

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

[Part8: リチウム電池・透明電極等の特殊な用途のための材料の観察]」編

株式会社 Advanced Algorithm & Systems

2018. 04. 20

1・目次

[Part8: リチウム電池・透明電極等の特殊な用途のための材料の観察]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、 リチウム電池・透明電極

用途別市場では、

用途区分 バッテリー 液晶

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「リチウム電池・透明電極等の観察」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）

- 1・Li-GICのSTM像シミュレーションの観察 探針バイアス +0.1 V **（計算事例1）**
- 2・Li-GICのSTM像シミュレーションの観察 探針バイアス +3.0 V **（計算事例2）**
- 3・Li-GICのSTM像シミュレーションの観察 探針バイアス -0.1 V **（計算事例3）**
- 4・Li-GICのSTM像シミュレーションの観察 探針バイアス -3.0 V **（計算事例4）**

- 3・DFTB_STM (量子論的SPM像シミュレータ) ConstCurrentSTM (コンスタントカレント、STMトポグラフィイー像)
 - 1・透明導電膜 ZnO の STM 像の観察 (計算事例 5)
 - 2・透明導電膜 ZnO の ConstHeightSTM STM 像の観察 バイアス電圧 +2.0 V (計算事例 6)
 - 3・透明導電膜 ZnO の ConstHeightSTM STM 像の観察 バイアス電圧 -2.0 V (計算事例 7)
 - 4・透明導電膜 ZnO のトンネル電流分光 (計算事例 8)

- 4・DFTB_STM (量子論的SPM像シミュレータ) ConstCurrentSTM (コンスタントカレント、STMトポグラフィイー像)
 - 1・透明導電膜 ITO (Indium Tin Oxide)の STM 像 In₂O₃(001)表面の STM 像の観察 (計算事例 9)
 - 2・In₂O₃(001)表面のトンネル電流分光 (計算事例 10)
 - 3・透明導電膜 ITO (Indium Tin Oxide)の STM 像 一部を Sn で置換した In₂O₃(001)表面の STM 像の観察 (計算事例 11)
 - 4・一部を Sn で置換した In₂O₃(001)表面のトンネル電流分光 (計算事例 12)

- 5・DFTB (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・LiCoO₂(リチウムイオン電池の正極活物質)の三方晶の(001)面の constant height STM 像観察 バイアス電圧 +1.0 V (計算事例 13)
 - 2・LiCoO₂(リチウムイオン電池の正極活物質)の三方晶の(001)面の constant height STM 像観察 バイアス電圧 -1.0 V (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)

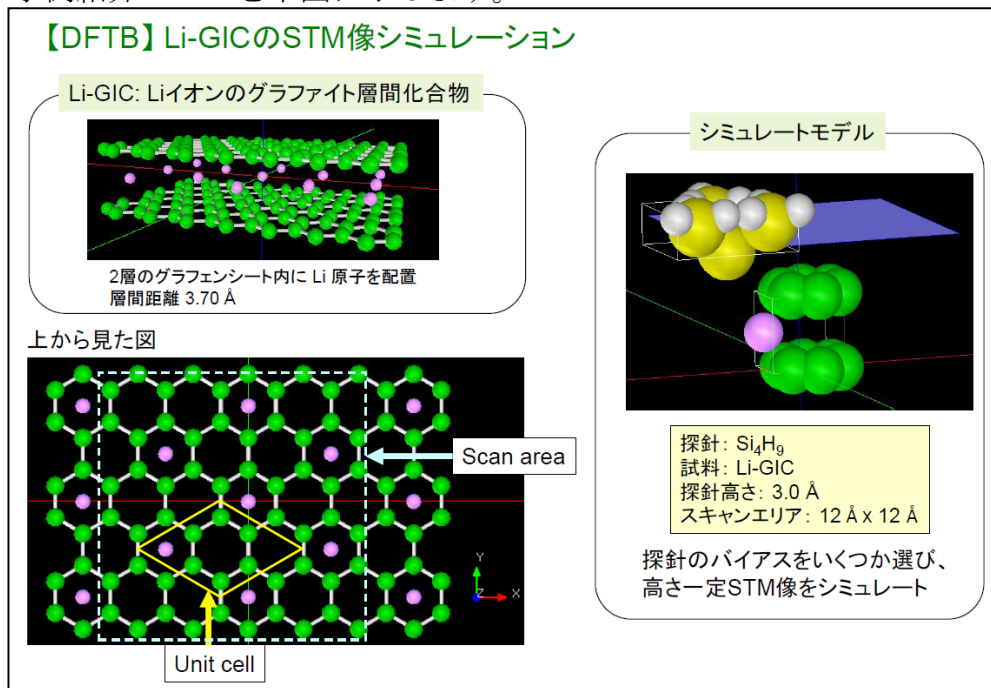
2-1 ●DFTB_STM・高さ一定モードによる Li-GIC の STM 像シミュレーション (a) 探針バイアス +0.1V 計算事例①

計算モード識別番号: [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_013a]

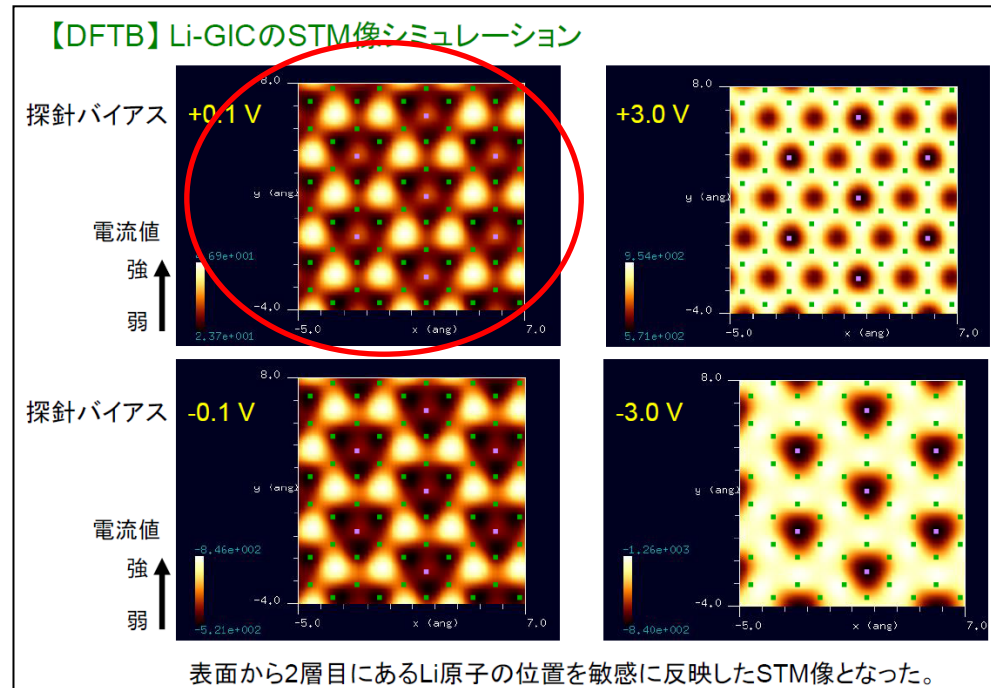
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php]

分類: DFTB_STM (高さ一定 STM 画像シミュレーション)、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ 1



事例紹介ページ 2

① 概要

本事例は、Li イオンのグラファイト層間化合物表面を、探針バイアス +0.1 V、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_013a]のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください(「SampleProject」としてプログラムフォルダ内にもプロジェクト・ファイルが保存されています)。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。

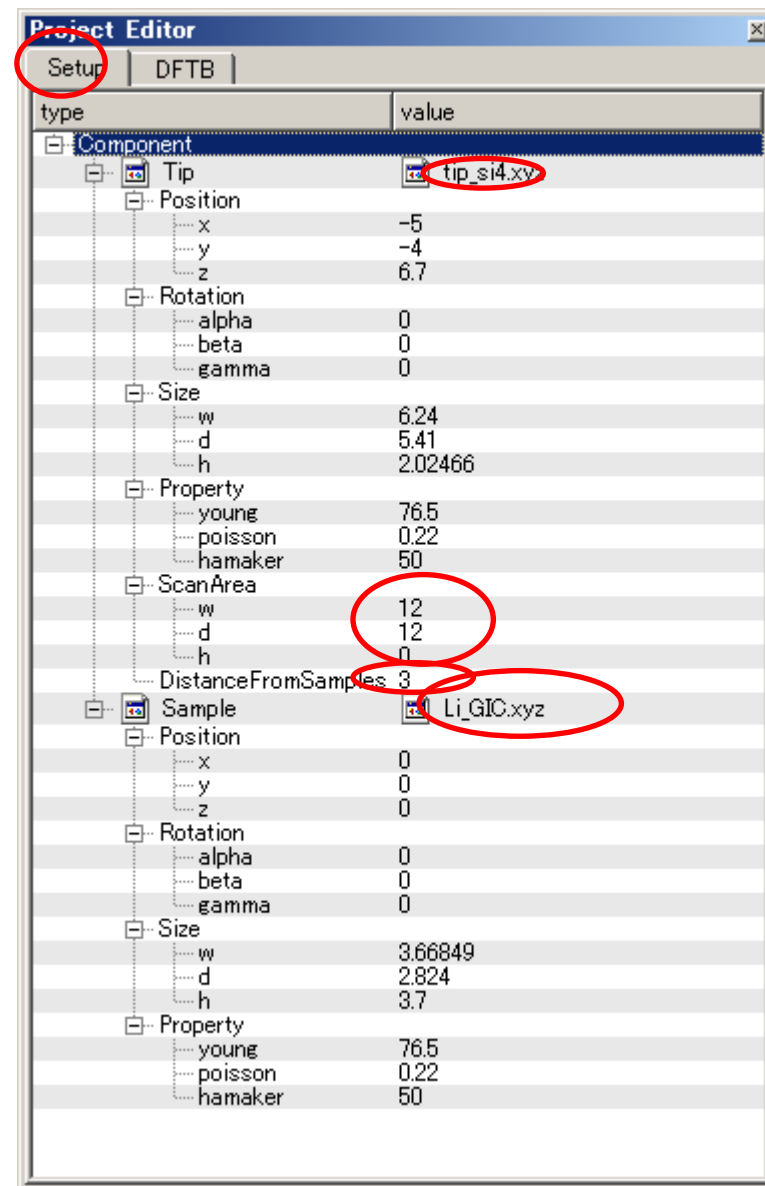
計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W12.0\text{\AA} \times D12.0\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています (Wは幅、Dは奥行、Hは高さへの入力を示し、単位は \AA です。本事例以降では、説明を割愛します)。

探針試料間距離は 3\AA 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)

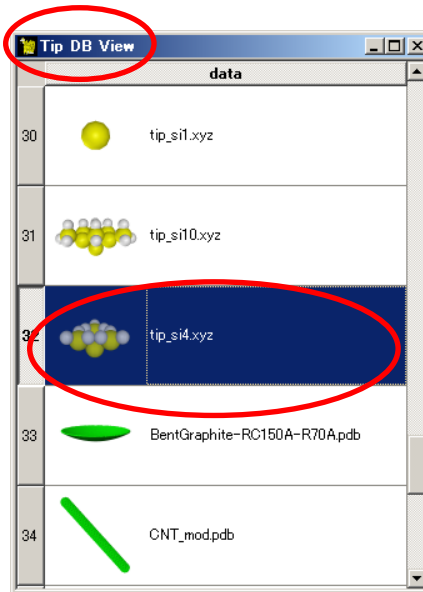


事例モデルのセットアップ条件

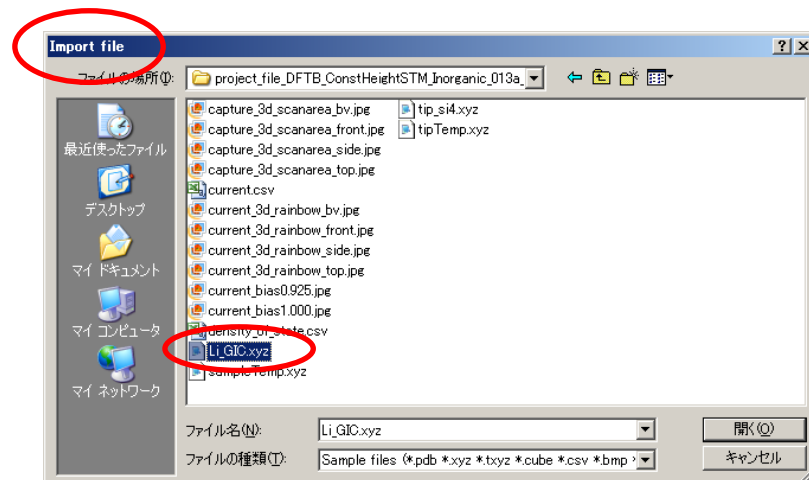
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

以下、簡略に操作を説明します (本事例以降の事例では割愛します)。

- 探針の場合、追加データは[Database] (データベース)、[File] (ファイル) および 4 種類の形状モデル [Sphere][Cone][Pyramid][Pillar]から選択可能です。試料の場合も同様に選択可能です。



登録済み[Database] (データベース) により探針選択



作成済み[File] (ファイル) により試料選択

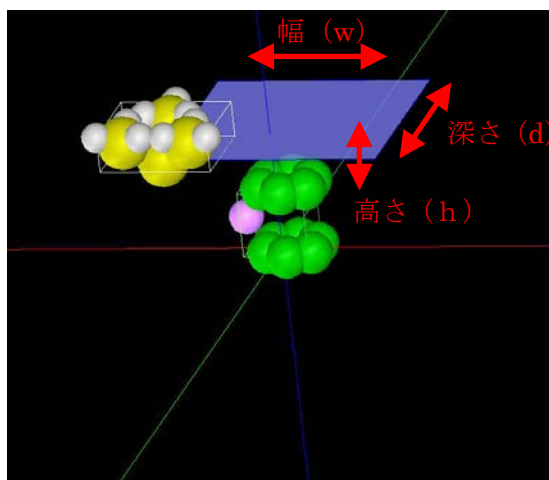
- スキャンエリアや探針試料間距離等の設定値は、項目"value"をダブルクリックしてスピンボックスにより数値変更するか、直接、数値をキー入力します。

