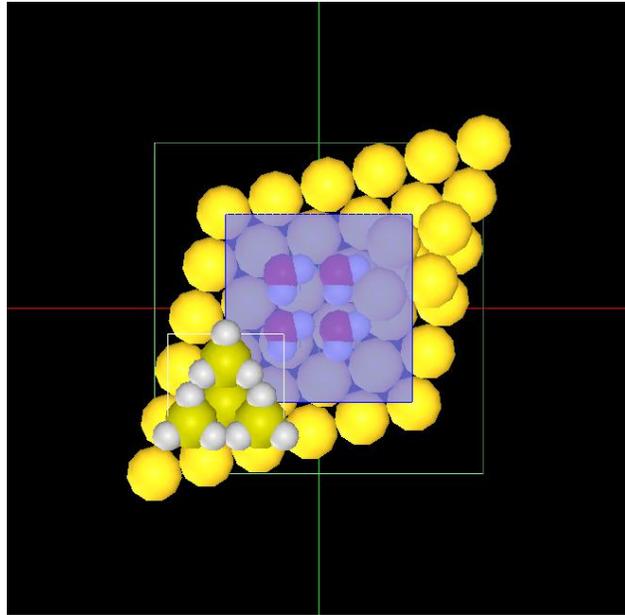


設定条件

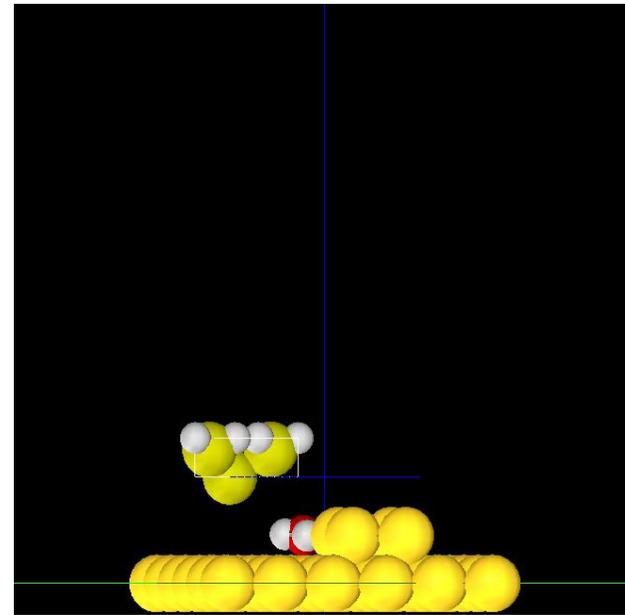
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

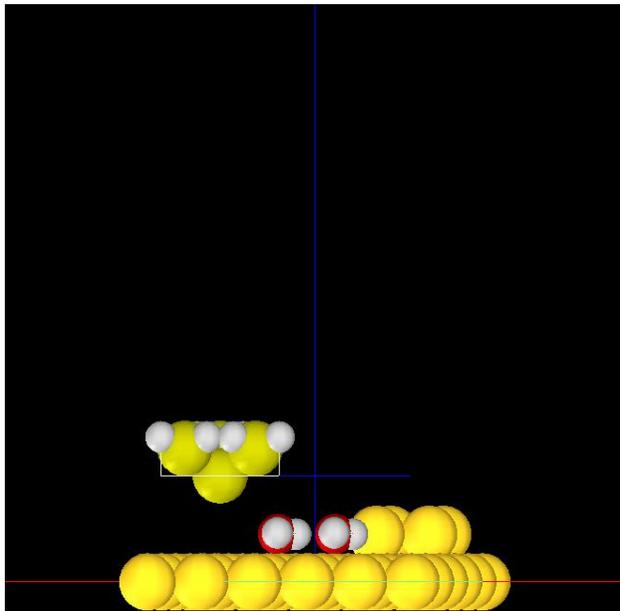
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



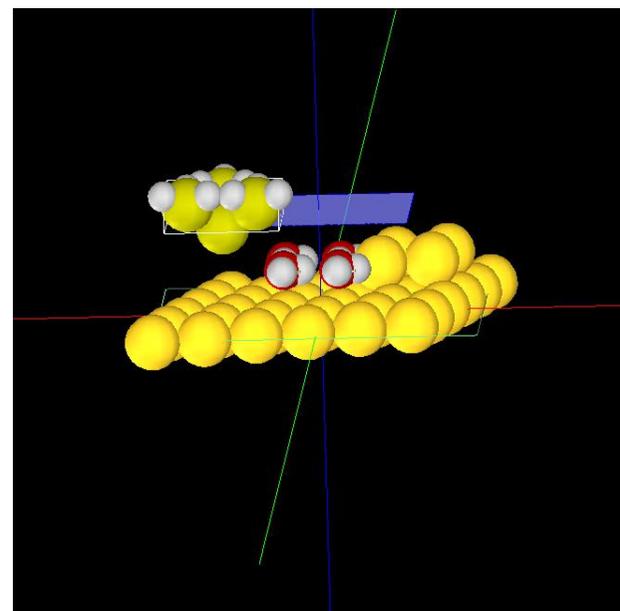
TOP



SIDE



FRONT

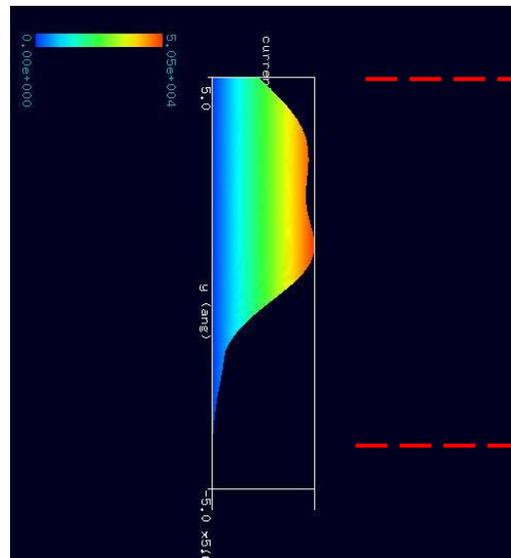


俯瞰

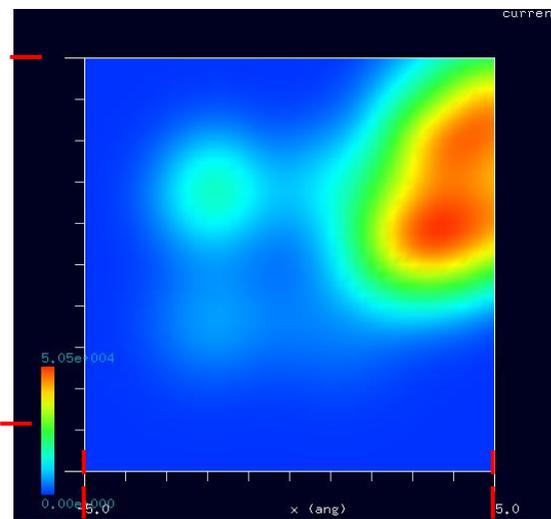
⑤ シミュレーション結果

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。

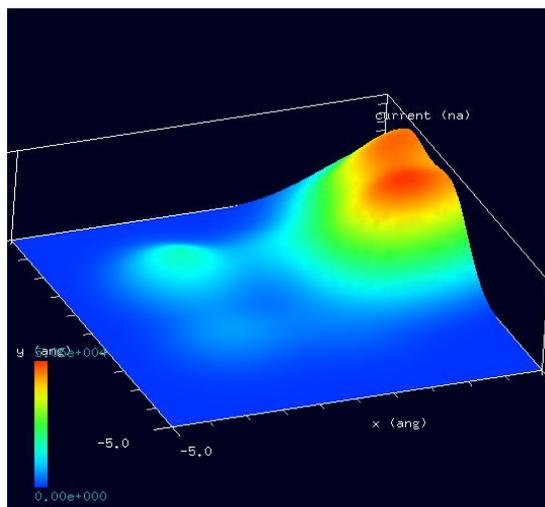
水分子と金原子の中心位置が、同じのため、配置上、原子番号の、より大きな金原子側でトンネル電流が大きくなりました。



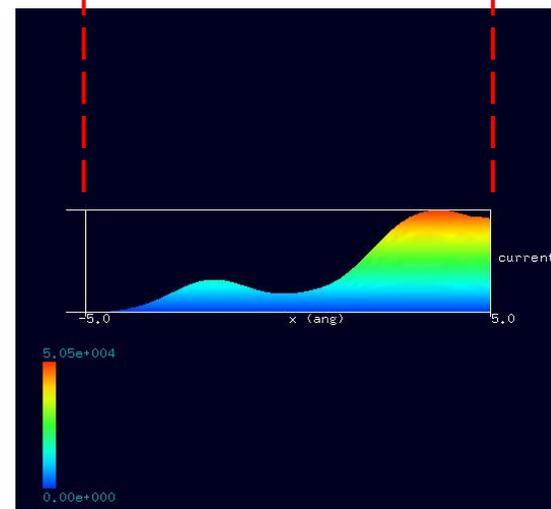
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

3-3 類例●DFTB_STM・高さ一定モードによる Au(111) 基板上的の水分子のトンネル電流像 STM シミュレーション 計算事例⑤

計算モード識別番号：[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_018+au 2]

ソルバ・モード・計算例アドレス [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_018+au 2.zip](#)

分類：DFTB_STM（高さ一定 STM 画像シミュレーション）、Åオーダー、触媒

① 概要

前の事例の類例として AU（金）と H₂O（水）の位置関係を更に変えた場合のトンネル電流像を計算しました。

本計算事例の入力条件について記載します。

先の事例と同様、水分子と金原子は、セットアップ条件の中で、4分子ずつ追加します。

② セットアップ条件 (Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアの設定は有効です。

スキャンエリアは「 $W10\text{Å} \times D10\text{Å} \times H0.0\text{Å}$ 」と設定されています。

探針は登録済みデータ「**Si4H9**」を用います。

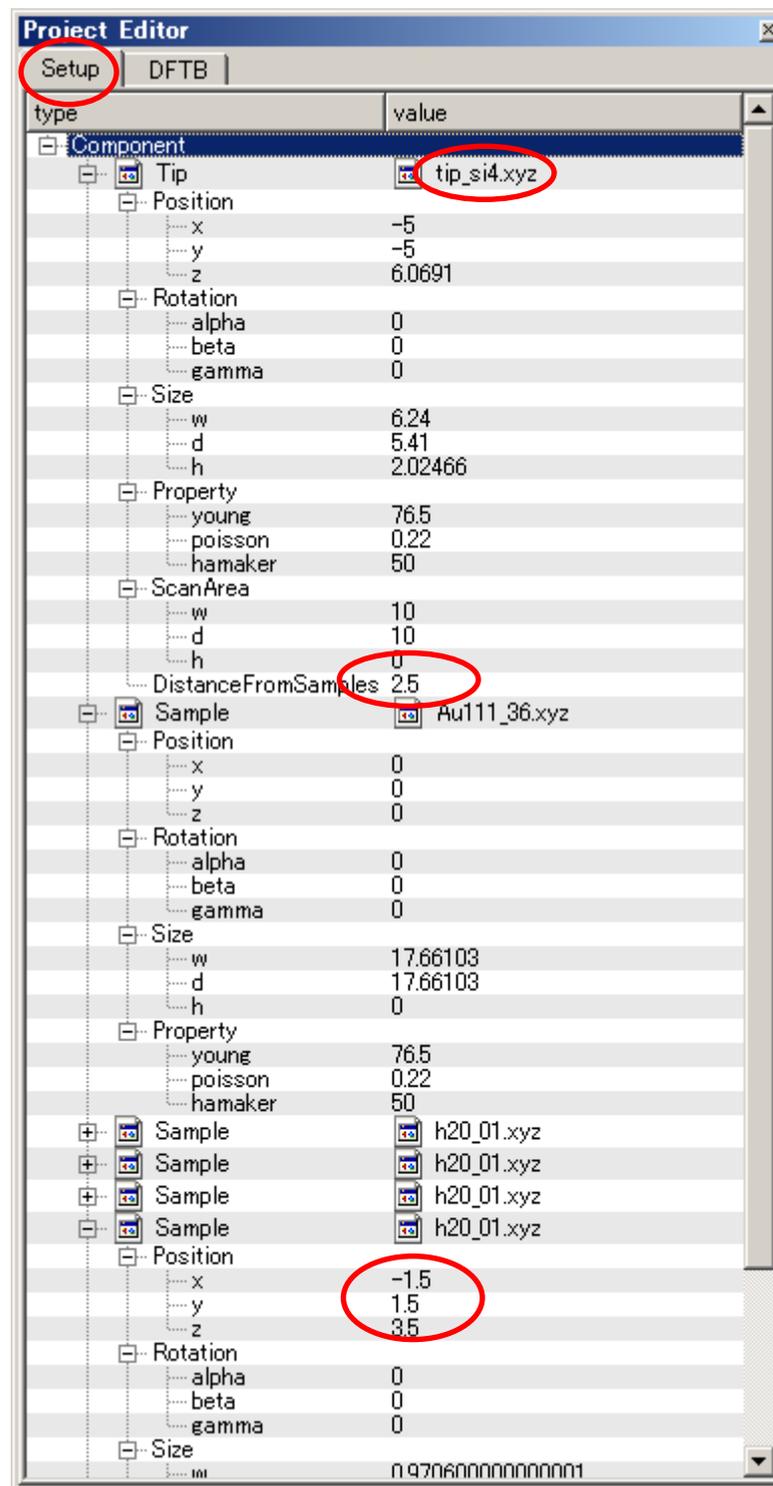
探針試料間距離は 2.5Å としています。

金原子 (Au111_4.xyz) は前の類例と同位置です。

水分子4個は追加金原子に対し 1Å 高めに配置し、

水分子が、より探針に近くなるようにしました。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

③ DFTB解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

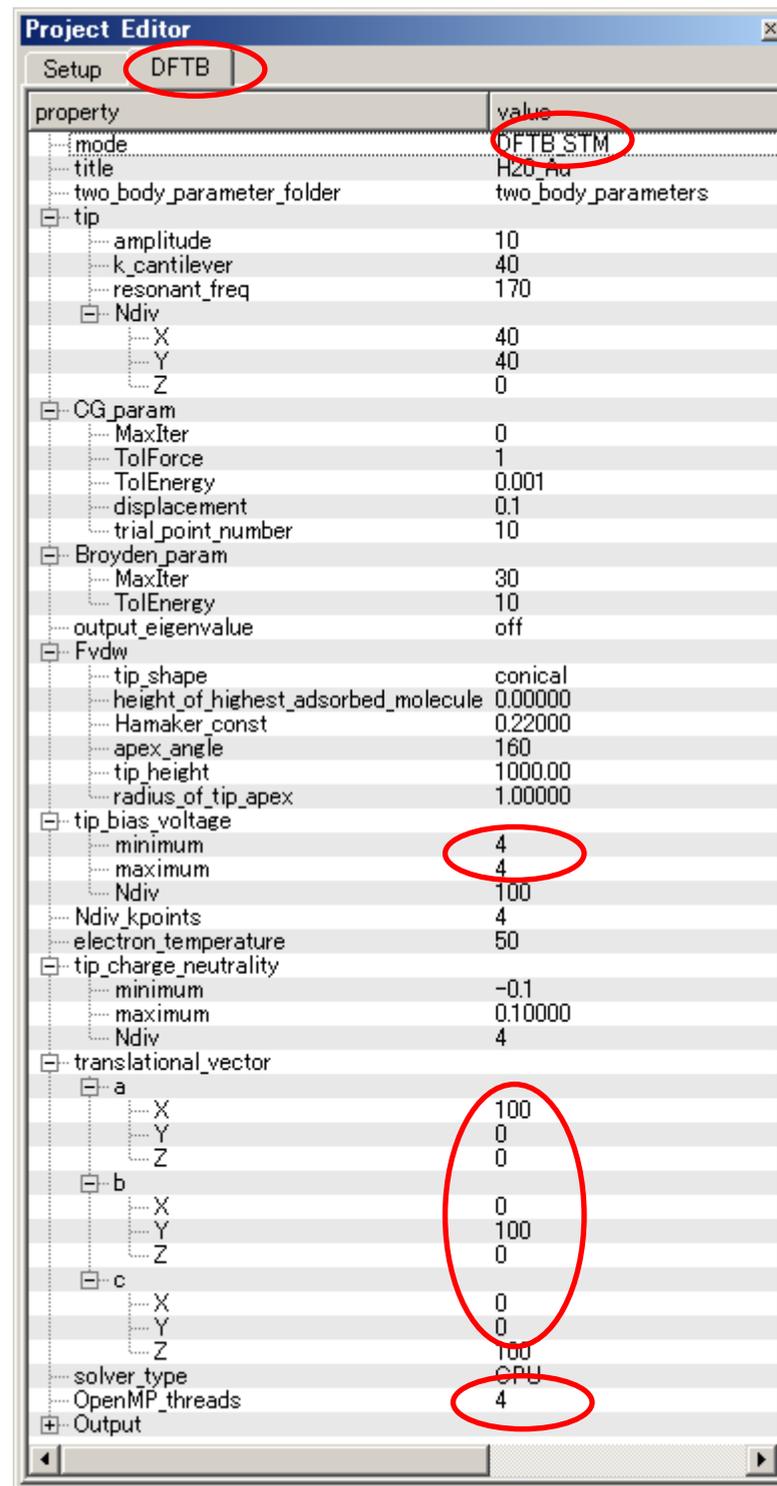
「stm_mode」は、「ConstHeight」(デフォルト設定となり、記述がない場合があります) とします。

周期境界は考慮されません。

T I Pバイアス電圧 +4.0Vでの計算を設定条件で行わせました。

並列化処理設定を行っています (4スレッド対応)。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

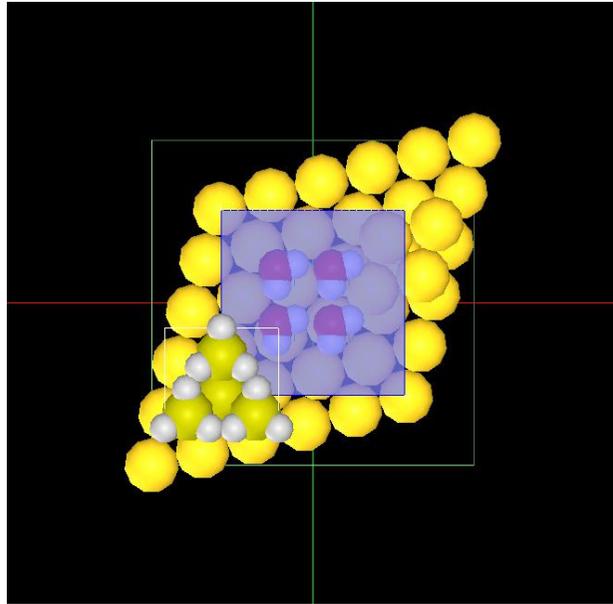


設定条件

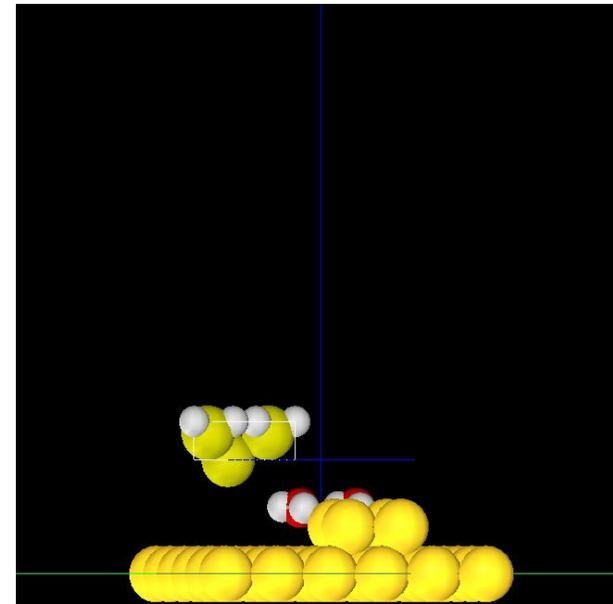
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

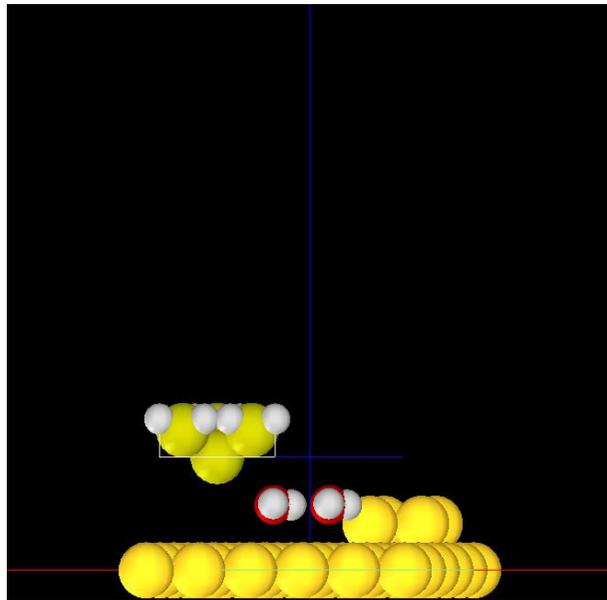
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



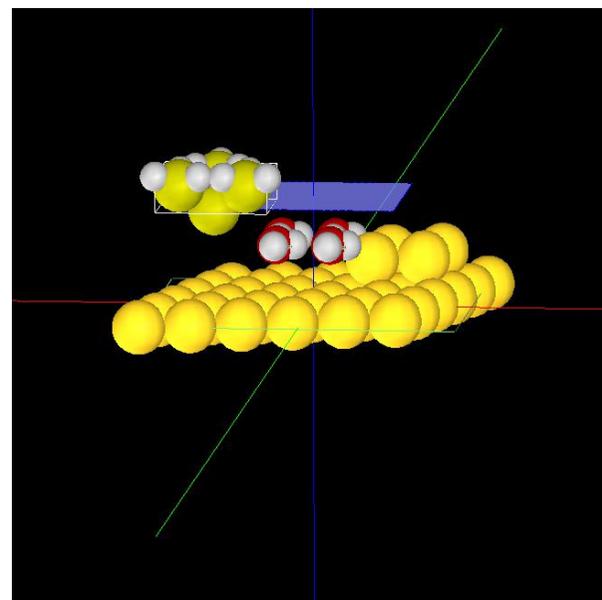
TOP



SIDE



FRONT

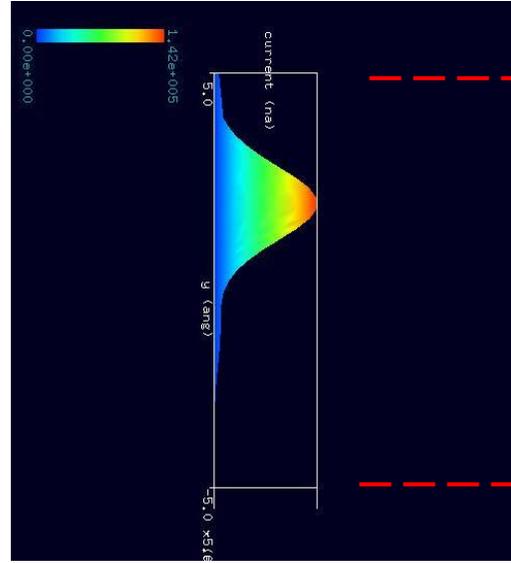


俯瞰

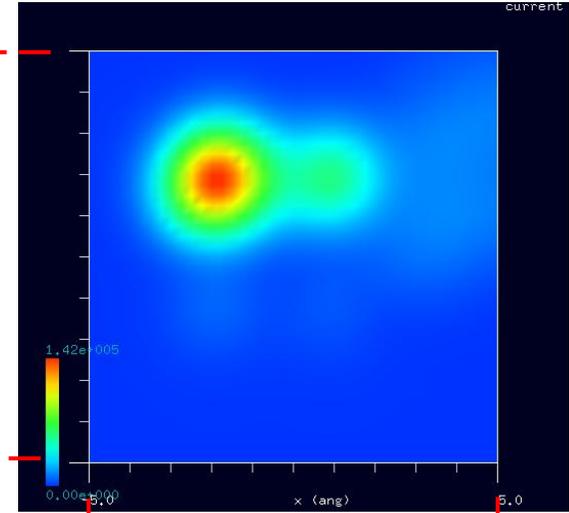
⑤ シミュレーション結果

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。

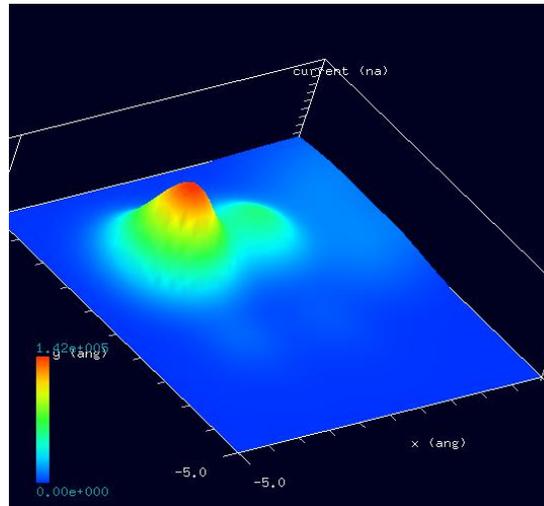
水分子と金原子の中心位置が、水分子の方が高いので、探針との距離が、水分子の方が金原子よりも近くなり、トンネル電流が大きくなったといえます。



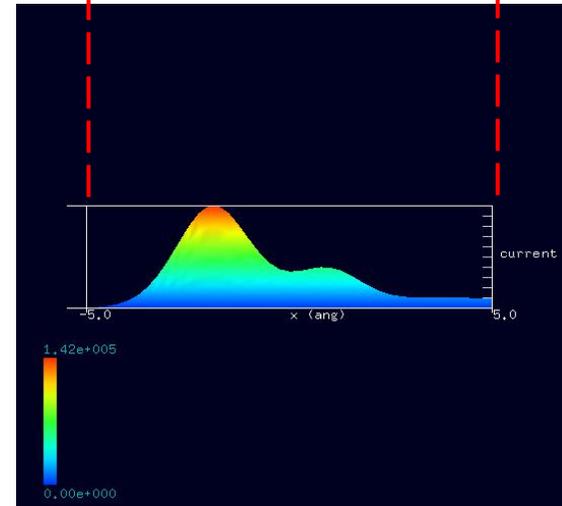
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

3-4 類例●DFTB_STM・高さ一定モードによる Au(111) 基板上的の水分子のトンネル電流像 STM シミュレーション 計算事例⑥

計算モード識別番号：[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_018+au 3]

ソルバ・モード・計算例アドレス [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_018+au 3.zip](#)

分類：DFTB_STM（高さ一定 STM 画像シミュレーション）、Åオーダー、触媒

① 概要

前の事例の類例として AU（金）と H₂O（水）の位置関係を更に変えた場合のトンネル電流像を計算しました。

本計算事例の入力条件について記載します。

先の事例と同様、水分子と金原子は、セットアップ条件の中で、4分子ずつ追加します。

② セットアップ条件 (Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアの設定は有効です。

スキャンエリアは「 $W14\text{\AA} \times D14\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と再設定しました。

探針は登録済みデータ「**Si4H9**」を uses。

探針試料間距離は 3.0\AA としています。

金原子 (Au111_4.xyz) は前の類例と同位置です。

水分子4個は追加金原子に対し 0.5\AA 高めに配置しました。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

type	value
Component	
Tip	tip_si4.xyz
Position	
x	-7
y	-7
z	6.0691
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	3
Sample	Au111_36.xyz
Sample	h20_01.xyz
Position	
x	-1.5
y	1.5
z	3
Rotation	
alpha	0
beta	0
gamma	0
Size	
w	0.9706000000000001
d	1.1645
h	0.06909999999999997
Property	
young	76.5
poisson	0.22
hamaker	50
Sample	Au111_4.xyz

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。

③ DFTB解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

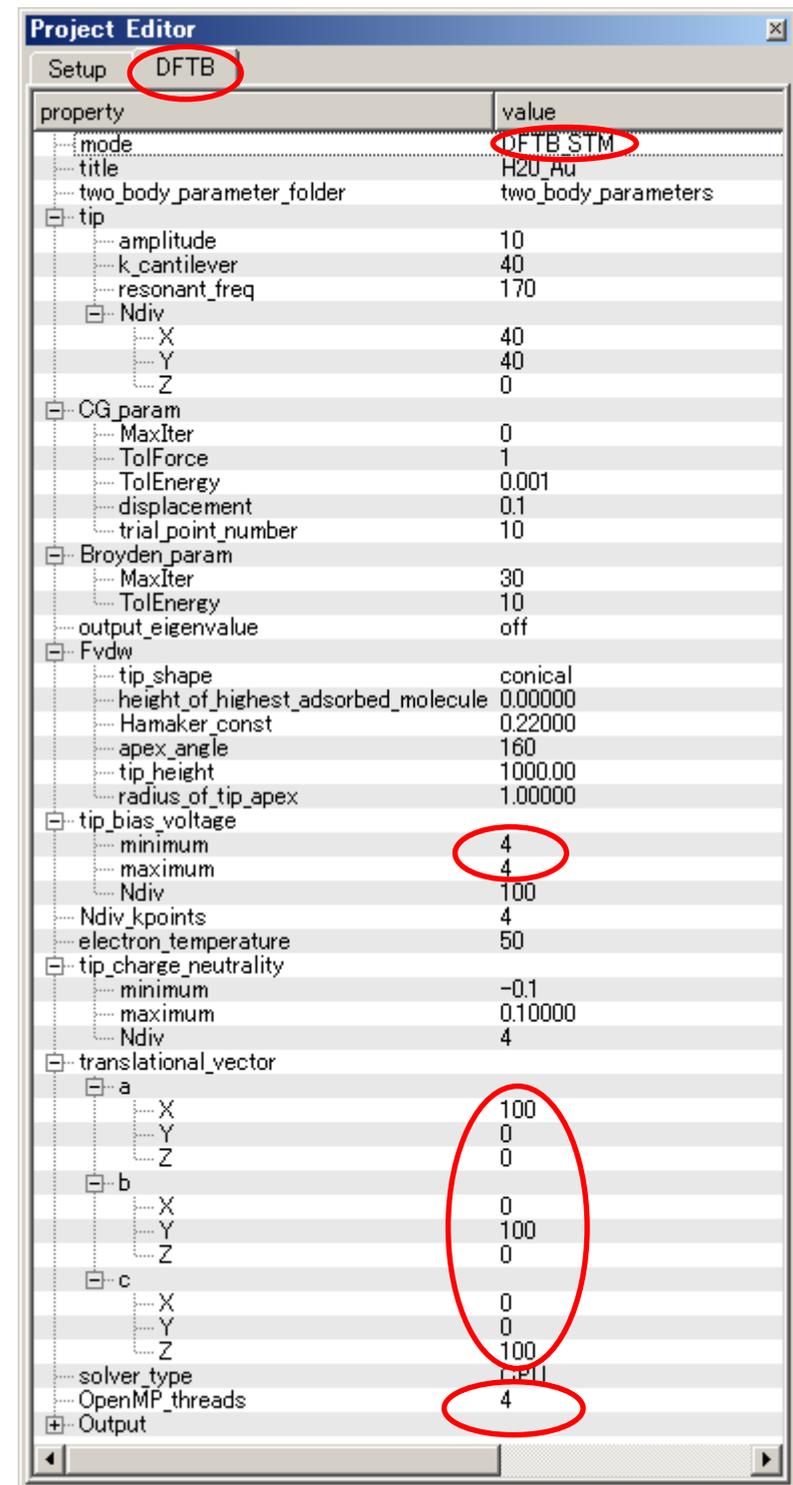
「stm_mode」は、「ConstHeight」(デフォルト設定となり、記述がない場合があります) とします。

周期境界は考慮されません。

T I Pバイアス電圧 +4.0Vでの計算を設定条件で行わせました。

並列化処理設定を行っています (4スレッド対応)。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

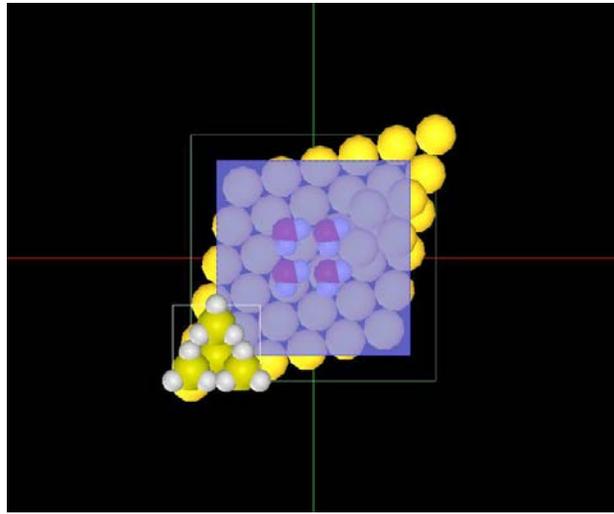


設定条件

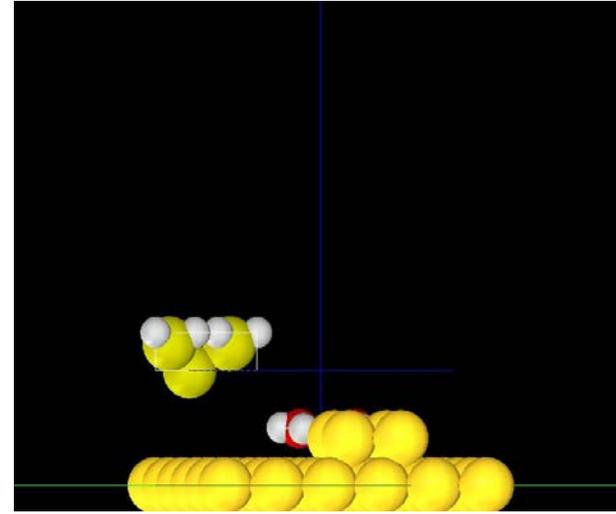
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

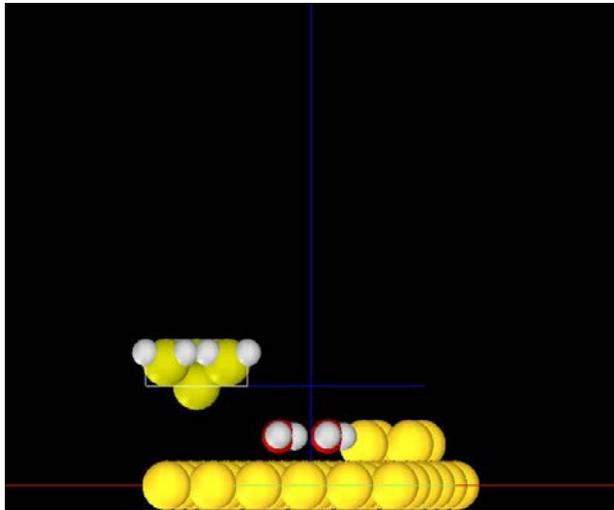
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



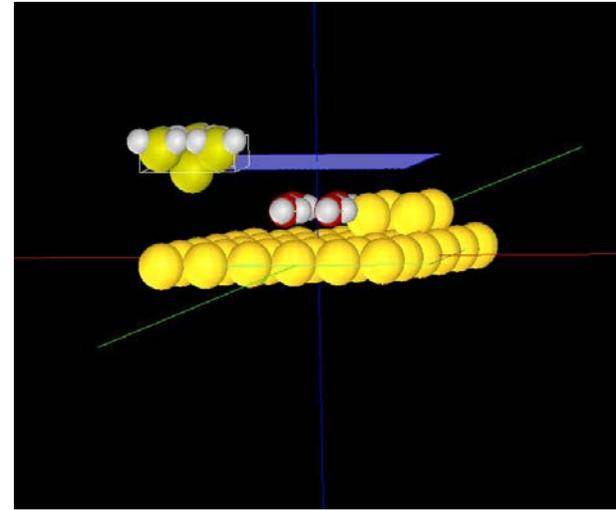
TOP



SIDE



FRONT

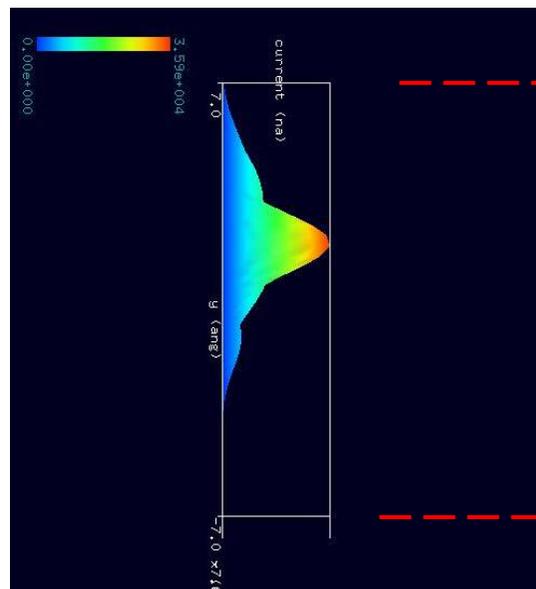


俯瞰

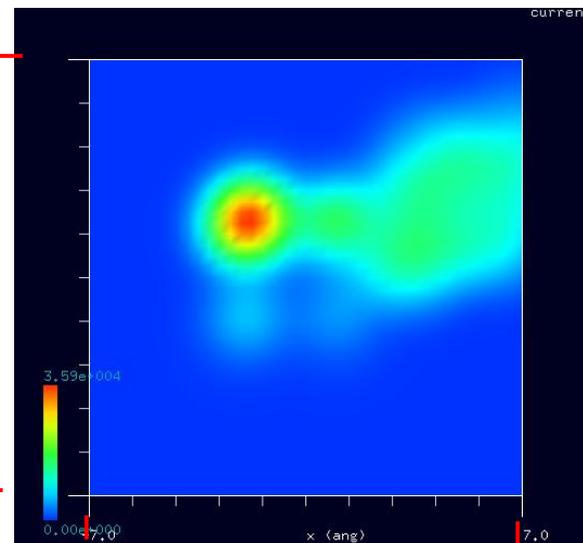
⑤ シミュレーション結果

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。

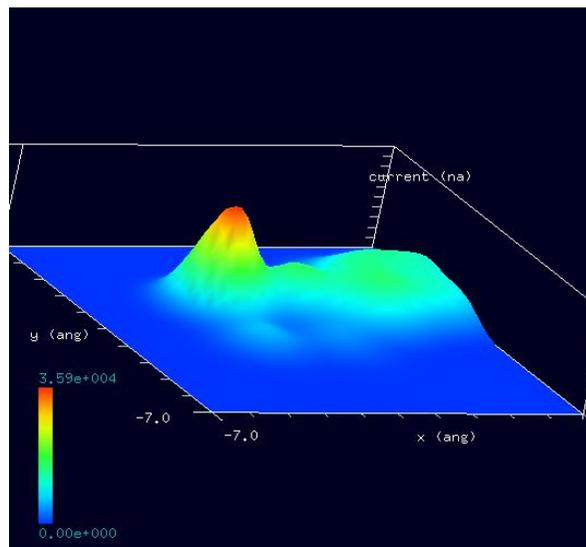
水分子と金原子の中心位置が、水分子の方が高いので、探針との距離が、水分子の方が金原子よりも近くなり、トンネル電流が大きくなったといえます。