"Main View"右クリック→コンテキストメニュー→[Show Scan Area]の操作により、

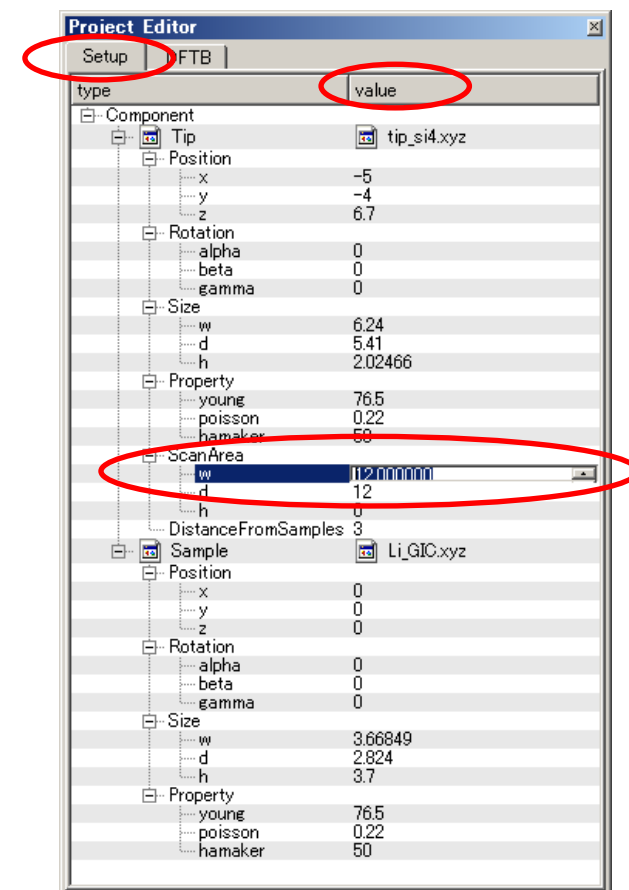
スキャン範囲が"Main View"上に青色の直方体で表示されます。

走査範囲の高さ (z軸方向)、幅 (x軸方向) や深さ (y軸方向) について、

"ScanArea"の"h"、"w"や"d"を用いて変更できます。



スキャンエリア表示 (青色の直方体)



スキャンエリアの幅 (w) 値の設定値変更

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。

周期境界条件を考慮します(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+0.9203Vでの計算を設定条件で行わせました。

(参考事例プロジェクトファイルでは+0.1Vとなっていますが、+0.9203Vとします)

並列化処理設定を行います(設定記載なしの場合1スレッド対応)。

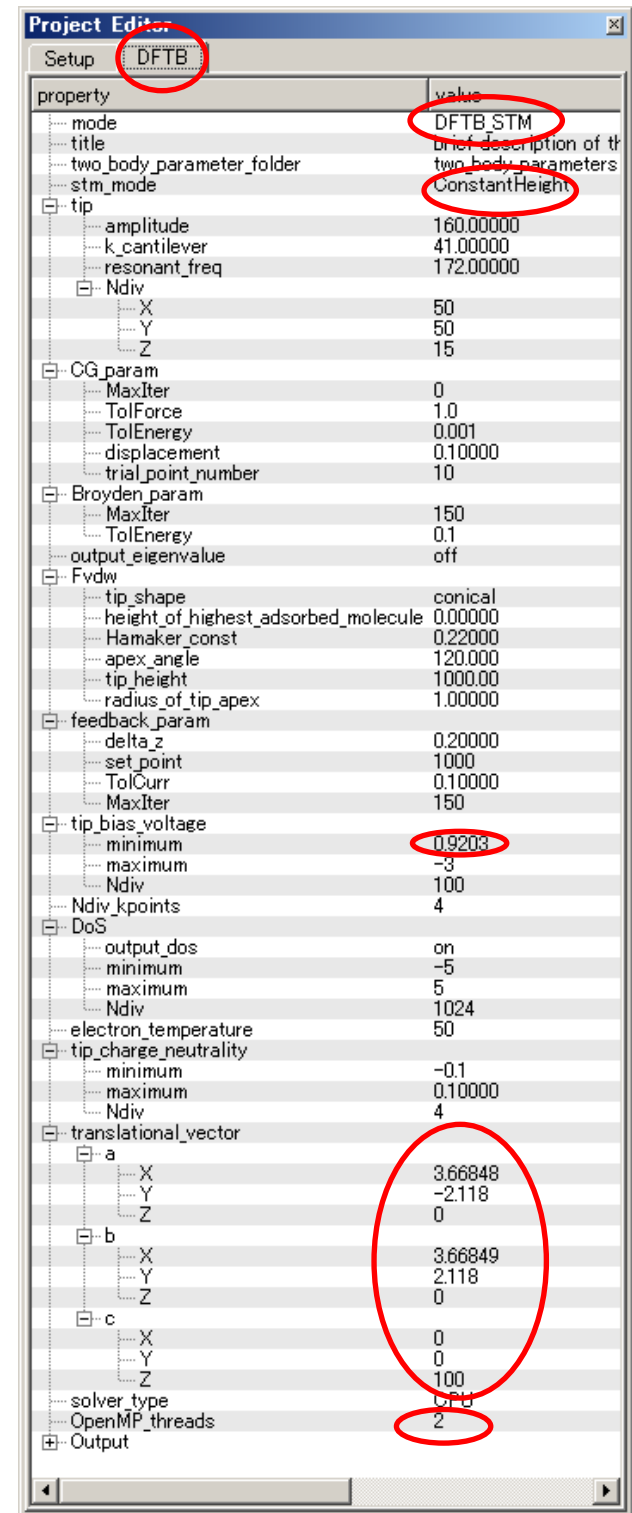
(参考事例プロジェクトファイルでは1CPUとなっていますが、2CPUとします)

各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください。

以下、簡略に操作を説明します。

- 「mode」は、「量子論的 SPM 像シミュレータ」での計算モードです。
項目”value”をダブルクリックして、リストボックスより選択します。
DFTB_AFM, DFTB_STM, DFTB_STS, DFTB_KPFFM, DFTB_BAND が選択できます。
それぞれ、原子間力顕微鏡像計算、トンネル電流顕微鏡像計算、トンネル電流分光計算、ケルビンプローブ力顕微鏡像計算、試料のバンド構造計算に対応します。
- 「stm_mode」はSTMの計算モードです。ConstantHeightとConstantCurrentの中から選ぶことができます。ConstantHeightは探針の高さ一定モードに対応し、ConstantCurrentは電流一定モードに対応します。
この項目はDFTB_STMモードを選択したときにしか意味をなしません。
- TIPバイアス電圧(tip_bias_voltage)は項目”value”により変更します。
minimum値 > maximum値の場合、minimum値が設定値となります。
- 周期境界条件でのベクトル c は DFTB_BAND モードの三次元計算のみで使用されます。
- 並列化処理設定は、並列計算を行う際に使用する CPU のコア数を設定します。
概ね、大きな数値の方が、効果が出ますが、使用PCの搭載コア数より大きくしても効果はありません。
(本事例以降の事例では、操作説明を割愛します)

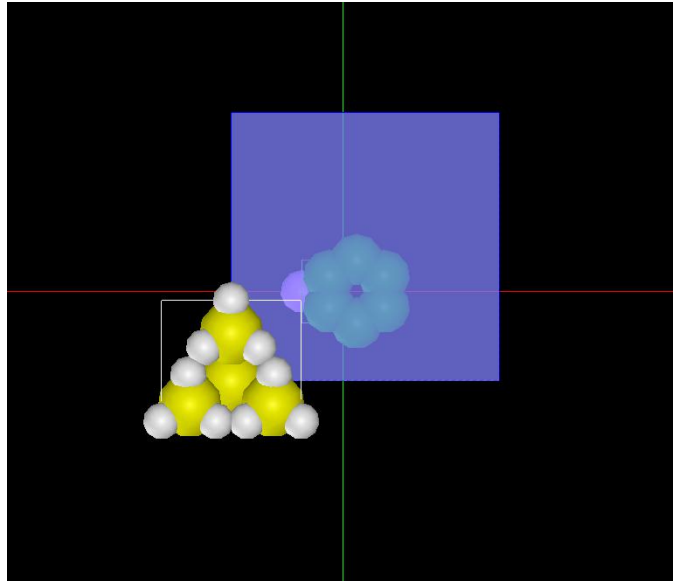
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。



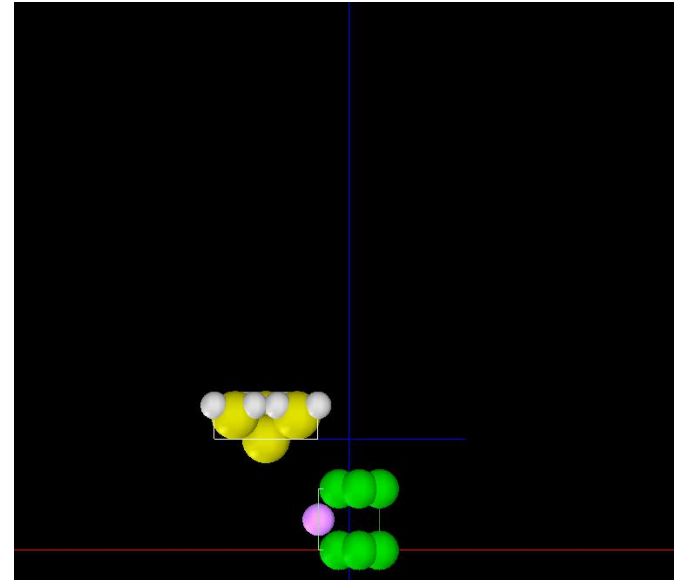
設定条件

④ 探針、試料モデル

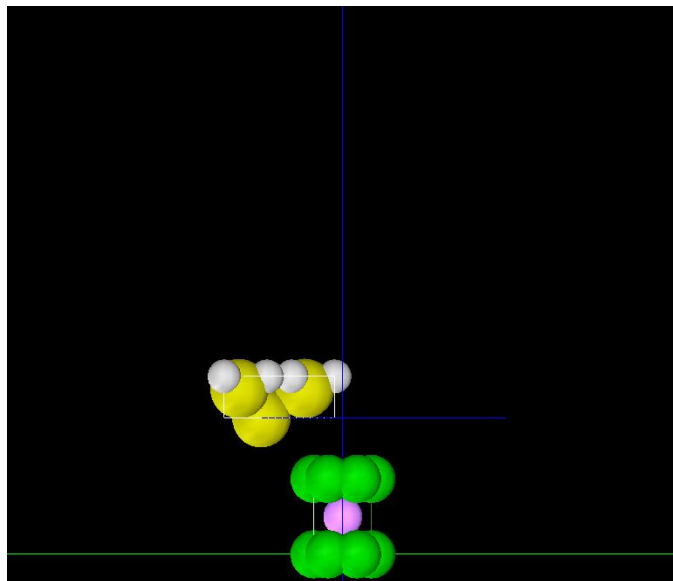
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



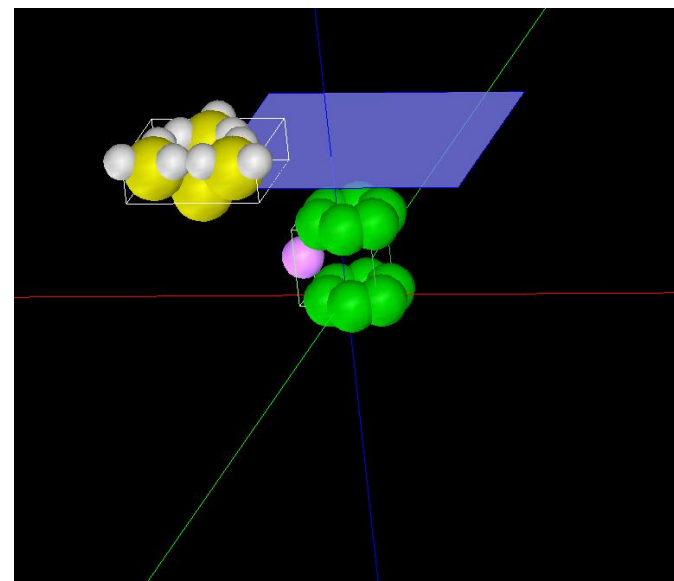
TOP



SIDE



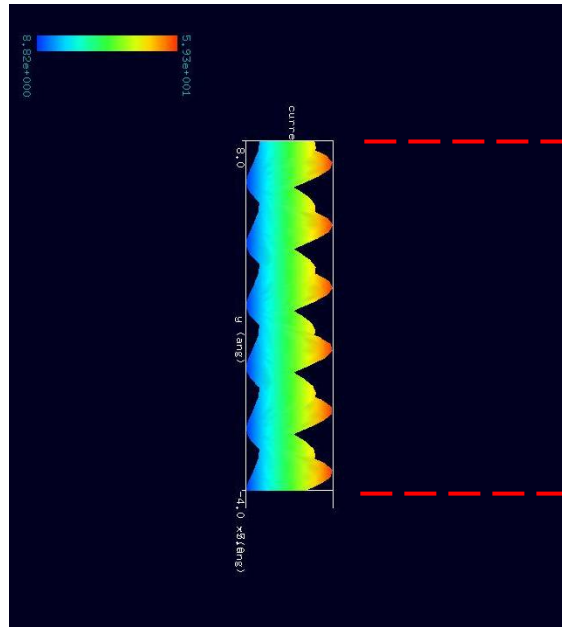
FRONT



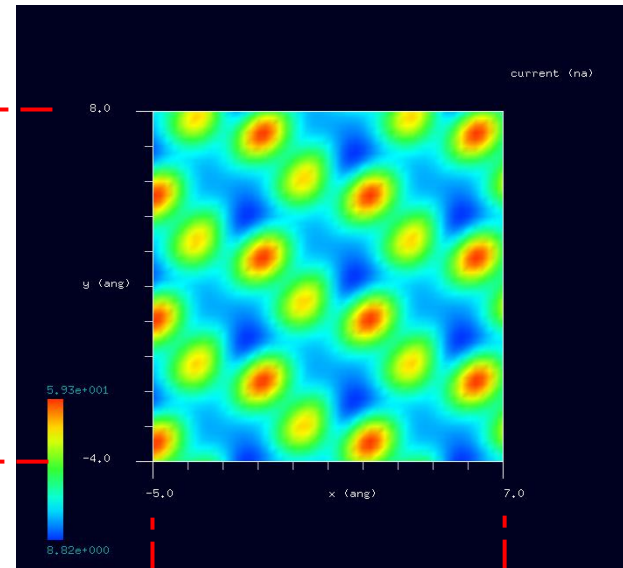
俯瞰

⑤ シミュレーション結果

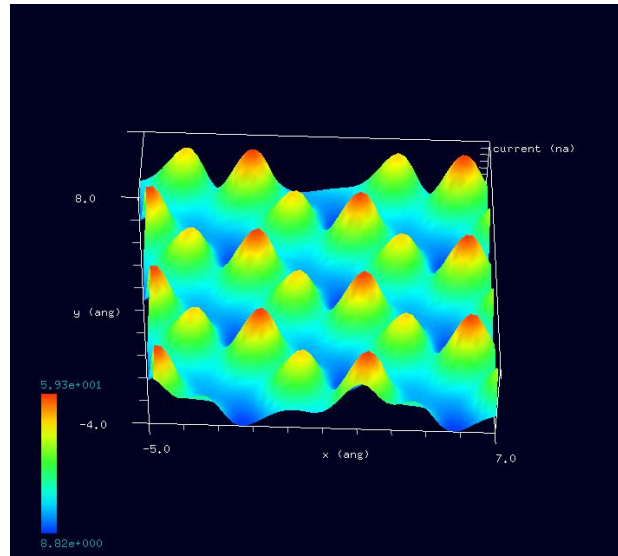
以下に、シミュレーション結果を3D-ViewのRainbow色表示で、TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



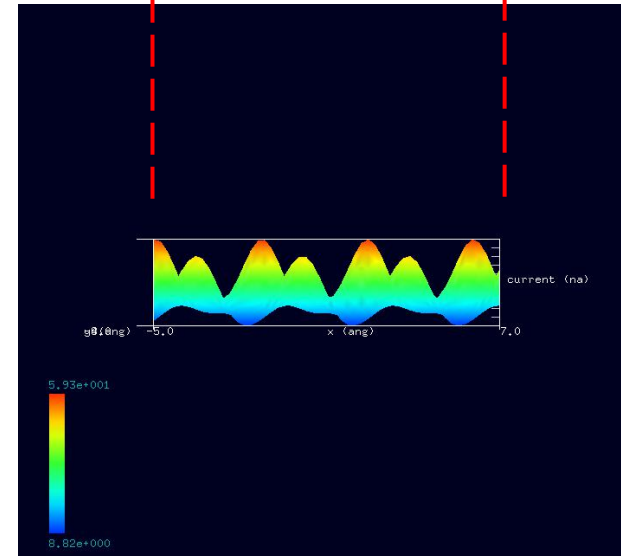
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

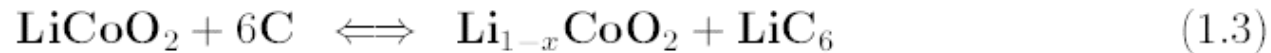
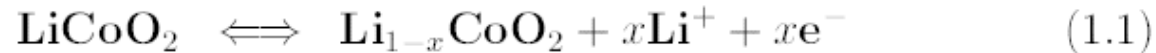
⑥ Liイオンのグラファイト層間化合物について

・ グラファイト層間化合物 (GIC、Graphite Intercalation Compounds) について

『黒鉛 (Graphite) は炭素六角網面、いわゆるグラフェン (Graphene)、が平行に積層した層状物質です。 グラフェン面は sp^2 炭素原子による強い共有結合で形成されていますが、グラフェンとグラフェンの間 (黒鉛層間) には弱いファンデルワールス力しか働いていません。そのため、黒鉛の層間にはさまざまな原子や分子等が侵入することができます。 このようにして形成したサンドイッチ構造の化合物が黒鉛層間化合物 (Graphite Intercalation Compound) で、通常、GIC (ジー・アイ・シー) と略されます。』

(東京工芸大学・松本(里) 研究室のホームページより抜粋 <http://www.gen.t-kougei.ac.jp/chem/mrika/GICseminar.html>)

『陽極に LiCoO_2 を用い、陰極にグラファイトを用いた 2 次電池が 製品化されている。この電池では、陽極で式 (1.2) のような反応が進行し、陰極では式 (1.3) のような反応が進行する。全体では式 (1.3) のような反応が進行する。』



充電するときは陰極のグラファイトの層間に Li が入り、放電するときは、グラファイト層間の Li が抜け出し、陽極の LiCoO_2 の層間に入り込む。』

(「グラファイトクラスターのLi 過剰吸着とラマン強度」電気通信大学大学院電子工学専攻電子デバイス工学講座修士論文 中平政男様より抜粋

<http://flex.phys.tohoku.ac.jp/riron/ronbun/m96naka.pdf> p6)

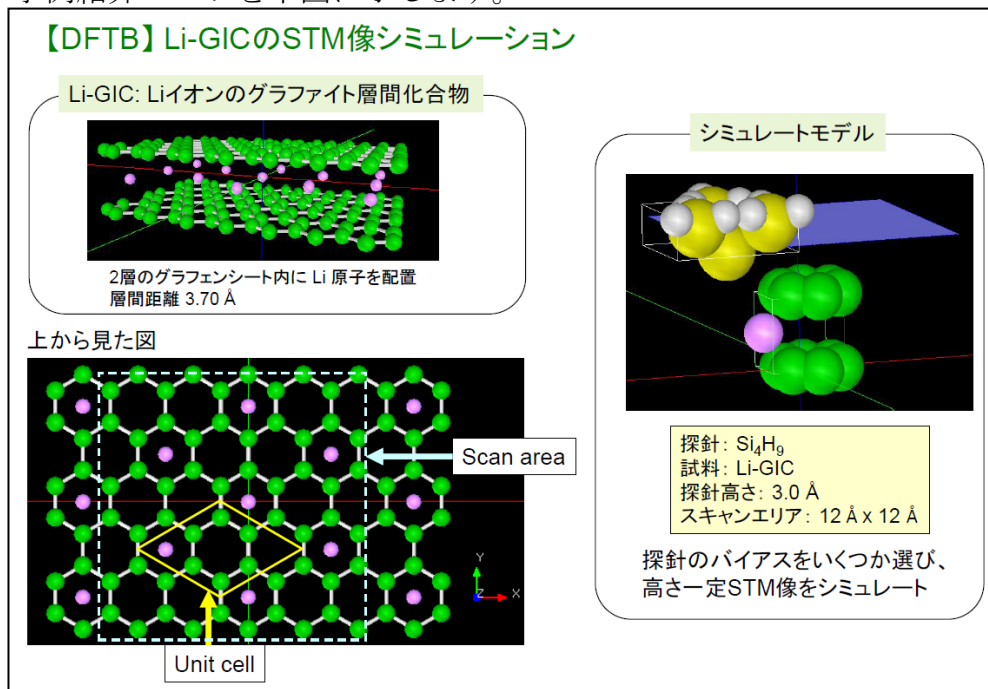
2-2●DFTB_STM・高さ一定モードによるLi-GICのSTM像シミュレーション (b) 探針バイアス +3.0 V 計算事例②

計算モード識別番号：[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_013b]

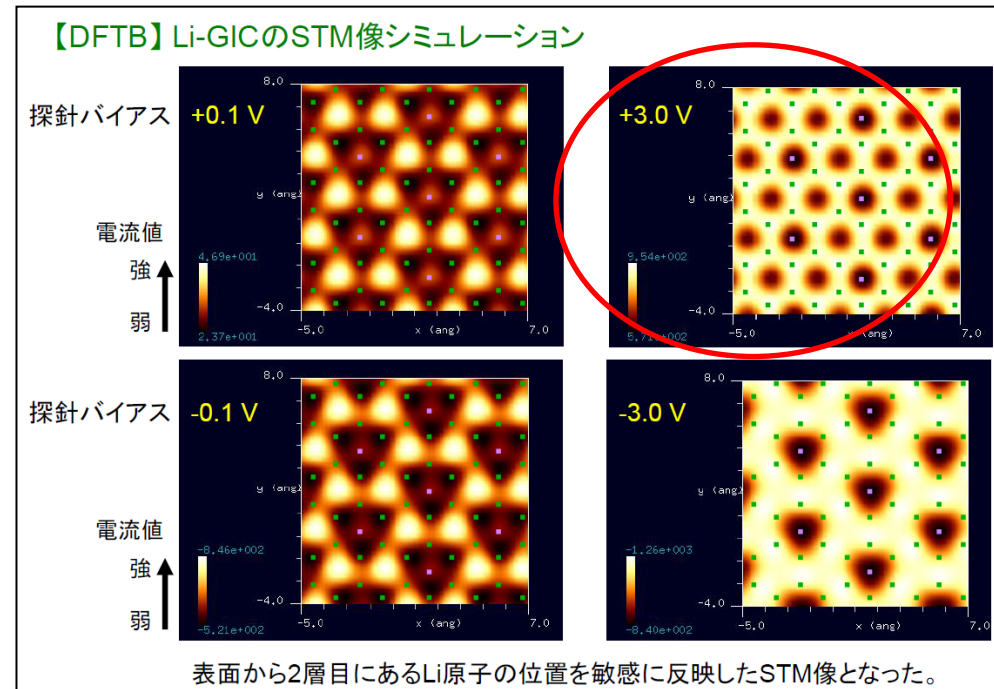
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php]

分類：DFTB_STM（高さ一定STM画像シミュレーション）、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ1



事例紹介ページ2

① 概要

本事例は、Li イオンのグラファイト層間化合物表面を、探針バイアス +3.0 V、DFTB 高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。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のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください（「SampleProject」としてプログラムフォルダ内にもプロジェクト・ファイルが保存されています）。

本計算事例の入力条件について記載します。

操作全般についての説明は最初の計算事例①（P4, P6, P7）に記してあります。

② セットアップ条件 (Project・Editor Setup・Tab)

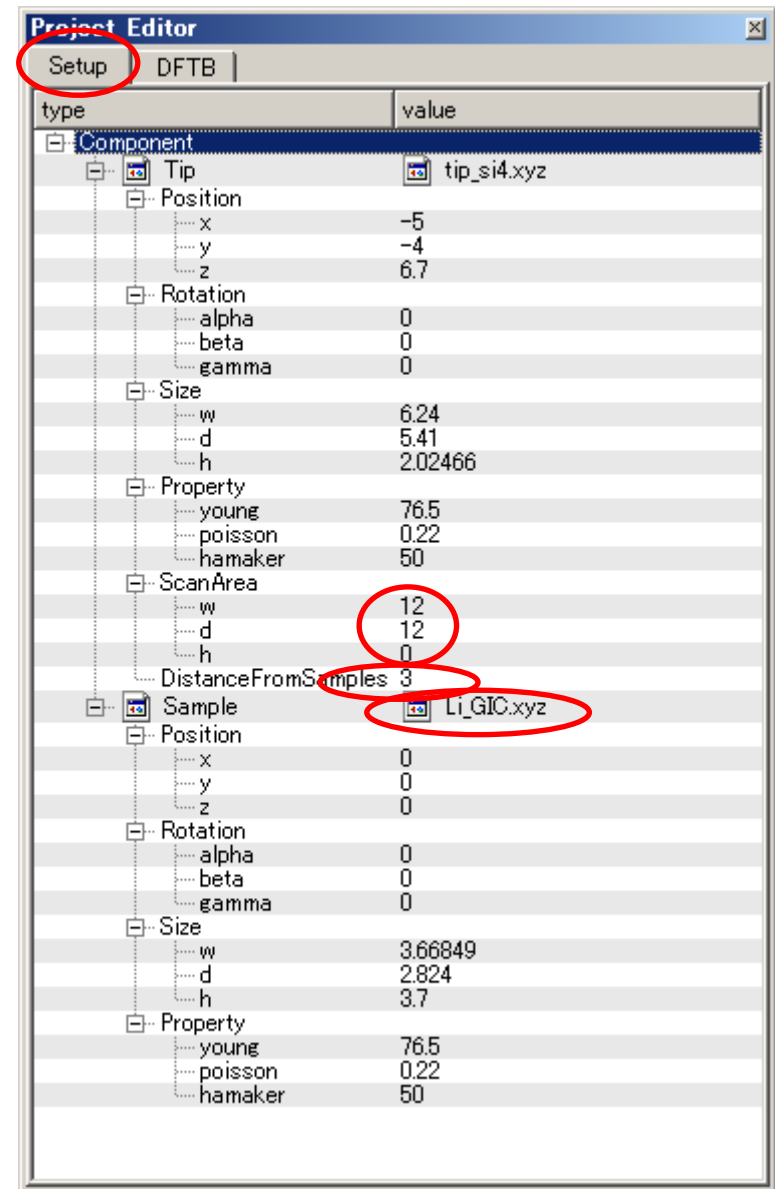
[Project Editor]の[Setup]タブをクリックします。

本計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W1\ 2\ \text{\AA} \times D1\ 2\ \text{\AA} \times H0.0\ \text{\AA}$ 」と設定されています。

試料探針間距離は、「 $3\ \text{\AA}$ 」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)

[Project Editor]の[DFTB]タブをクリックします。

「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。

周期境界条件を考慮します(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)。

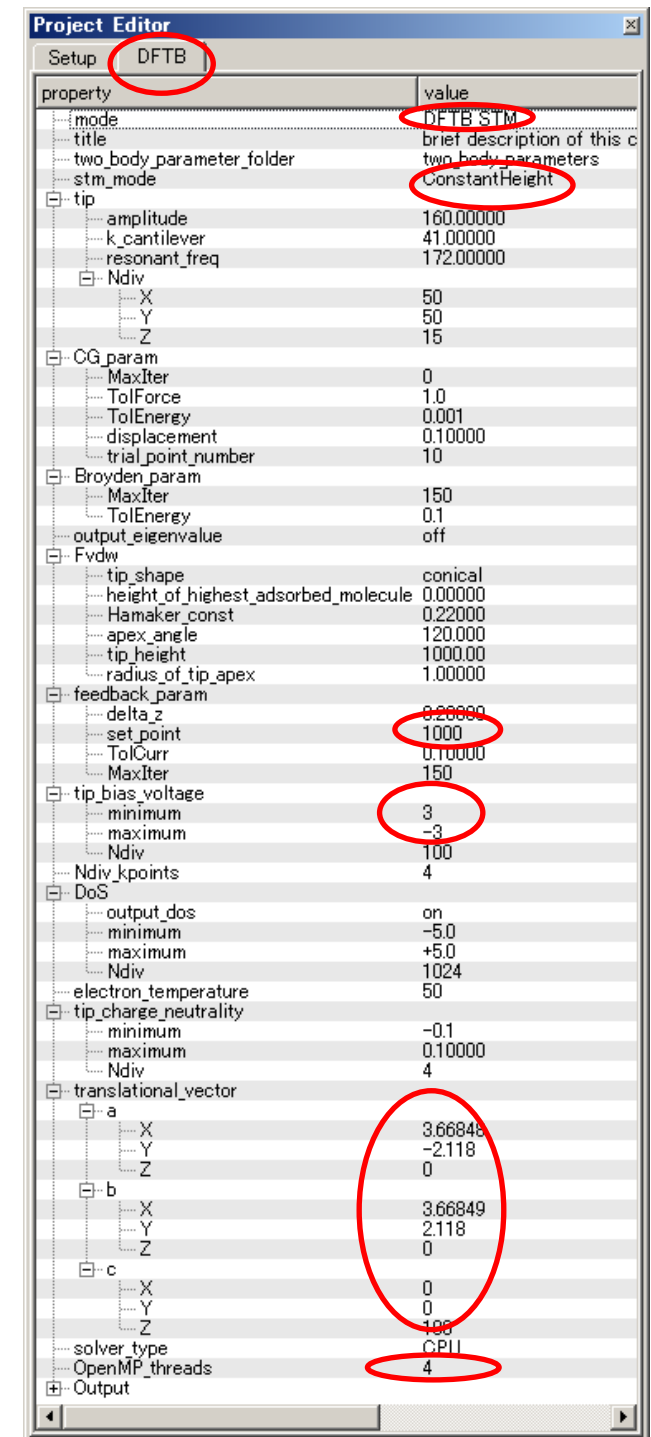
TIPバイアス電圧を+3.0Vでの計算を設定条件で行わせました。

並列化処理設定を行います(設定記載なしの場合1スレッド対応)。

(参考事例プロジェクトファイルでは1CPUとなっておりますが、4CPUとします)

(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)