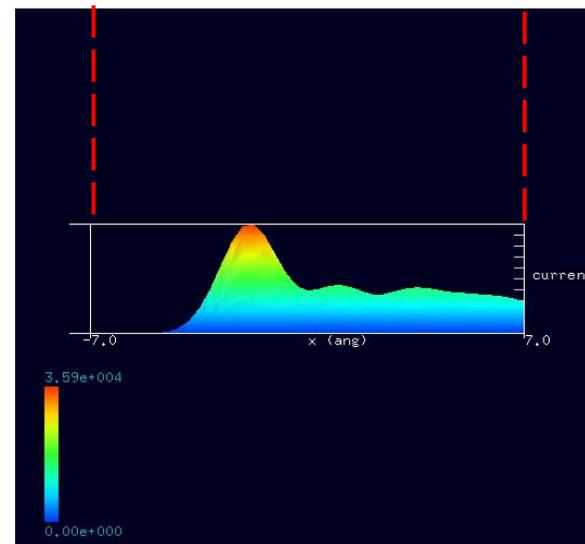
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

⑥触媒となる条件について

金原子の位置関係と、水分子と金原子の位置関係で触媒の効果がシミュレートできるかを検証しました。

金原子の触媒効果が、どの様にシミュレートできるかについては明確とならなかった。

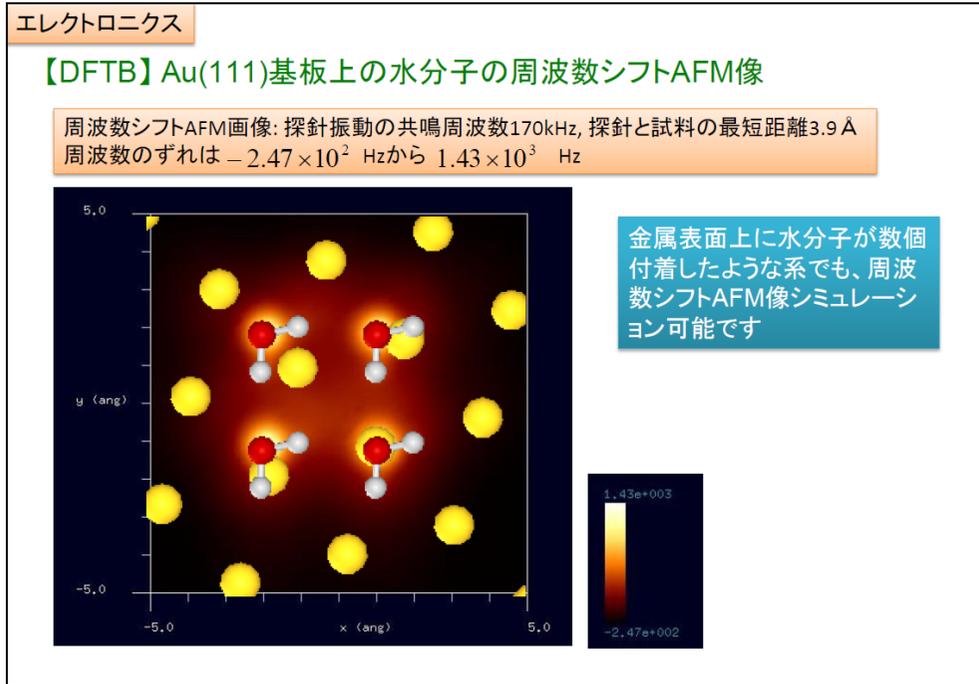
3-5●DFTB AFM : FreqShift (周波数シフト画像シミュレーション) Au(111)基板上的の水分子のAFM像シミュレーション 計算事例⑦

計算モード識別番号 : [DFTB_FreqShift_Inorganic_005]

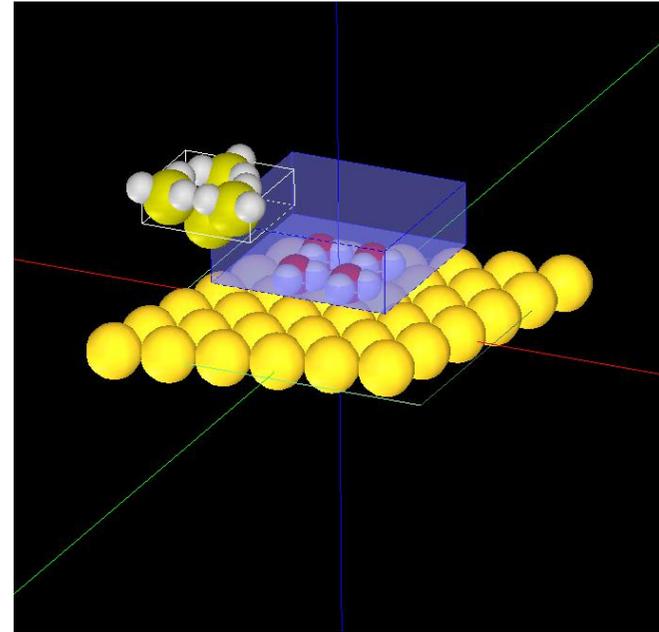
ソルバ・モード・計算例アドレス https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/FreqShift/DFTB_FreqShift.php

分類 : DFTB、周波数シフト画像シミュレーション、Åオーダー、触媒

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ



試料モデルとスキャンエリアの3D表示

① 概要

本事例は、Au(111)基板上的の水分子を、DFTB周波数シフト画像でシミュレートします。

本計算事例の入力条件について記載します。

水分子は、セットアップ条件の中で、4分子を追加します。

② セットアップ条件 (Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアの設定は有効です。

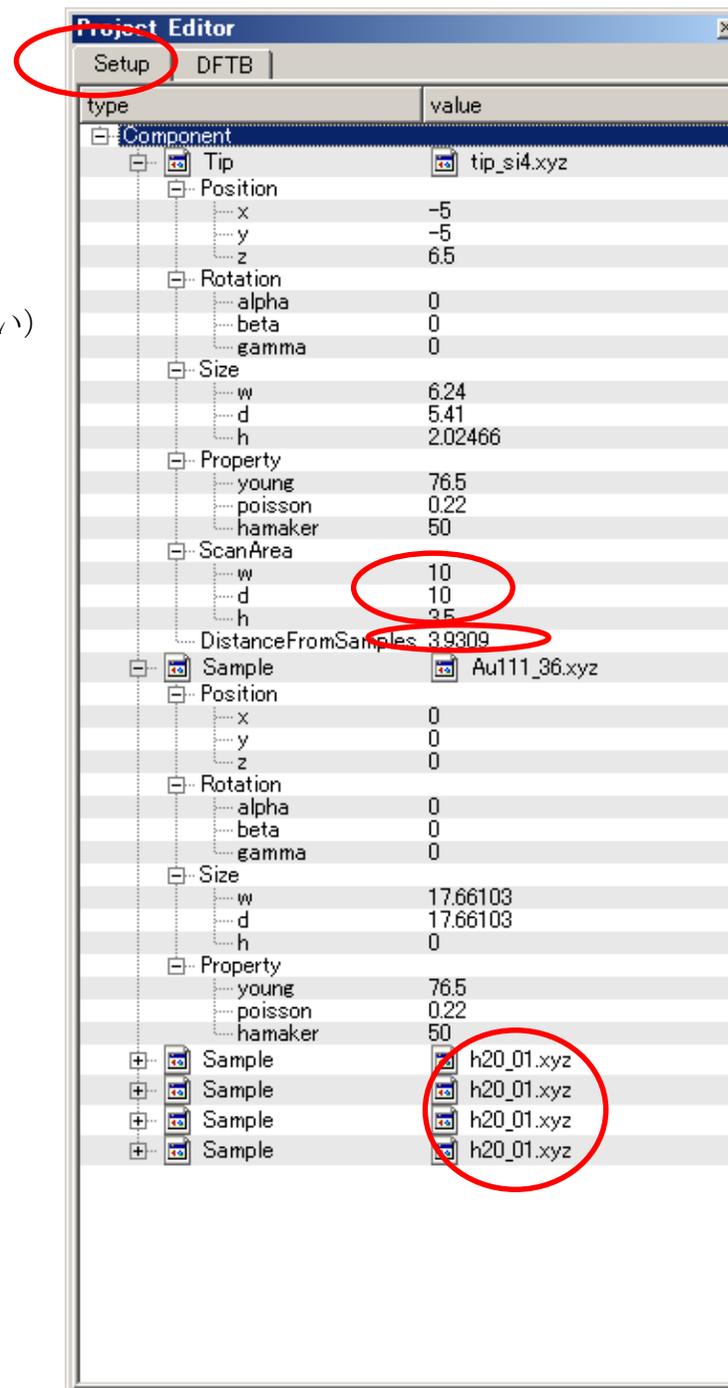
スキャンエリアは「 $W10\text{Å} \times D10\text{Å} \times H3.5\text{Å}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 3.9309Å としています。

探針は登録済みデータ「**Si4H9**」を用います。

水4分子を追加します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

③ DFTB 解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_AFM」とします。

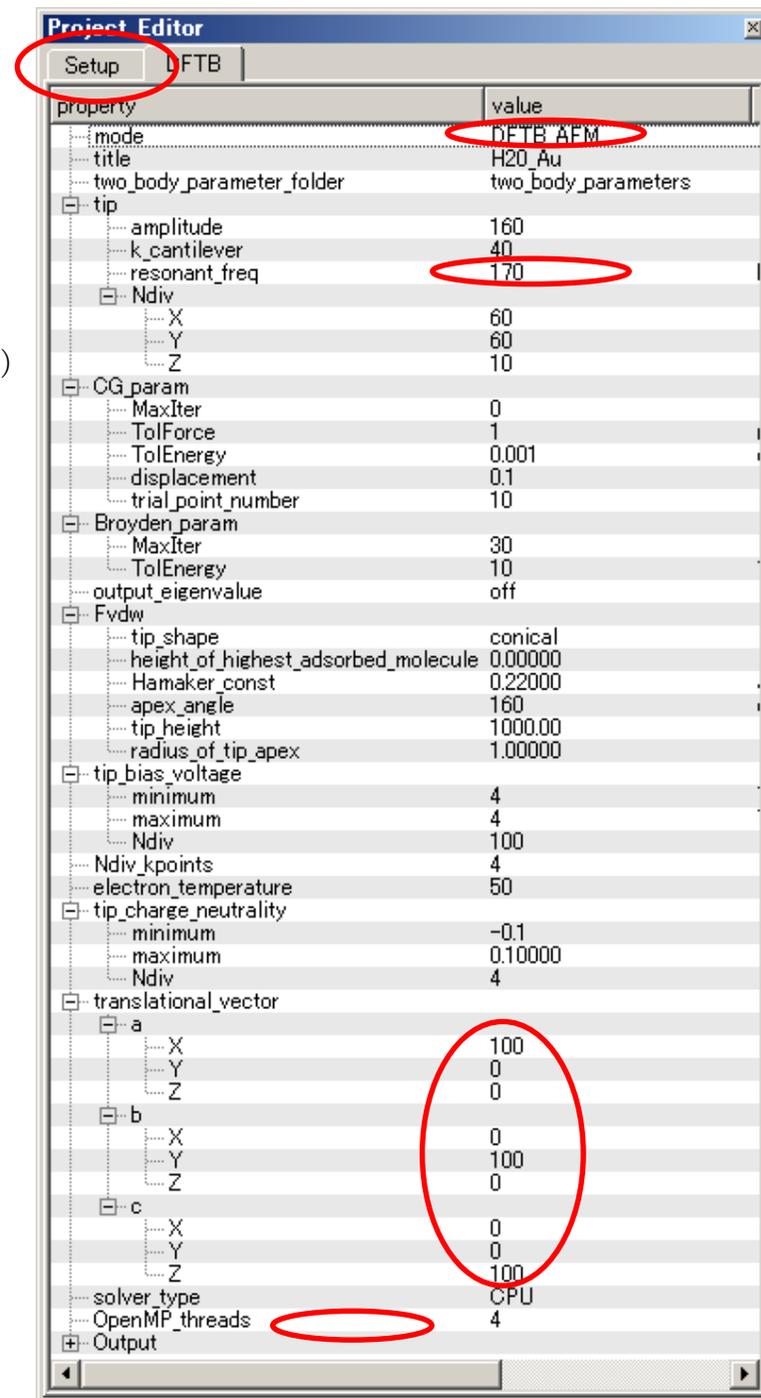
周期境界は考慮されません。

探針振動の共鳴周波数を「170KH z」とします。

探針振動の共鳴周波数はDFTB_AFM モードで周波数シフトを計算するときに利用します。

並列化処理設定を行っています (4スレッド対応)。

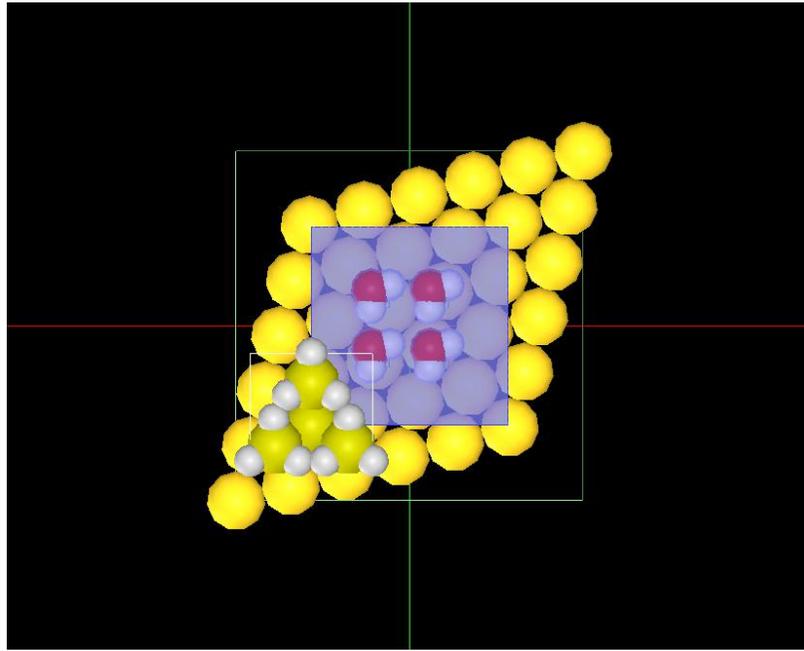
(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



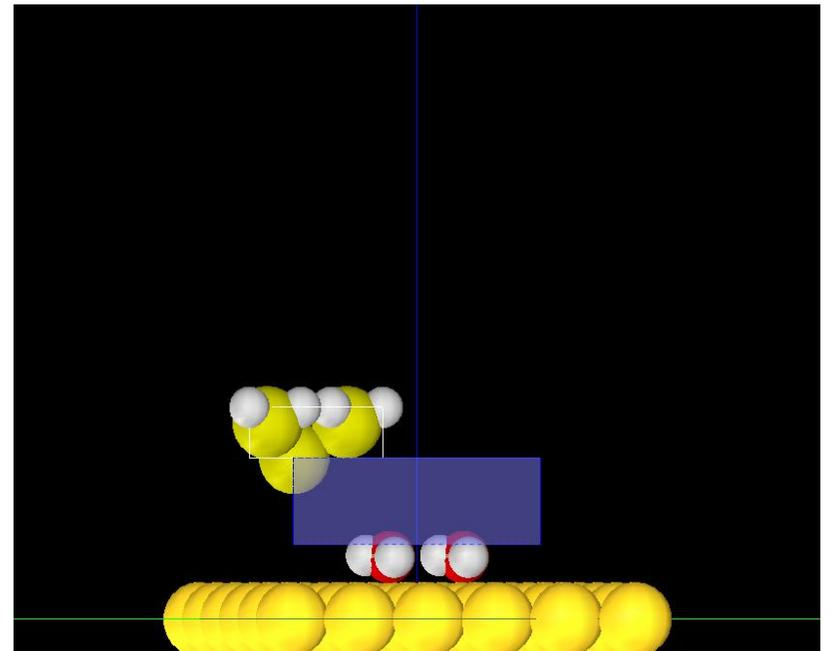
設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

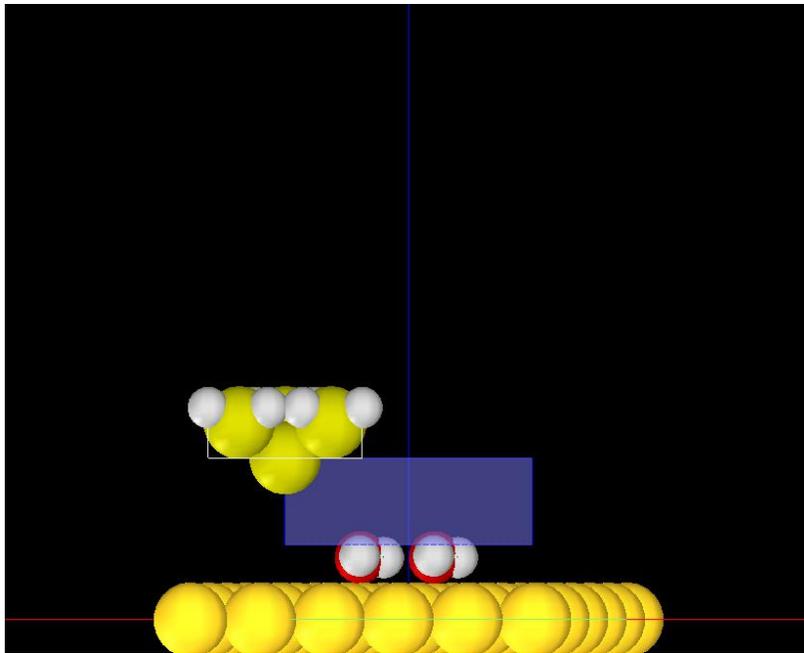
④ 探針、試料モデル



TOP



SIDE

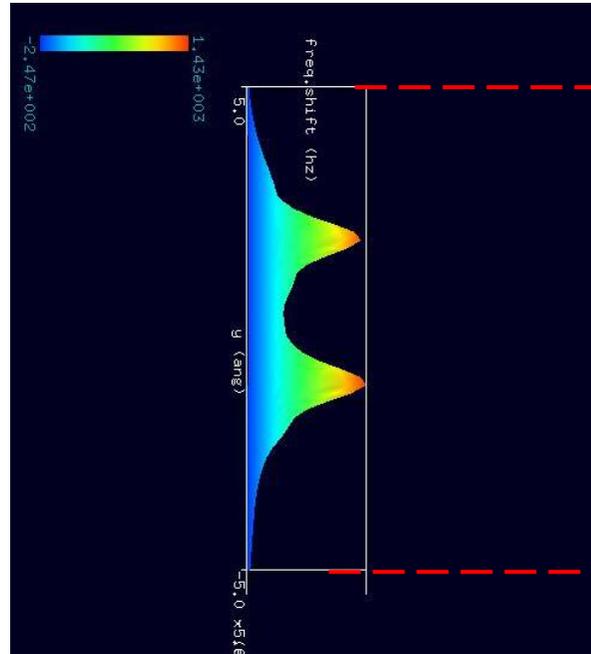


FRONT

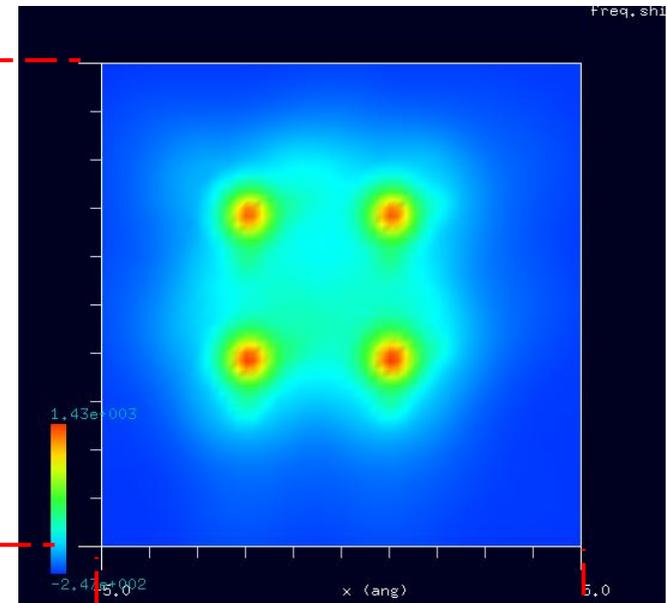
⑤ シミュレーション結果

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。

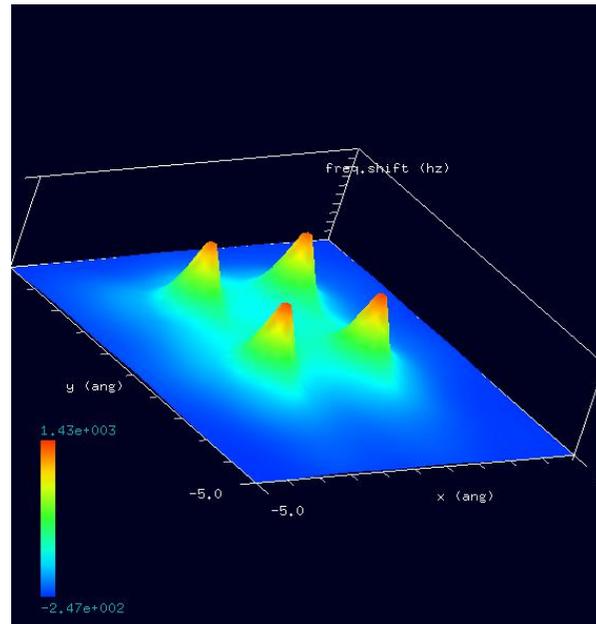
高さ方向の大きさが、4つの水分子を同等にシミュレートできたといえます。



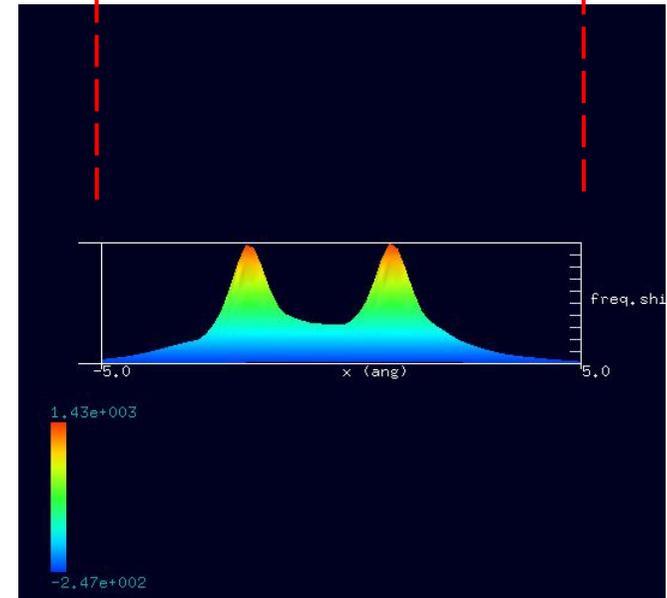
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

⑥AU（金）の触媒作用について

- ・金を直径 10 nm以下のナノ粒子にして担体（TiO₂ 等）上に分散・固定すると、触媒の作用が現れます。
- ・化学分野では、触媒として広く利用されている。表面化学の研究の進展により主に単結晶表面での反応性が調べられ、極めて不活性であると考えられてきた。しかし、春田正毅らによって、金の粒子径（1 - 10 nm での）制御により一酸化炭素を-78 ° C の低温下でも二酸化炭素に酸化できるという発見、および酸素水素混合ガスを酸化剤に用いてプロピレンを選択的にエポキシ化できるという発見がなされてから一転、金触媒ブームが巻き起こった。また、金の様々な合金はこの分野で作られたのが初めである。（wikipedia）

4・DFTB_STM (量子論的SPM像シミュレータ) ConstHeightSTM (高さ一定STM画像シミュレーション)

4-1●DFTB : ConstHeightSTM (高さ一定STM画像シミュレーション) ZrO₂ 単斜晶(空間群番号:14)[常温の場合] (001)面 計算事例⑧

計算モード識別番号: [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_030a]、[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_030b]

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

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

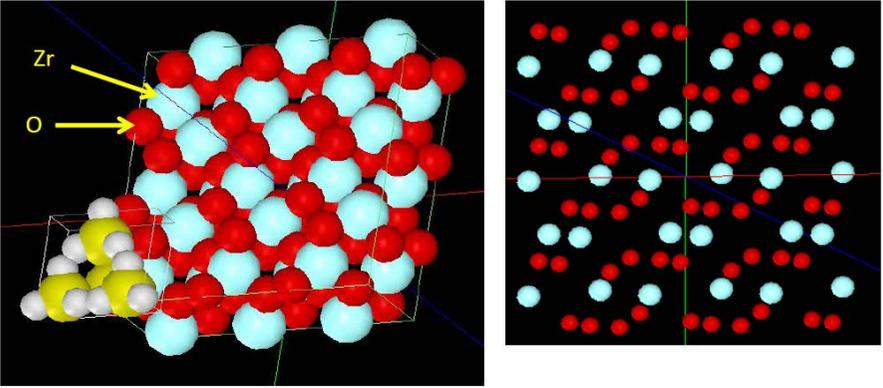
事例紹介ページを下図に示します。

自動車: 排ガス触媒

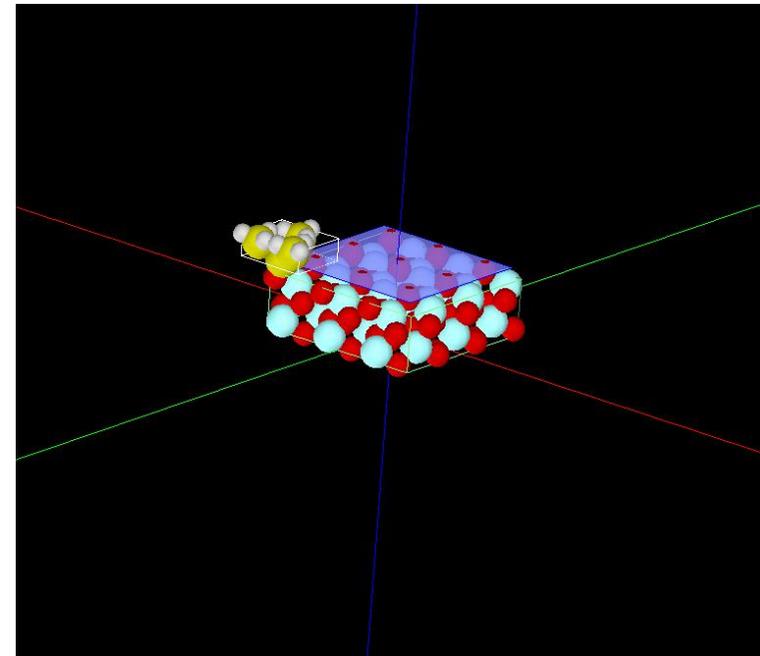
DFTB ZrO₂ (ジルコニア 自動車の排ガス触媒として用いられる)

水素終端されたシリコン探針を使用
単斜晶(空間群番号:14)[常温の場合]
(001)面

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



事例紹介ページ1



試料モデルとスキャンエリアの3D表示

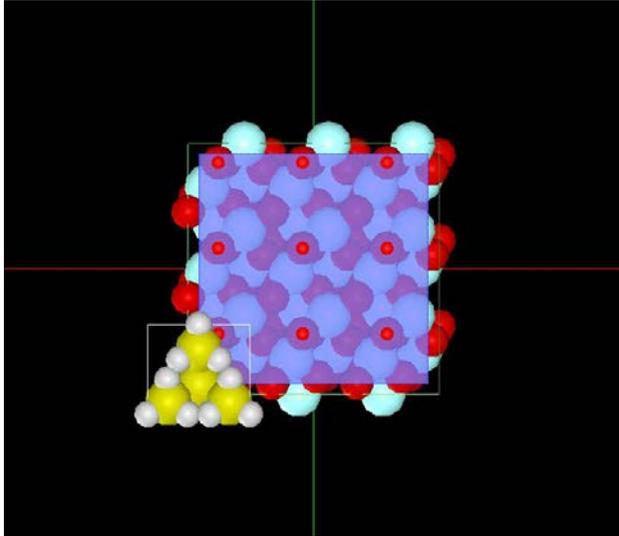
① 概要

本事例は、ZrO₂ 単斜晶(空間群番号:14)[常温の場合] (001)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。

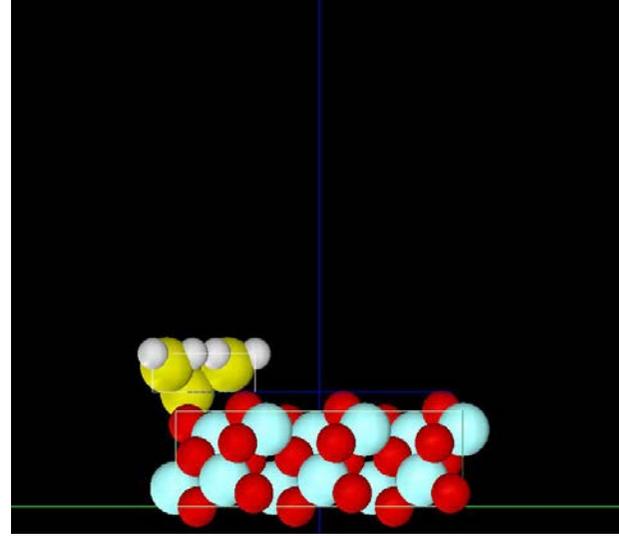
探針は作成済みデータ「tip_si4.xyz」を用います。バイアス電圧 +1.0V (a)とバイアス電圧 -1.0V (b)での計算を設定例条件で行わせ、結果の違いを比較します。

② 探針、試料モデル

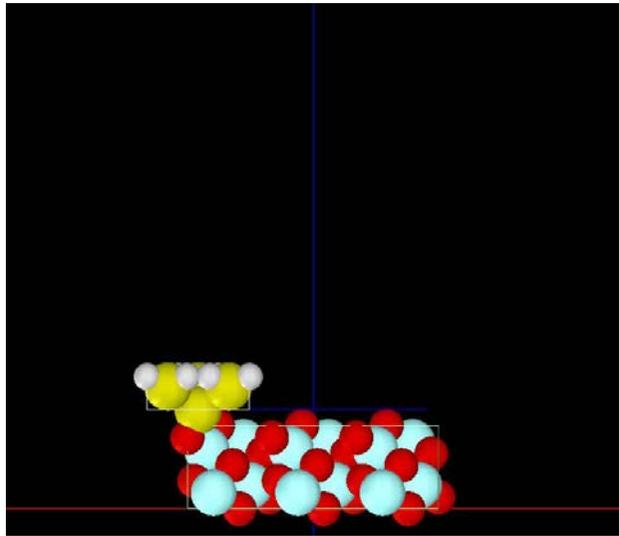
探針、試料モデルをSIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



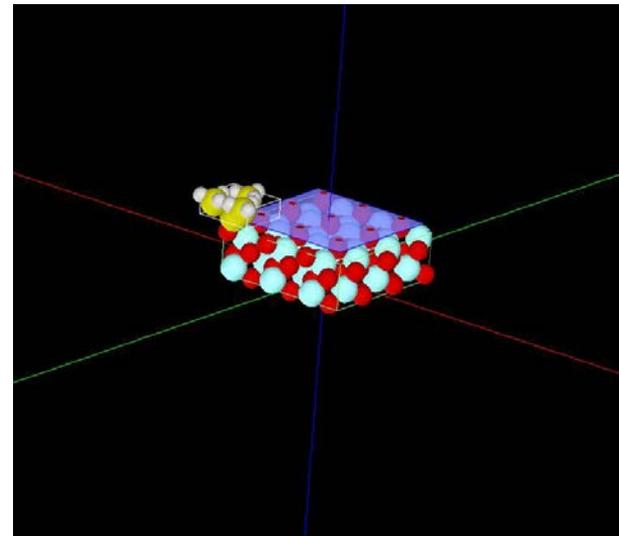
TOP



SIDE



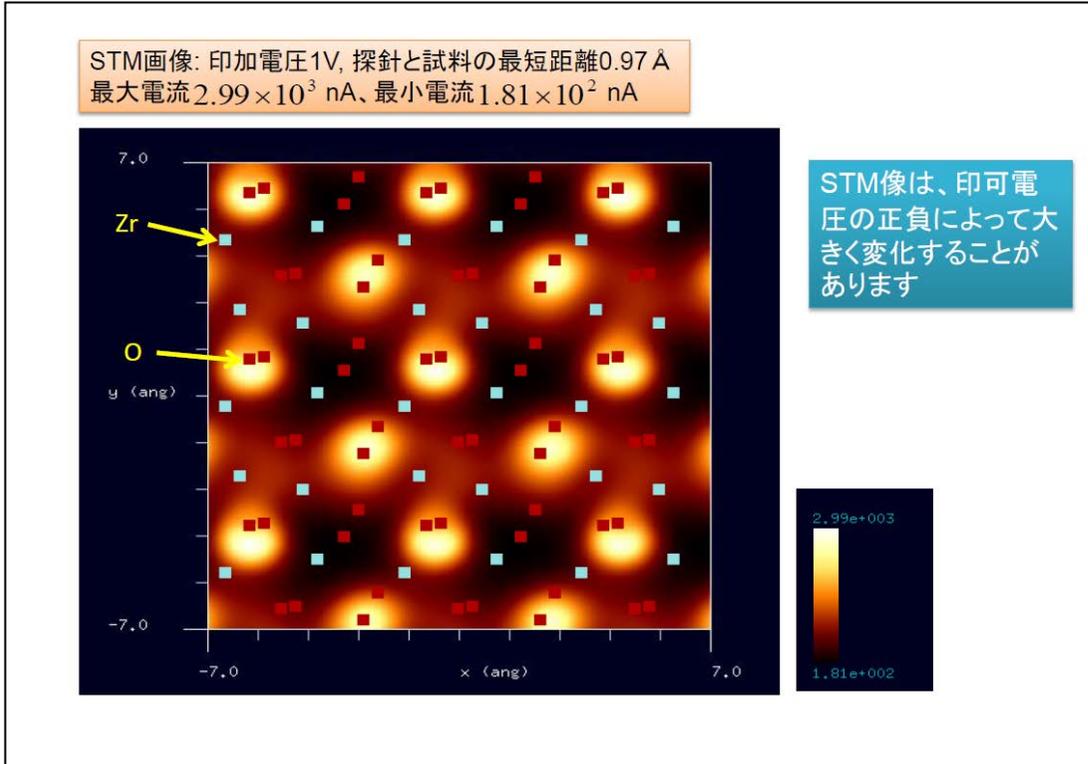
FRONT



俯瞰

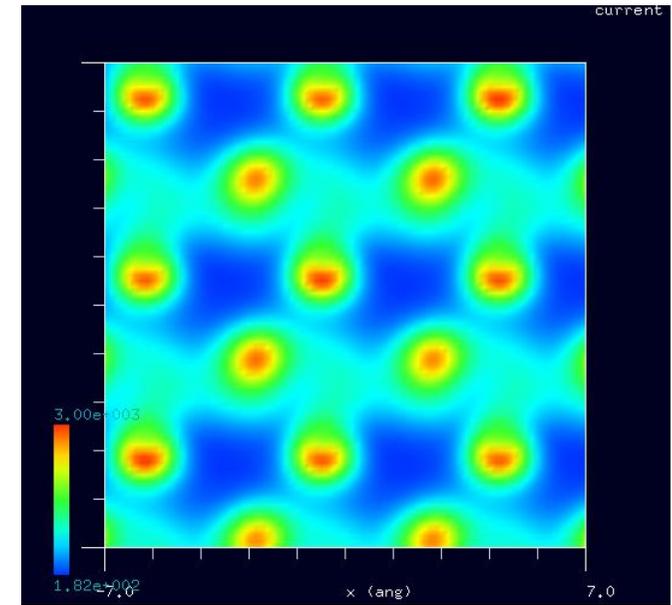
③ TIP バイアス電圧 1V の場合

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ2

本計算事例の入力条件について記載します。



シミュレーション結果、TOP画像 3D-ViewのRainbow色表示

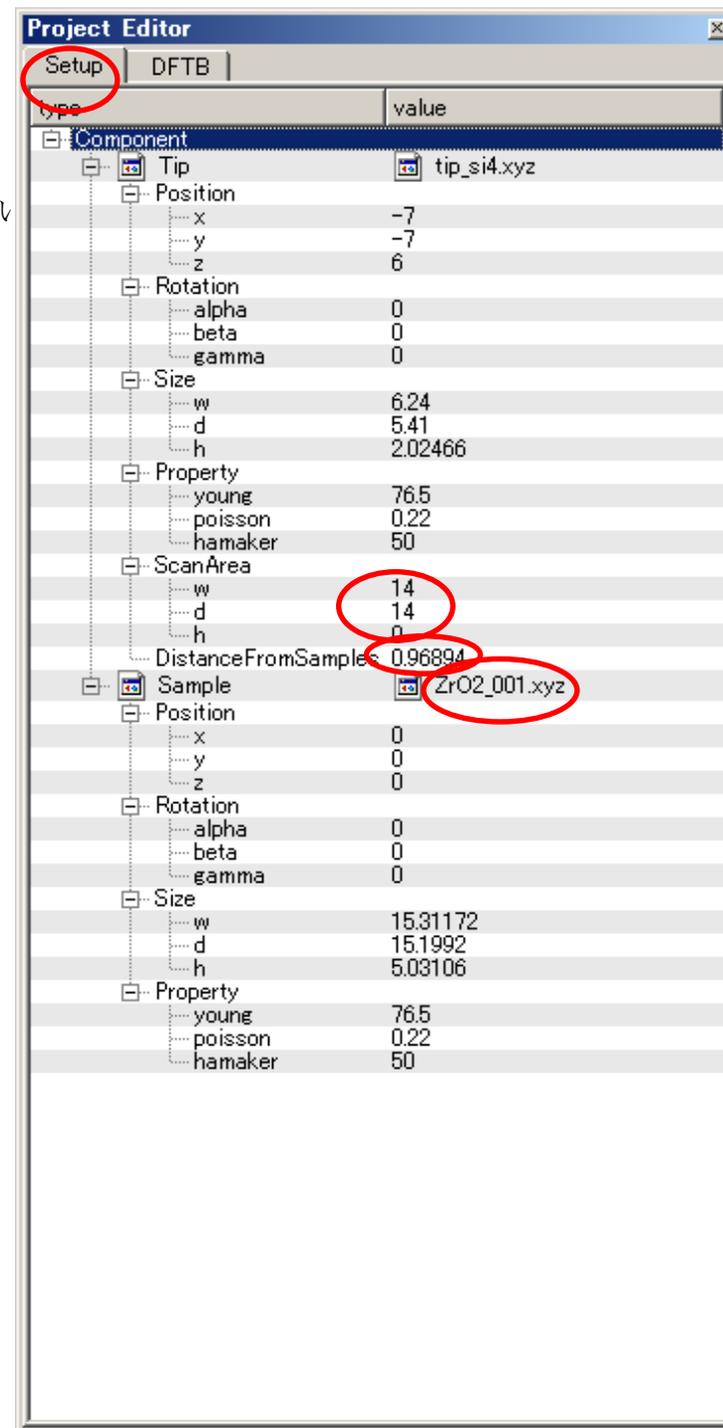
④ TIP バイアス電圧 1V の場合のセットアップ条件

(Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアは「 $W14\text{\AA} \times D14\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 0.96894\AA としています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