各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください。

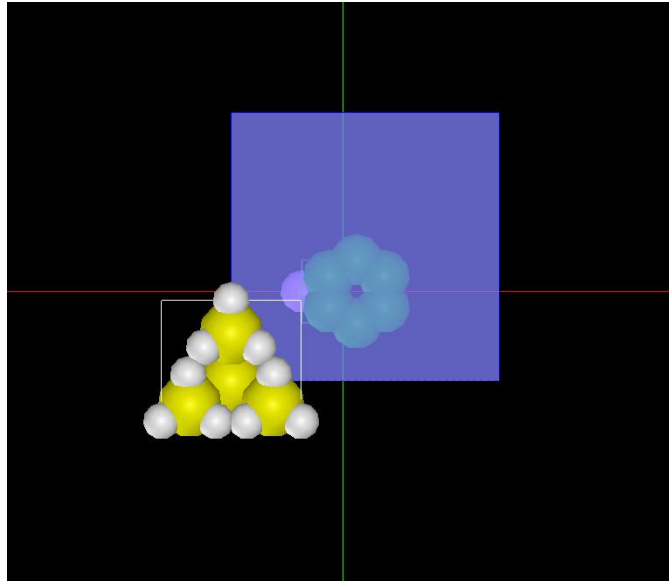


設定条件

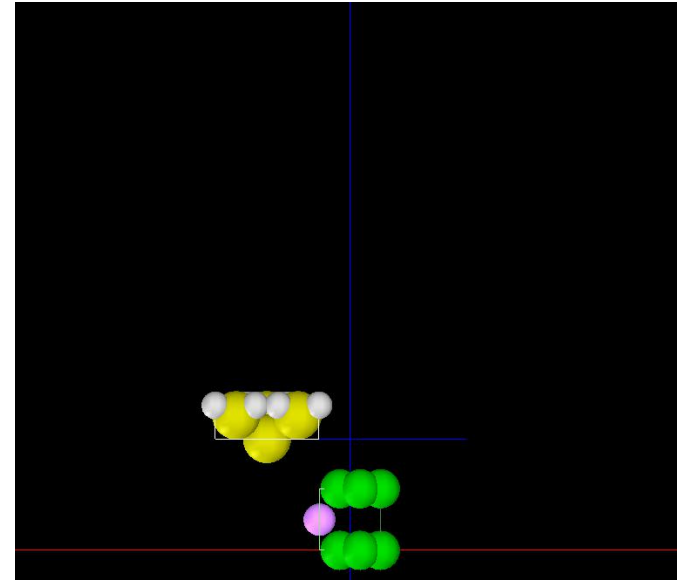
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

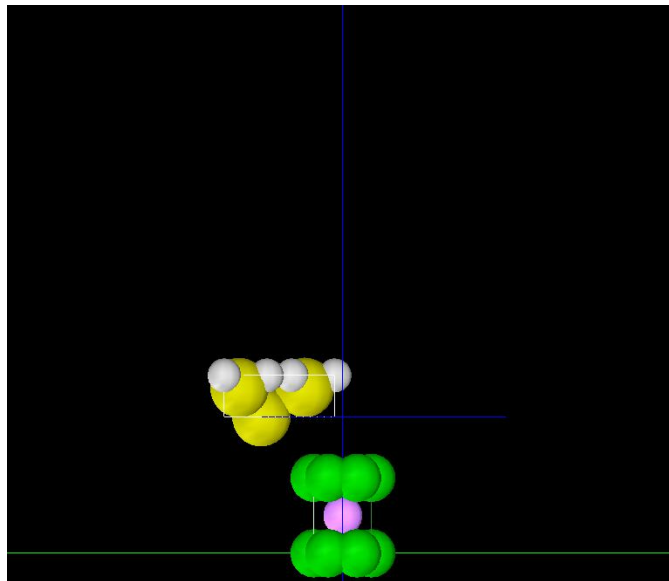
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



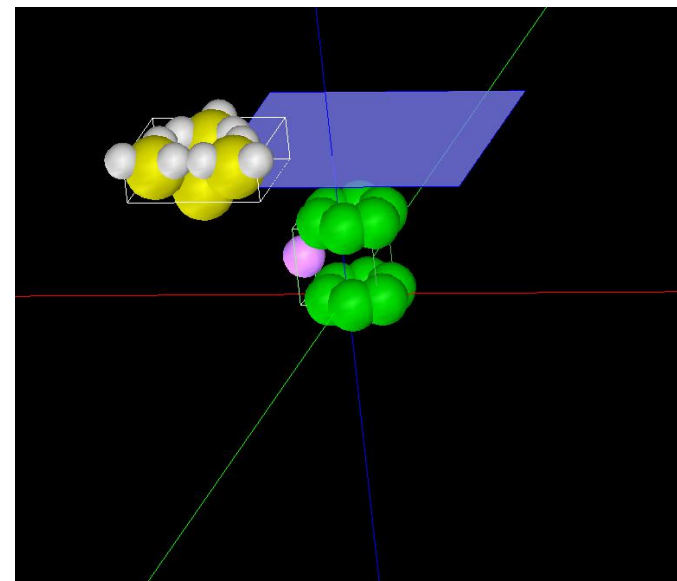
TOP



SIDE



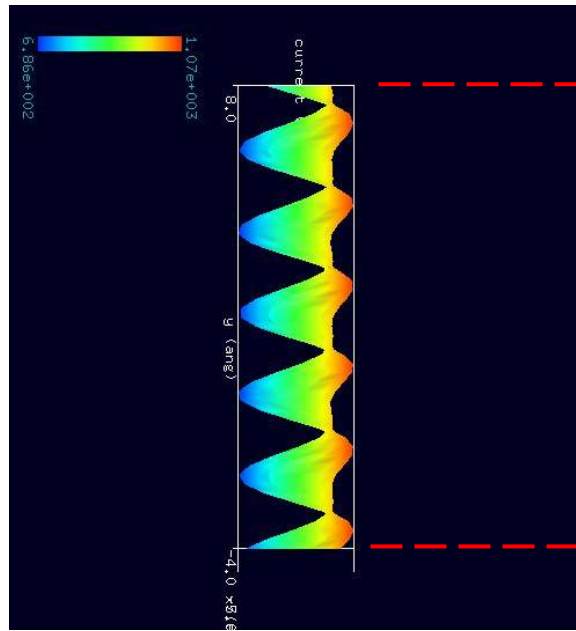
FRONT



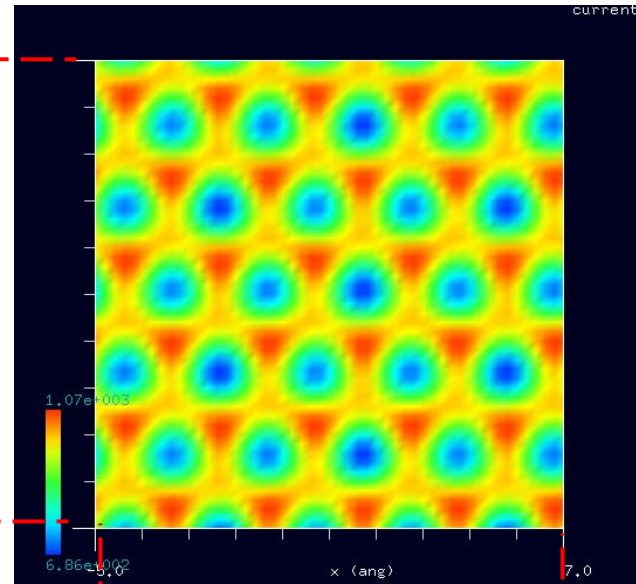
俯瞰

⑤シミュレーション結果・

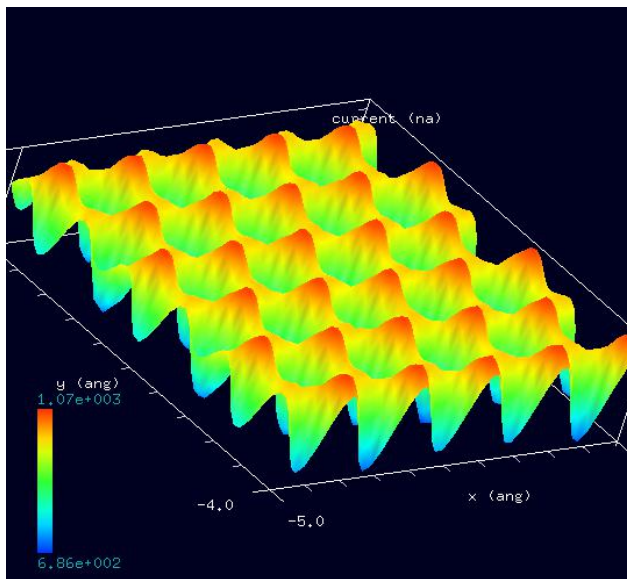
Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



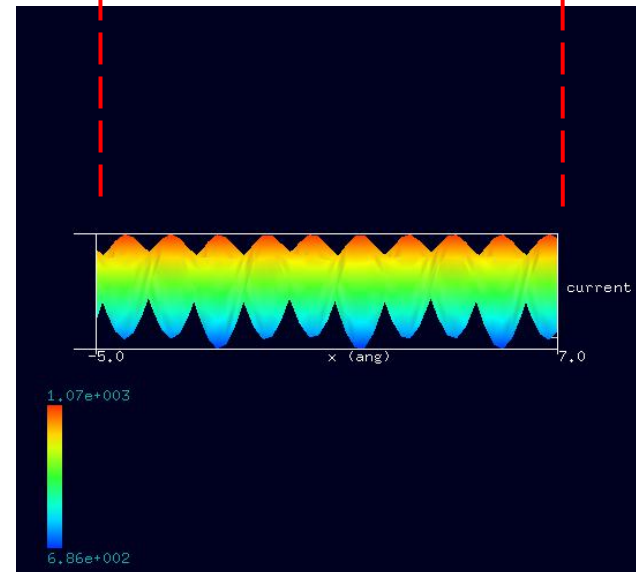
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

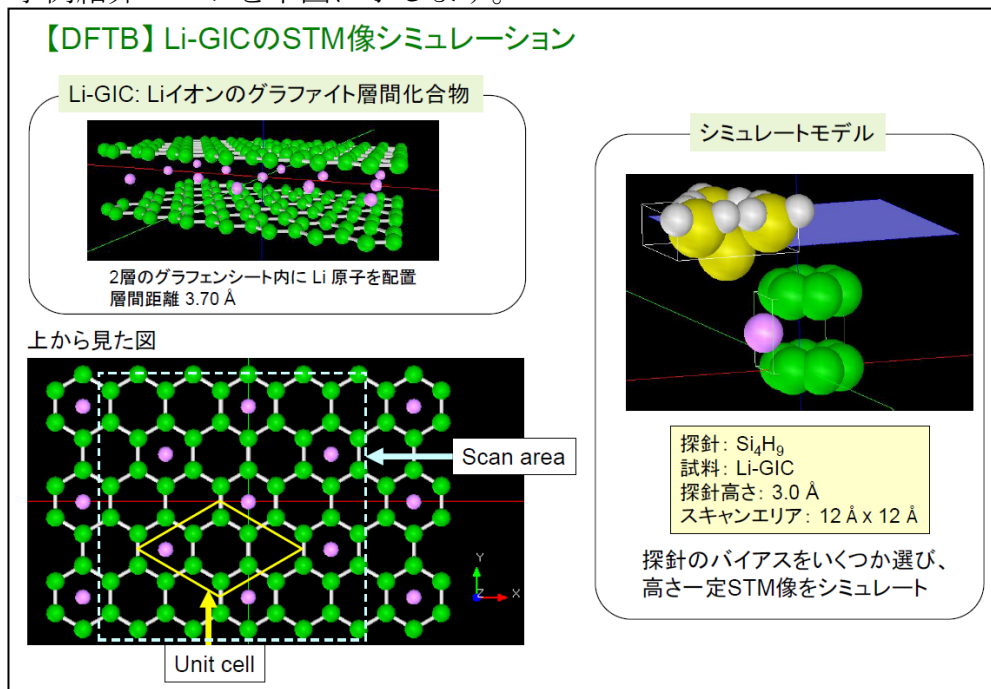
2-3 ●DFTB_STM・高さ一定モードによる Li-GIC の STM 像シミュレーション (c) 探針バイアス -0.1 V 計算事例③

計算モード識別番号：[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_013c]

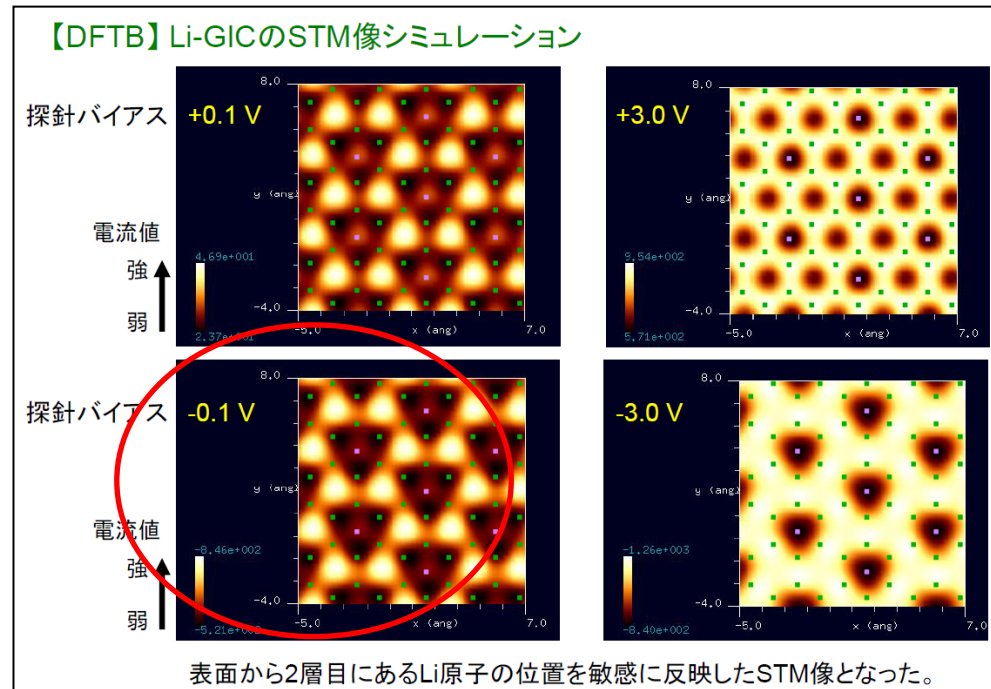
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php]

分類：DFTB_STM（高さ一定 STM 画像シミュレーション）、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ 1



事例紹介ページ 2

① 概要

本事例は、Li イオンのグラファイト層間化合物表面を、探針バイアス -0.1 V、DFTB 高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。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のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください（「SampleProject」としてプログラムフォルダ内にもプロジェクト・ファイルが保存されています）。