事例モデルのセットアップ条件

⑤ TIP バイアス電圧 1V の場合の DFTB 解析設定条件

(Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

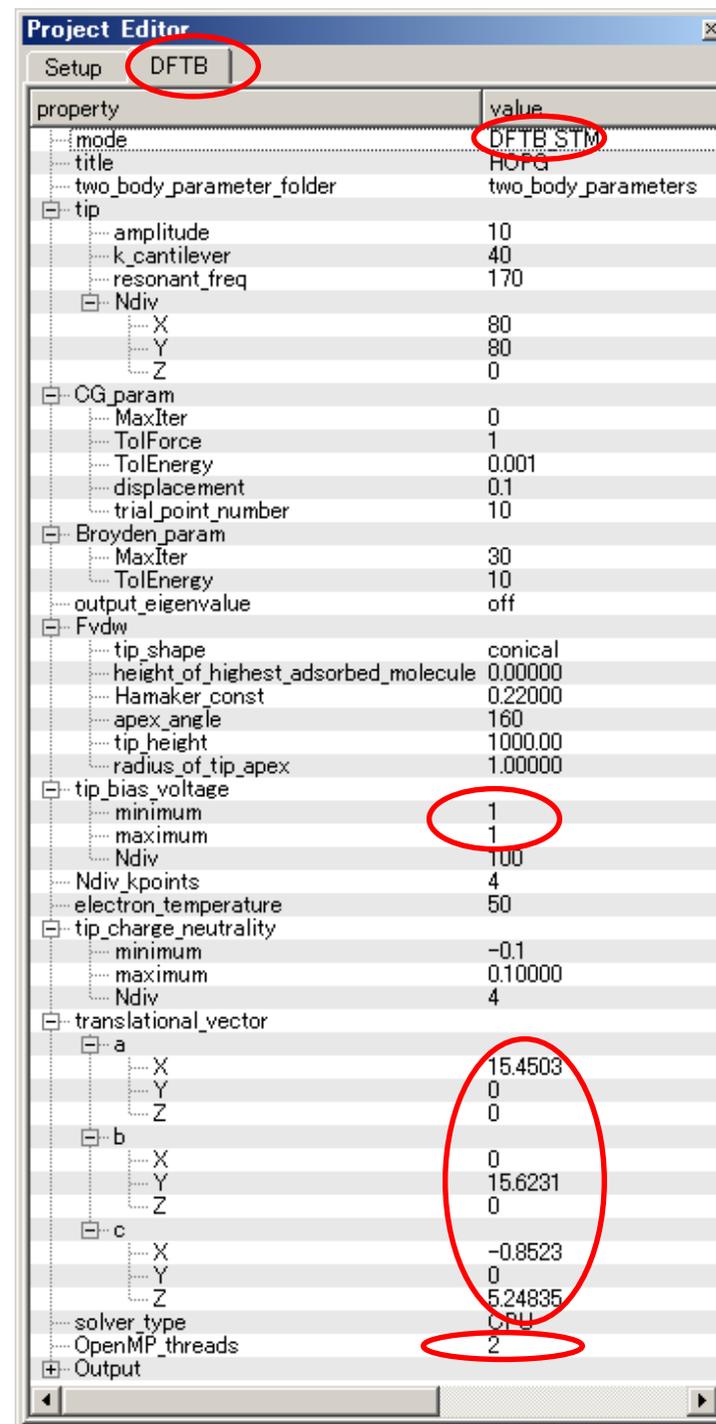
「STM_MODE」は「ConstantHeight」(Default、指定のない場合：

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 (2 スレッド対応)。

周期境界を考慮します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

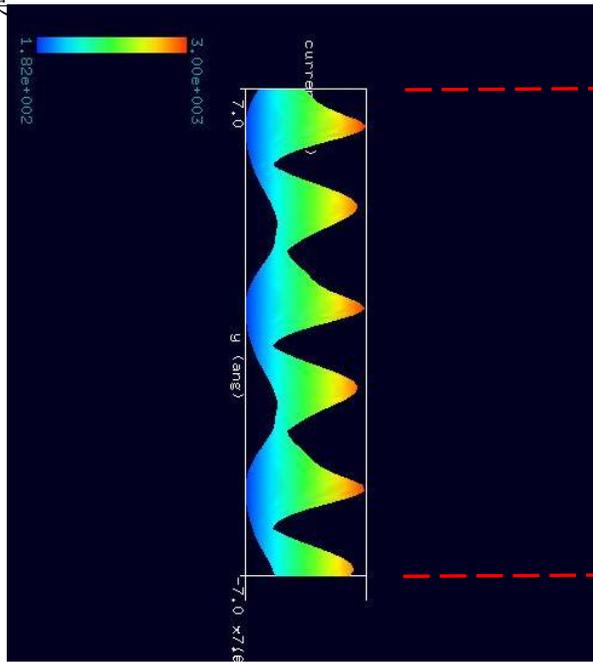


※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

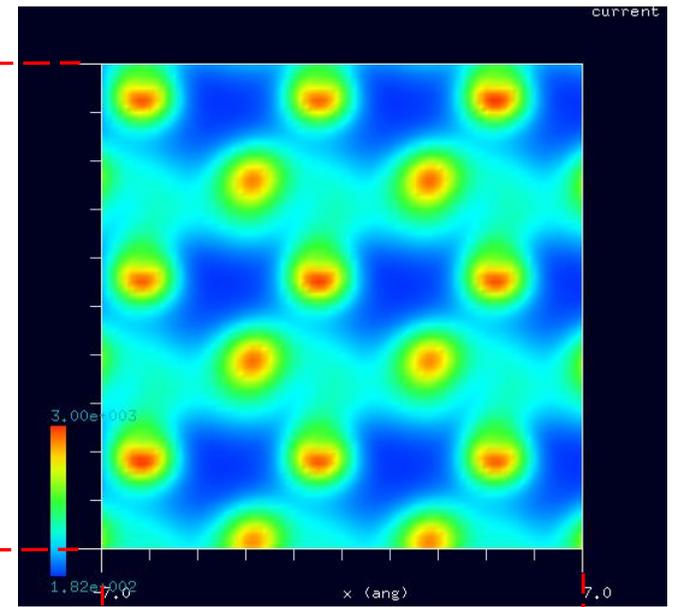
設定条件

⑥ TIP バイアス電圧 1V の場合のシミュレーション結果

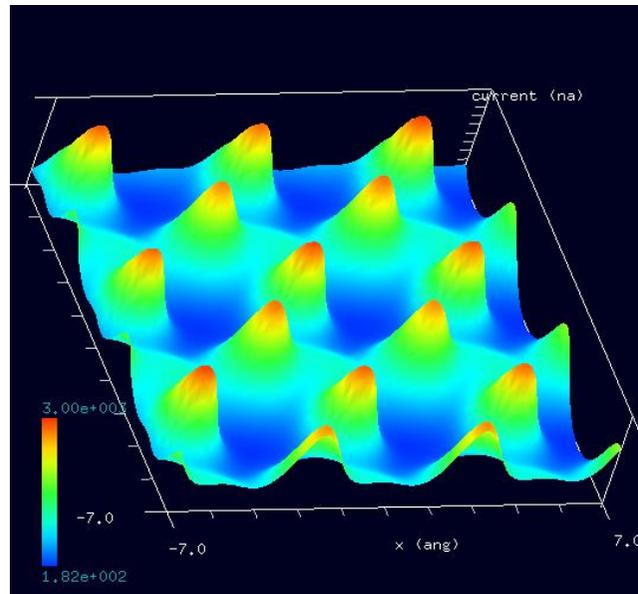
・ Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



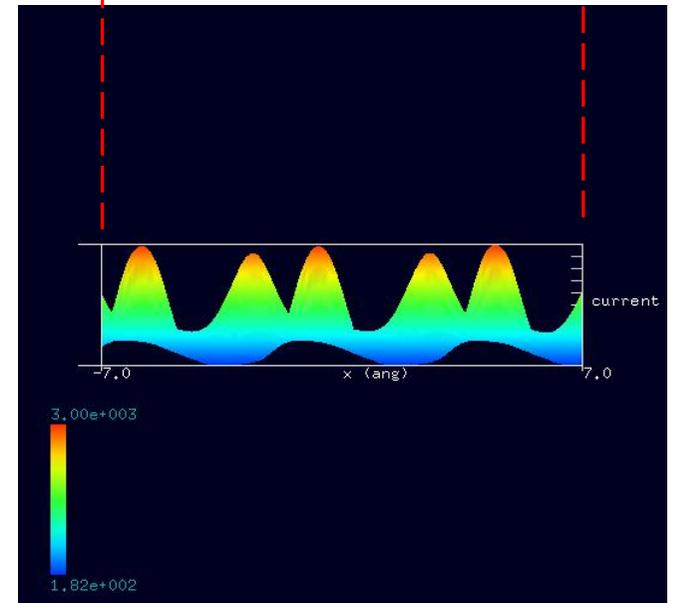
SIDE



TOP



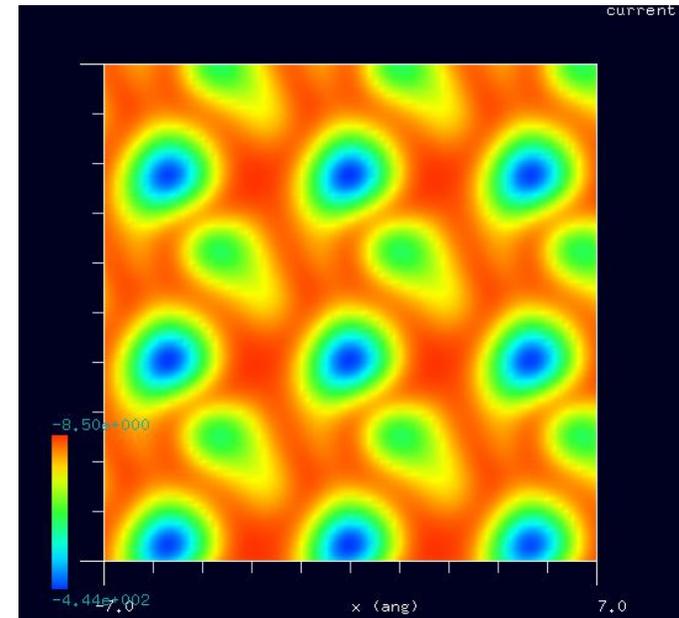
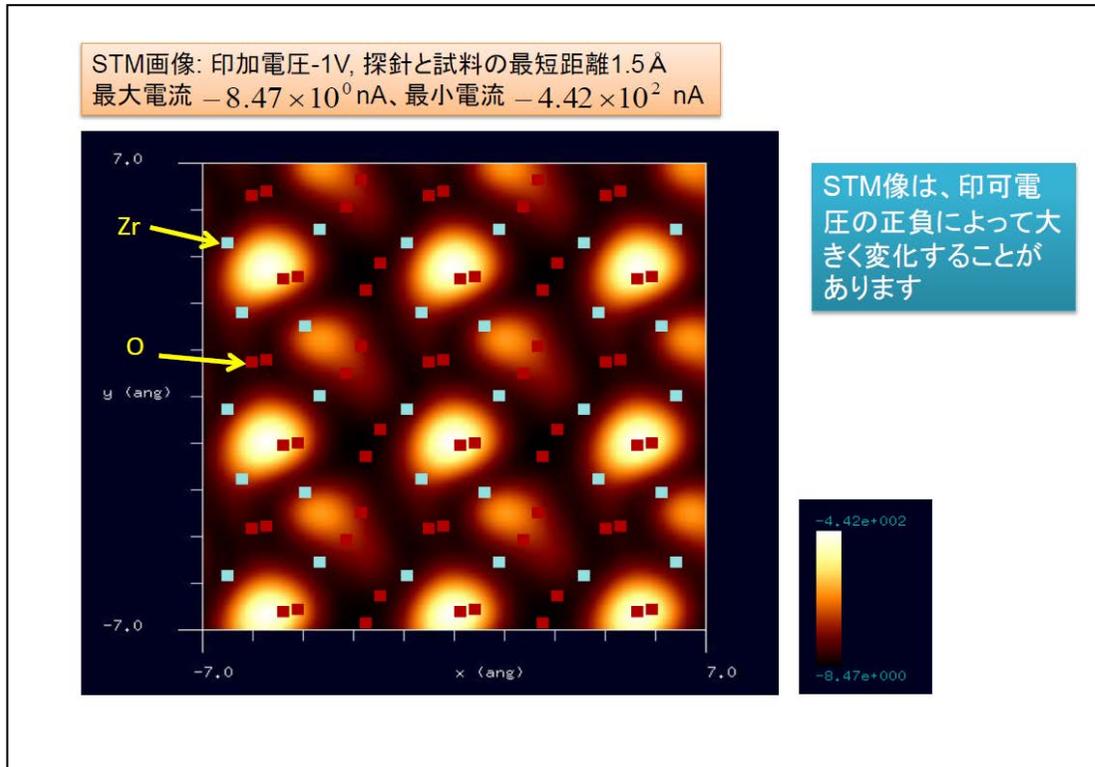
俯瞰



FRONT

⑦ TIP バイアス電圧-1V の場合

事例紹介ページを下図に示します。



シミュレーション結果、TOP画像3D-ViewのRainbow色表示

事例紹介ページ3 (逆スケール表示)

本計算事例の入力条件について記載します。

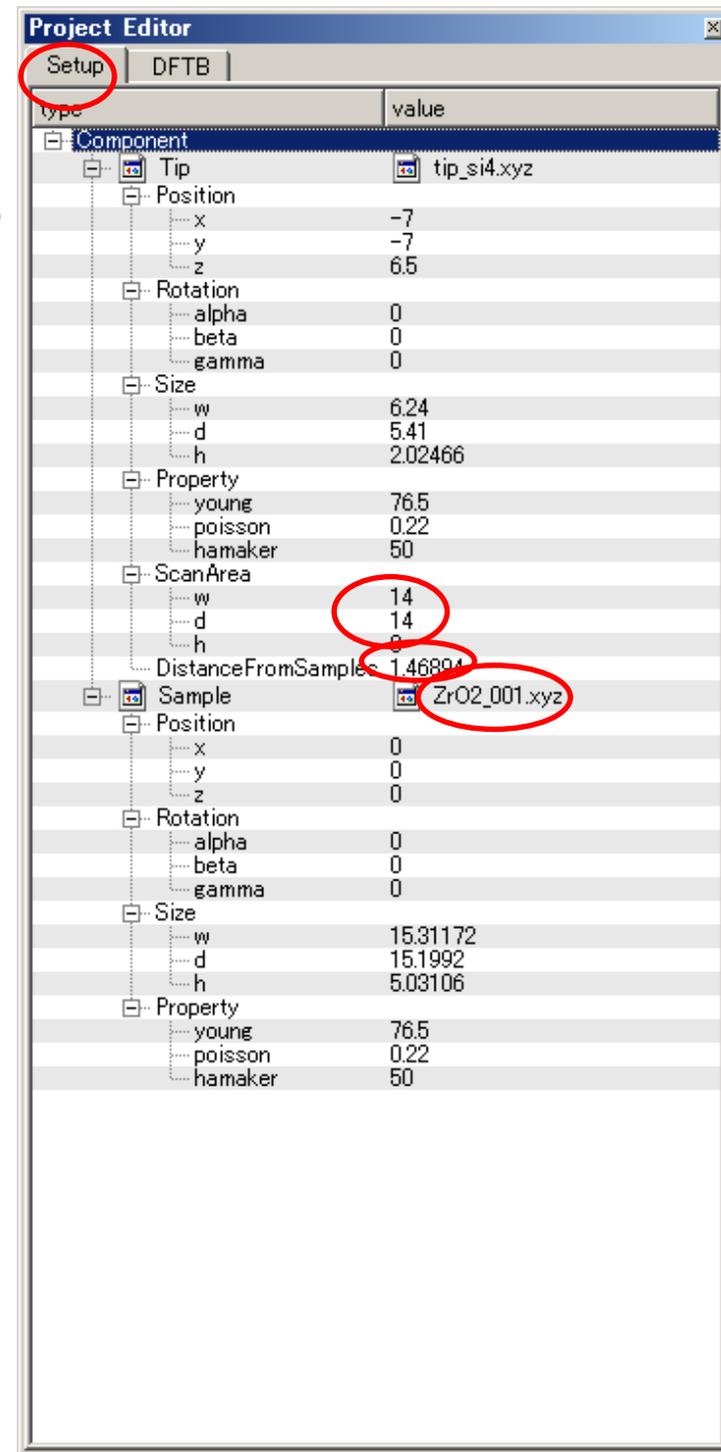
⑧ TIP バイアス電圧-1V の場合のセットアップ条件

(Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアは「 $W14\text{\AA} \times D14\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 1.46894\AA としています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

事例モデルのセットアップ条件

⑨ TIP バイアス電圧-1V の場合の DFTB 解析設定条件

(Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

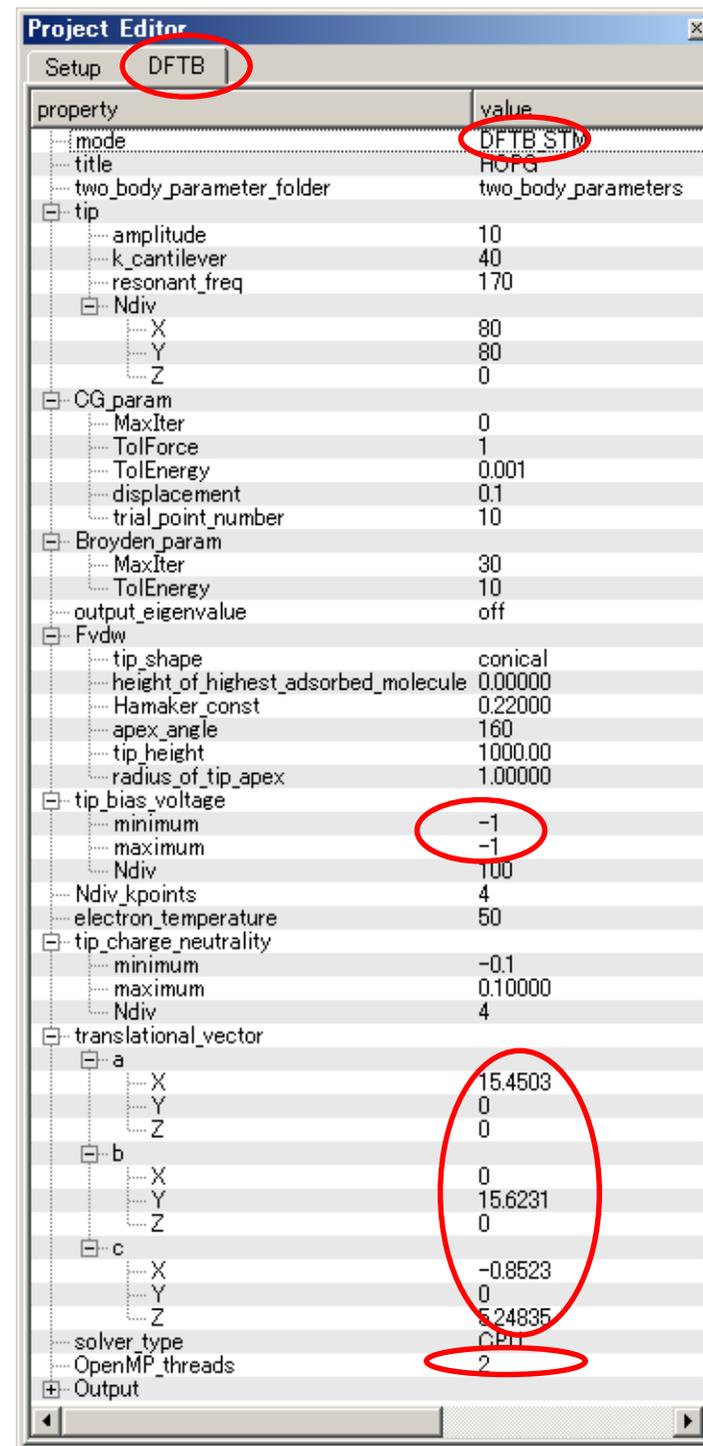
「STM_MODE」は「ConstantHeight」(Default、指定のない場合：

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 (2 スレッド対応)。

周期境界条件を考慮します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

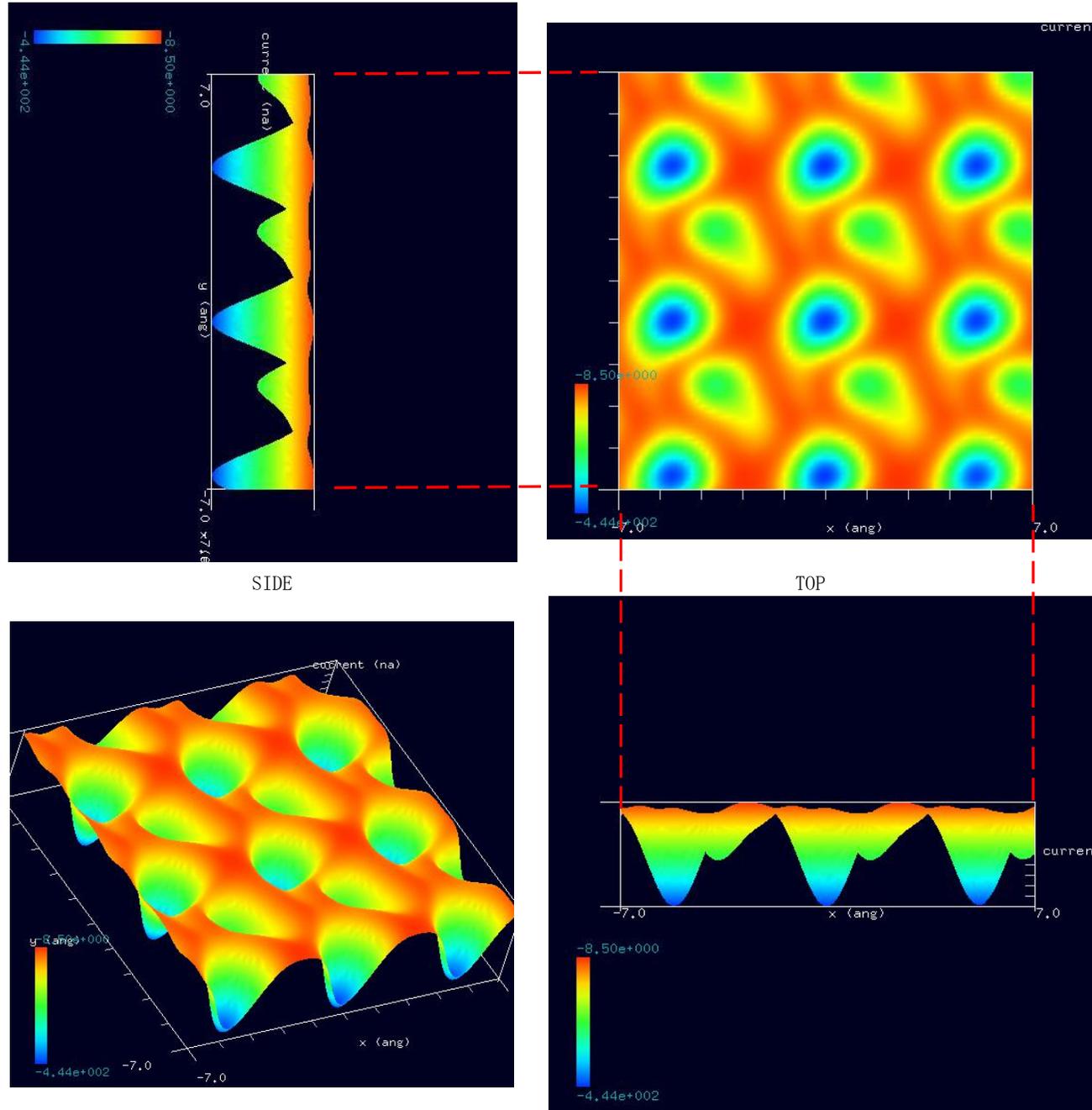


※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

設定条件

⑩ TIPバイアス電圧-1Vの場合のシミュレーション結果

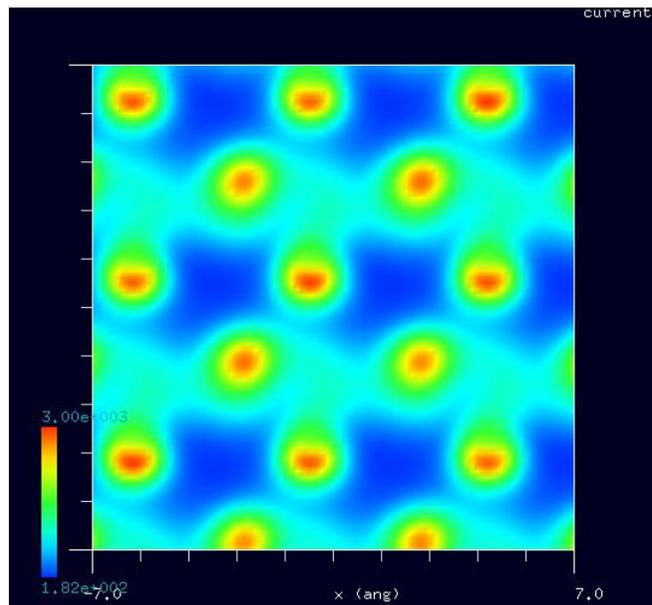
Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



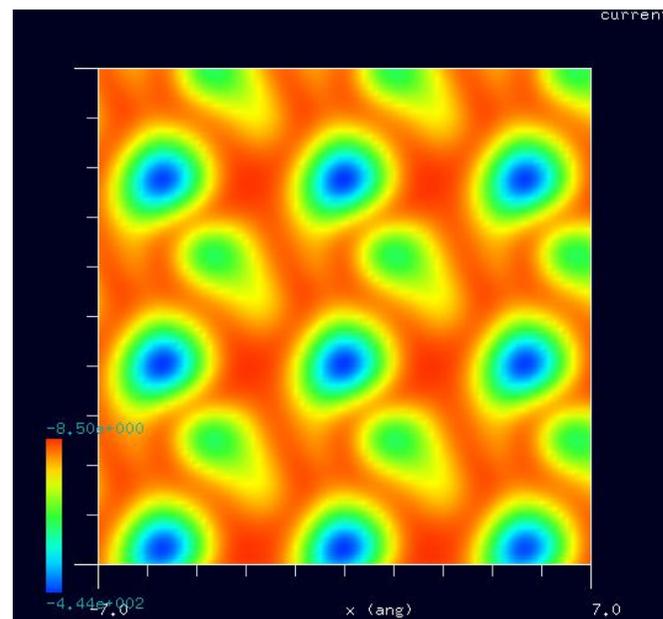
俯瞰

FRONT

⑪ TIPバイアス電圧+1V とTIPバイアス電圧-1Vの場合のシミュレーション結果比較



TIPバイアス電圧+1V



TIPバイアス電圧-1V

TIPバイアス電圧+1Vでの電流の大きな位置と、TIPバイアス電圧-1Vでの電流の小さな位置は、対応せず、互い違いになっている。少なくとも、本シミュレーション条件である常温では、ZrO₂単斜晶(空間群番号:14)(001)面では半導体の性質は持たないといえる。

⑫ ジルコニアZrO₂について

・ジルコニア（二酸化ジルコニウム、化学式：ZrO₂）は、ジルコニウムの酸化物である。常態では白色の固体。融点が2700℃と高いため、耐熱性セラミックス材料として利用されている。また、透明でダイヤモンドに近い高い屈折率を有することから模造ダイヤとも呼ばれ、宝飾品としても用いられている。（wikipedia）

・酸化ジルコニウムはその酸塩基両機能性に従い特徴ある触媒作用を示す。金属酸化物の表面は一般に酸性，塩基性，酸化性，還元性のいずれかに富むが，酸化ジルコニウムの特徴は弱いながらも酸性，塩基性双方をバランスよく有することおよび酸化性，還元性も有することである。

（「酸化ジルコニウムの触媒への応用」石油学会誌，36，（4），250-267（1993）、北海道大学 山口 力 様 より引用）

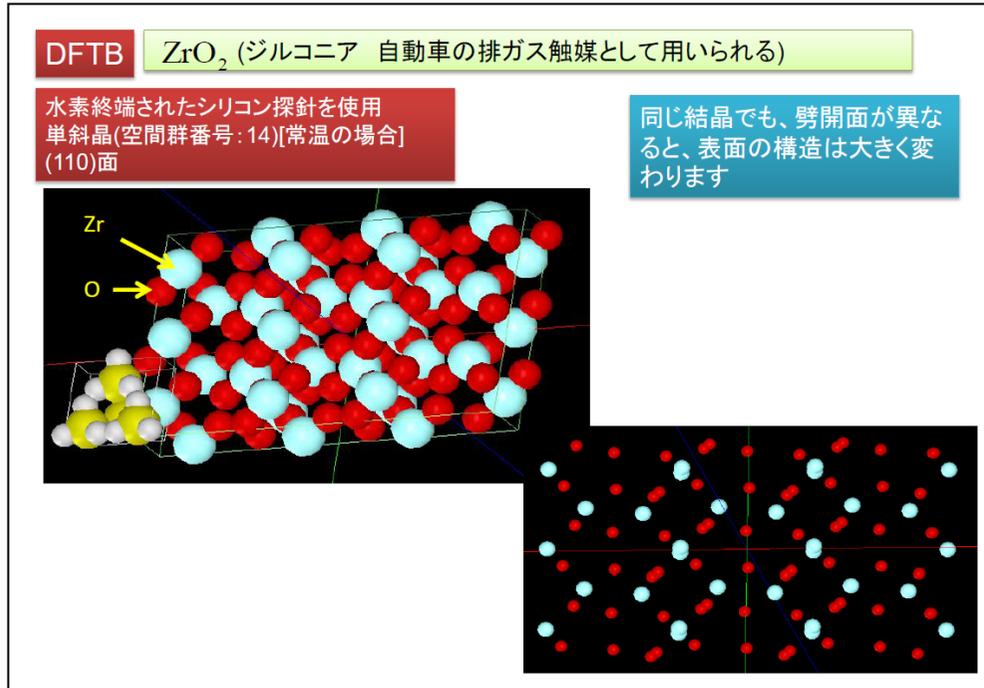
4-2●DFTB : ConstHeightSTM (高さ一定STM 画像シミュレーション) ZrO2 単斜晶(空間群番号: 14) [常温の場合] (110)面 計算事例⑨

計算モード識別番号: [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_031a]、[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_031b]

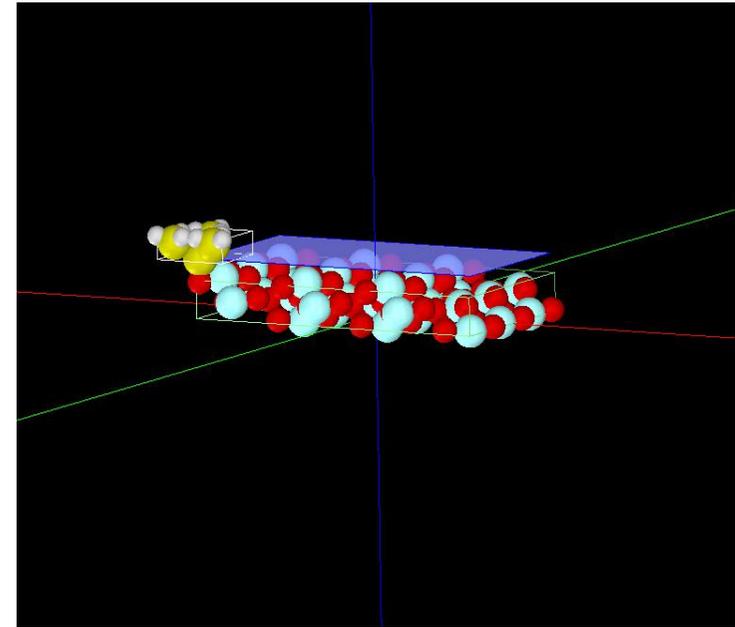
ソルバ・モード・計算例アドレス https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php

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

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ1



試料モデルの3D表示

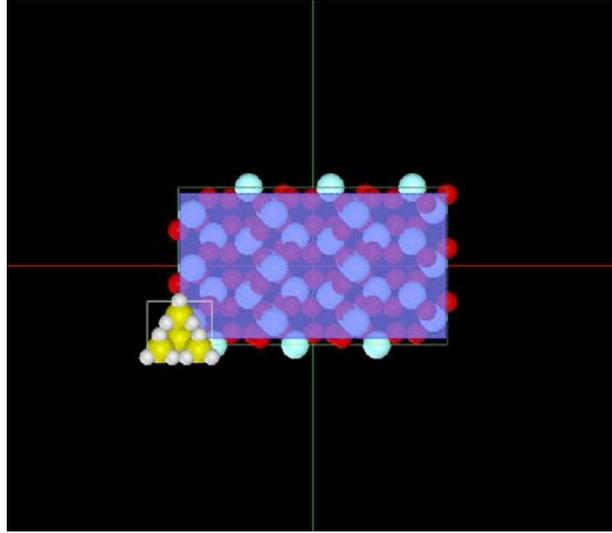
① 概要

本事例は、ZrO₂ 単斜晶(空間群番号: 14) [常温の場合] (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。

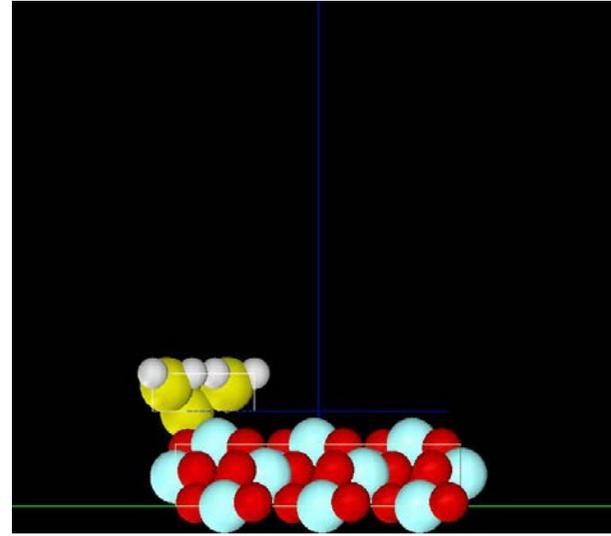
探針は作成済みデータ「tip_si4.xyz」を用います。バイアス電圧 +1.0V (a)とバイアス電圧 -1.0V (b)での計算を設定例条件で行わせ、結果の違いを比較します。