本計算事例の入力条件について記載します。

操作全般についての説明は最初の計算事例①（P4, P6, P7）に記してあります。

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。

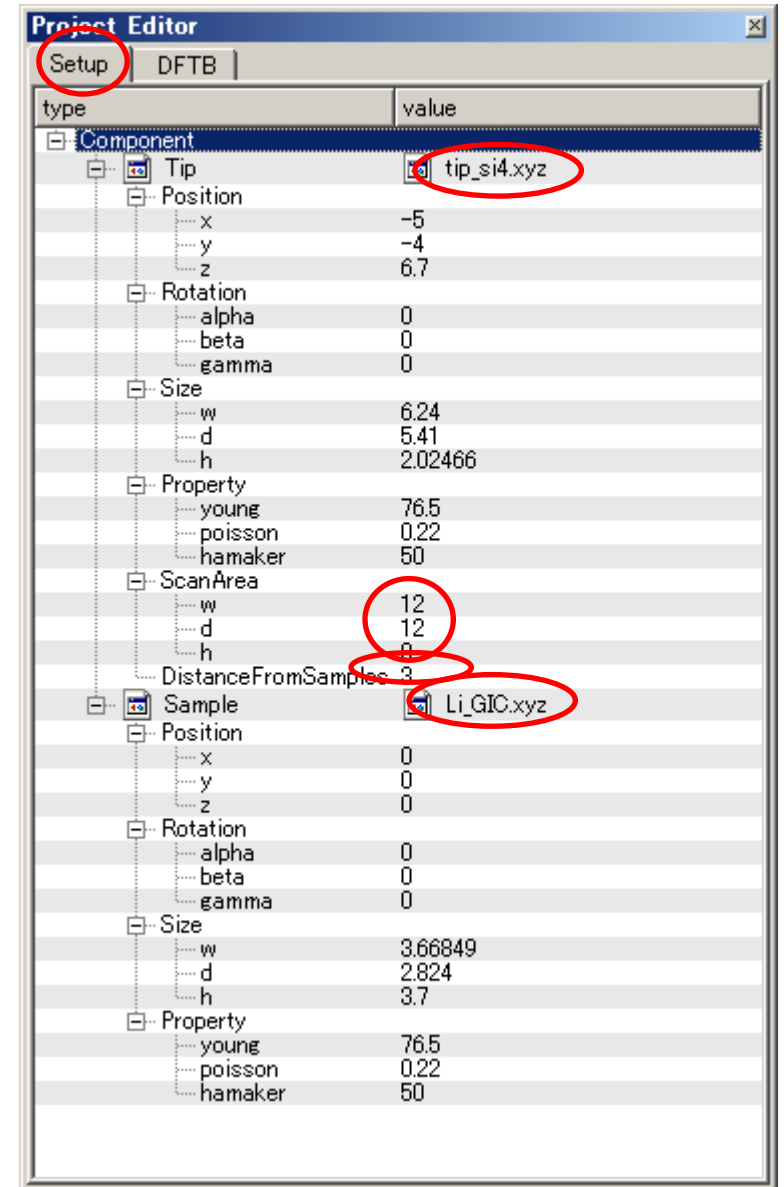
本計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W12.0\text{\AA} \times D12.0\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」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)



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。

周期境界条件を考慮します（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 $-1.0V$ での計算を設定条件で行わせました。

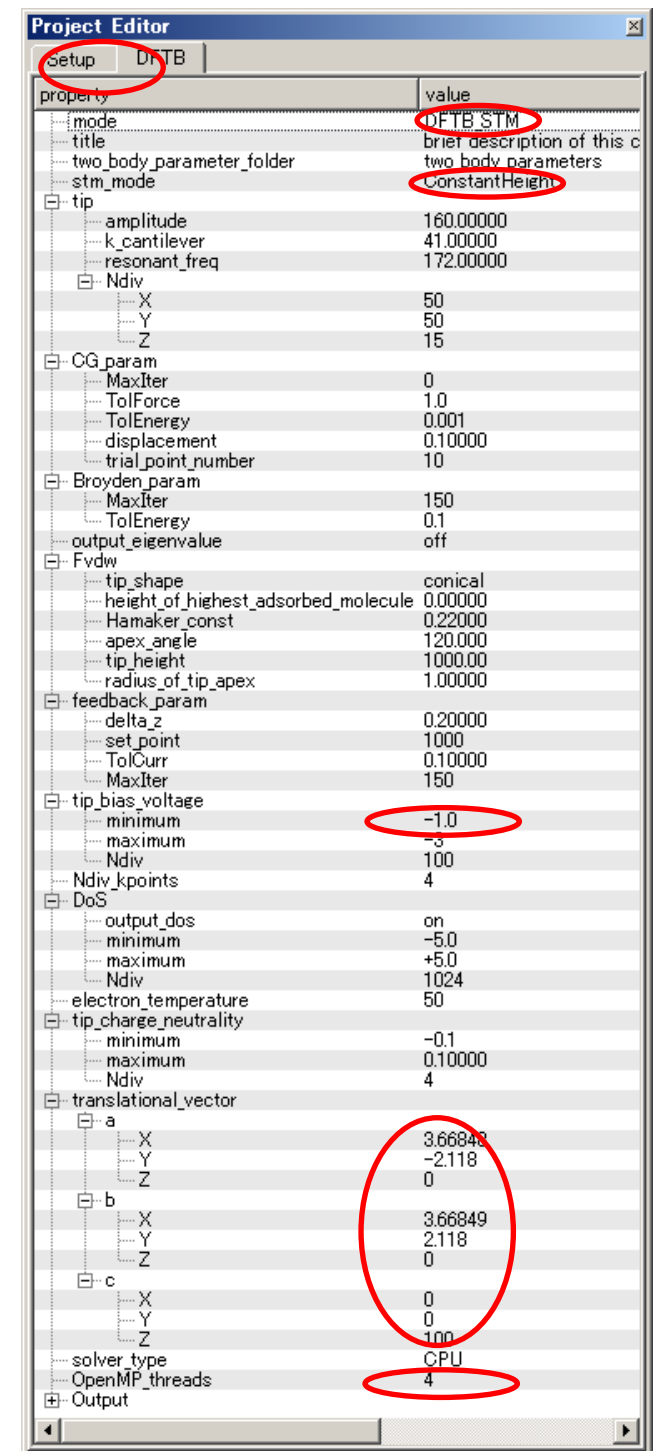
（事例紹介ページ2では $-0.1V$ となっていますが、 $-1.0V$ とします）

並列化処理設定を行います（設定記載なしの場合1スレッド対応）。

（参考事例プロジェクトファイルでは1CPUとなっていますが、4CPUとします）

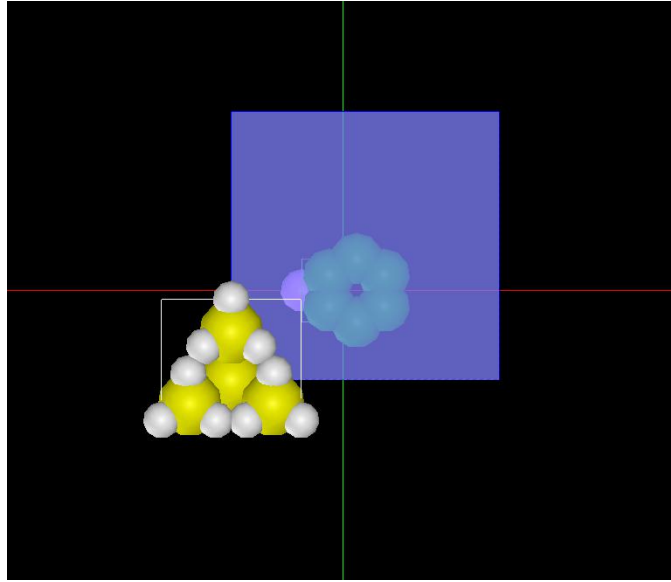
（探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい）

各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください。

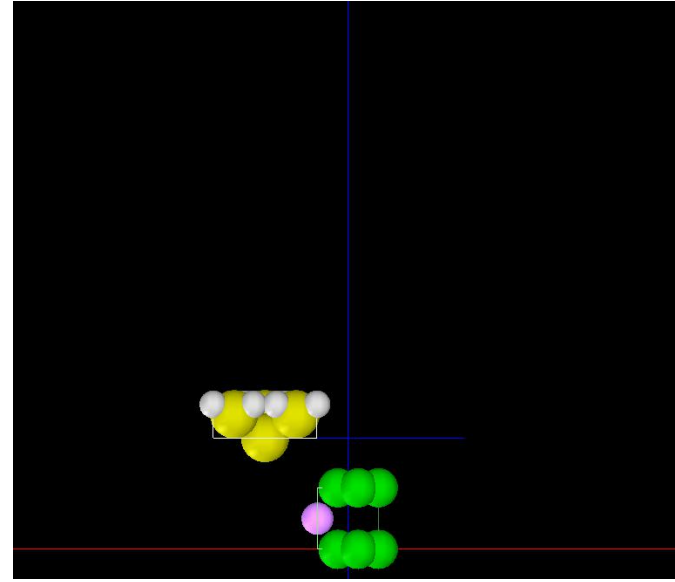


④ 探針、試料モデル

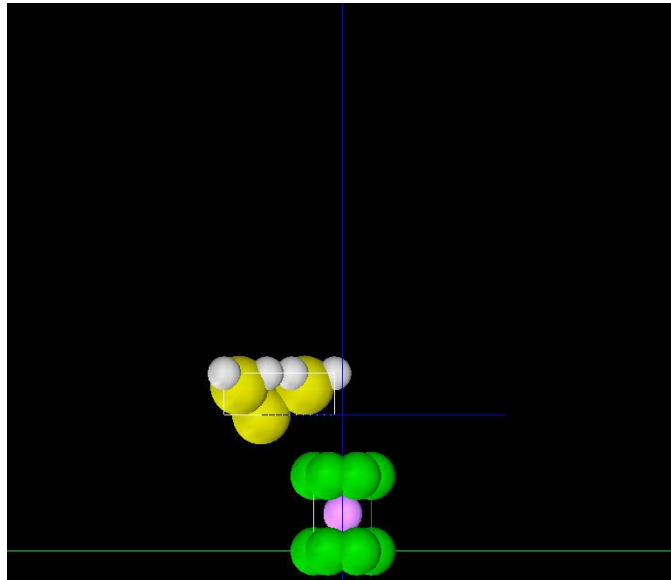
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



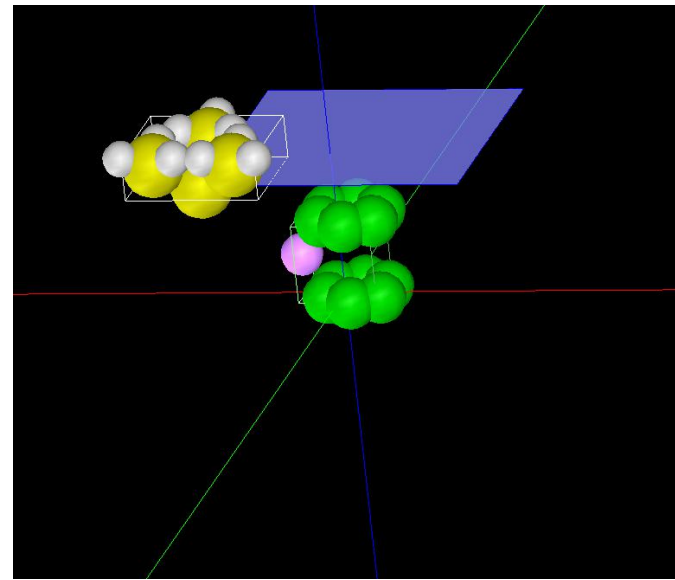
TOP



SIDE



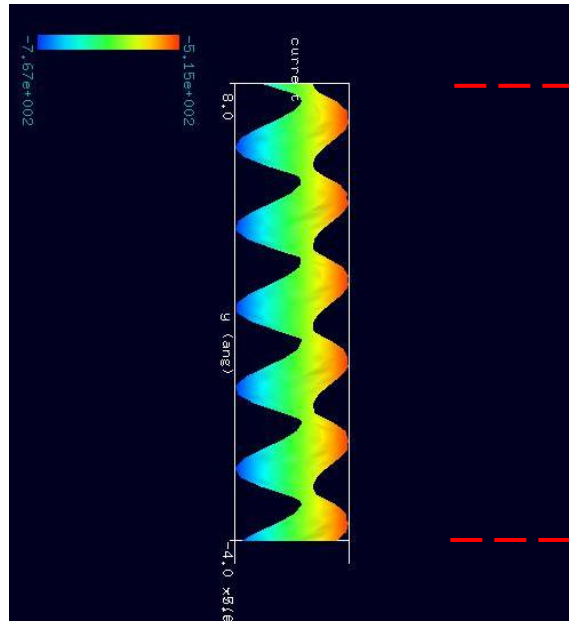
FRONT



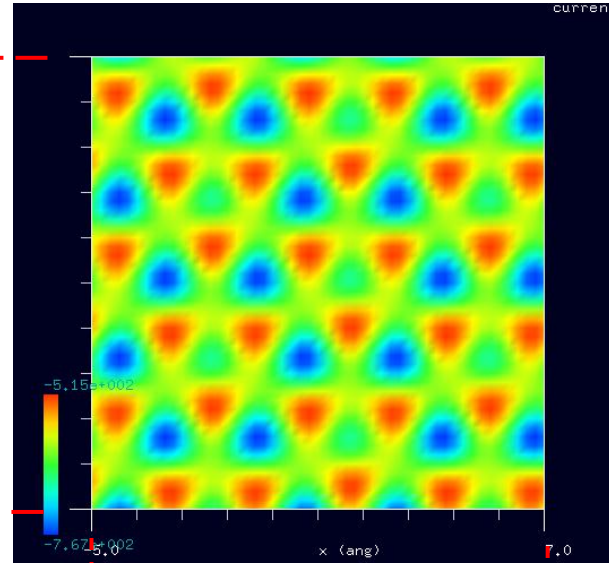
俯瞰

⑤ シミュレーション結果

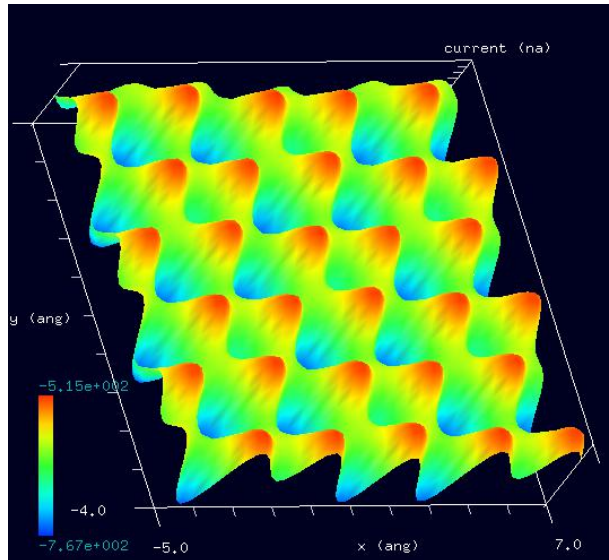
以下に、シミュレーション結果を3D-ViewのRainbow色表示で、TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