② 探針、試料モデル

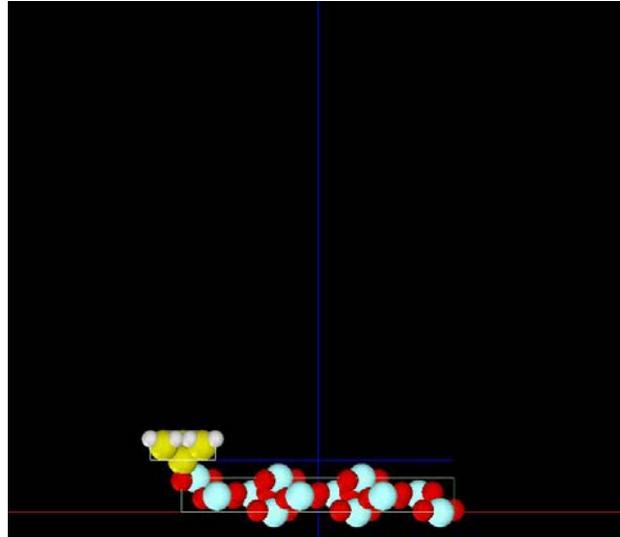
探針、試料モデルをSIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



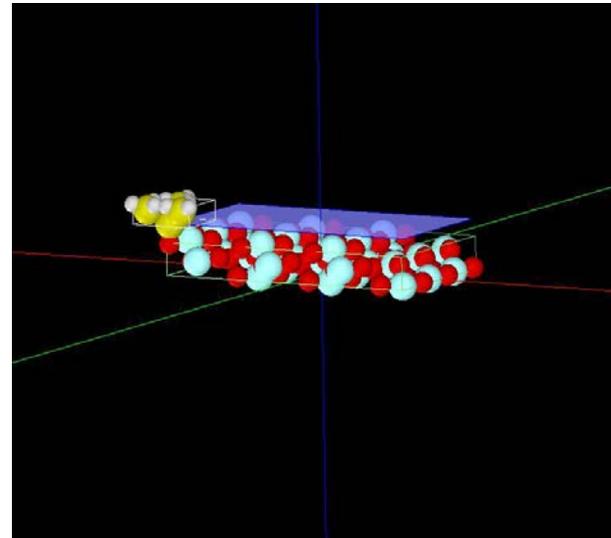
TOP



SIDE



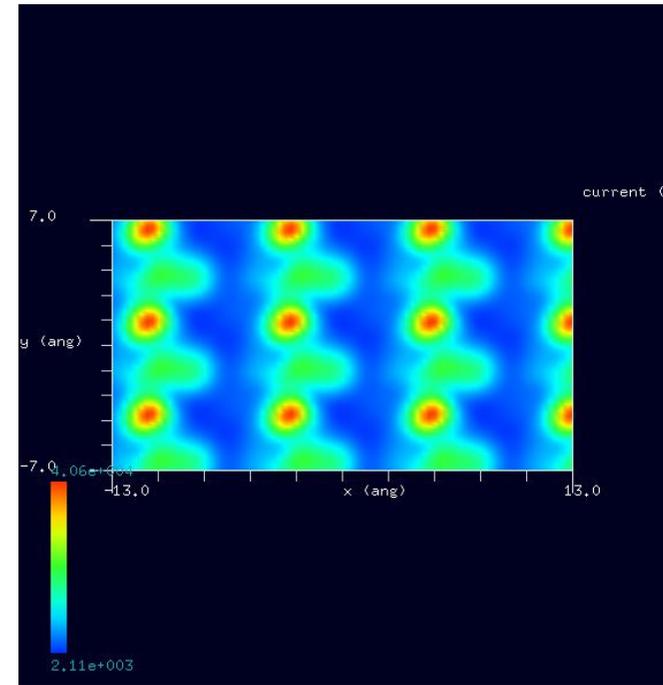
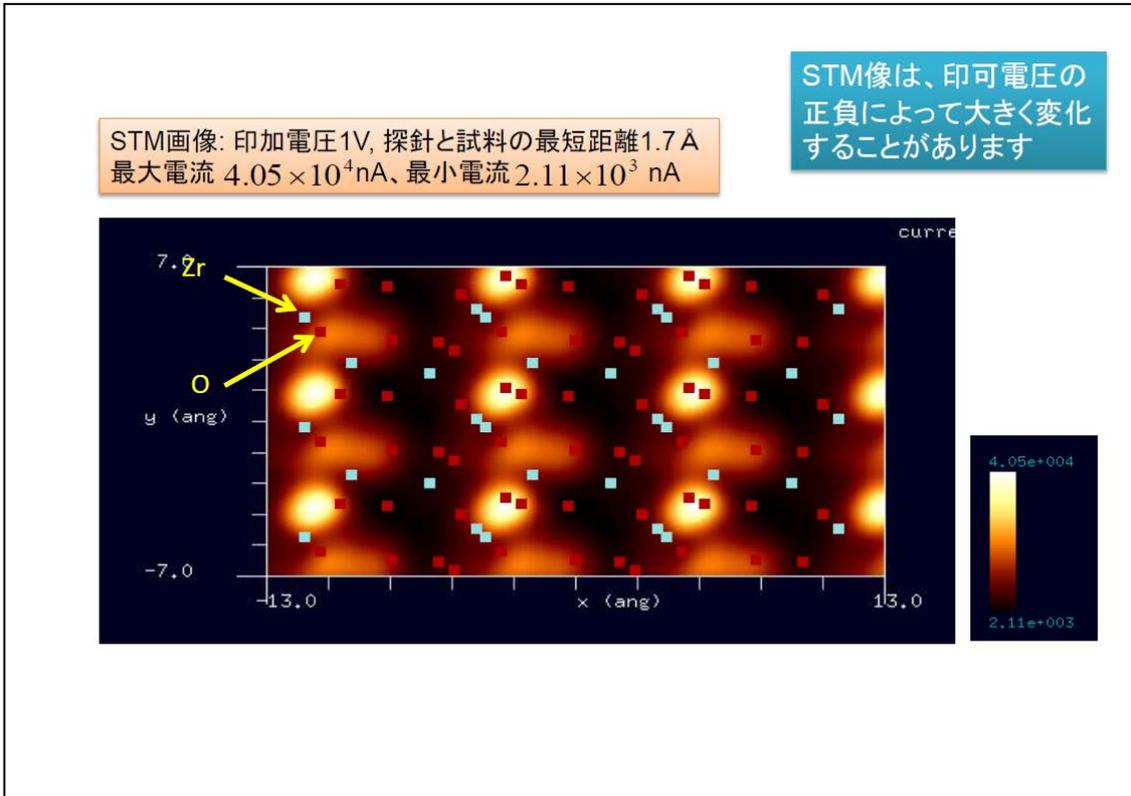
FRONT



俯瞰

③ TIP バイアス電圧 1V の場合

事例紹介ページを下図に示します。



シミュレーション結果、TOP画像 3D-ViewのRainbow色表示

事例紹介ページ 2

本計算事例の入力条件について記載します。

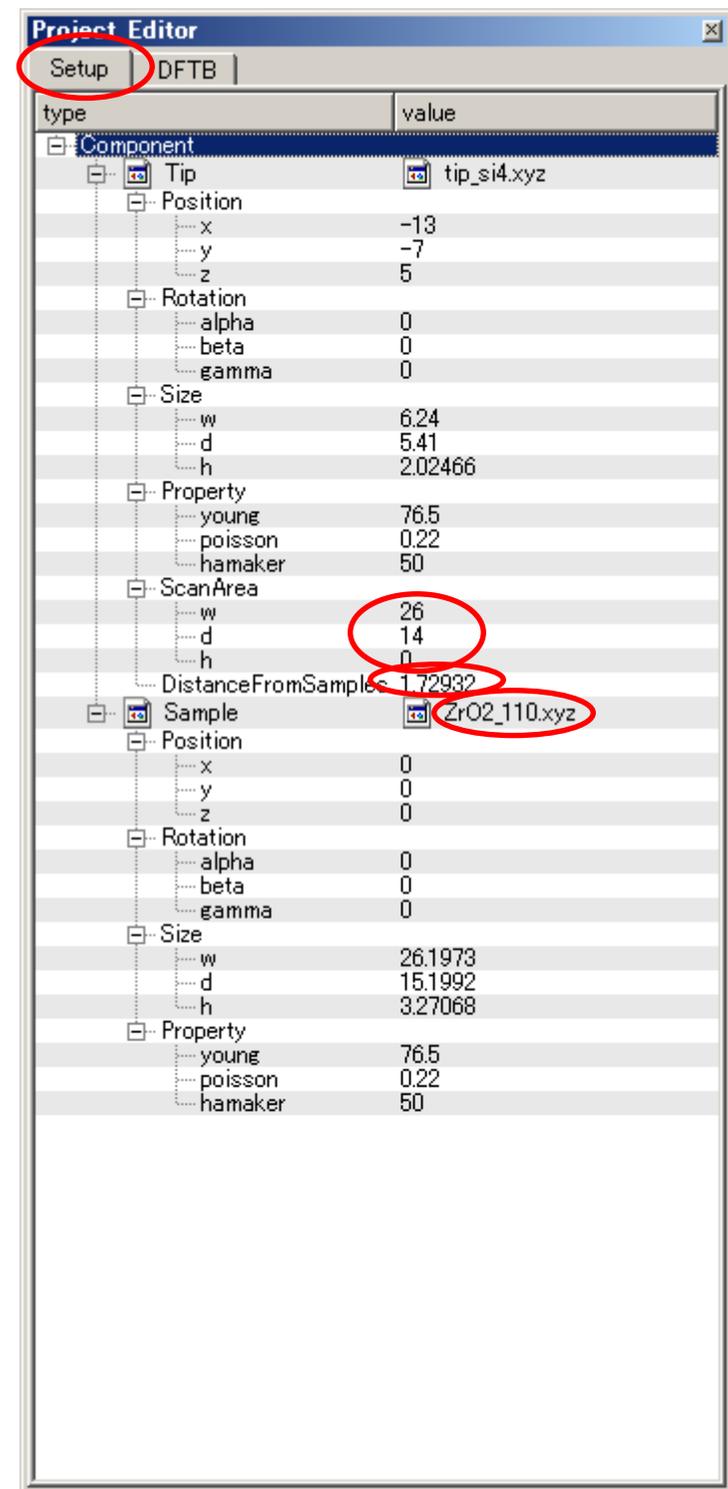
④ TIP バイアス電圧 1V の場合のセットアップ条件

(Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアは「 $W26\text{\AA} \times D14\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 1.72932\AA としています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

⑤TIP バイアス電圧 1V の場合の DFTB 解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

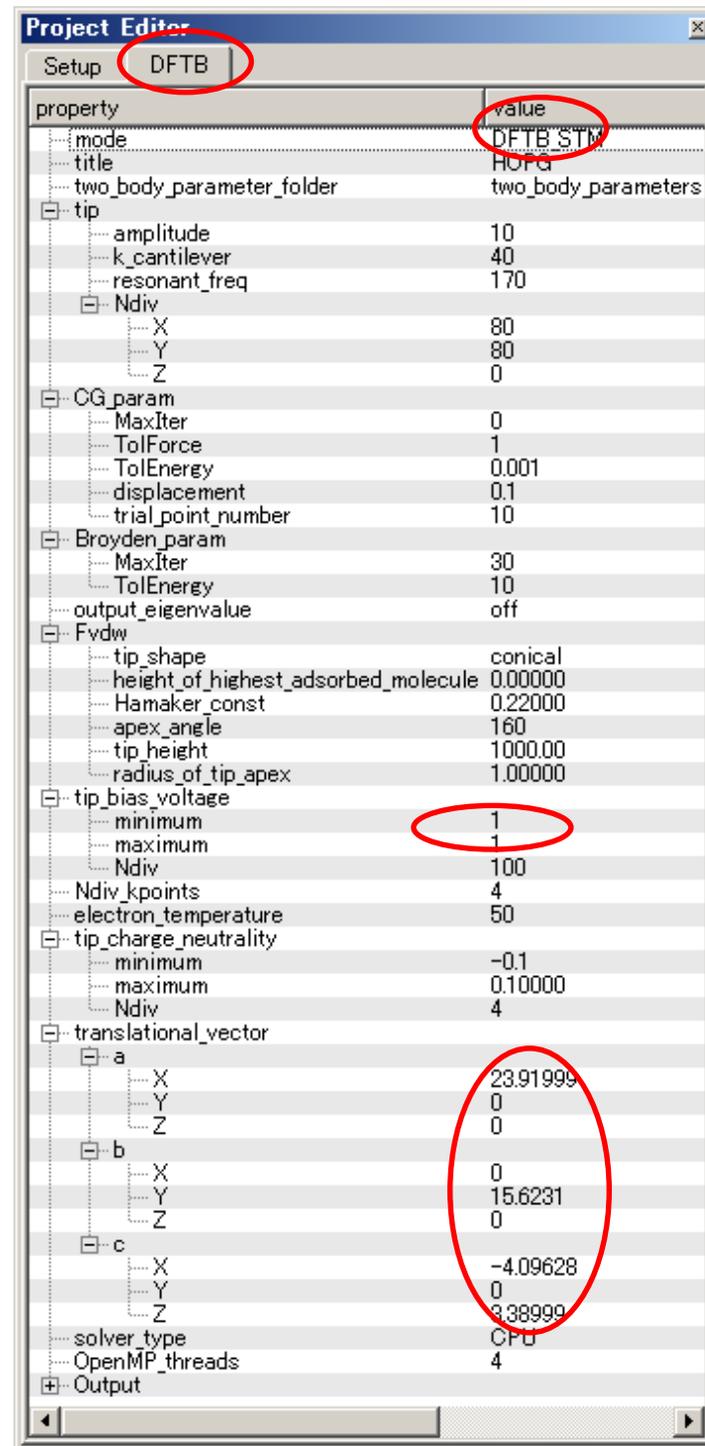
「STM_MODE」は「ConstantHeight」(Default、指定のない場合：

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)。

周期境界条件を考慮します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

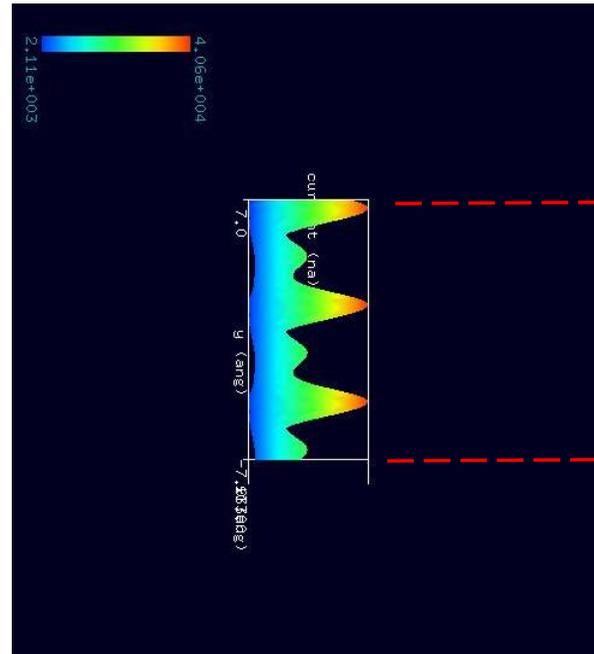


設定条件

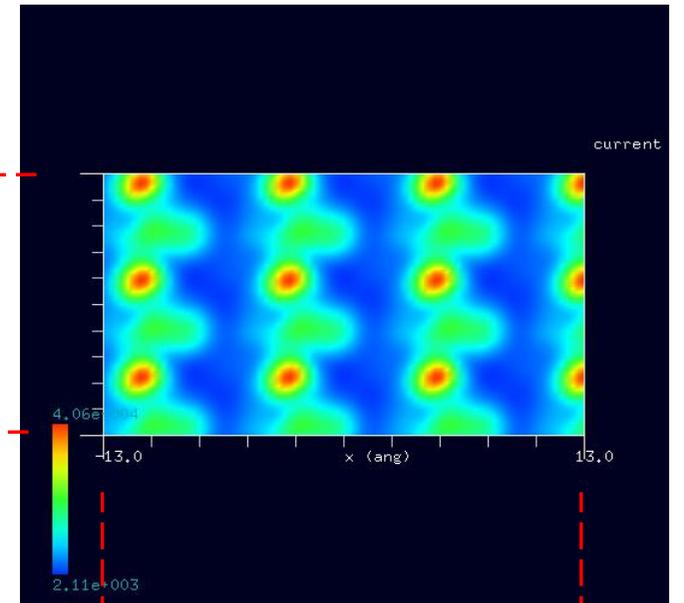
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

⑦ TIPバイアス電圧1Vの場合のシミュレーション結果

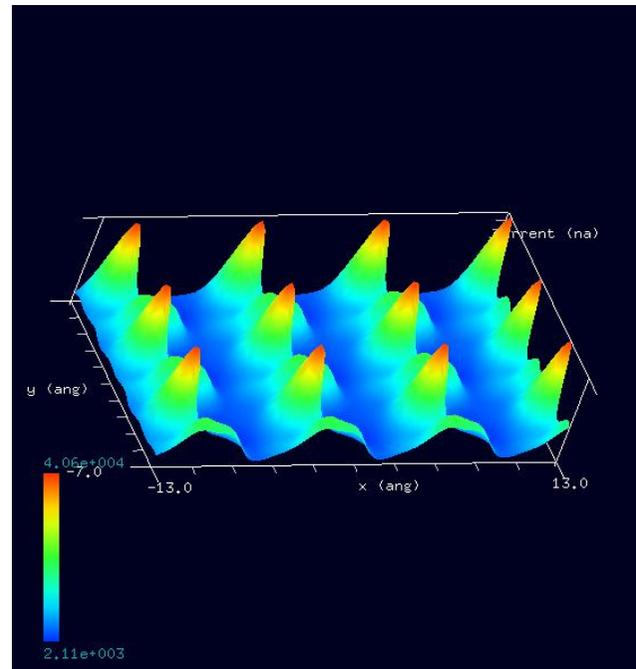
・Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



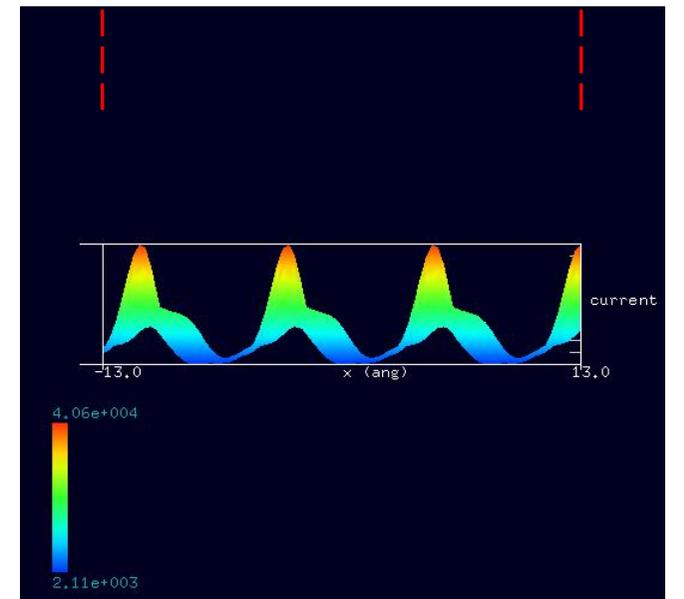
SIDE



TOP



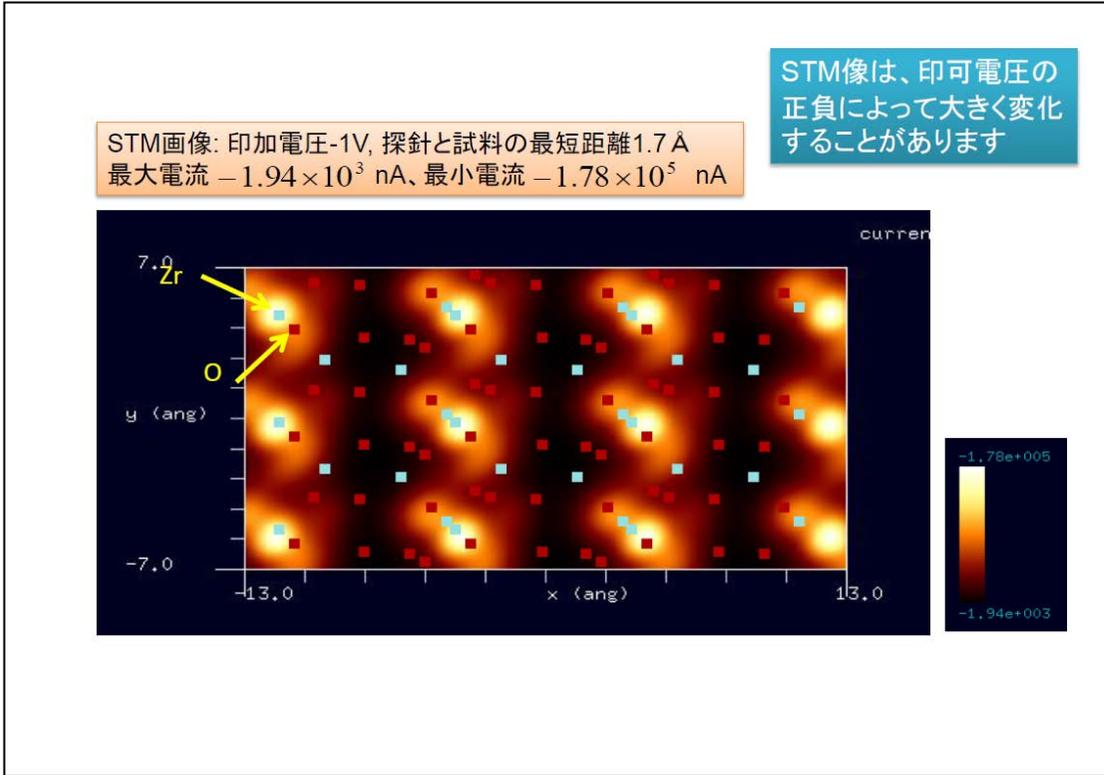
俯瞰



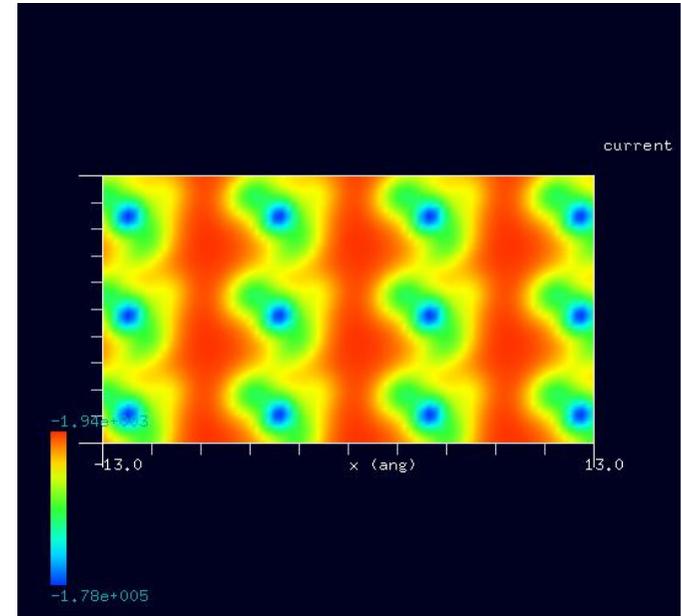
FRONT

⑧ TIP バイアス電圧-1V の場合

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ 3 (逆スケール表示)



シミュレーション結果、TOP画像 3D-ViewのRainbow色表示

本計算事例の入力条件について記載します。

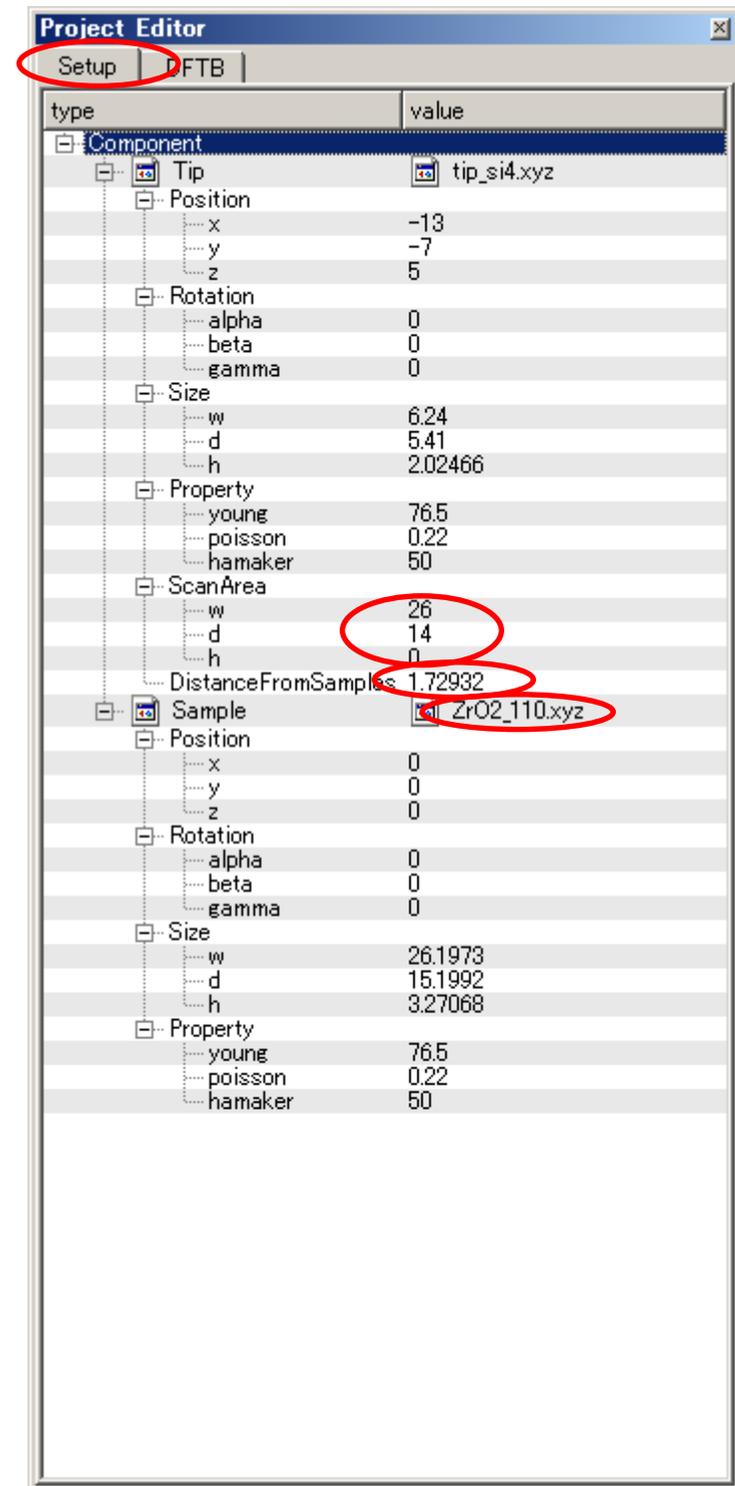
⑨ TIP バイアス電圧-1Vの場合のセットアップ条件

(Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアは「 $W26\text{\AA} \times D14\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 1.72932\AA ととしています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

⑩ TIP バイアス電圧 $-1V$ の場合の DFTB 解析設定条件

(Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

「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。

周期境界条件を考慮します。

並列化処理設定を行っています (2 スレッド対応)。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

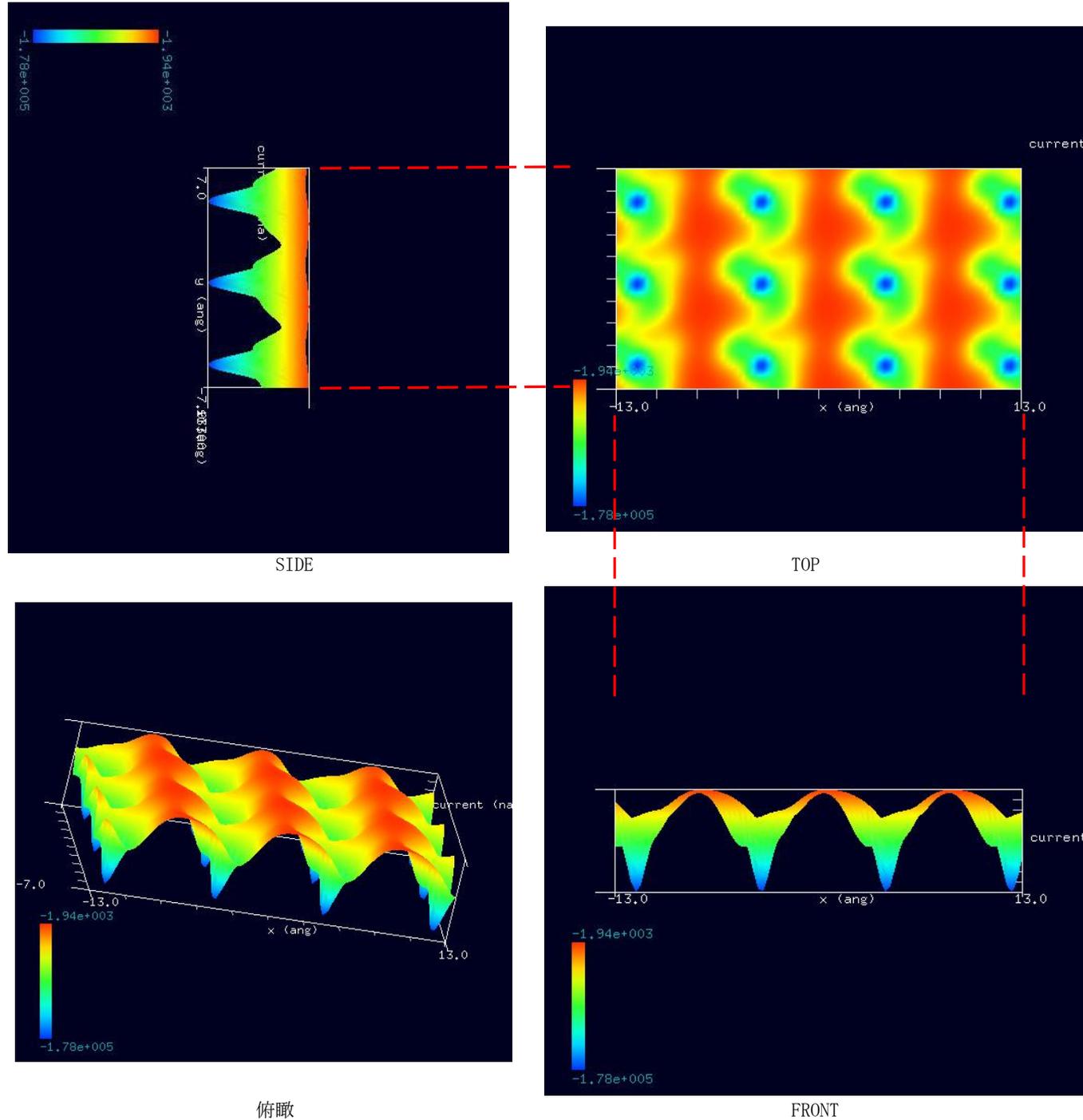
property	value
mode	DFTB_STM
title	HOPG
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	10
k_cantilever	40
resonant_freq	170
Ndiv	
X	80
Y	80
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1
TolEnergy	0.001
displacement	0.1
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	30
TolEnergy	10
output_eigenvalue	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	-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	23.91999
Y	0
Z	0
b	
X	0
Y	15.6231
Z	0
c	
X	-4.09628
Y	0
Z	3.38999
solver_type	CPU
OpenMP_threads	2
Output	

設定条件

※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

⑪ TIPバイアス電圧-1Vの場合のシミュレーション結果

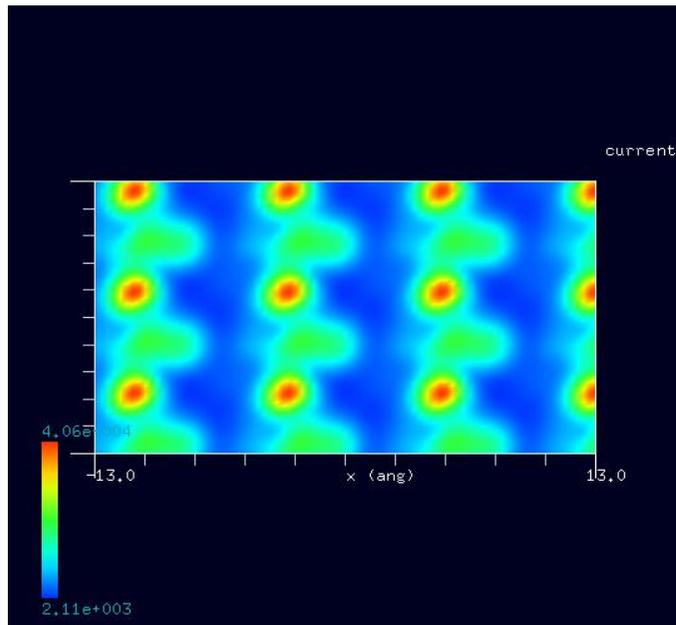
Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



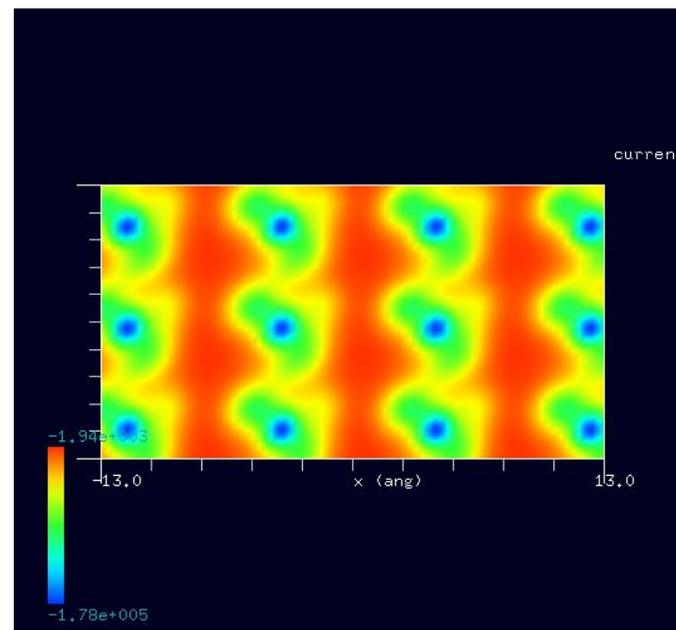
俯瞰

FRONT

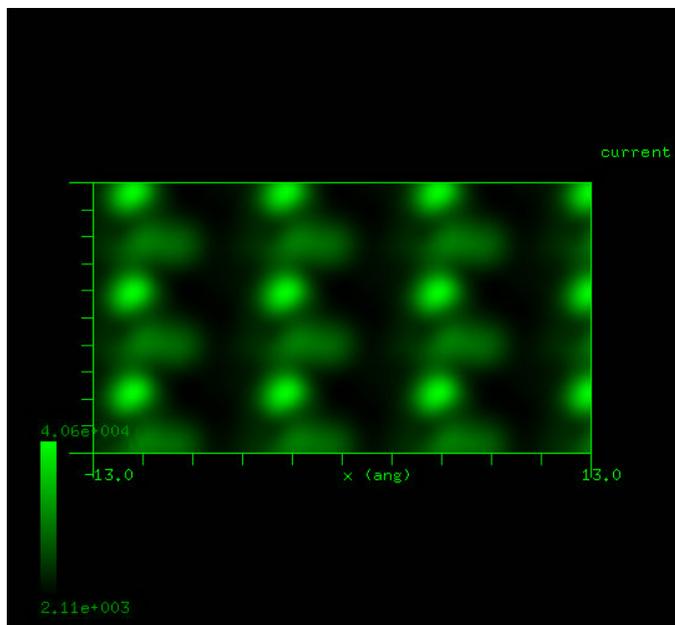
⑫ TIPバイアス電圧+1V とTIPバイアス電圧-1Vの場合のシミュレーション結果比較



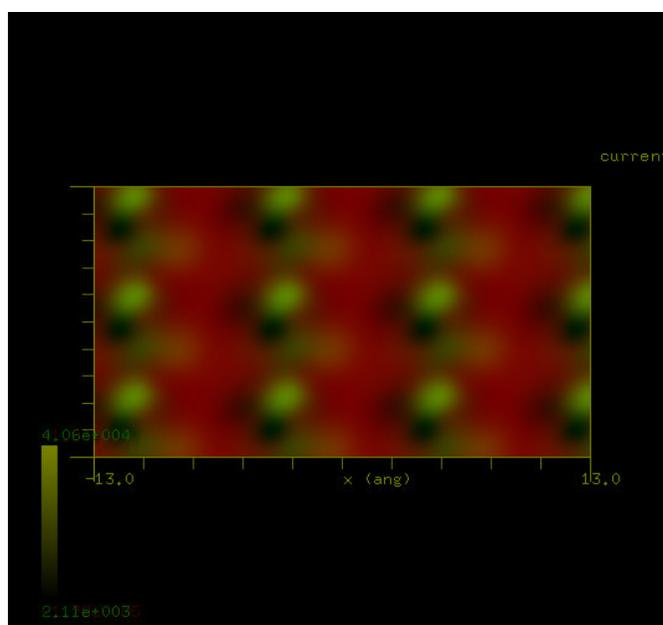
TIPバイアス電圧+1V



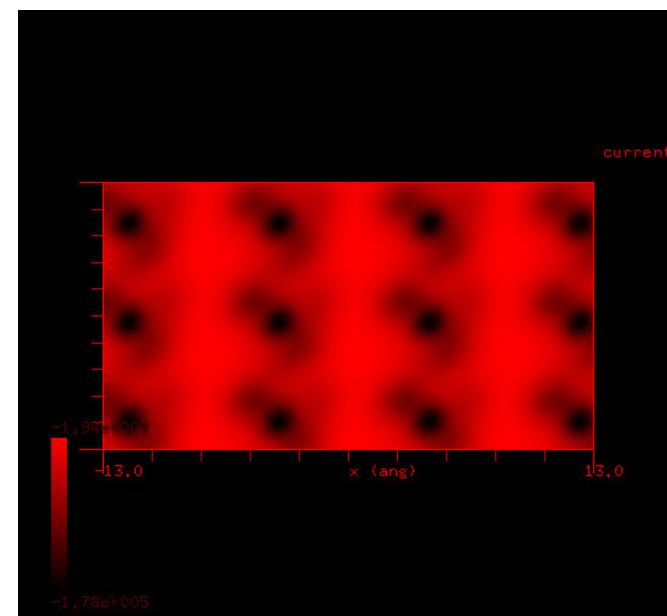
TIPバイアス電圧-1V



モノトーン緑画像：TIPバイアス電圧+1V



モノトーン緑と赤の合成画像



モノトーン赤画像：TIPバイアス電圧-1V

TIPバイアス電圧+1Vでの電流の大きな位置は、TIPバイアス電圧-1Vでの電流の小さな位置は、対応せず、互い違いになっている。少なくとも、本シミュレーション条件である常温では、ZrO₂単斜晶(空間群番号：14)(110)面では半導体の性質は持たないといえます。

4・3●DFTB_STM : ConstHeightSTM (高さ一定STM画像シミュレーション) ZrO₂ 立方晶(空間群番号: 225) [高温の場合] (001)面 計算事例⑩

計算モード識別番号: [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_032a]、[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_032b]

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

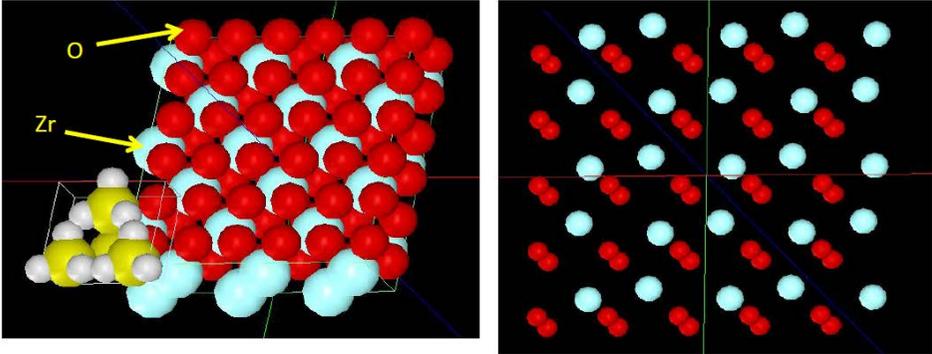
分類: DFTB ConstHeightSTM (高さ一定、トンネル電流像)、Åオーダー、触媒

事例紹介ページを下図に示します。

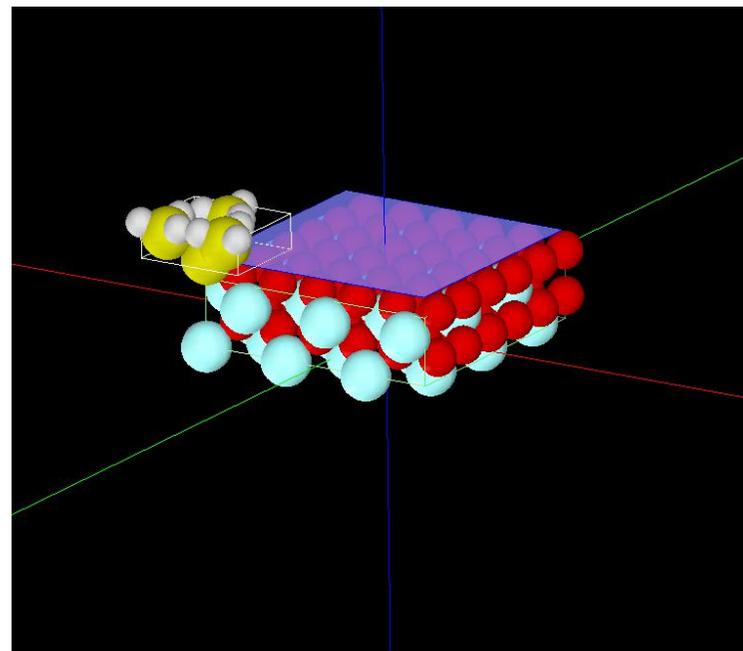
DFTB ZrO₂ (ジルコニア 自動車の排ガス触媒として用いられる)

水素終端されたシリコン探針を使用
立方晶(空間群番号:225)[高温の場合]
(001)面

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



事例紹介ページ1



試料モデルとスキャンエリアの3D表示

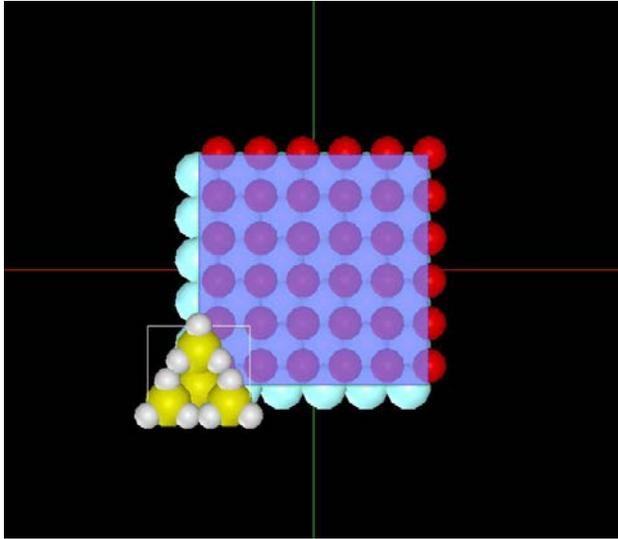
① 概要

本事例は、ZrO₂ 立方晶(空間群番号: 225) [高温の場合] (001)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。

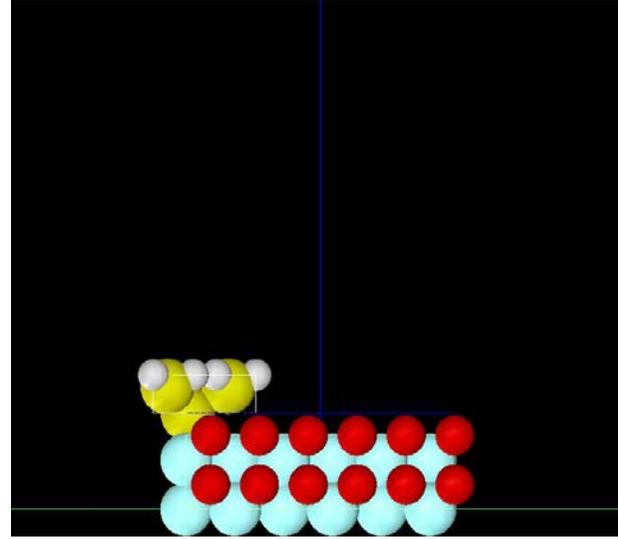
探針は作成済みデータ「tip_si4.xyz」を用います。バイアス電圧 +1.0V (a)とバイアス電圧 -1.0V (b)での計算を設定例条件で行わせ、結果の違いを比較します。

② 探針、試料モデル

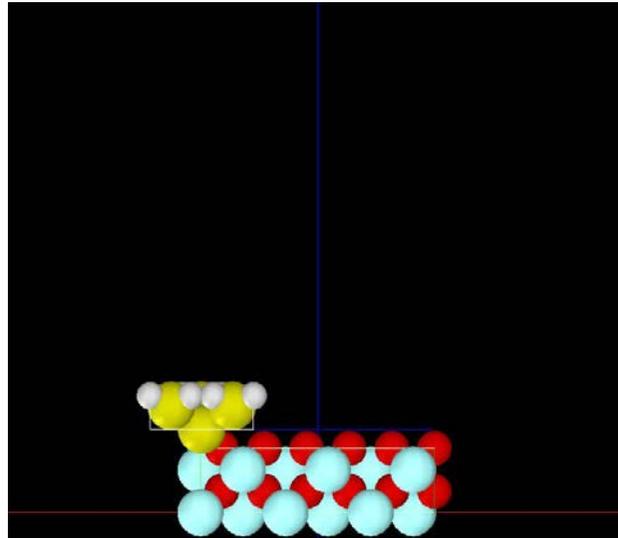
探針、試料モデルをSIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



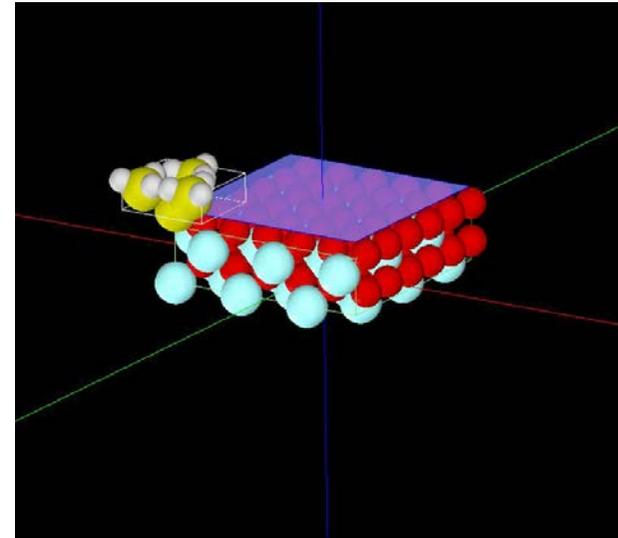
TOP



SIDE



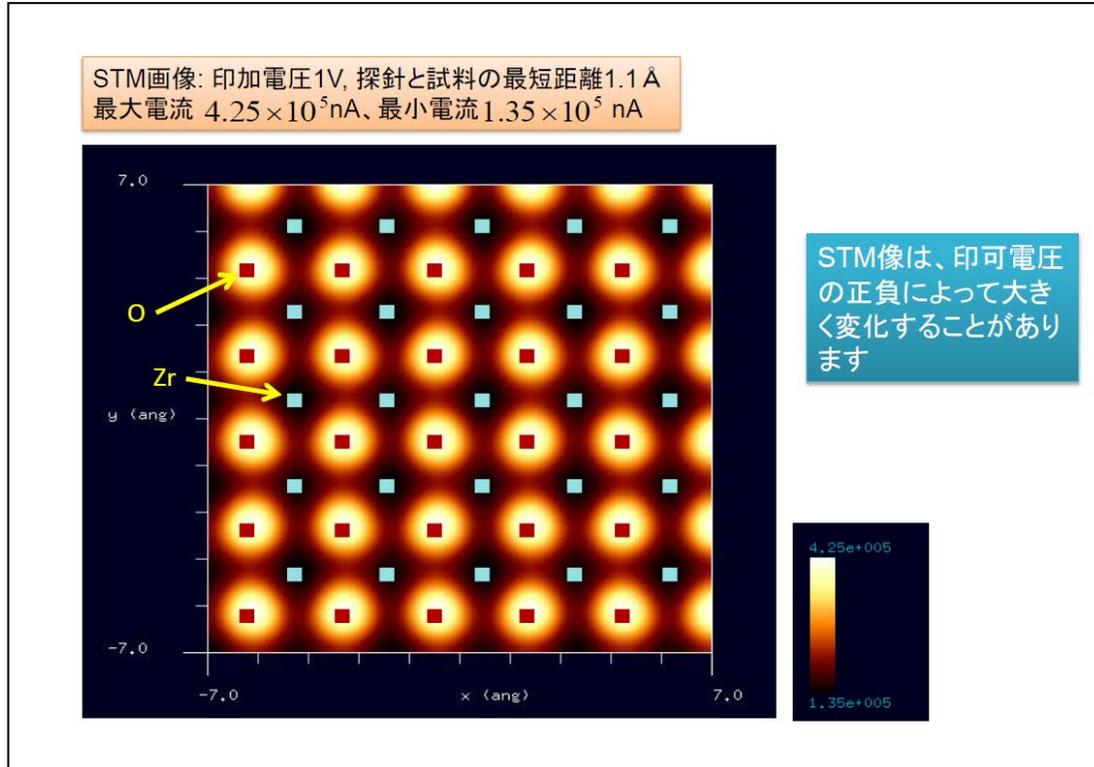
FRONT



俯瞰

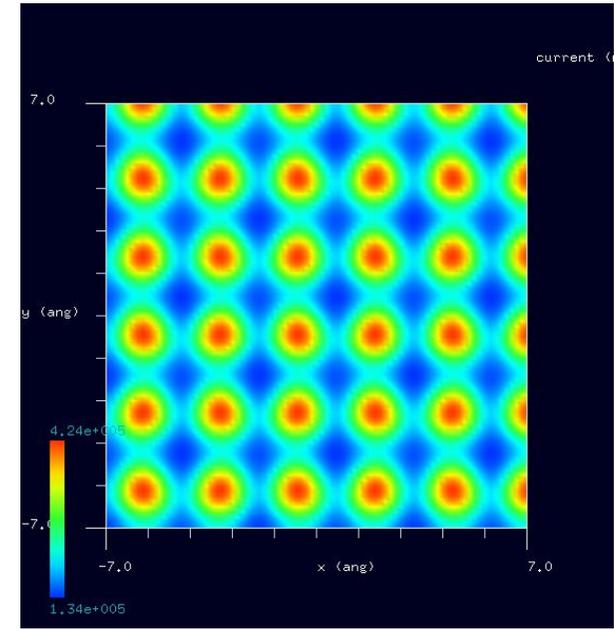
③ TIP バイアス電圧 1V の場合

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ2

本計算事例の入力条件について記載します。



シミュレーション結果、TOP 画像 3D-View の Rainbow 色表示

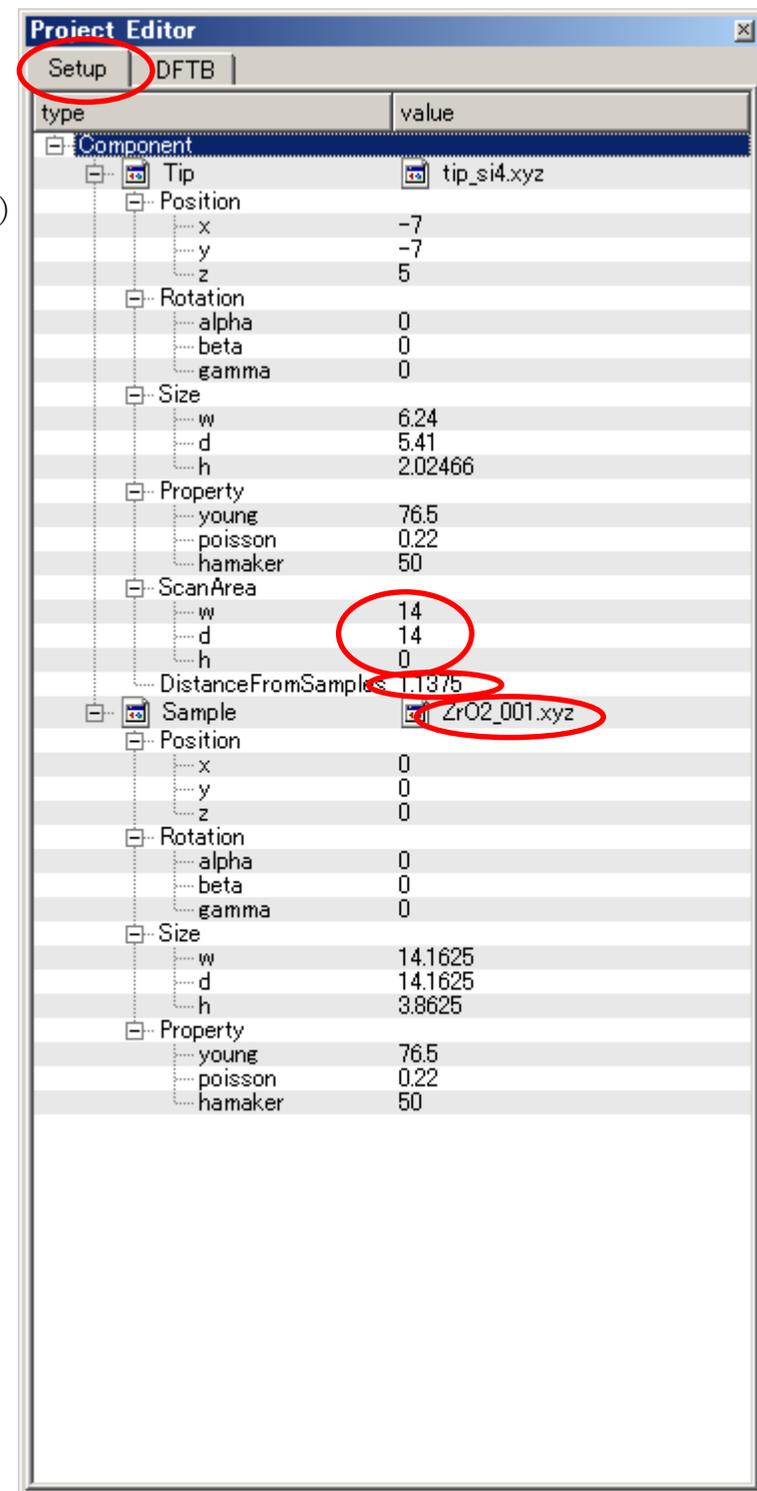
④ TIP バイアス電圧 1V の場合のセットアップ条件

(Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアは「 $W14\text{\AA} \times D14\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 1.1375\AA としています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

⑤ TIP バイアス電圧 1 V の場合の DFTB 解析設定条件

(Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

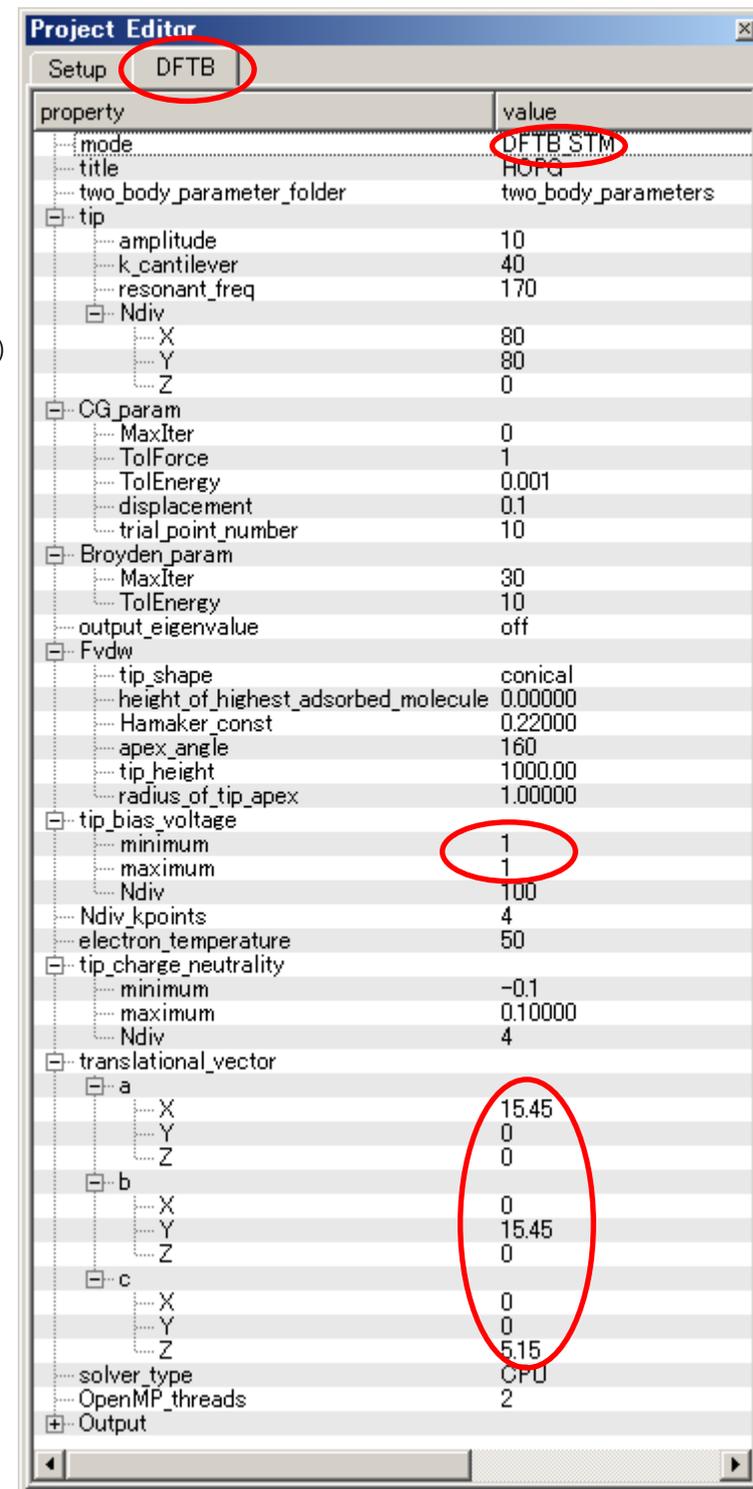
「STM_MODE」は「ConstantHeight」(Default、指定のない場合：

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 (2 スレッド対応)。

周期境界条件を考慮します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



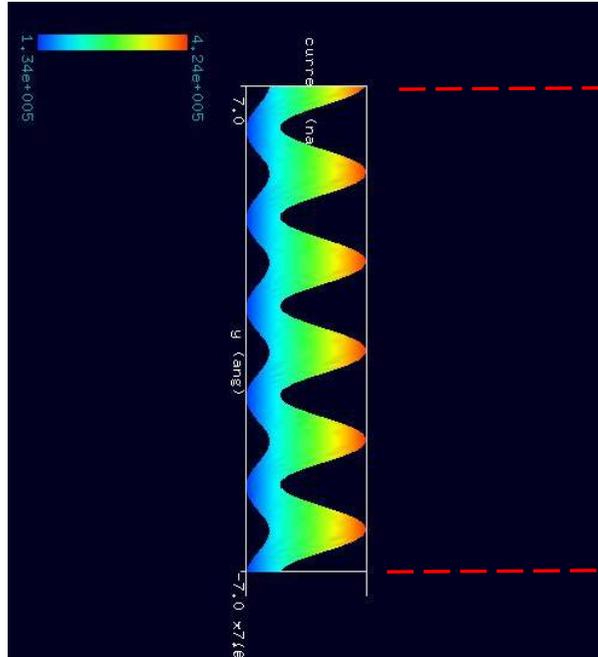
property	value
mode	DFTB_STM
title	HOPG
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	10
k_cantilever	40
resonant_freq	170
Ndiv	
X	80
Y	80
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1
TolEnergy	0.001
displacement	0.1
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	30
TolEnergy	10
output_eigenvalue	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	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	15.45
Y	0
Z	0
b	
X	0
Y	15.45
Z	0
c	
X	0
Y	0
Z	5.15
solver_type	CPU
OpenMP_threads	2
Output	

設定条件

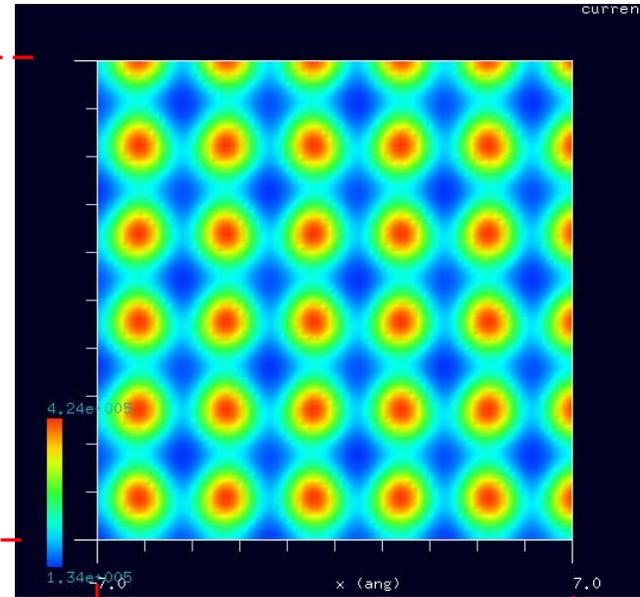
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

⑥ TIPバイアス電圧1Vの場合のシミュレーション結果

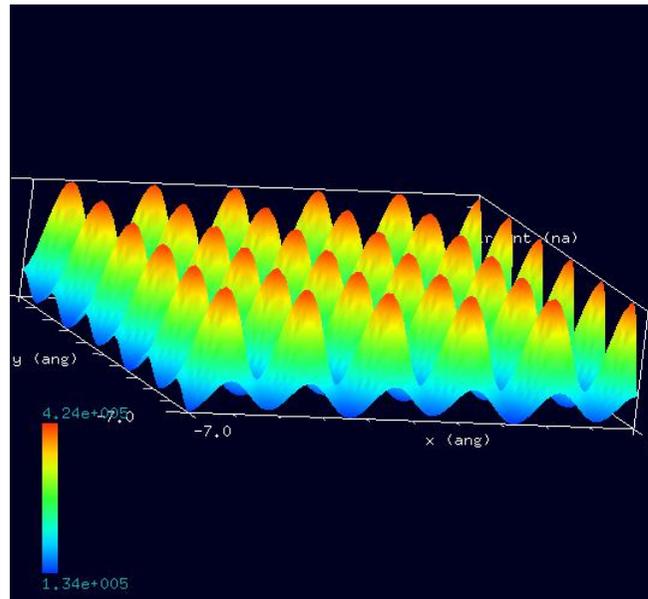
Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



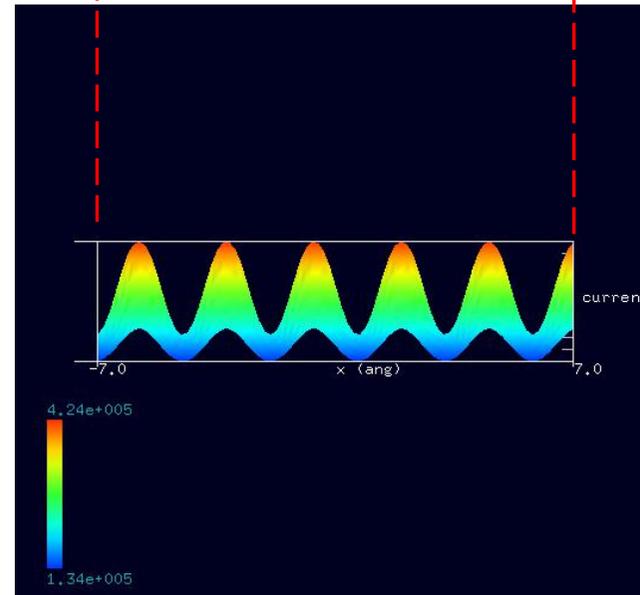
SIDE



TOP



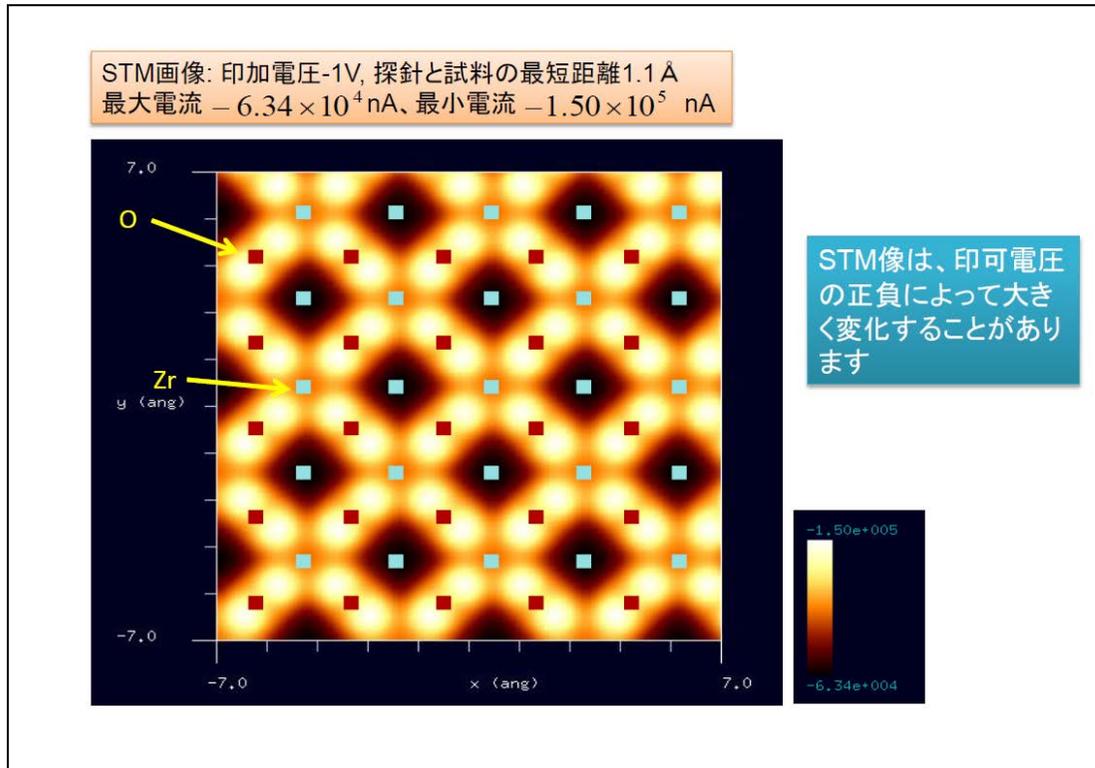
俯瞰



FRONT

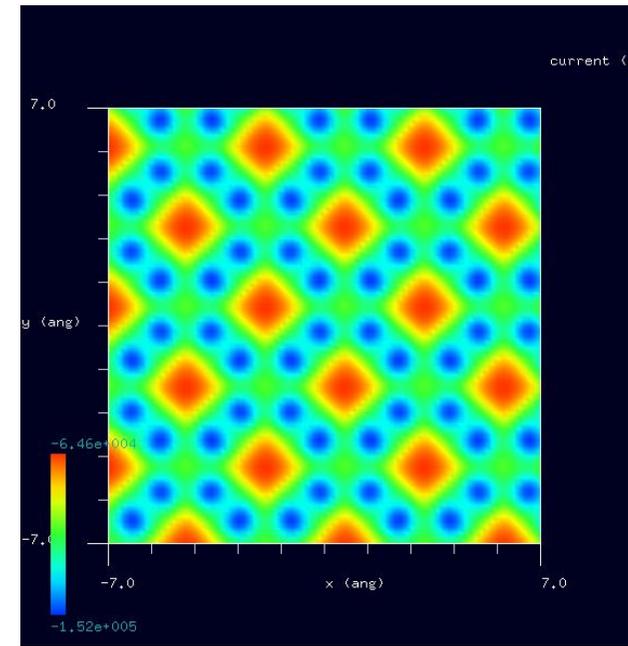
⑦ TIP バイアス電圧-1V の場合

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ2 (逆スケール)

本計算事例の入力条件について記載します。



シミュレーション結果、TOP 画像 3D-View の Rainbow 色表示

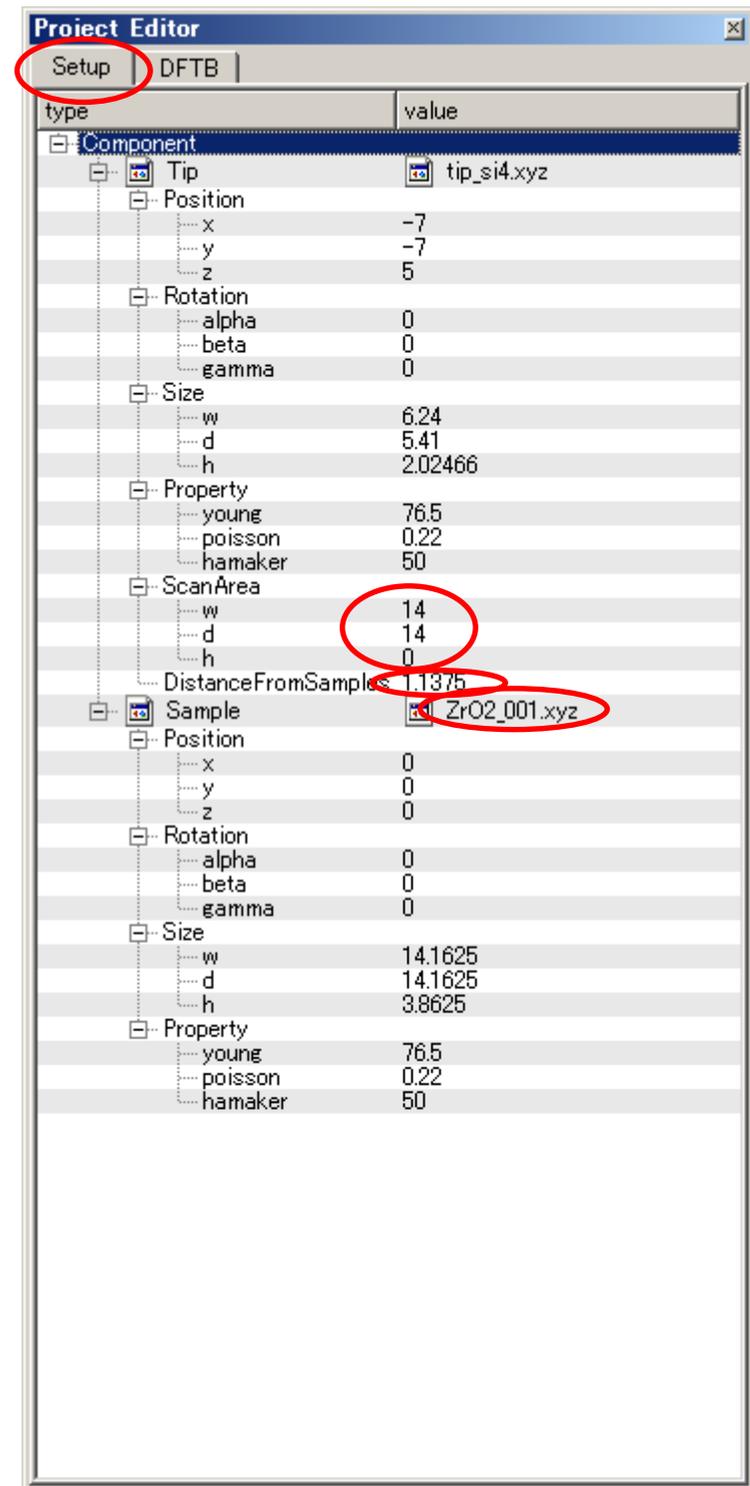
⑧ TIP バイアス電圧 -1V の場合のセットアップ条件と

(Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアは「 $W14\text{\AA} \times D14\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 1.1375\AA としています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

⑨ TIP バイアス電圧 $-1V$ の場合のセットアップ条件と DFTB 解析設定条件
(Project・Editor Setup・TabとDFTB・Tab)