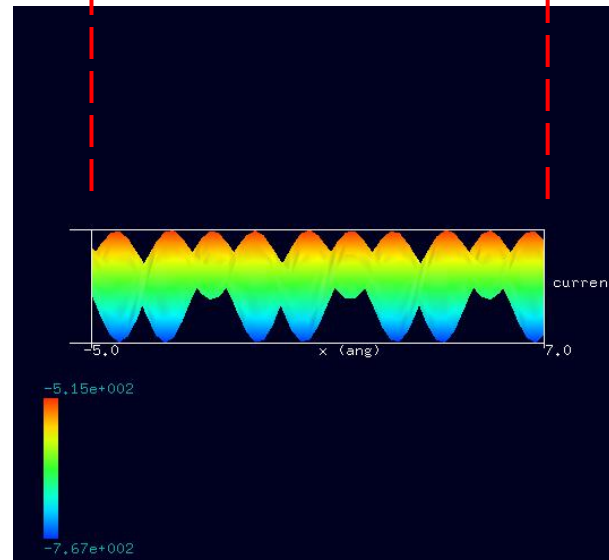
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

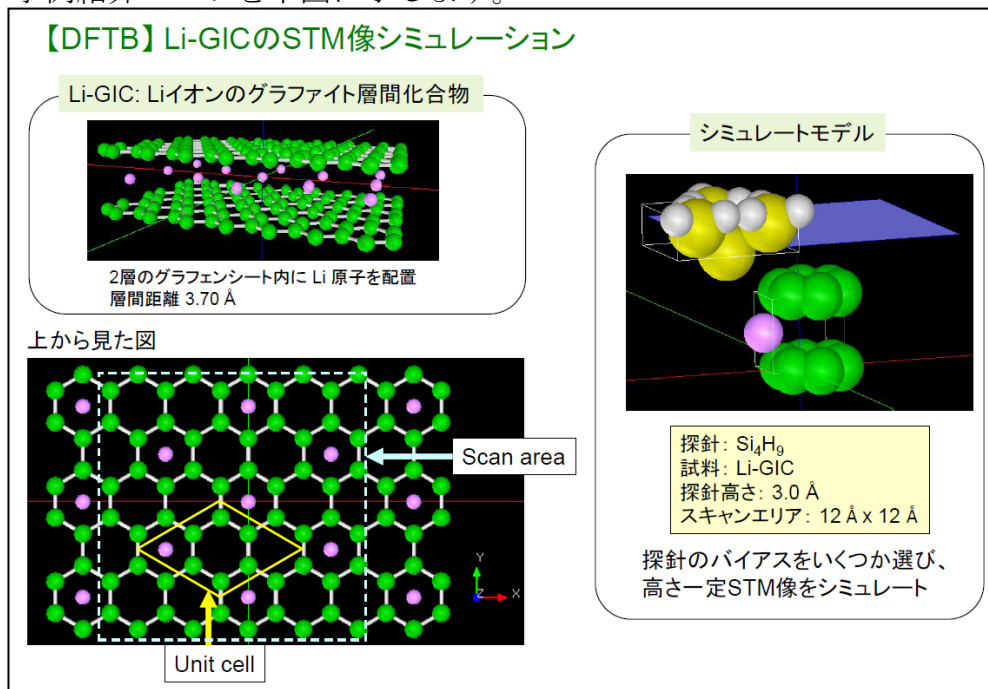
2-4●DFTB_STM・高さ一定モードによる Li-GIC の STM 像シミュレーション (d) 探針バイアス -3.0 V 計算事例④

計算モード識別番号：[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_013d]

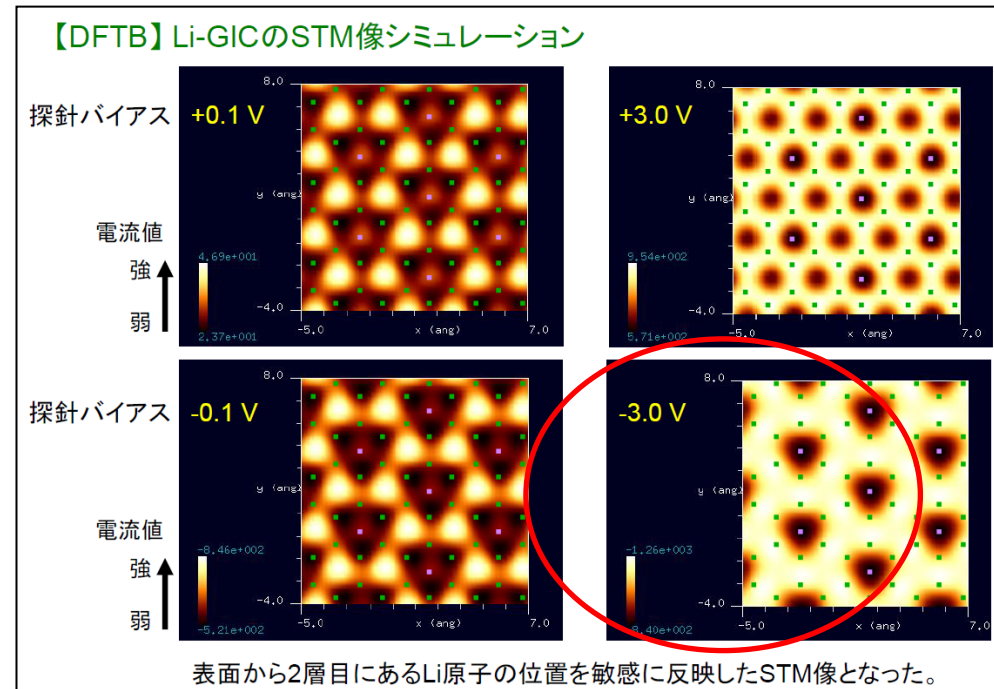
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstHeightSTM/DFTB_ConstHeightSTM.php]

分類：DFTB_STM（高さ一定 STM 画像シミュレーション）、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等

事例紹介ページを下図に示します。



事例紹介ページ1



事例紹介ページ2

① 概要

本事例は、Li イオンのグラファイト層間化合物表面を、探針バイアス -3.0 V 、DFTB 高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。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のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください（「SampleProject」としてプログラムフォルダ内にもプロジェクト・ファイルが保存されています）。

本計算事例の入力条件について記載します。

操作全般についての説明は最初の計算事例①（P4, P6, P7）に記してあります。

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。

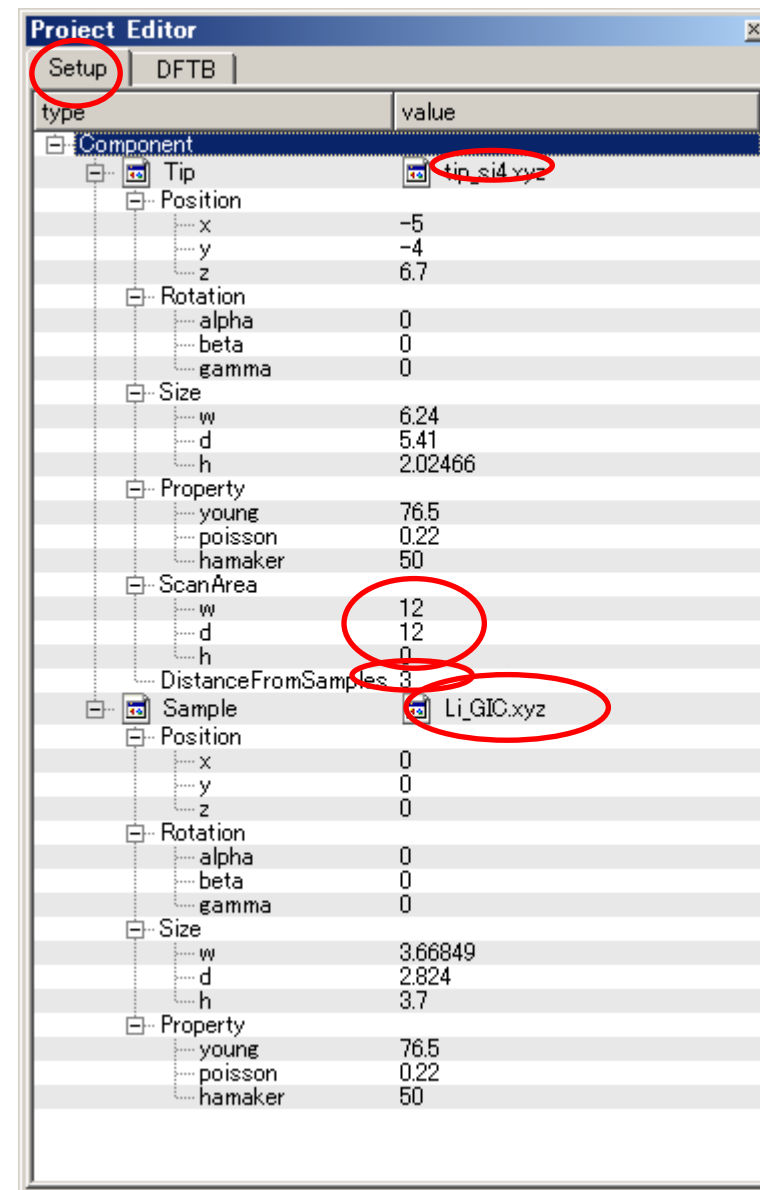
本計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W12.0\text{\AA} \times D12.0\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」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。

周期境界条件を考慮します(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 $-3.0V$ での計算を設定条件で行わせました。

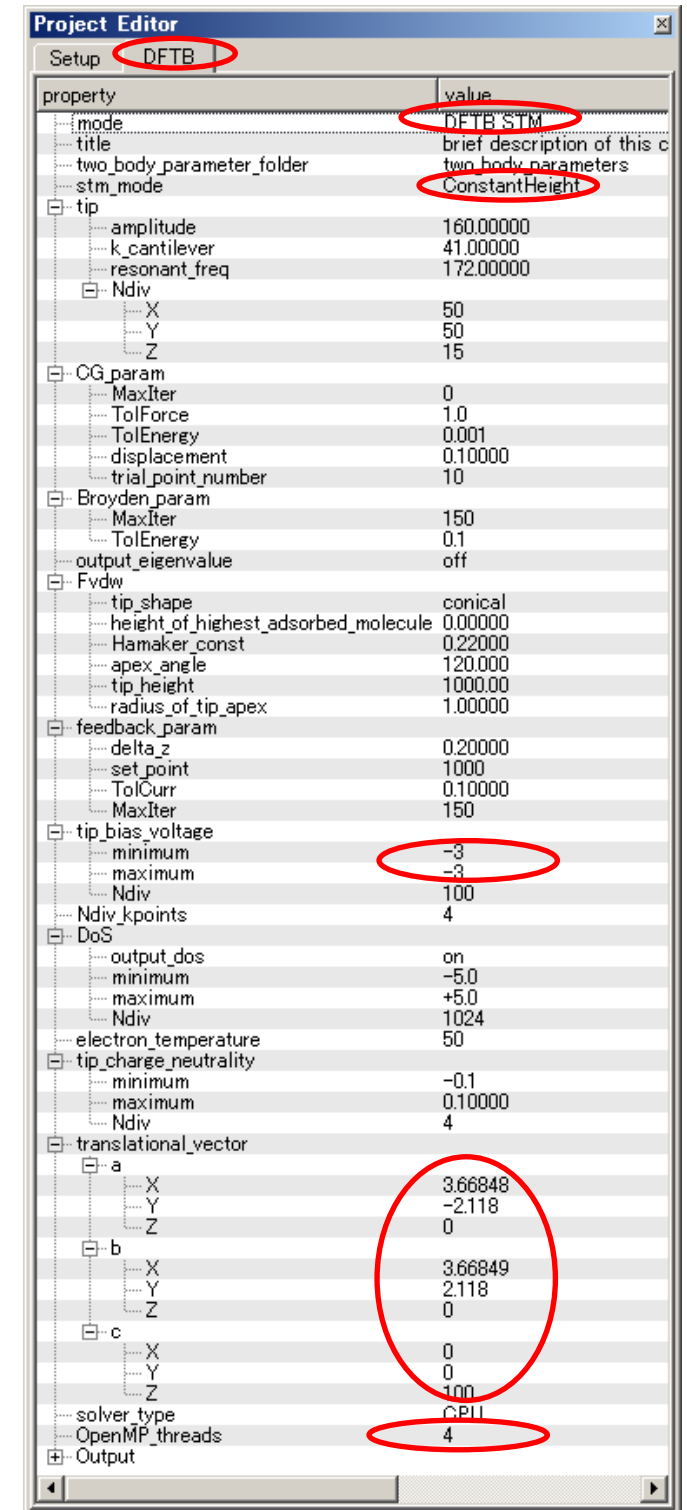
並列化処理設定を行います(設定記載なしの場合1スレッド対応)。

(参考事例プロジェクトファイルでは1CPUとなっておりますが、4CPUとします)

(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)

各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください。

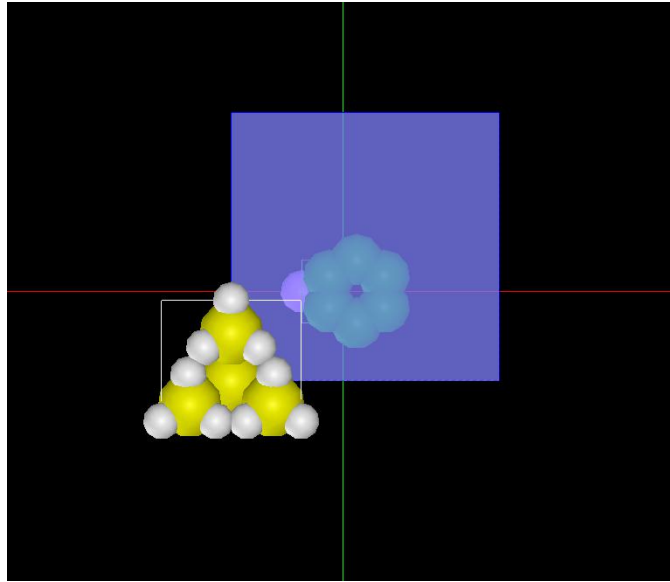
設定条件



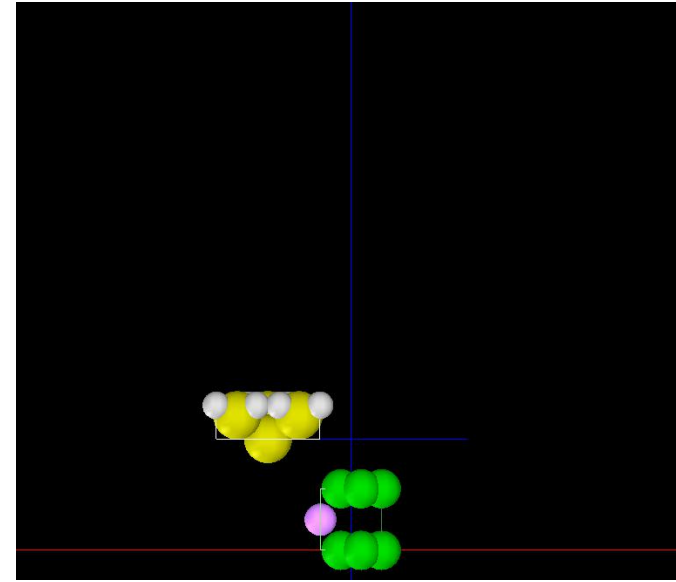
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