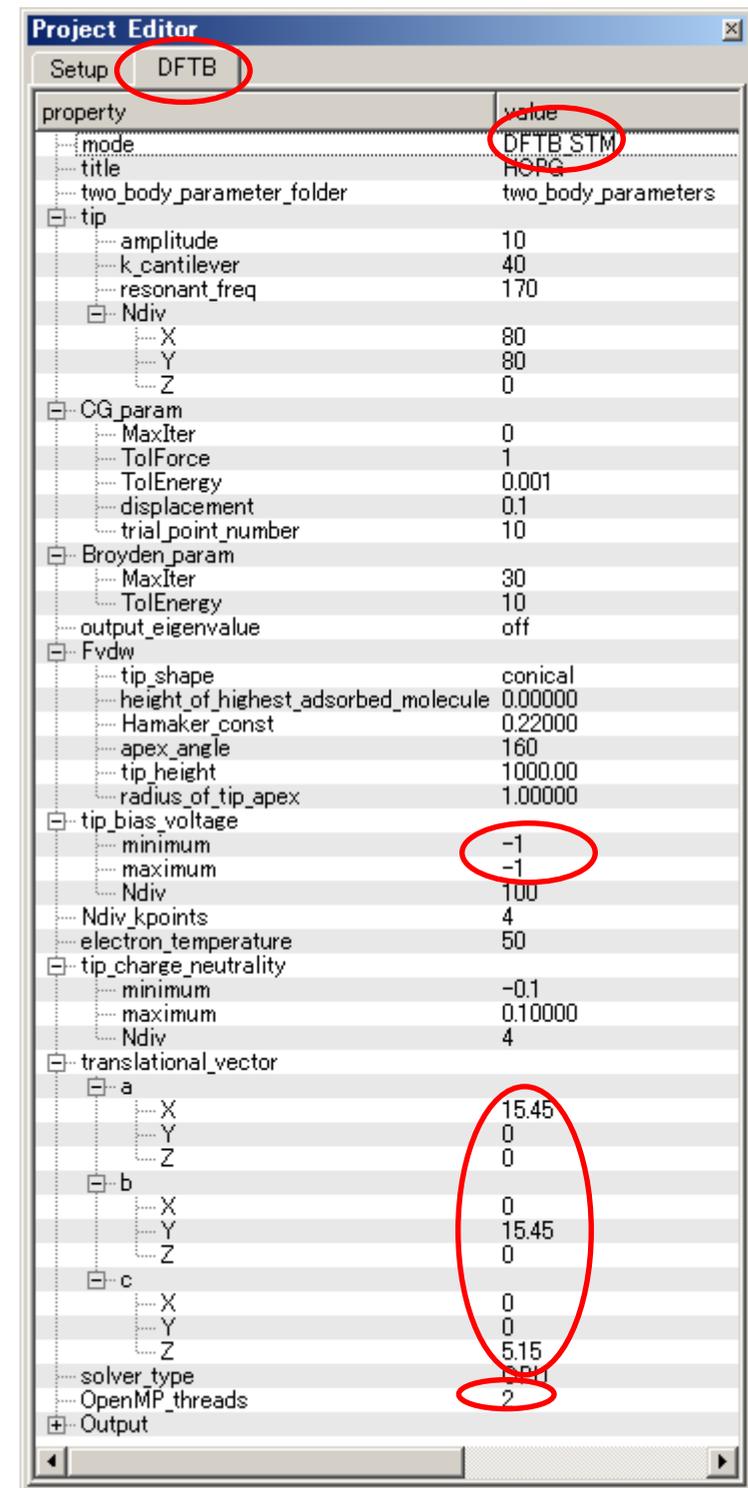
「mode」は、「DFTB_STM」とします。

「stm_mode」は、「ConstHeight」(デフォルト設定となり、記述がない場合があります) とします。

並列化処理設定を行っています (2 スレッド対応)。

周期境界条件を考慮します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

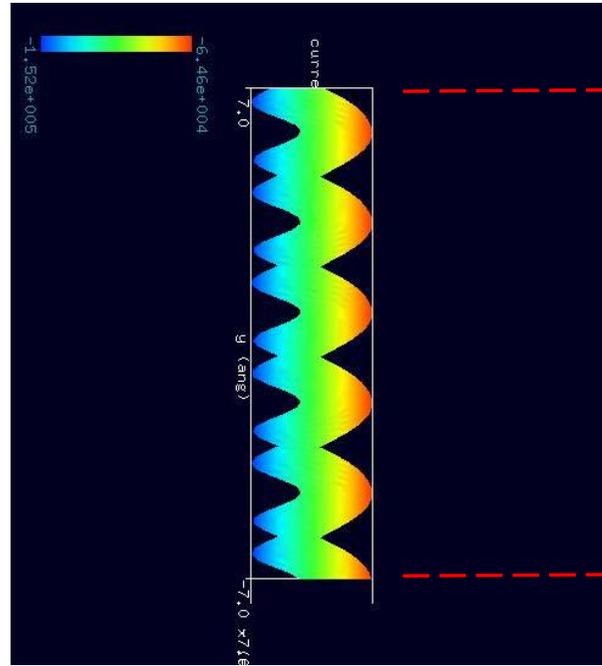


設定条件

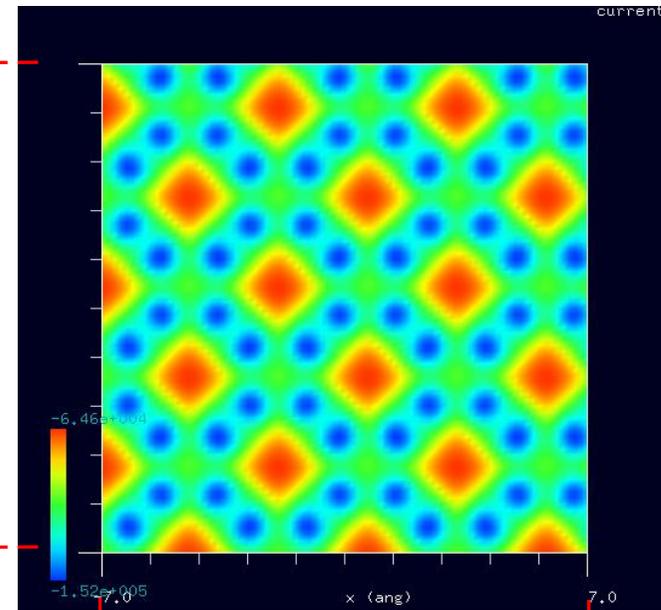
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

⑩ TIPバイアス電圧-1Vの場合のシミュレーション結果

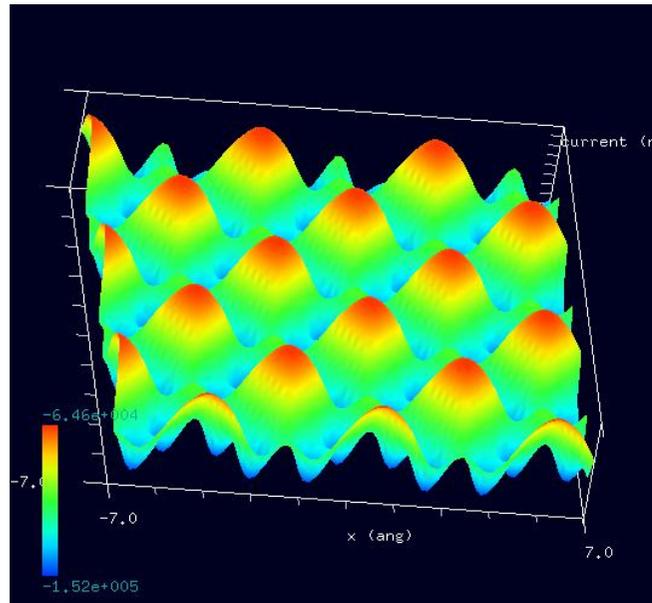
Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



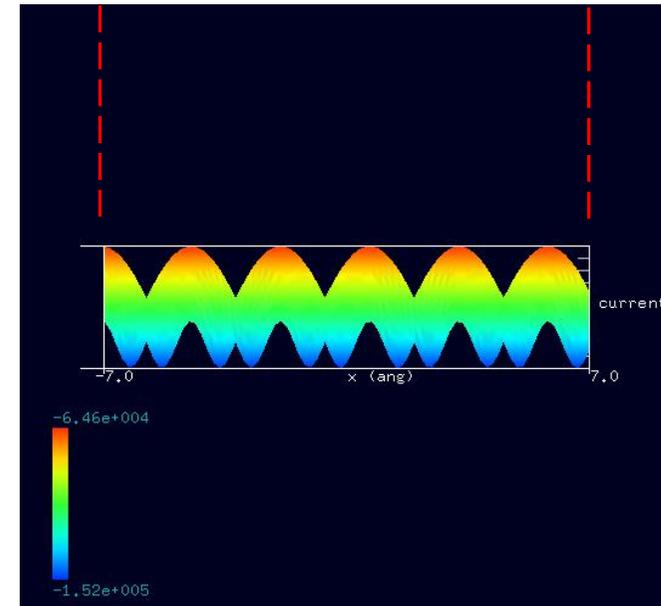
SIDE



TOP

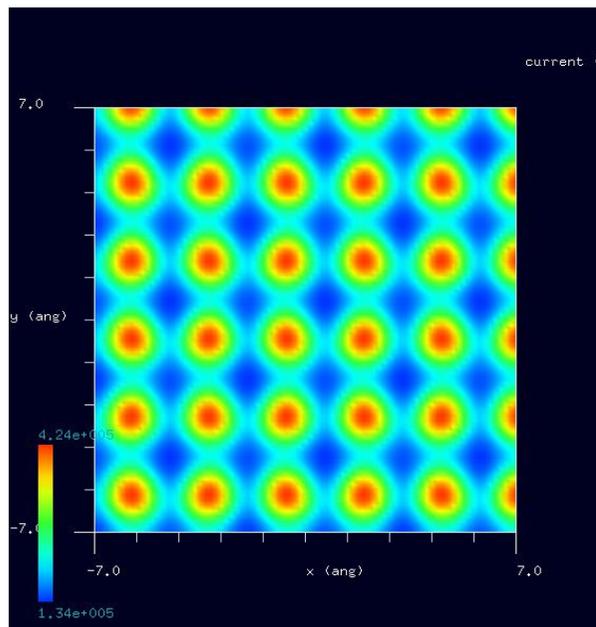


俯瞰

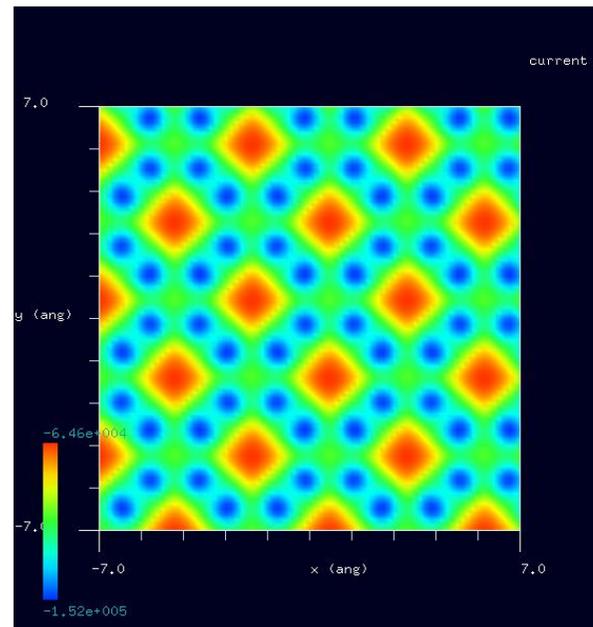


FRONT

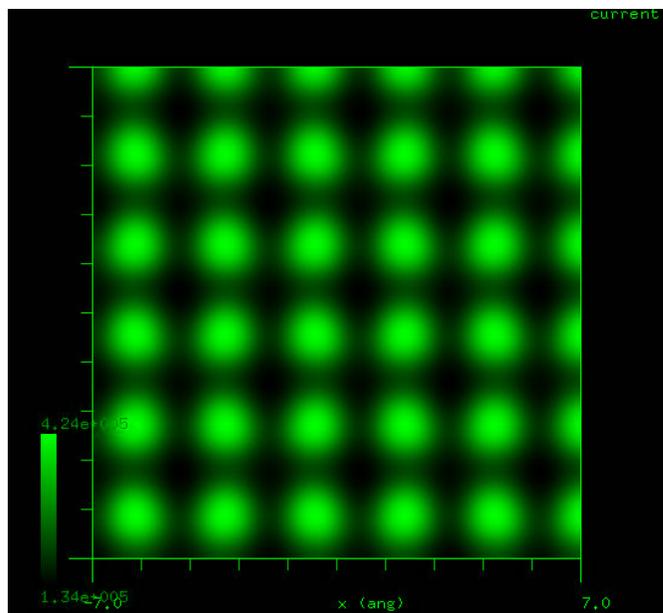
⑪ TIPバイアス電圧+1V とTIPバイアス電圧-1Vの場合のシミュレーション結果比較



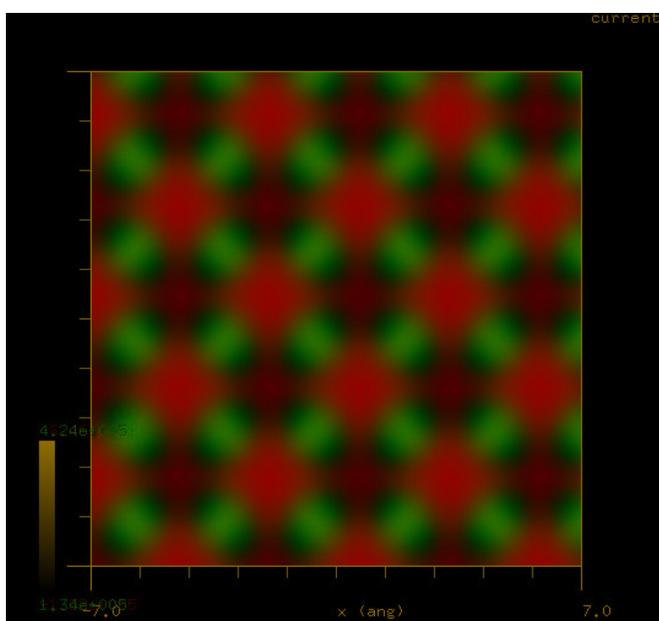
TIPバイアス電圧+1V



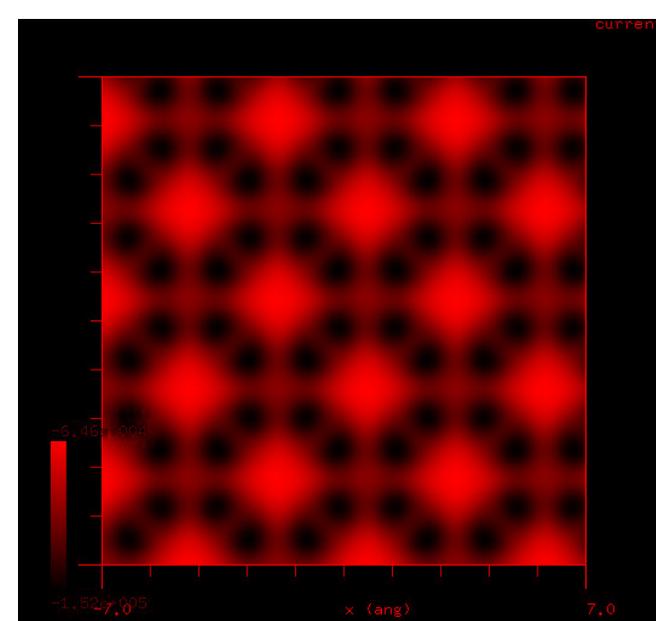
TIPバイアス電圧-1V



モノトーン緑画像：TIPバイアス電圧+1V



モノトーン緑と赤の合成画像



モノトーン赤画像：TIPバイアス電圧-1V

TIPバイアス電圧+1Vでのトンネル電流の大きな位置は、TIPバイアス電圧-1Vでのトンネル電流の小さな位置とほぼ対応している。

本シミュレーション条件である高温では、ZrO₂立方晶(空間群番号：225) (001)面では半導体の性質を持つといえる。

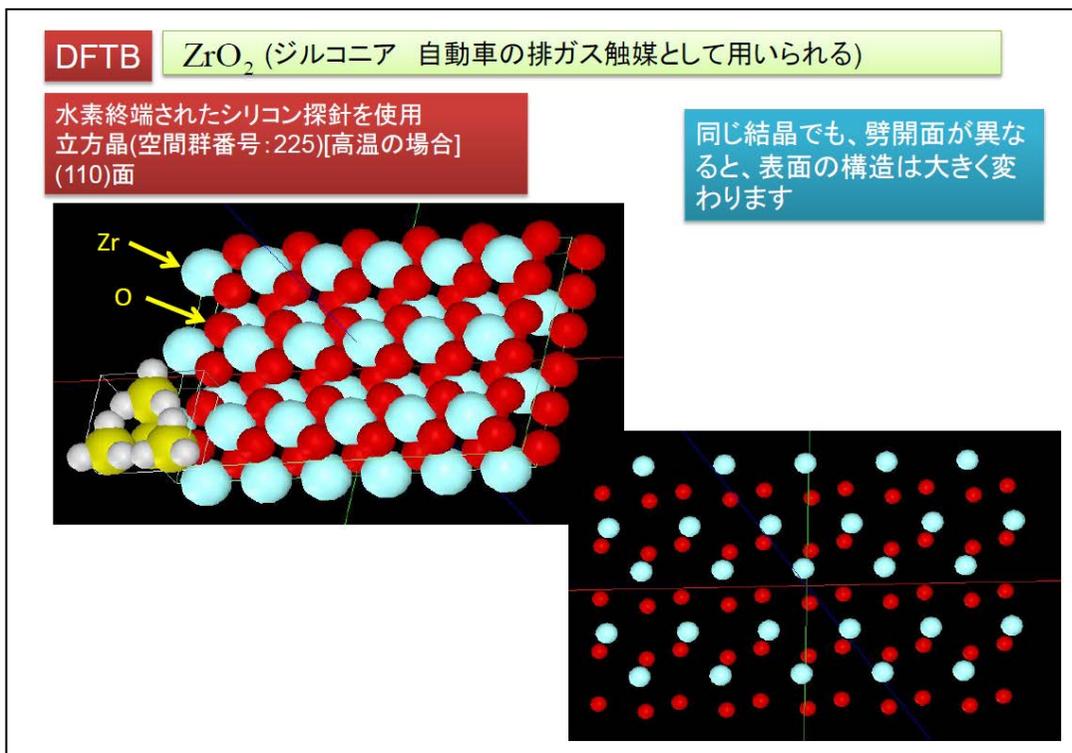
4・4●DFTB_STM : ConstHeightSTM (高さ一定STM画像シミュレーション) ZrO₂ 立方晶(空間群番号: 225) [高温の場合] (110)面 計算事例①

計算モード識別番号: [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_033a]、[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_033b]

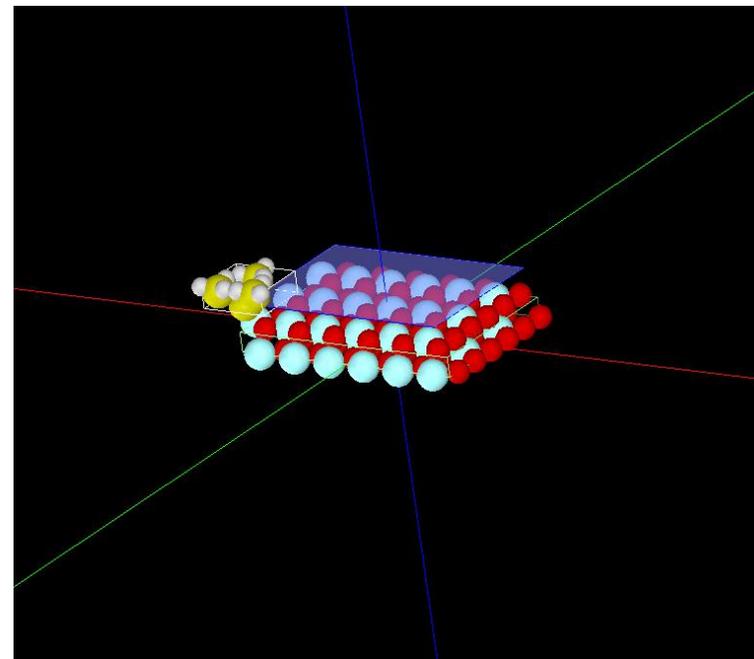
ソルバ・モード・計算例アドレス https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php

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

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ1



試料モデルとスキャンエリアの3D表示

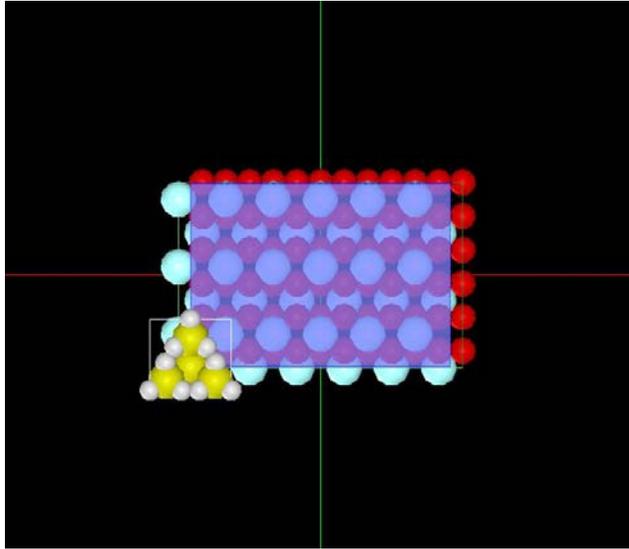
① 概要

本事例は、ZrO₂ 立方晶(空間群番号: 225) [高温の場合] (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。

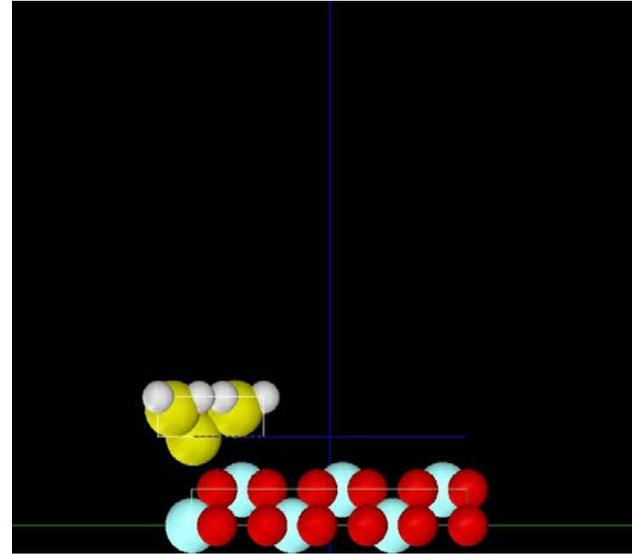
探針は作成済みデータ「tip_si4.xyz」を用います。バイアス電圧 +1.0V (a)とバイアス電圧 -1.0V (b)での計算を設定例条件で行わせ、結果の違いを比較します。

② 探針、試料モデル

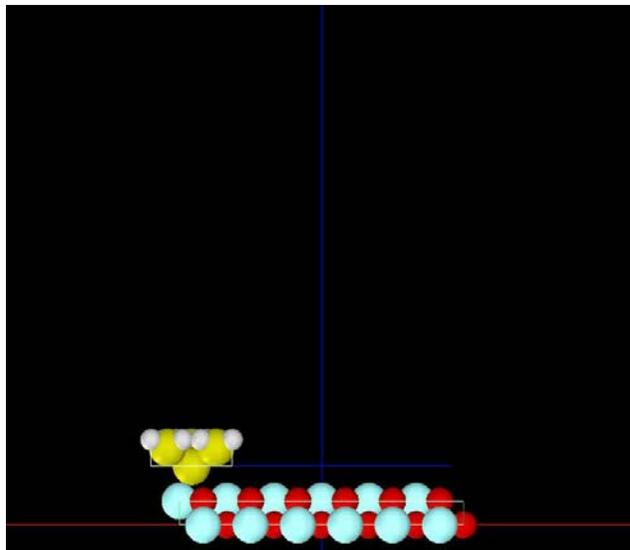
探針、試料モデルをSIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



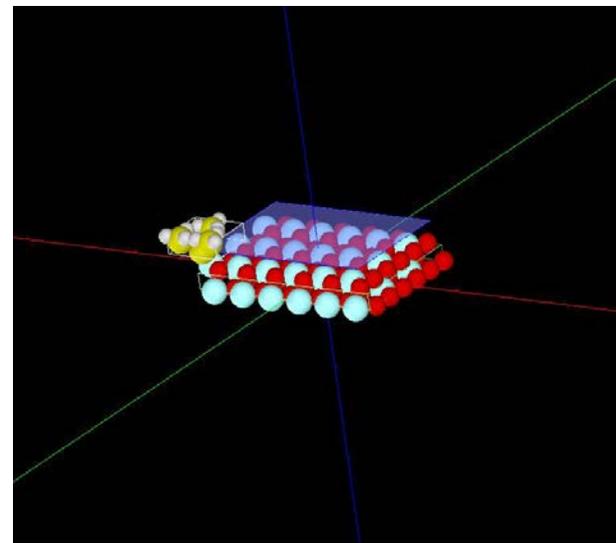
TOP



SIDE



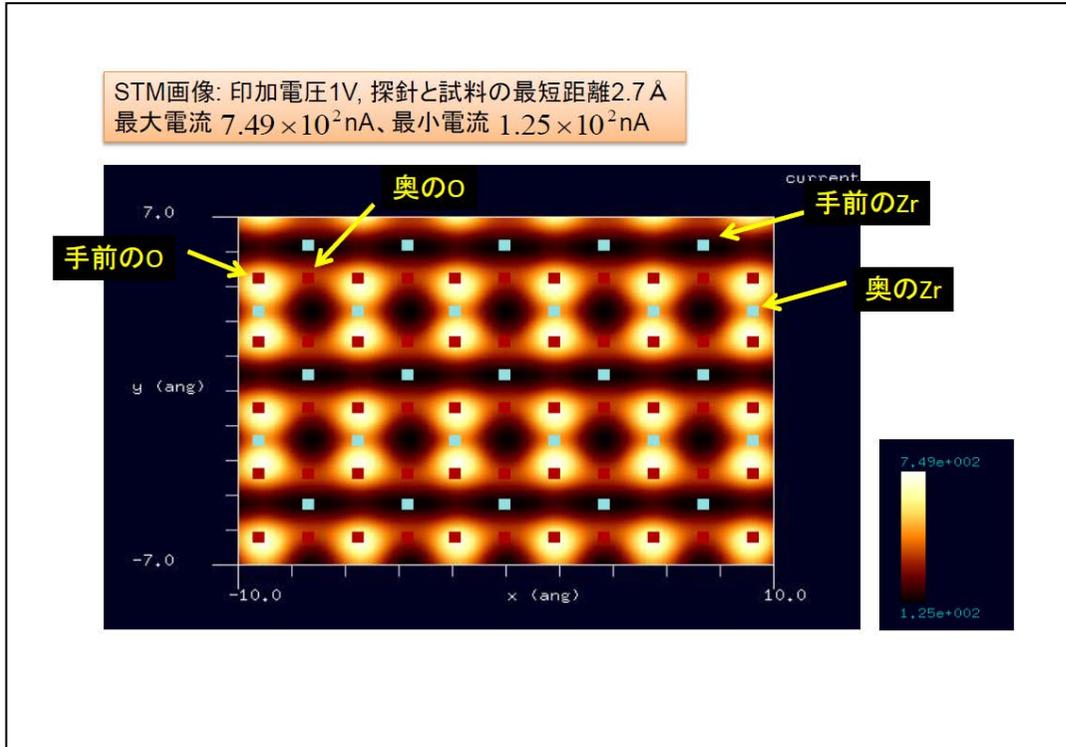
FRONT



俯瞰

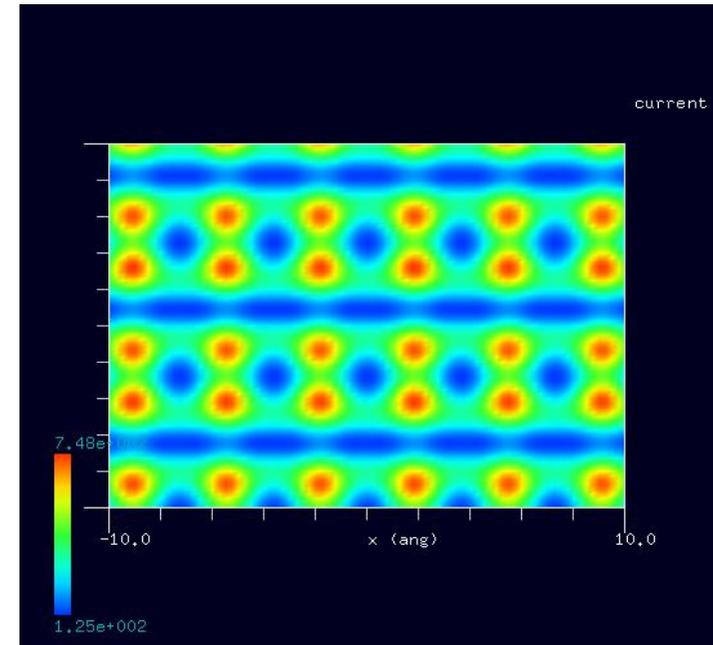
③ TIP バイアス電圧 1V の場合

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ2

本計算事例の入力条件について記載します。



シミュレーション結果、TOP 画像 3D-View の Rainbow 色表示

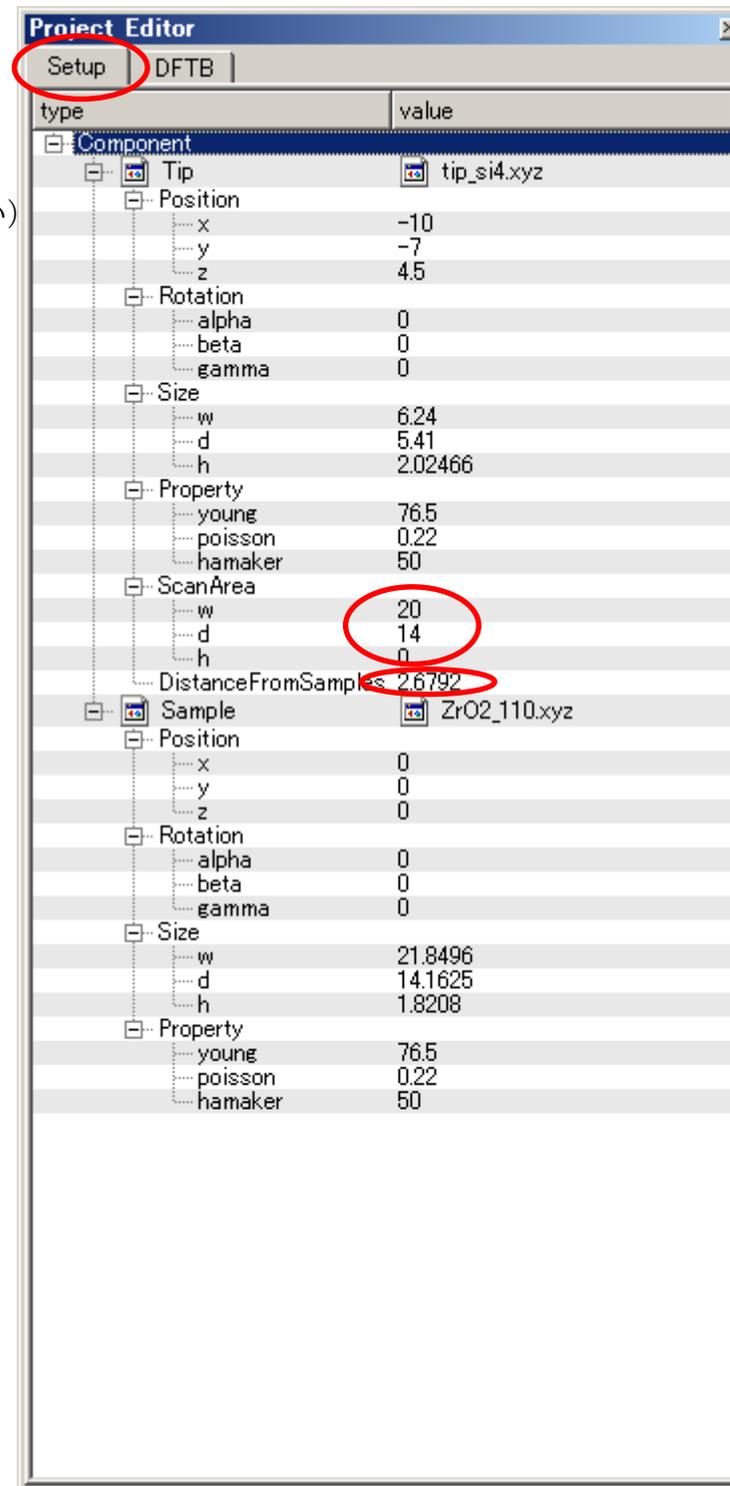
④ TIP バイアス電圧 1V の場合のセットアップ条件

(Project・Editer Setup・Tab)

スキャンエリアは「 $W20\text{\AA} \times D14\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 2.6792\AA としています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

⑤ TIP バイアス電圧 1V の場合の DFTB 解析設定条件

(Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

「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)。

周期境界条件を考慮します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

The screenshot shows the 'Project Editor' window with the 'DFTB' tab selected. The 'property' and 'value' columns are visible. Several values are circled in red: 'DFTB_STM' in the 'mode' field, '1' in the 'tip_bias_voltage' 'maximum' field, another '1' in the 'tip_bias_voltage' 'Ndiv' field, and '4' in the 'OpenMP_threads' field. The 'tip_bias_voltage' 'minimum' field also contains '1'. The 'translational_vector' 'a' 'X' component is 21.8496, 'b' 'Y' component is 15.45, and 'c' 'X' component is -3.6416 and 'Z' component is 3.6416. The 'solver_type' is 'CPU'.

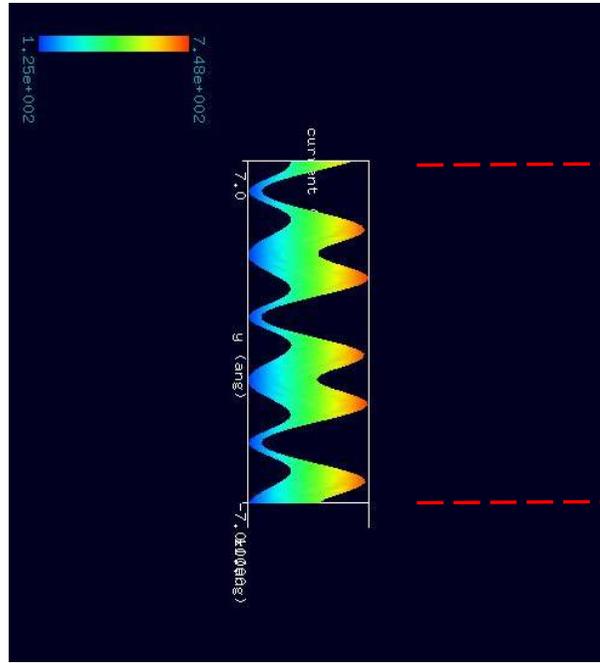
property	value
mode	DFTB_STM
title	HOPG
two_body_parameter_folder	two_body_parameters
tip	
amplitude	10
k_cantilever	40
resonant_freq	170
Ndiv	
X	80
Y	80
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1
TolEnergy	0.001
displacement	0.1
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	30
TolEnergy	10
output_eigenvalue	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	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	21.8496
Y	0
Z	0
b	
X	0
Y	15.45
Z	0
c	
X	-3.6416
Y	0
Z	3.6416
solver_type	CPU
OpenMP_threads	4
Output	

設定条件

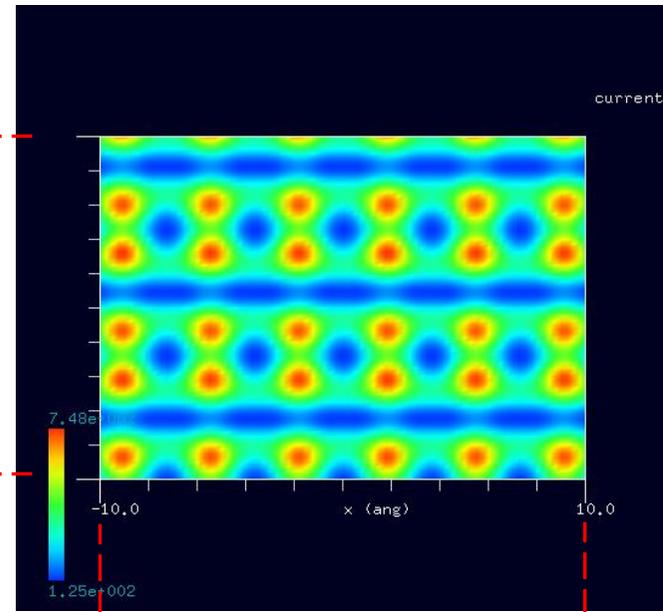
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

⑥ TIPバイアス電圧1Vの場合のシミュレーション結果

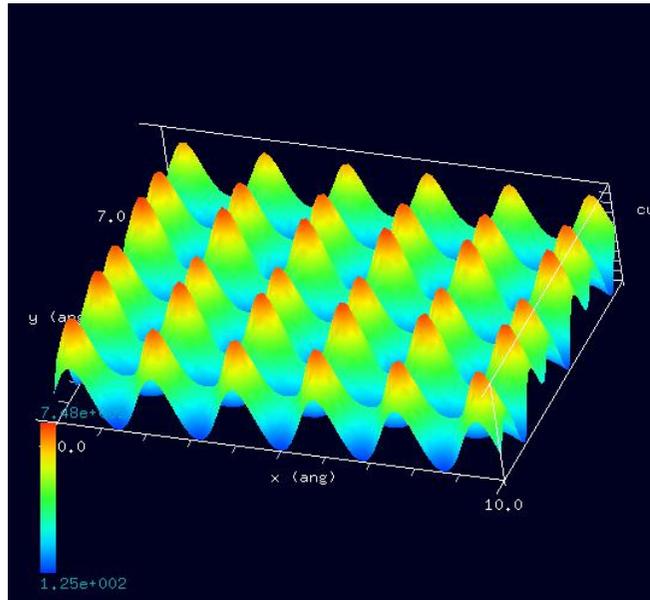
Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