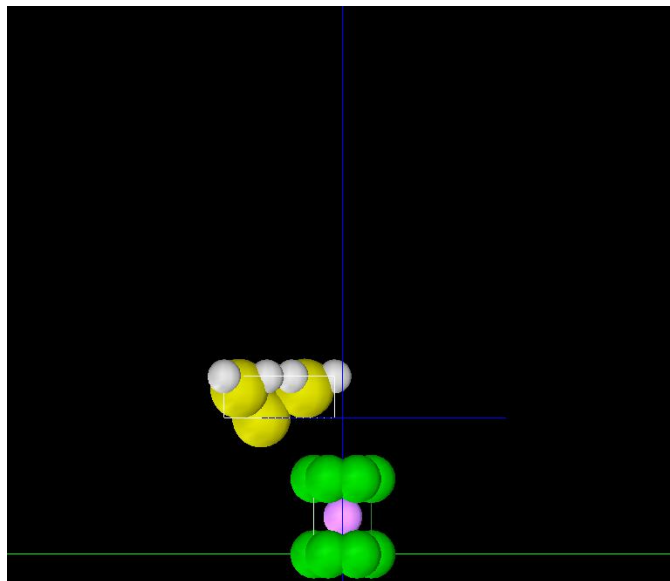
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアを TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



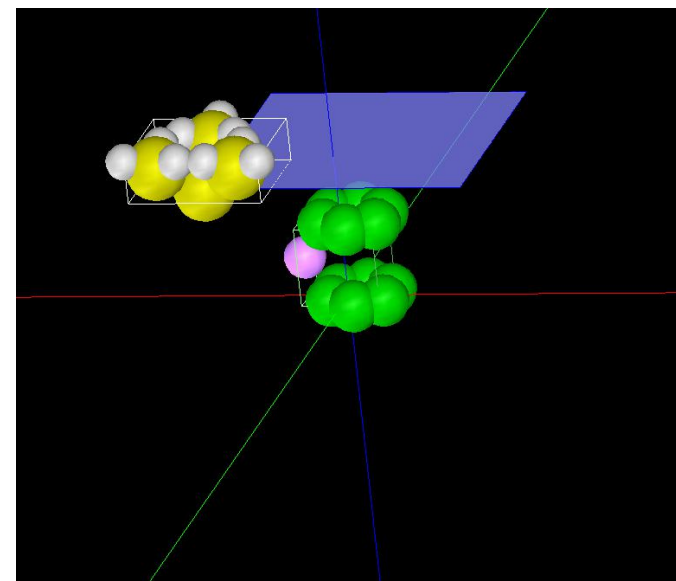
TOP



SIDE



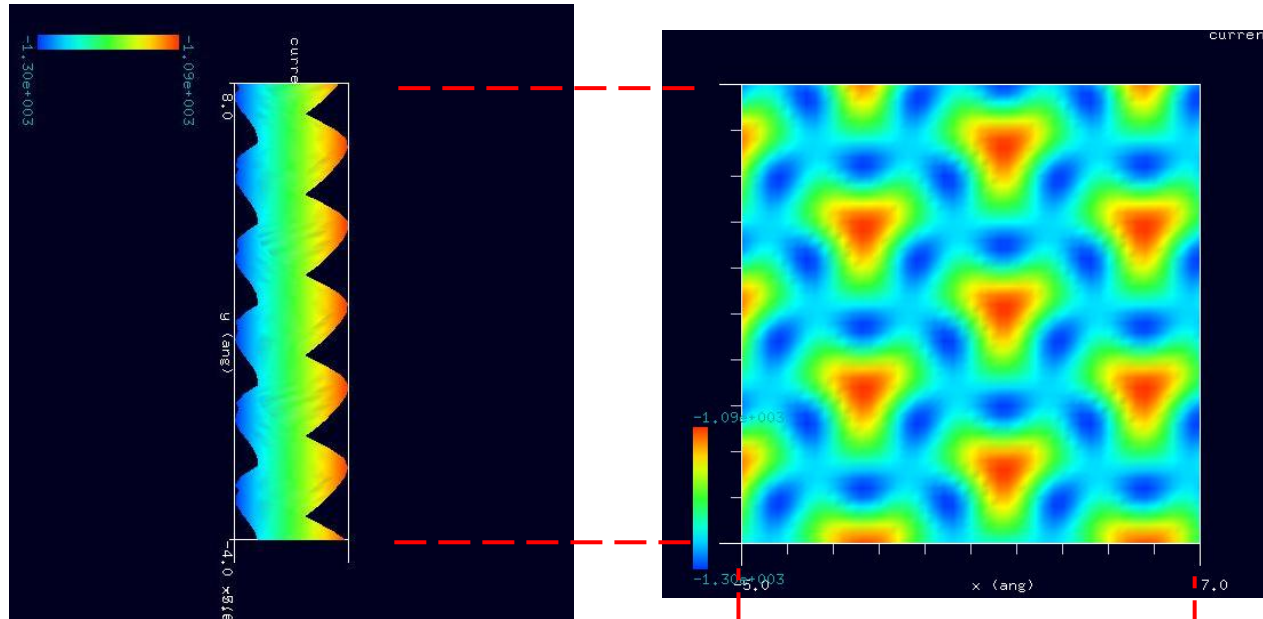
FRONT



俯瞰

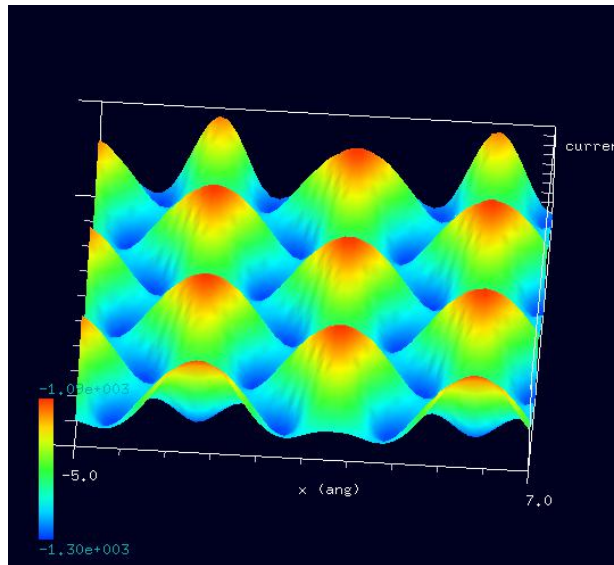
⑤ シミュレーション結果

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。

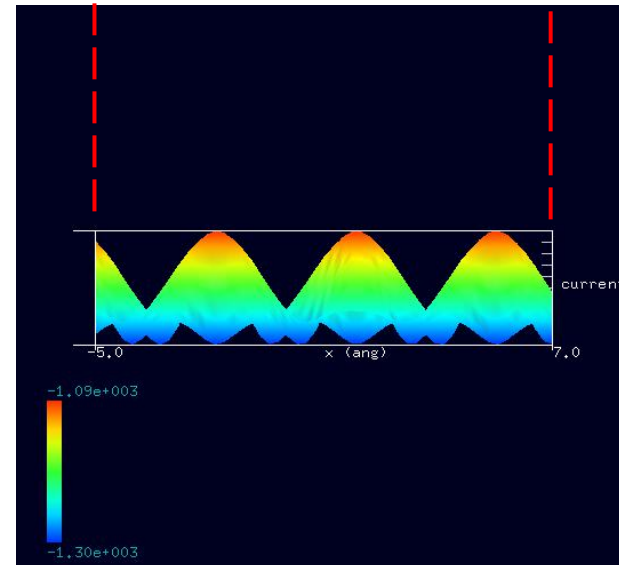


SIDE

TOP



俯瞰

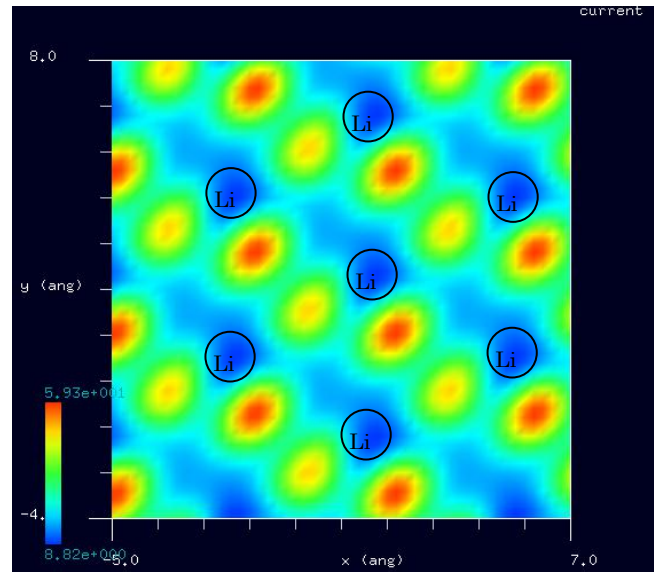


FRONT

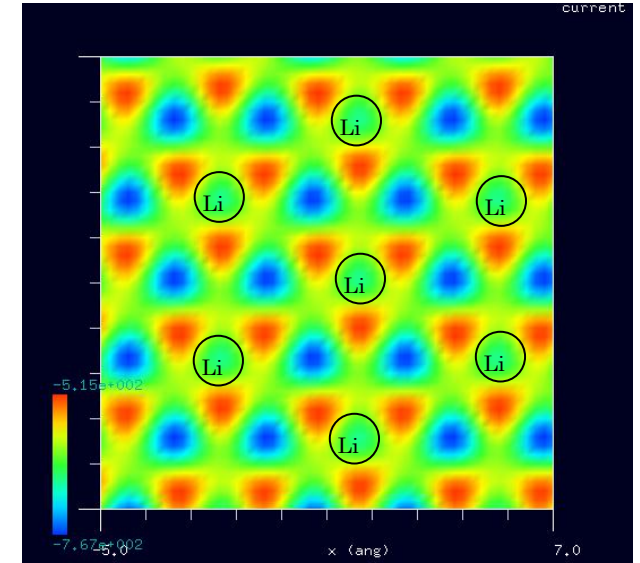
⑥シミュレーション結果の3D-ViewのRainbow色表示でのTOP画像比較
事例紹介ページ2と異なる表示で比較します。

TIPバイアス電圧の正負で、トンネル電流最大最小が逆転する事から、半導体の性質を持っていることがわかります。
事例紹介ページ2に記載がありますが、Liイオンが、際立って、シミュレート出来ることが判ります。

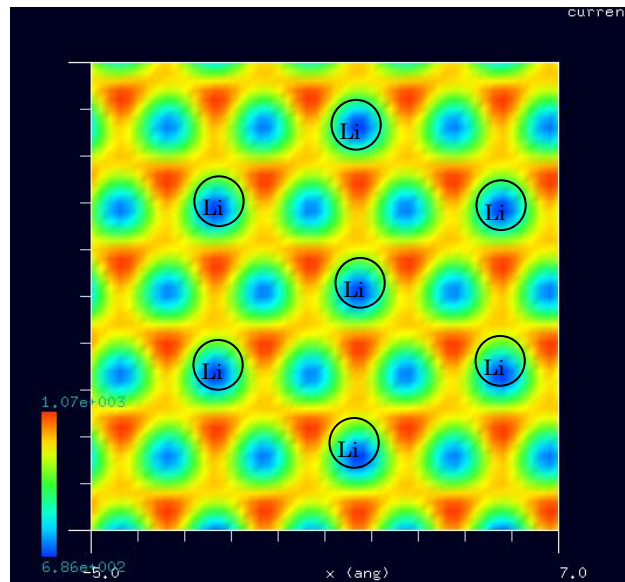
TIPバイアス電圧 0.9203V



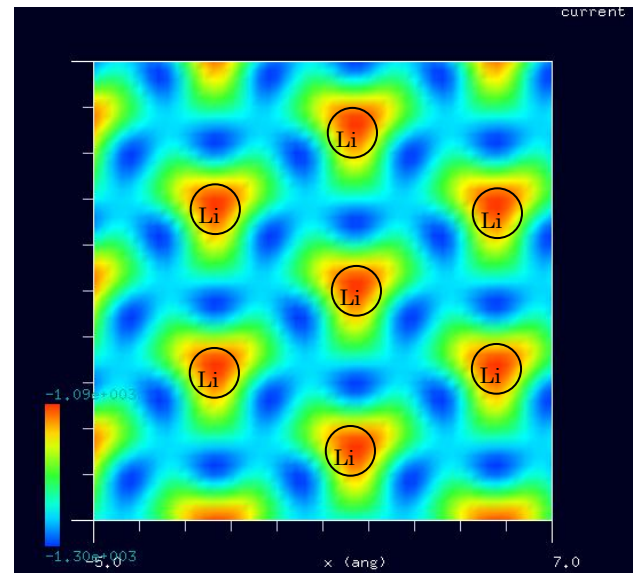
TIPバイアス電圧 -1.0V



TIPバイアス電圧 3.0V



TIPバイアス電圧 -3.0V



3・(量子論的SPM像シミュレータ) ConstCurrentSTM (コンスタントカレント、STMトポグラフィイ像)

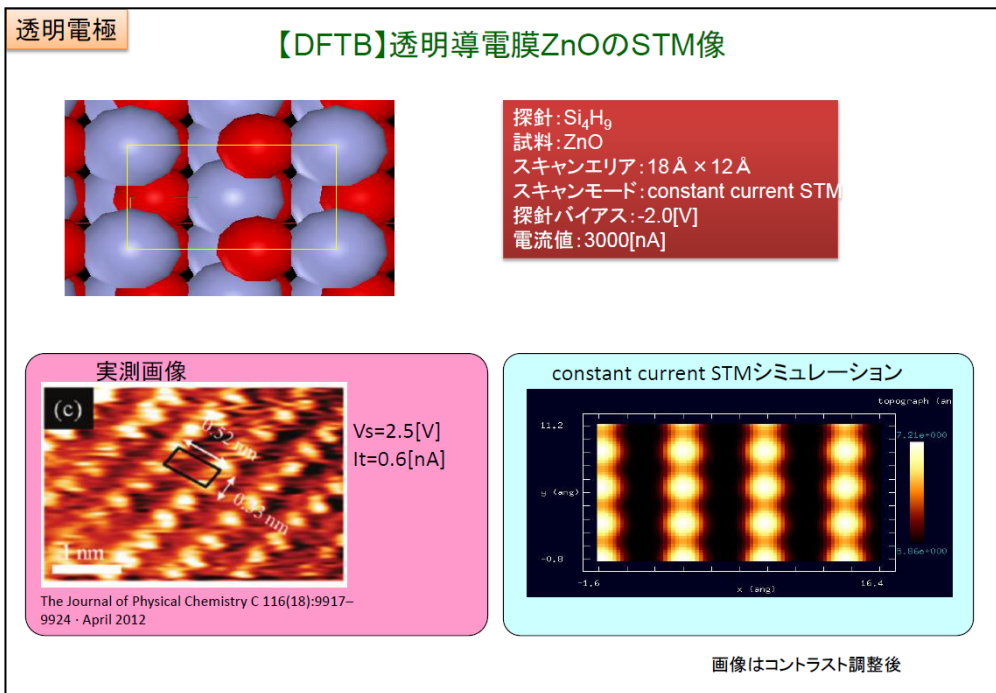
3-1●DFTB_STM・電流一定モードによる透明導電膜 ZnO の STM 像シミュレーション 計算事例⑤