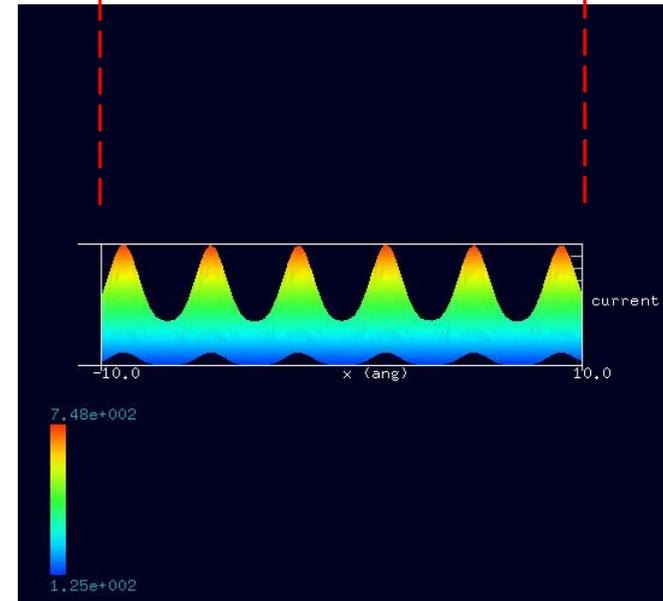
SIDE



TOP

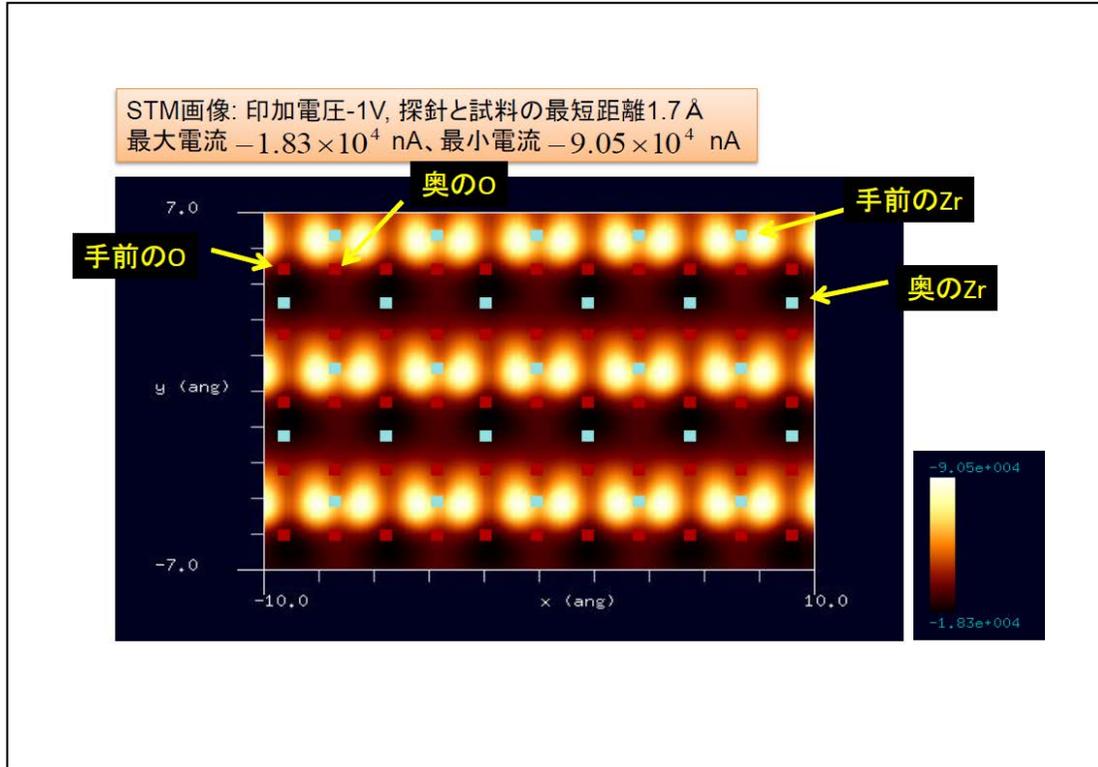


俯瞰



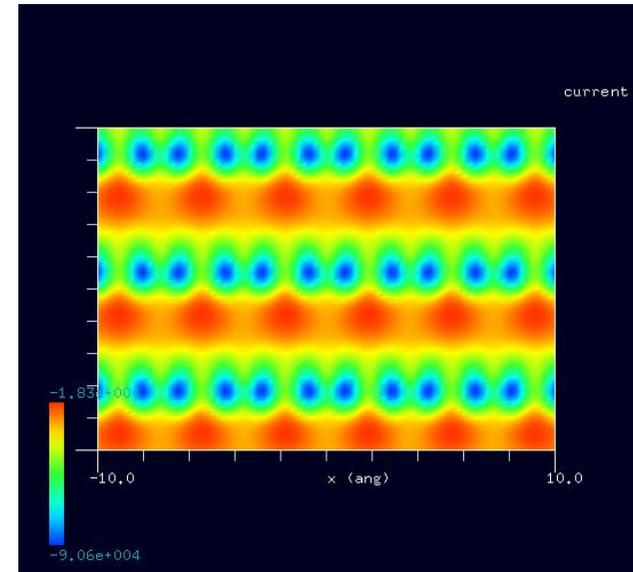
FRONT

⑦ TIP バイアス電圧-1V の場合
事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ2 (逆スケール)

本計算事例の入力条件について記載します。



シミュレーション結果、TOP 画像 3D-View の Rainbow 色表示

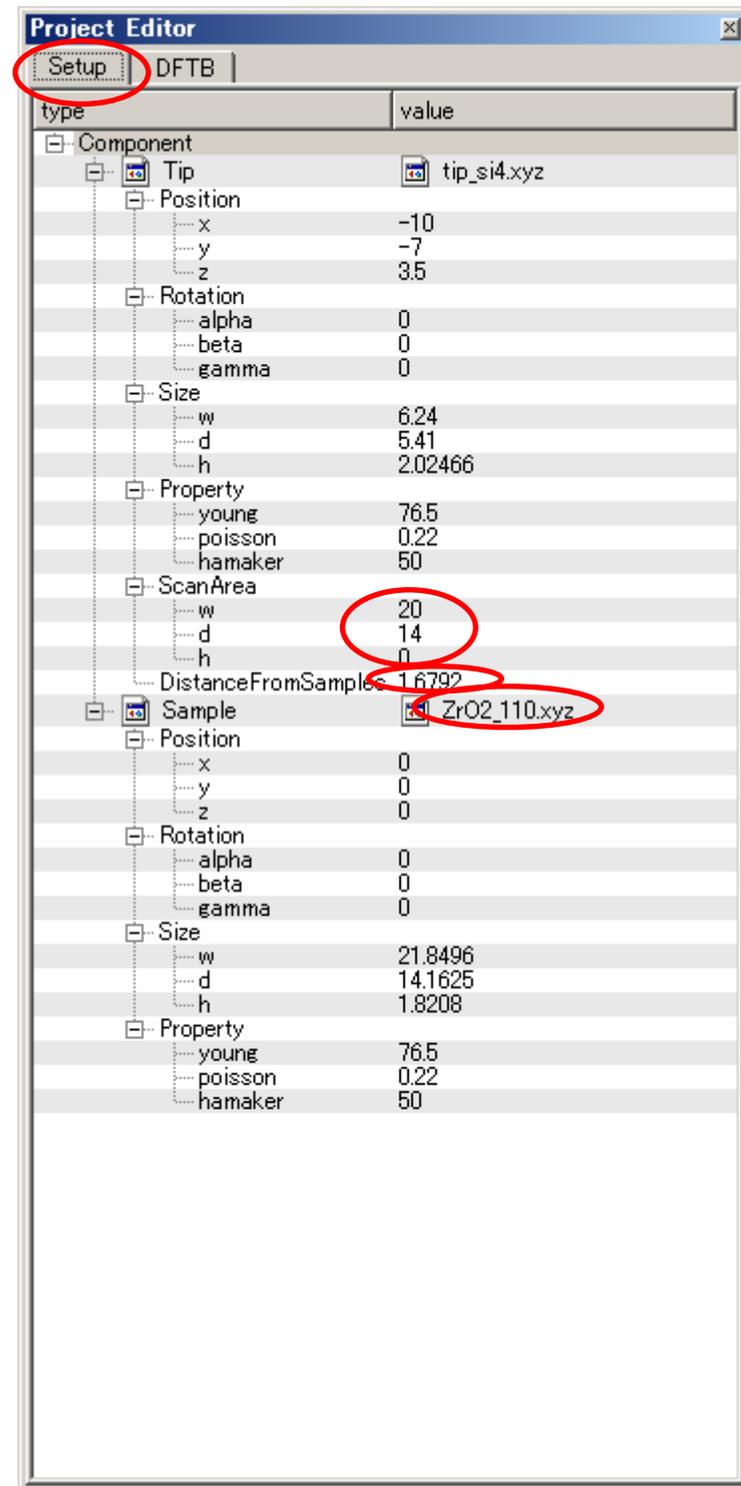
⑧ TIP バイアス電圧-1V の場合のセットアップ条件

(Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアは「 $W20\text{\AA} \times D14\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 1.6792\AA としています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

⑨ TIP バイアス電圧 $-1V$ の場合のDFTB解析設定条件

(Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

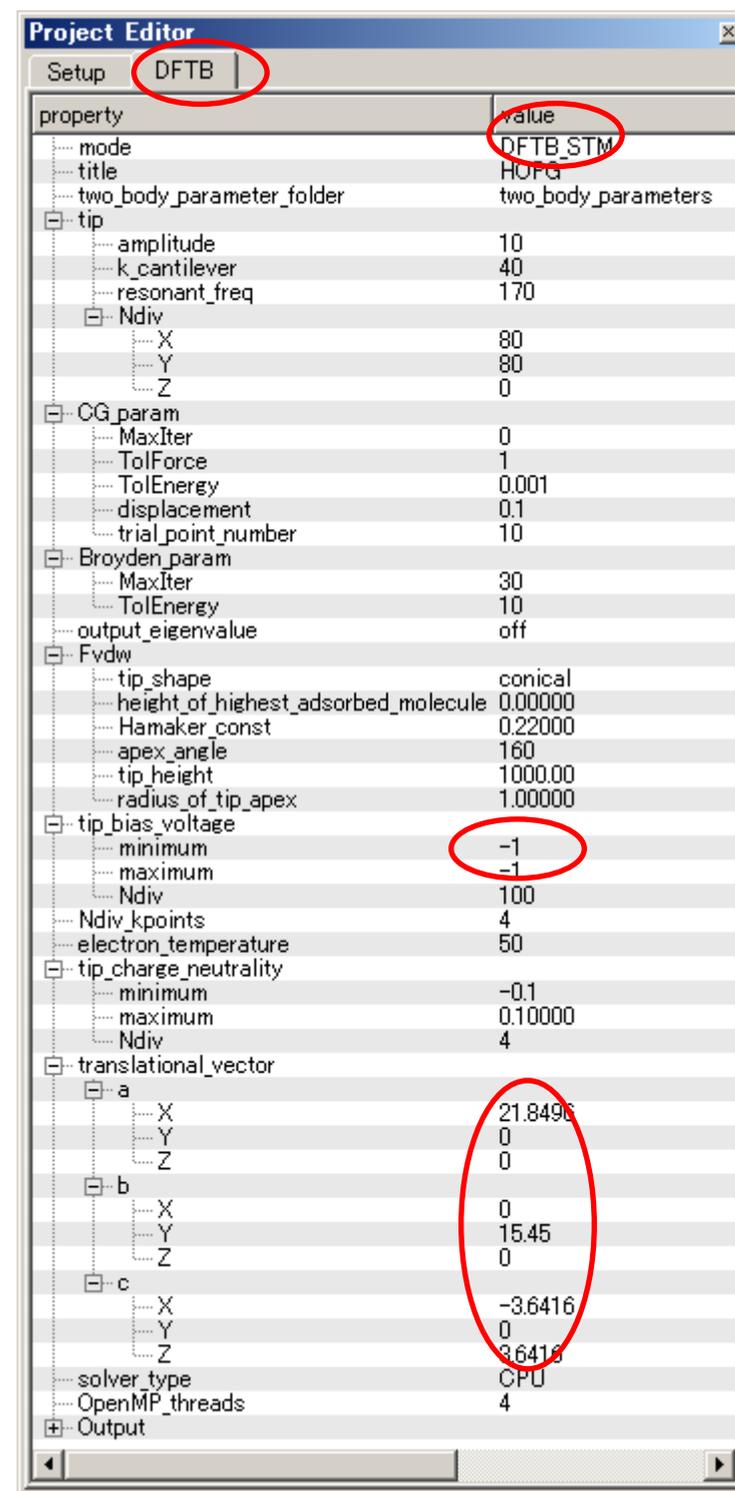
「STM_MODE」は「ConstantHeight」(Default、指定のない場合：

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)。

周期境界条件を考慮します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

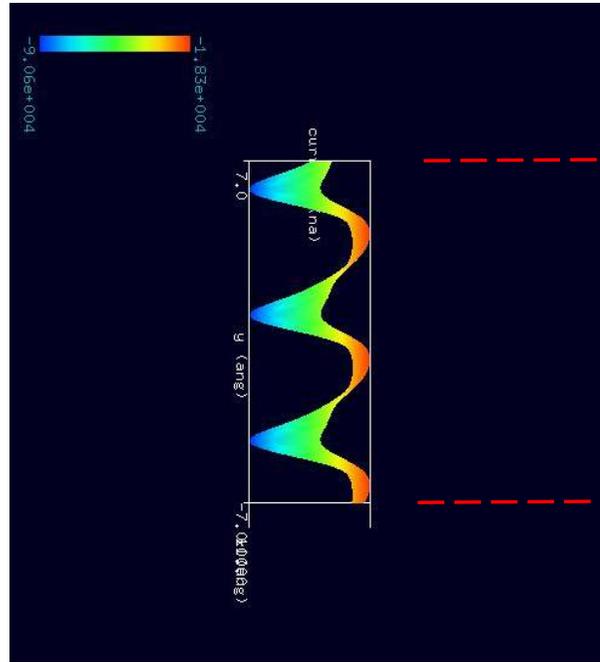


設定条件

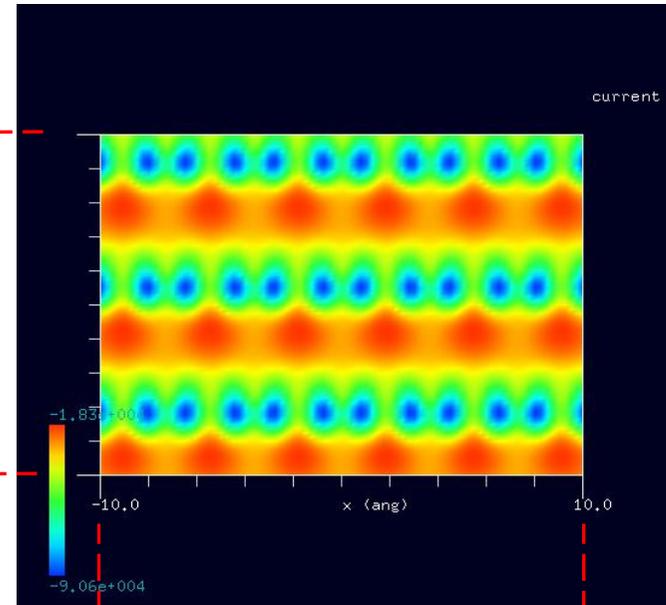
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

⑩ TIPバイアス電圧-1Vの場合のシミュレーション結果

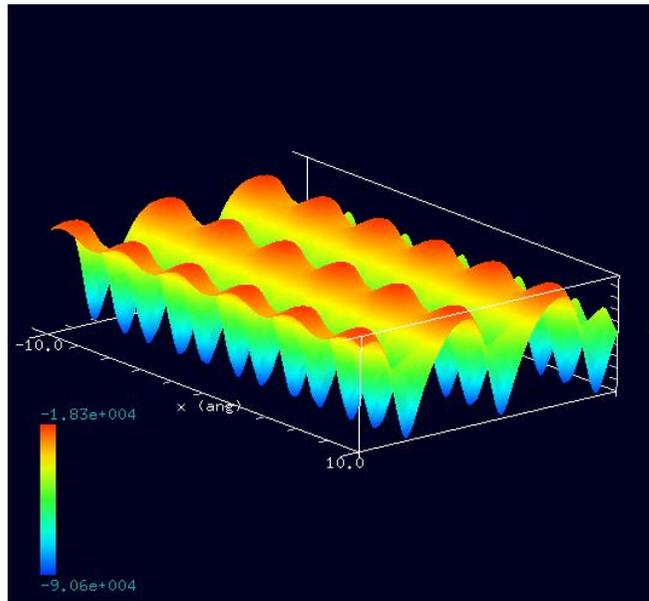
Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



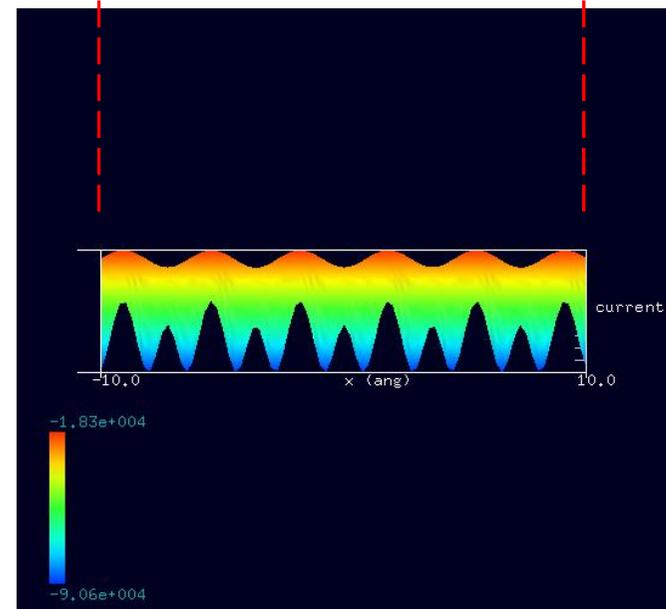
SIDE



TOP

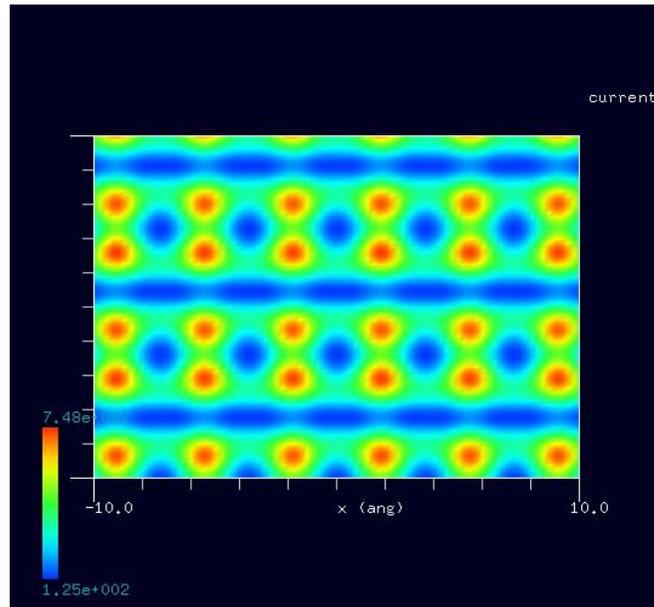


俯瞰

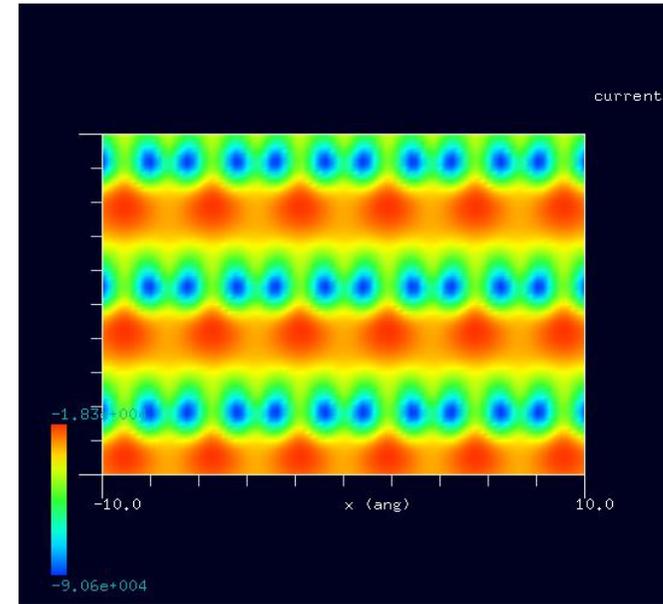


FRONT

⑪ TIPバイアス電圧+1V とTIPバイアス電圧-1Vの場合のシミュレーション結果比較



TIPバイアス電圧+1V



TIPバイアス電圧-1V

TIPバイアス電圧+1Vでのトンネル電流の大きな位置は、TIPバイアス電圧-1Vでのトンネル電流の小さな位置と対応しているとは言いがたい。本シミュレーション条件である高温では、ZrO₂立方晶(空間群番号:225) (110)面は半導体の性質を持っていないといえます。

5・DFTB_STM (量子論的SPM像シミュレータ) Constant CurrentSTM (電流一定STM画像シミュレーション)

Constant HeightSTM (高さ一定STM画像シミュレーション)

5・1●DFTB_STM・高さ一定モードによる Pt(111)表面のトンネル電流像 STM シミュレーション 計算事例⑫

計算モード識別番号: [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_016]

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

分類: DFTB_STM (高さ一定 STM 画像シミュレーション)、Åオーダー、触媒

事例紹介ページを下図に示します。

【DFTB】Pt(111)表面のconstant height STMシミュレーション

探針 (Si_4H_9) と試料 (Pt(111))

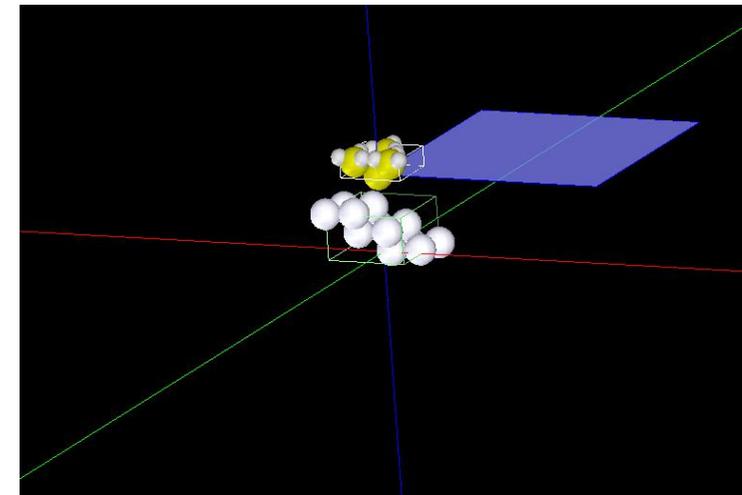
シミュレーション結果
高さ一定モード
探針 - 試料間の距離: 3.0[Å]
探針バイアス: 1.0[V]
範囲: 23.0[Å] × 23.0[Å]

実験結果
constant current STM
電流値: 1.0[nA]
範囲: 23.0[Å] × 23.0[Å]
sample bias voltages within ±1 V

The structure and corrosion chemistry of bromine on Pt(111)
H. Xu, R. Yuro, I. Harrison
Surface Science 411 (1998) 303–315

実験結果と良く一致した

事例紹介ページ 1



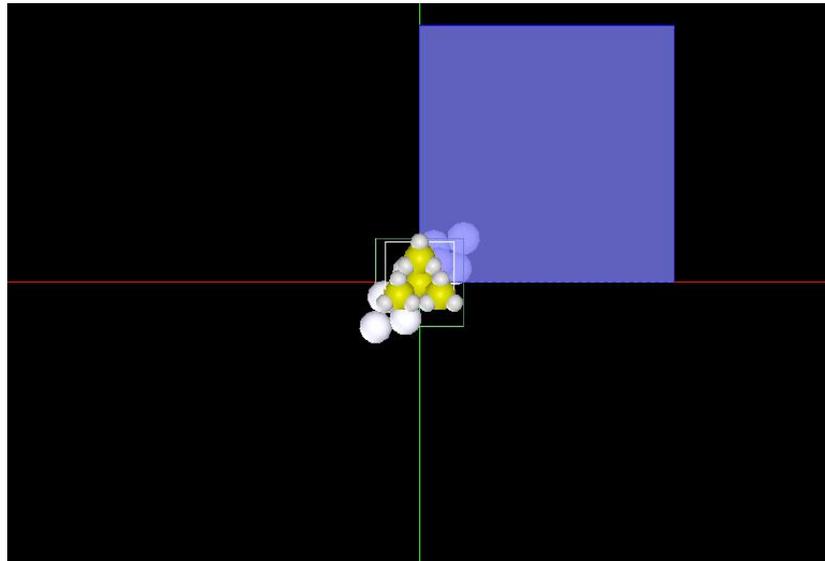
試料モデルとスキャンエリアの3D表示

① 概要

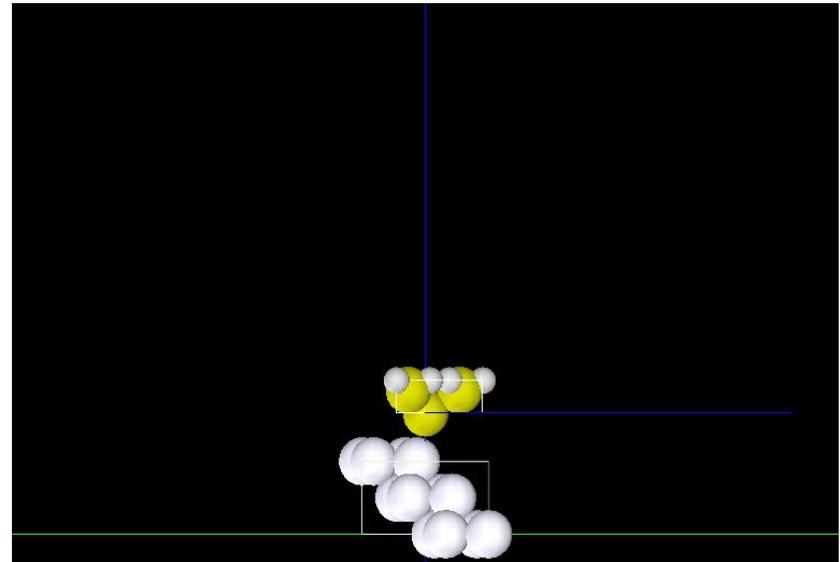
本事例は、Pt (111) 基板表面を高さ一定トンネル電流像でシミュレートします。
本計算事例の入力条件について記載します。

② 探針、試料モデル

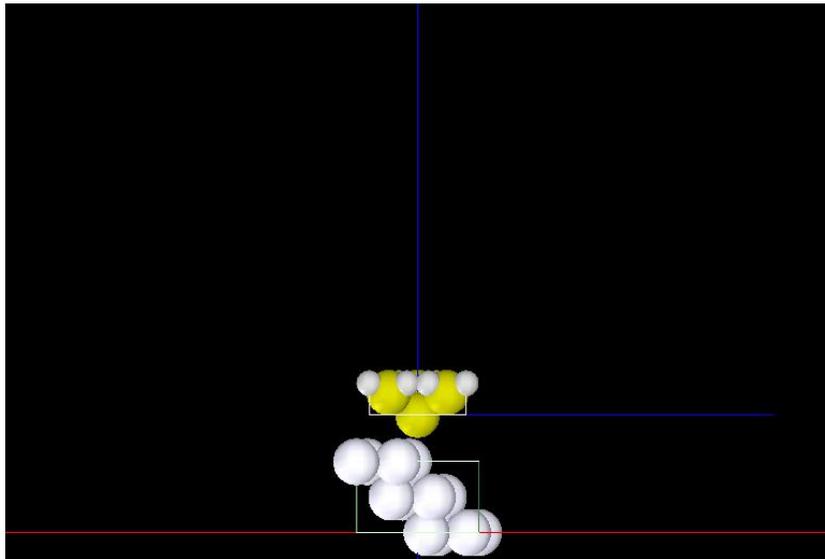
探針、試料モデルをSIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



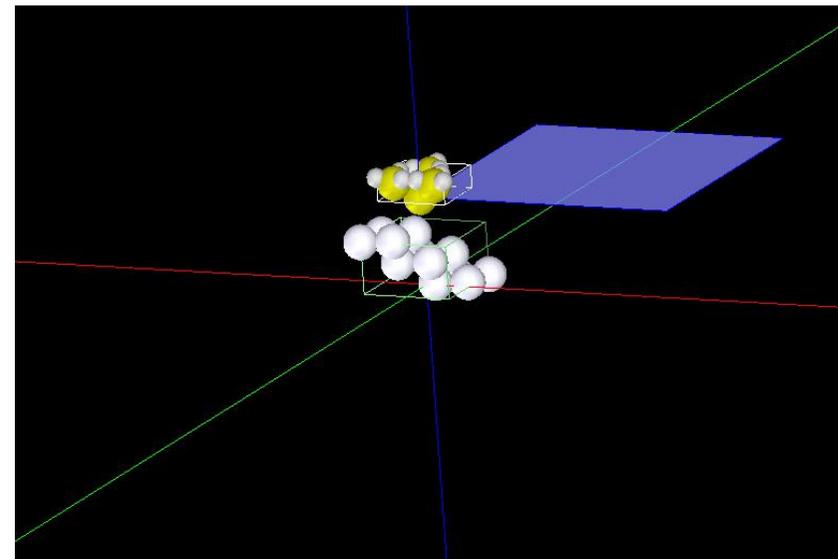
TOP



SIDE



FRONT



俯瞰

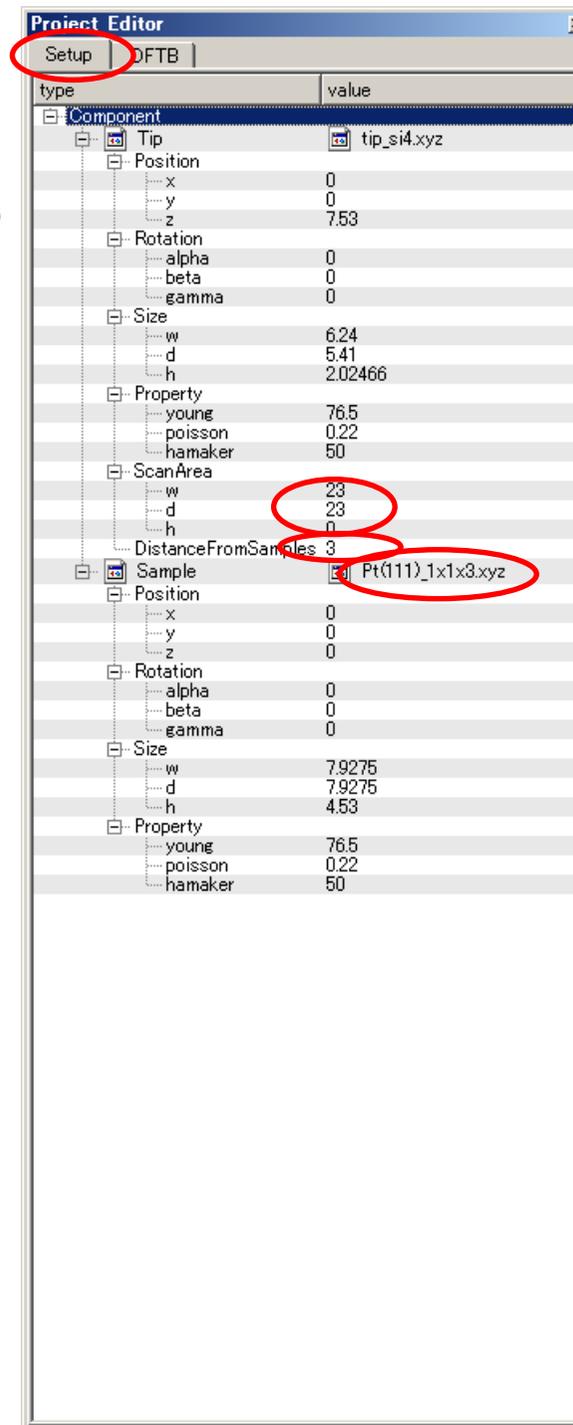
③ セットアップ条件

(Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアは「 $W23\text{\AA} \times D23\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 3\AA としています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

④ DFTB 解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

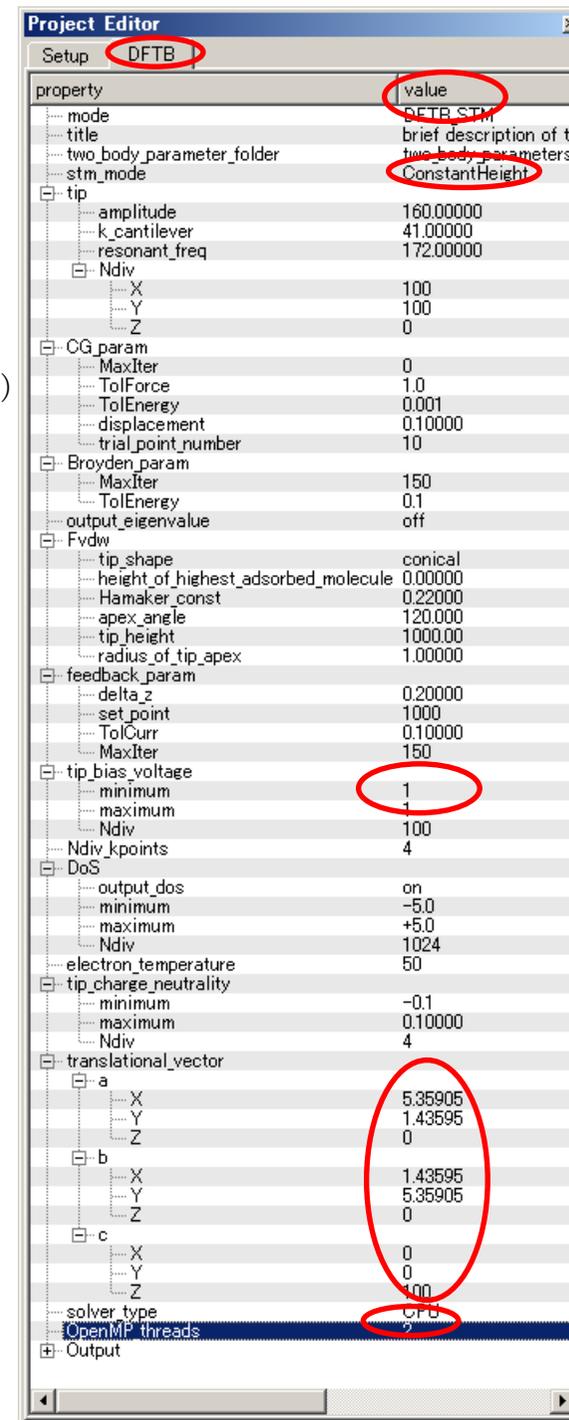
「stm_mode」は、「ConstHeight」(デフォルト設定となり、記述がない場合があります) とします。

並列化処理設定を行っています (2 スレッド対応)。

TIPバイアス電圧 1Vとしています。

周期境界条件を考慮します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

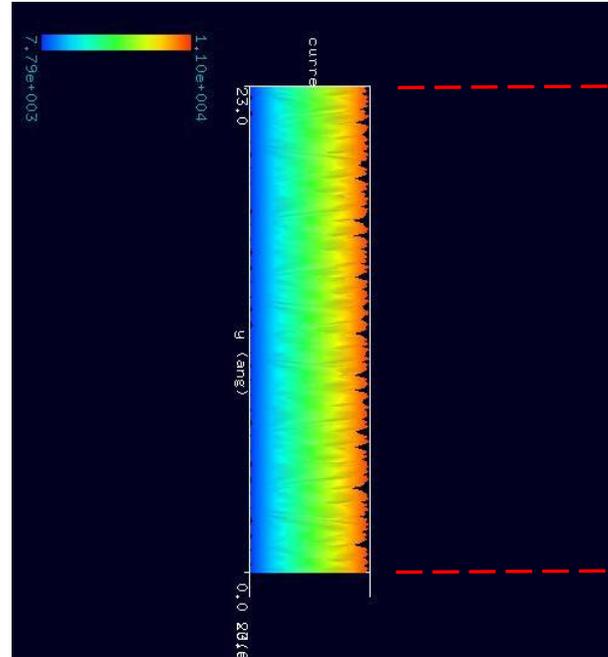


設定条件

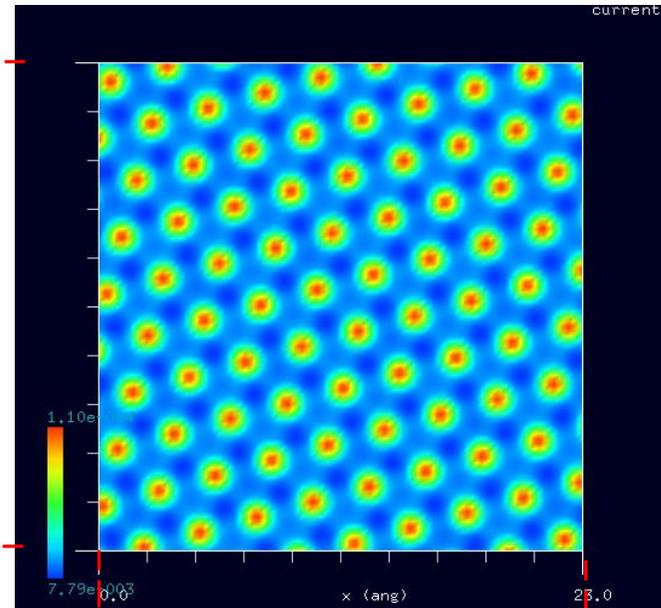
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

⑤ シミュレーション結果

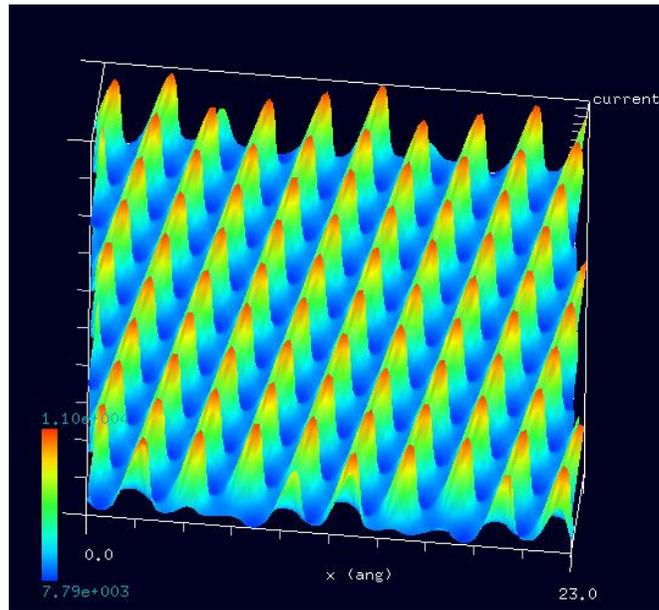
Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



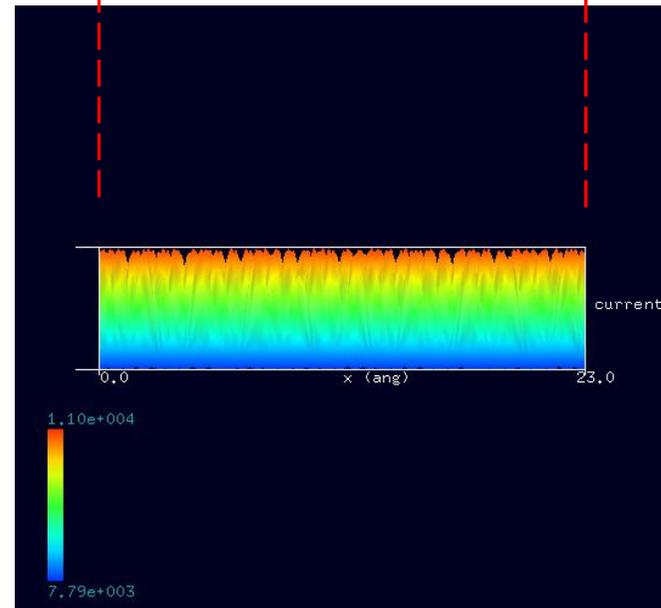
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

5・2●DFTB_STM・電流一定モードによる Pt (111)基板表面のトポロジー像 STM シミュレーション 計算事例⑬

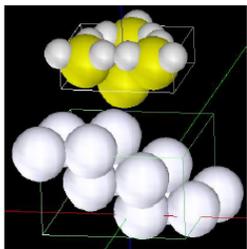
計算モード識別番号：[DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_010]

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

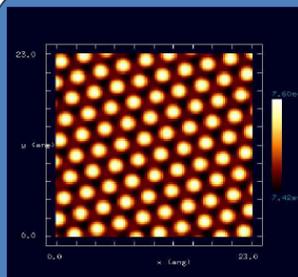
分類：DFTB_STM（電流一定 STM 画像シミュレーション）、Åオーダー、触媒

事例紹介ページを下左図に示します。

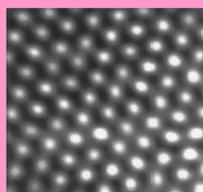
【DFTB】Pt(111)表面のconstant current STMシミュレーション



探針(Si₄H₉)と試料(Pt(111))



シミュレーション結果
constant current モード
電流値: 10000[nA]
探針バイアス: 1.0[V]
範囲: 23.0[Å] × 23.0[Å]

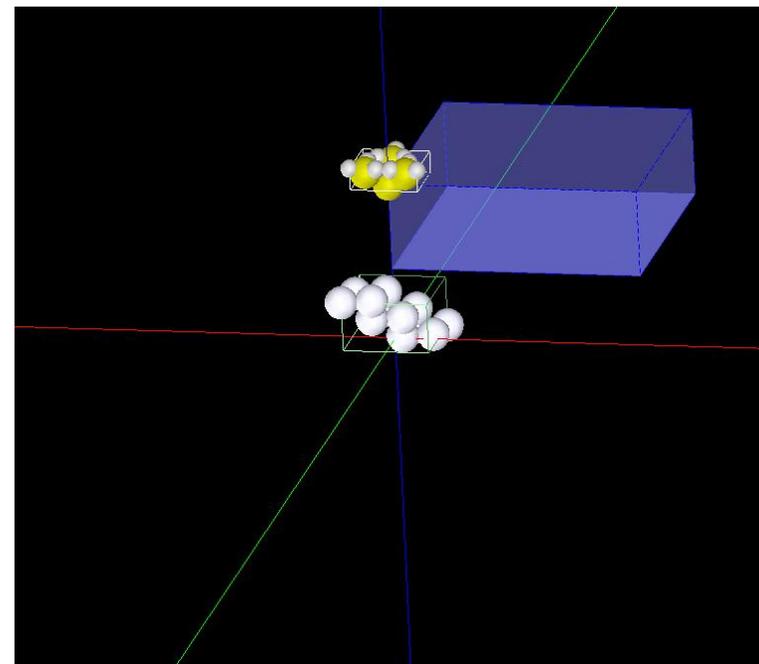


実験結果
constant current STM
電流値: 1.0[nA]
範囲: 23.0[Å] × 23.0[Å]
sample bias voltages within ±1 V

The structure and corrosion chemistry of bromine on Pt(111)
H. Xu, R. Yuro, I. Harrison
Surface Science 411 (1998) 303–315

実験結果と良く一致した

事例紹介ページ 1



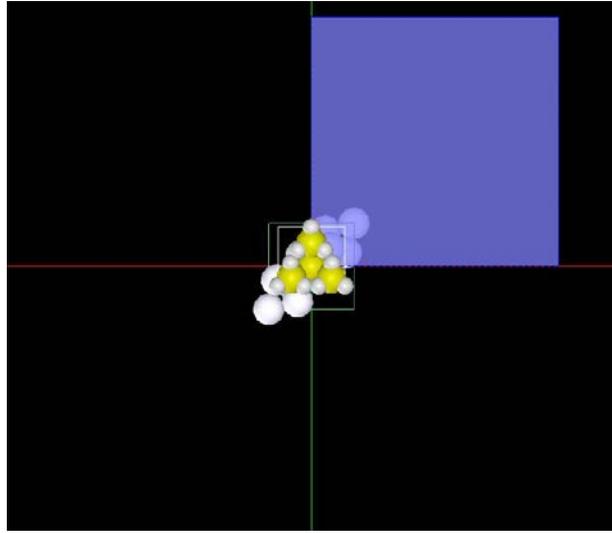
試料モデルとスキャンエリアの3D表示

① 概要

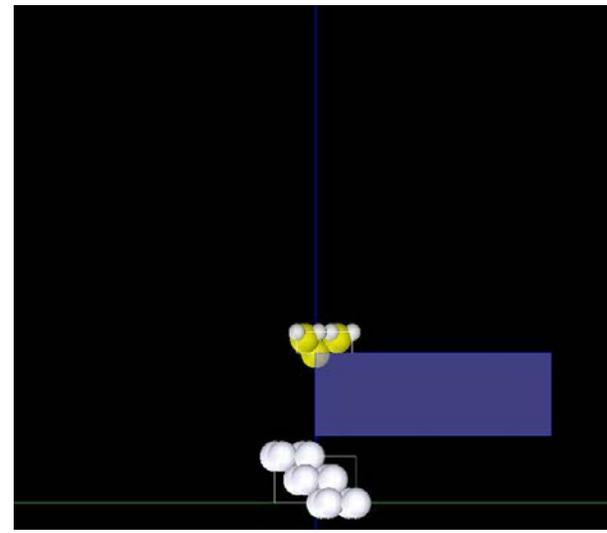
本事例は、Pt (111)基板表面を電流一定トポロジー像でシミュレートします。本計算事例の入力条件について記載します。

② 探針、試料モデル

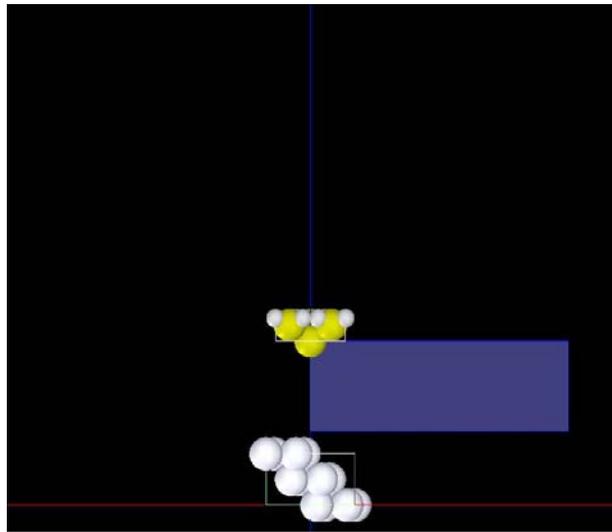
探針、試料モデルをSIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



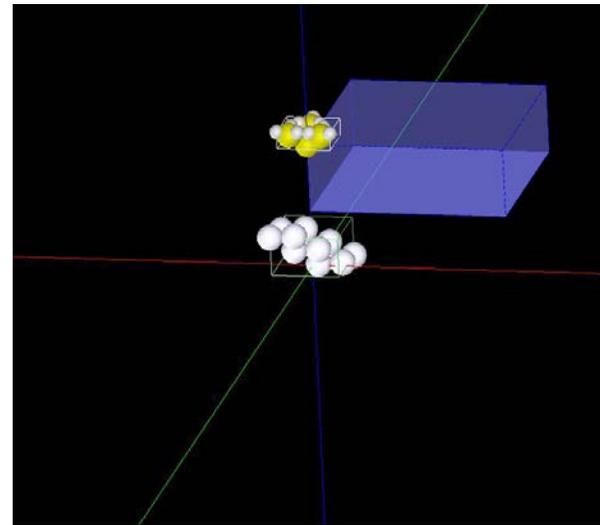
TOP



SIDE



FRONT



俯瞰

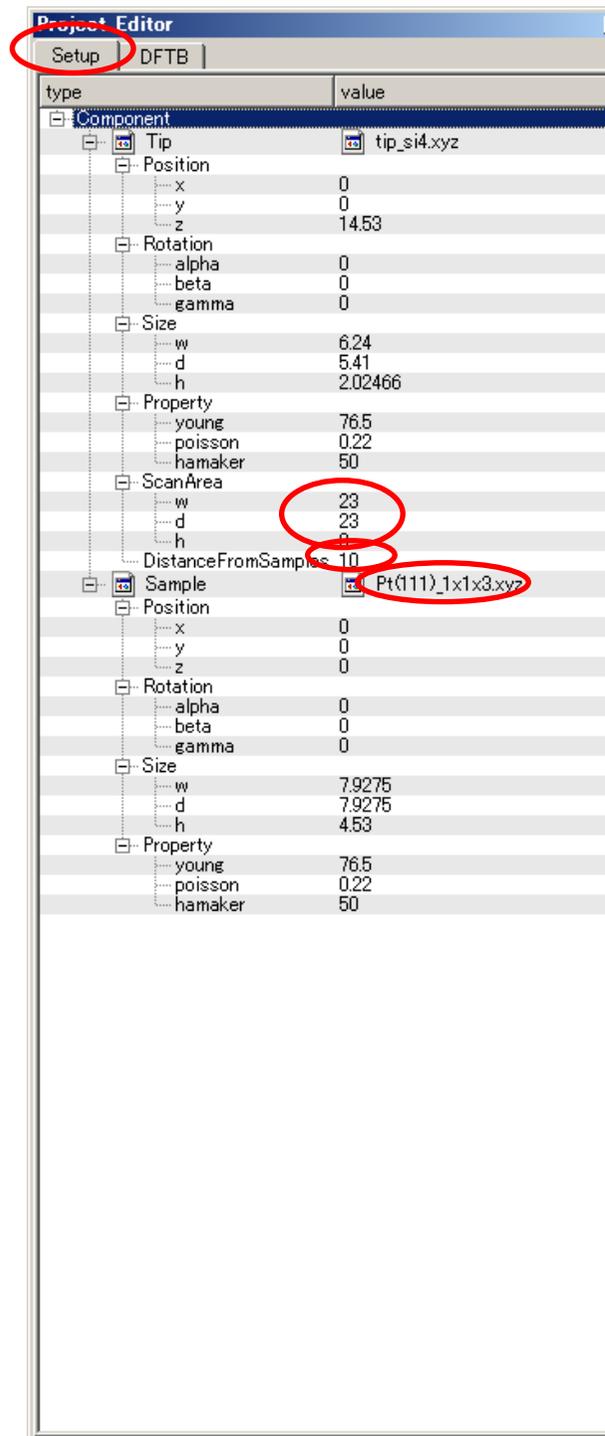
③ セットアップ条件

(Project・Editor Setup・Tab)

スキャンエリアは「 $W23\text{\AA} \times D23\text{\AA} \times H8.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 10\AA としています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

④ DFTB 解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

「STM_MODE」は「ConstantCurrent」に設定しています。

トンネル電流 10000 nA としています。

TIP バイアス電圧 1 V としています。

並列化処理設定を行っていません (1 スレッド対応)。

周期境界条件を考慮します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

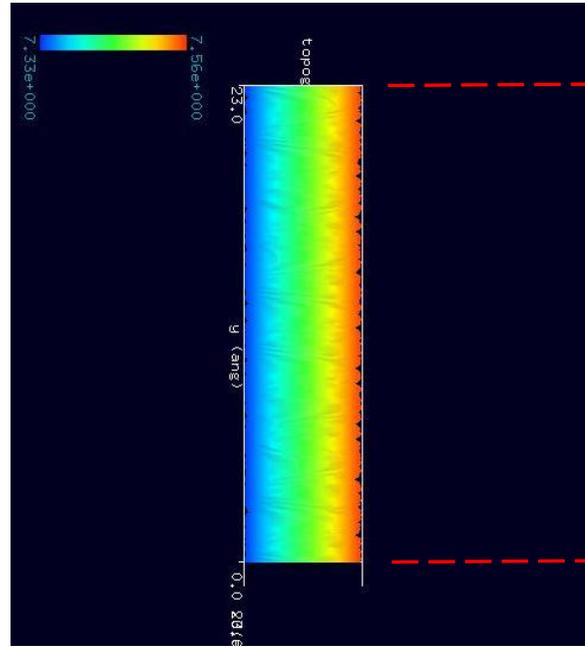
property	value
mode	DFTB_STM
title	brief description of this
two_body_parameter_folder	two body parameters
stm_mode	ConstantCurrent
tip	
amplitude	160.00000
k_cantilever	41.00000
resonant_freq	172.00000
Ndiv	
X	100
Y	100
Z	0
CG_param	
MaxIter	0
TolForce	1.0
TolEnergy	0.001
displacement	0.10000
trial_point_number	10
Broyden_param	
MaxIter	150
TolEnergy	0.1
output_eigenvalue	off
Fvdw	
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	10000
TolCurr	0.10000
MaxIter	150
tip_bias_voltage	
minimum	1
maximum	1
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	5.35905
Y	1.43595
Z	0
b	
X	1.43595
Y	5.35905
Z	0
c	
X	0
Y	0
Z	100
solver_type	CPH
OpenMP_threads	1
Output	

設定条件

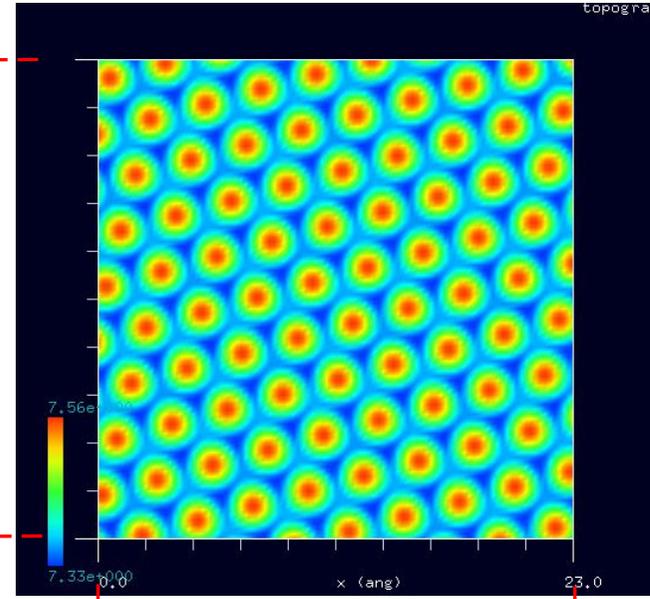
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

⑤ シミュレーション結果

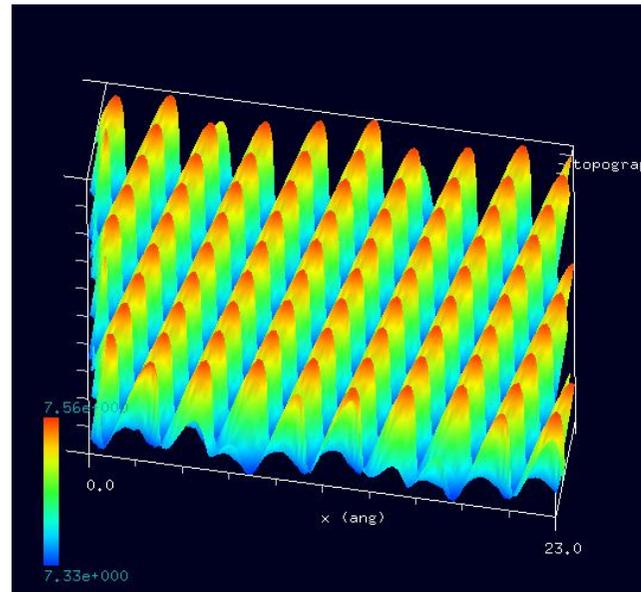
Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



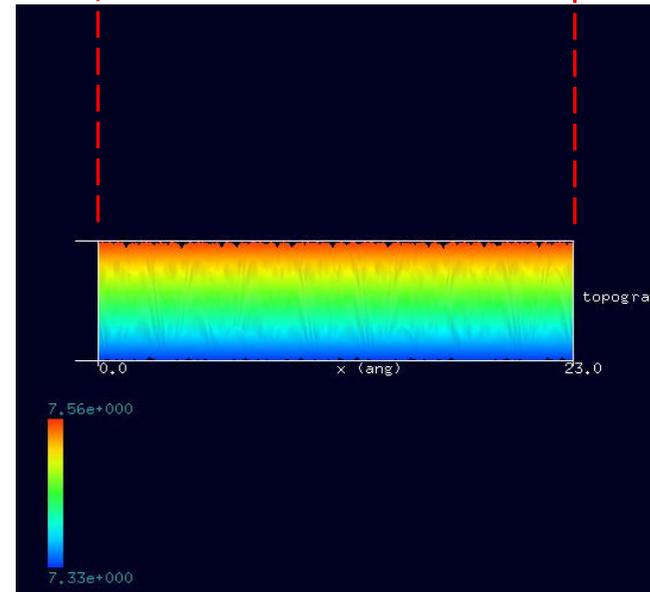
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

⑥Pt（白金）の触媒作用について

触媒として高い活性を持ち、自動車には排気ガスの浄化触媒として多くの量が使用されており、さらにはその高い耐久性により同じく自動車の点火プラグや排気センサーなど過酷な環境に晒される部品にも多用される。その他では化学工業でも水素化反応の触媒などとして利用されるほか、燃料電池への利用も盛んに行われている。なじみ深い所では ハクキンカイロの発熱装置としても利用されている。電気分解の電極としても広く用いられている。過酸化水素を水と酸素に還元させる触媒作用もあり、これを応用してソフトコンタクトレンズ用過酸化水素消毒システム（商品名エーオーセプト）の中和用ディスクにも用いられている。(wikipedia)

5・3●DFTB_STM・電流一定モードによる Pt(110)-(1x2)表面のトポグラフィー像 STM シミュレーション 計算事例⑭

計算モード識別番号：[DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_025]

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

分類：DFTB_STM（電流一定 STM 画像シミュレーション）、Åオーダー、触媒

事例紹介ページを下左図に示します。

自動車：排ガス触媒

DFTB: Pt(110)-(1x2) STM

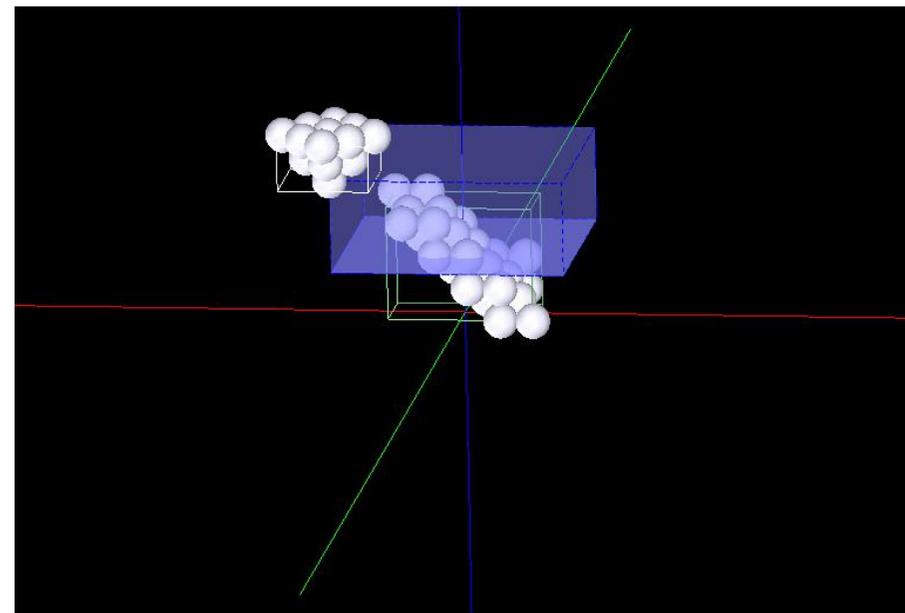
探針: プラチナ探針
試料表面: Pt(110)-(1x2)
missing row reconstruction

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

STM実験結果
Scanning Tunneling Microscopy
Studies of Model Systems
Relevant to Catalysis“, PhD
thesis. Figure 4.1

DFTB STM 電流一定像
占有状態、バイアス 1.0 V

事例紹介ページ 1



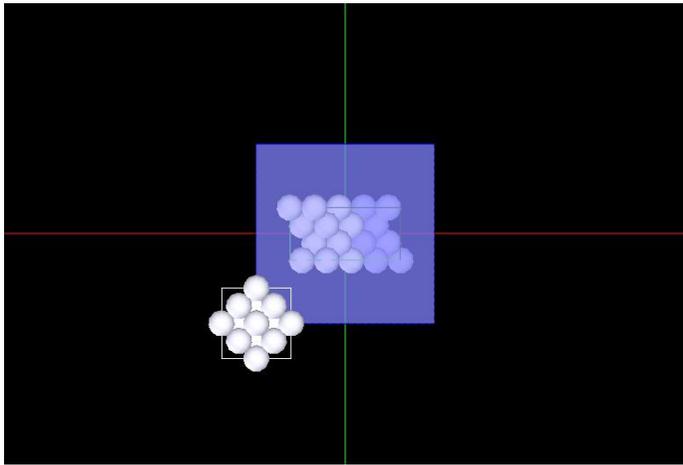
試料モデルとスキャンエリアの3D表示

① 概要

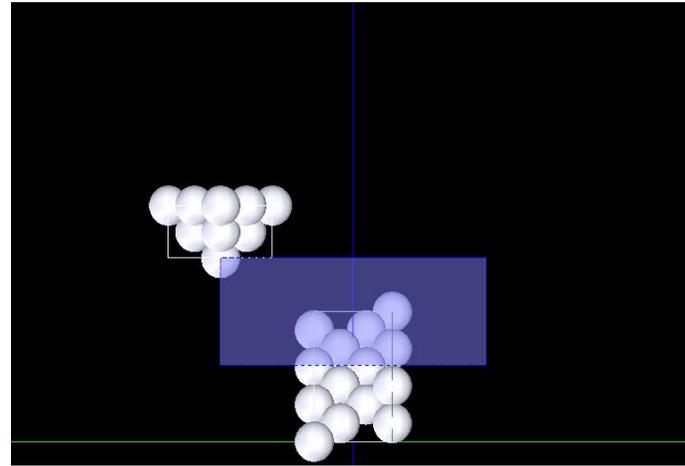
本事例は、Pt (111)基板表面を電流一定トポロジー像でシミュレートします。本計算事例の入力条件について記載します。

② 探針、試料モデル

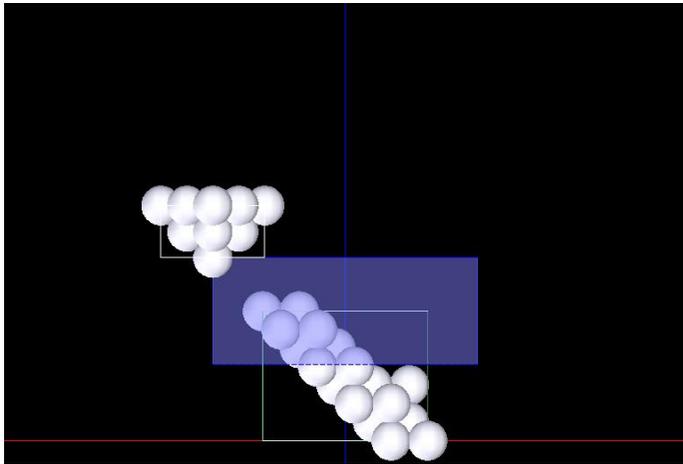
探針、試料モデルをSIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



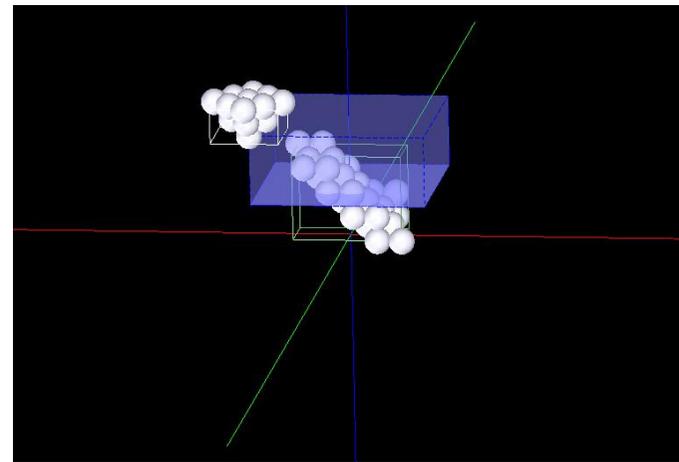
TOP



SIDE



FRONT



俯瞰

③ セットアップ条件

(Project・Editor Setup・Tab)

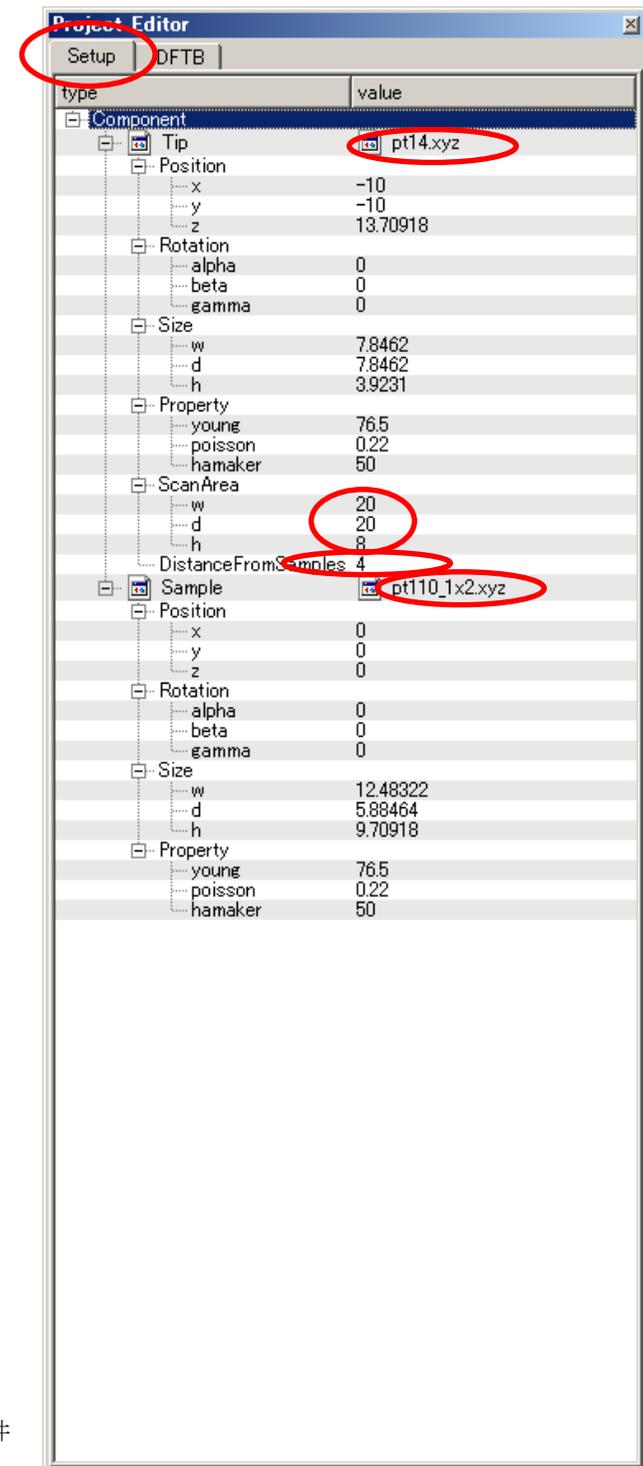
スキャンエリアは「 $W20\text{Å} \times D20\text{Å} \times H8.0\text{Å}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 4Å としています。

探針は作成済みデータ・プラチナ「`pt14.xyz`」を用います。

スキャンエリアは試料の凸凹を計算するため、最表層よりも内部まで設定しています。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)



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。

④ DFTB 解析設定条件 (Project・Editor DFTB・Tab)

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

「STM_MODE」は「ConstantCurrent」に設定しています。

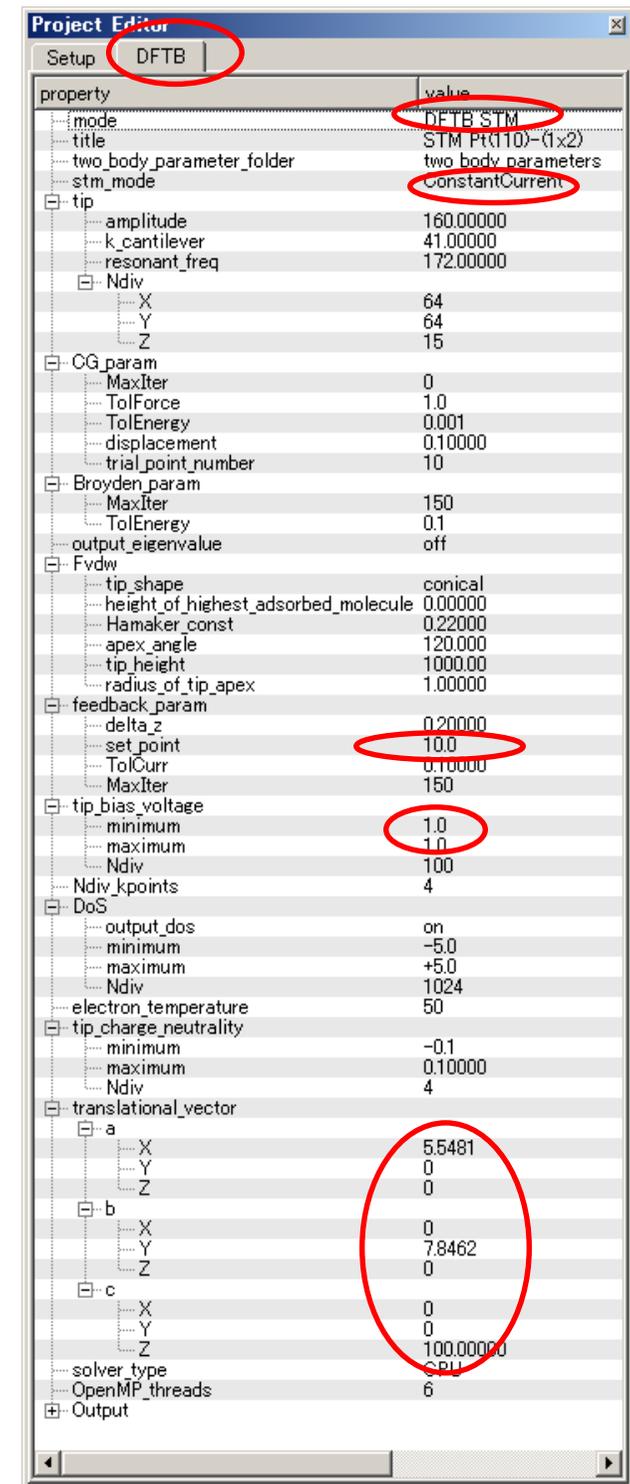
TIP バイアス電圧 1 V としています。

トンネル電流 10.0 nA としています。

並列化処理設定を行っています (6 スレッド対応)。

周期境界条件を考慮します。

(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

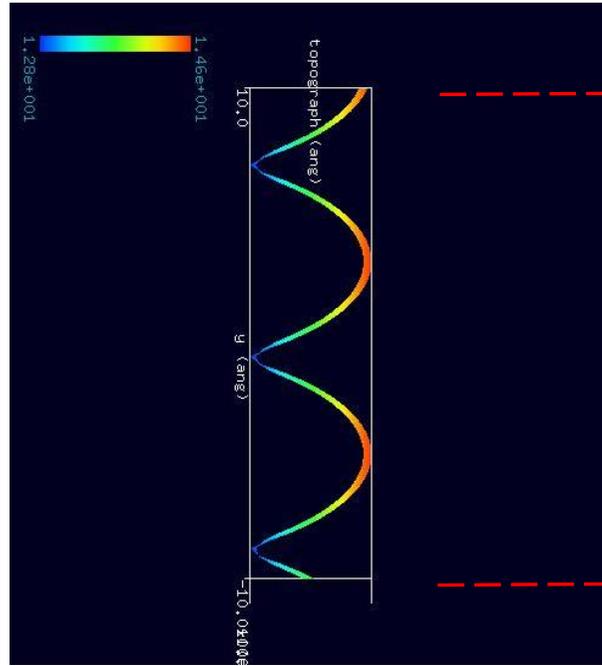


設定条件

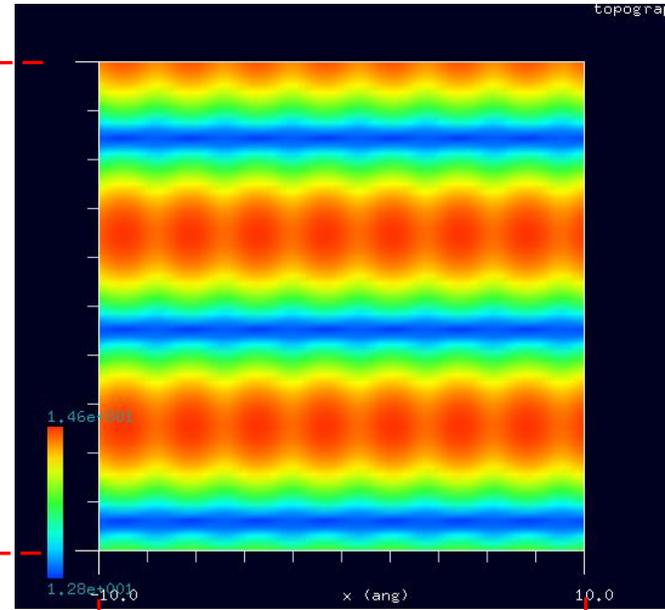
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

⑤ シミュレーション結果

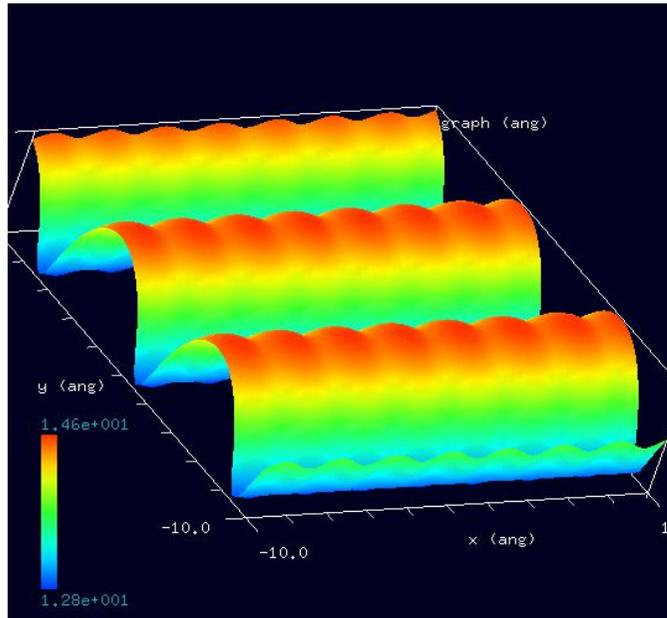
Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



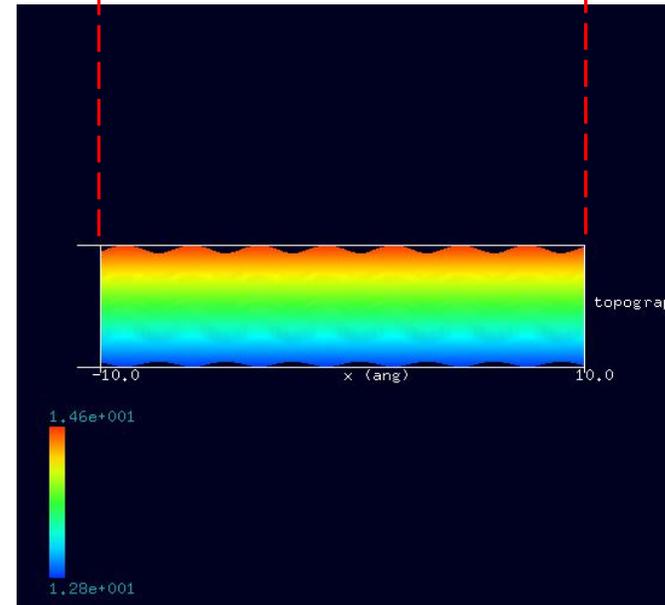
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

6・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:	
			DFTB_BAND		試料のバンド構造計算	