計算モード識別番号：[DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_021]

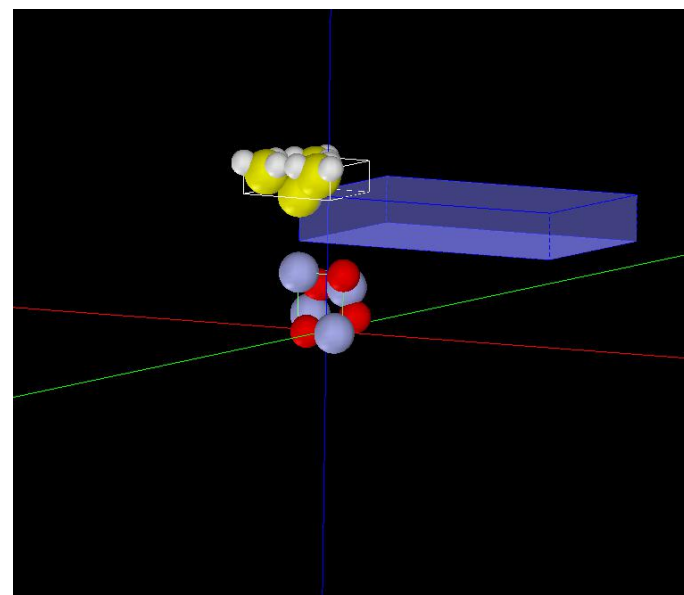
ソルバ・モード・計算例アドレス [\[https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstCurrentSTM/DFTB_ConstCurrentSTM.php\]](https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstCurrentSTM/DFTB_ConstCurrentSTM.php)

分類：DFTB_STM (電流一定 STM 画像シミュレーション)、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等

事例紹介ページを下左図に示します。



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、透明導電膜ZnOを、DFTB STMトポグラフィイ像でシミュレートします。

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のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください(「SampleProject」としてプログラムフォルダ内にもプロジェクト・ファイルが保存されています)。

本計算事例の入力条件について記載します。

操作全般についての説明は最初の計算事例① (P4, P6, P7) に記してあります。

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。

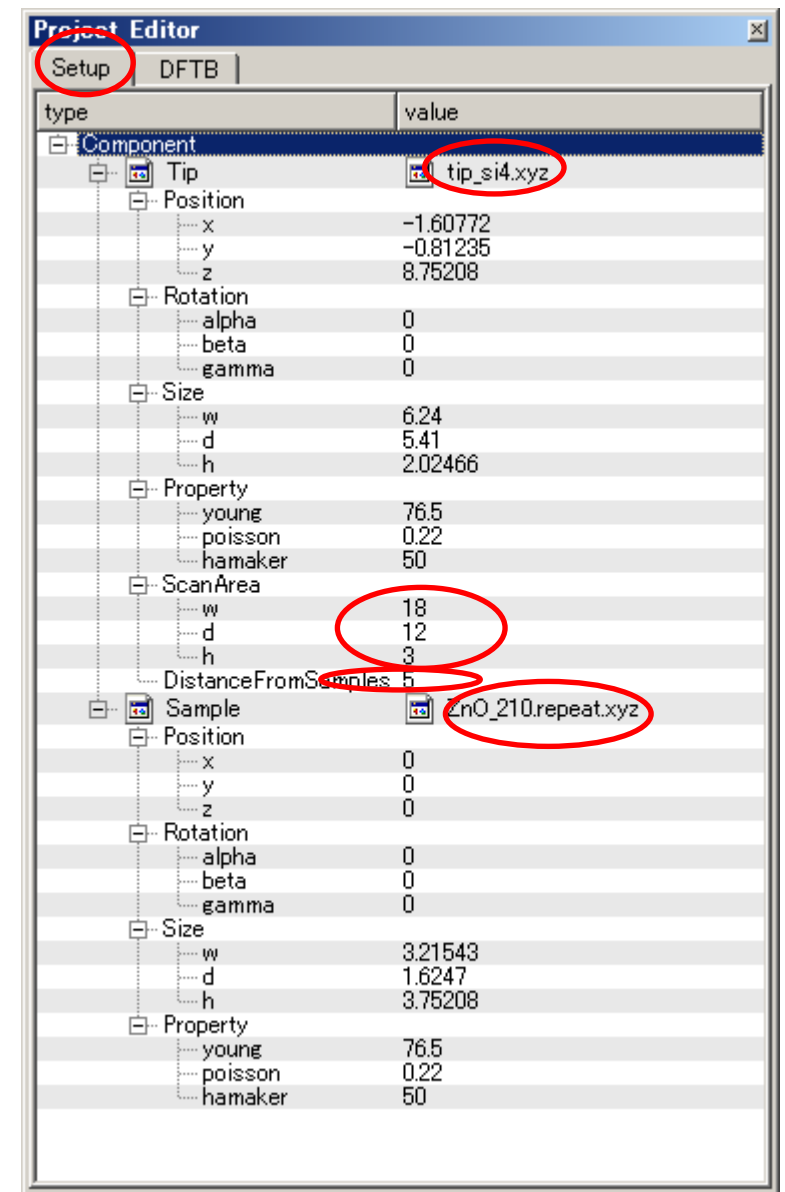
本計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W18\text{\AA} \times D12\text{\AA} \times H3.0\text{\AA}$ 」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 5.0\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)

[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、「ConstantCurrent」とします。

設定電流は、一定値 3 0 0 0 nAとします。

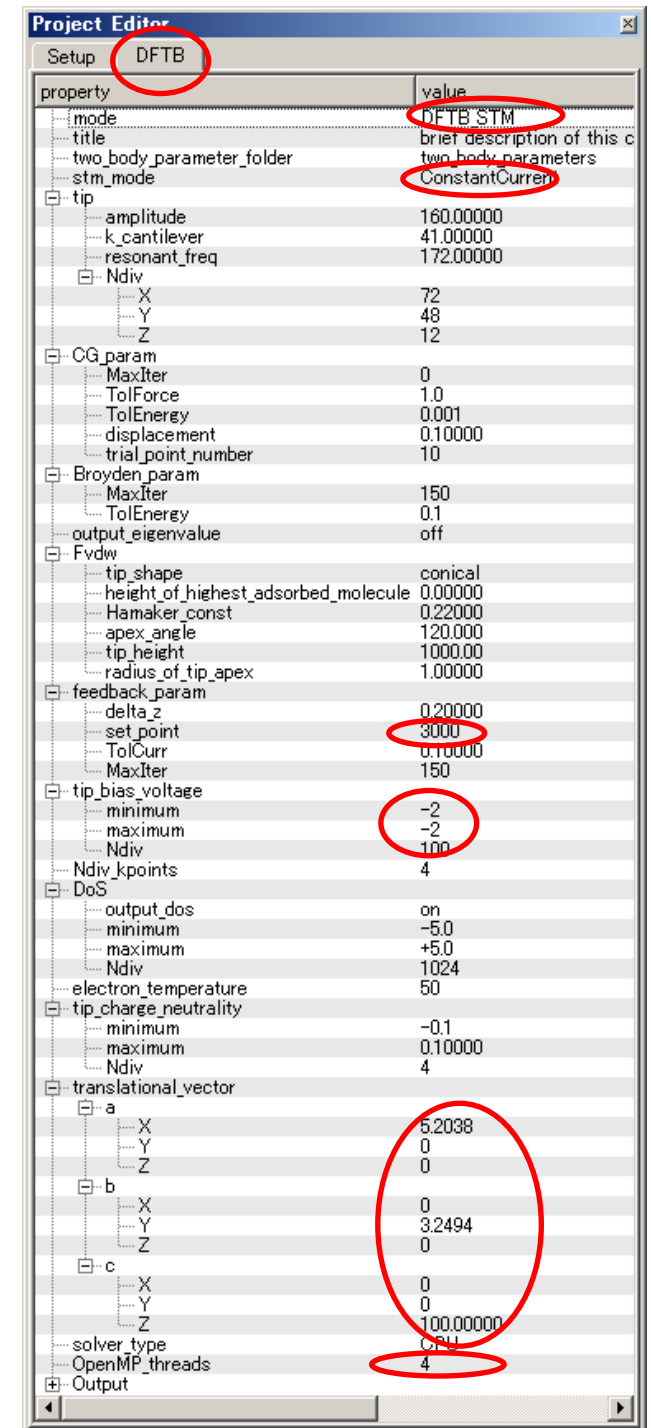
周期境界条件が考慮されます。

T I P バイアス電圧 -2.0V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)

各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください。

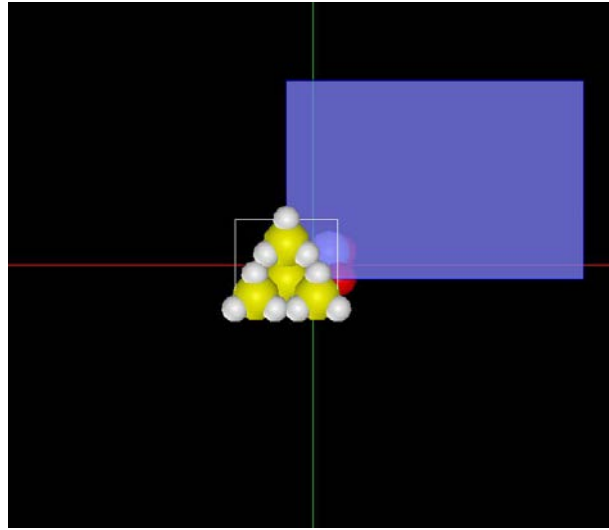


設定条件

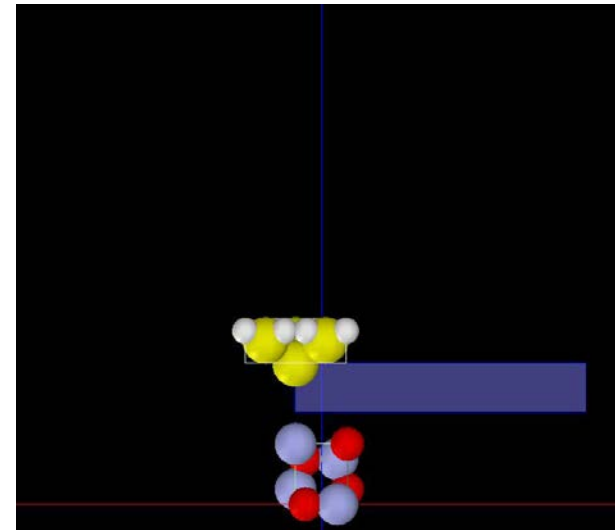
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

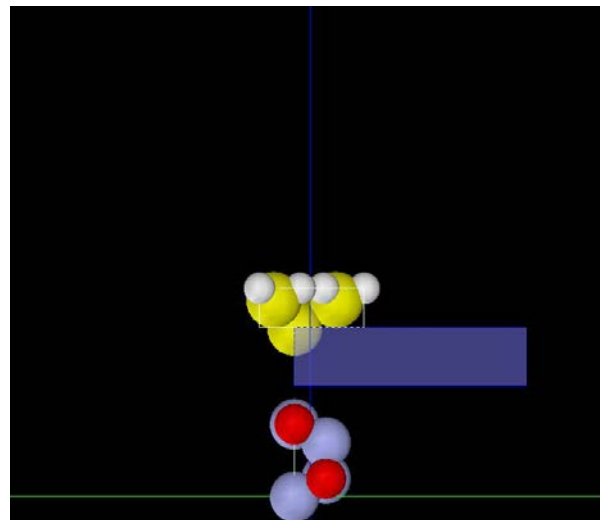
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



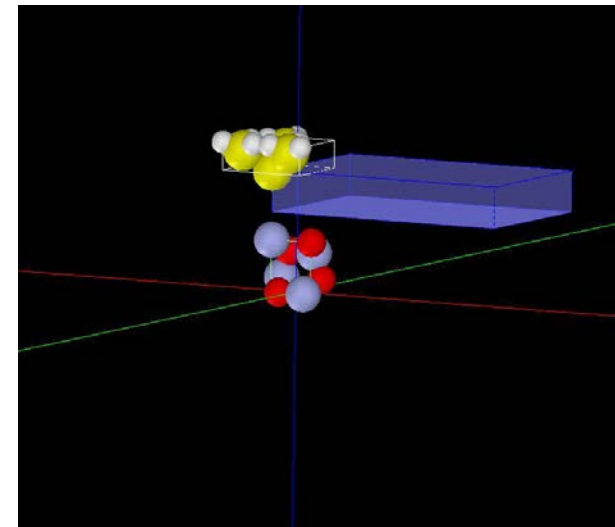
TOP



SIDE



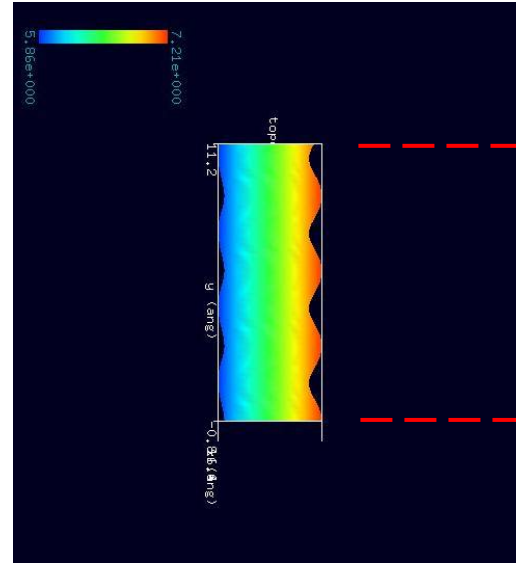
FRONT



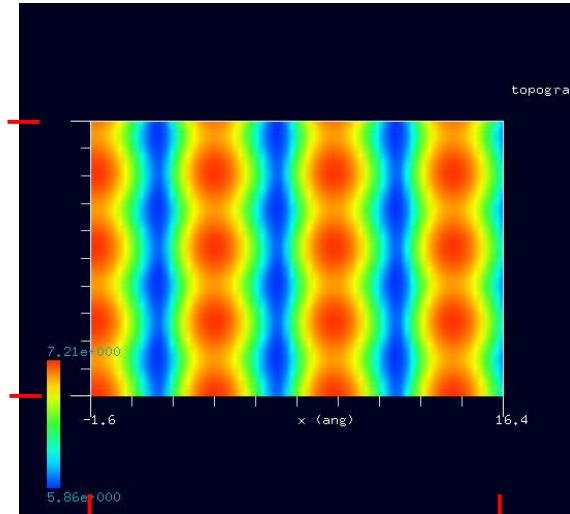
俯瞰

⑤ シミュレーション結果

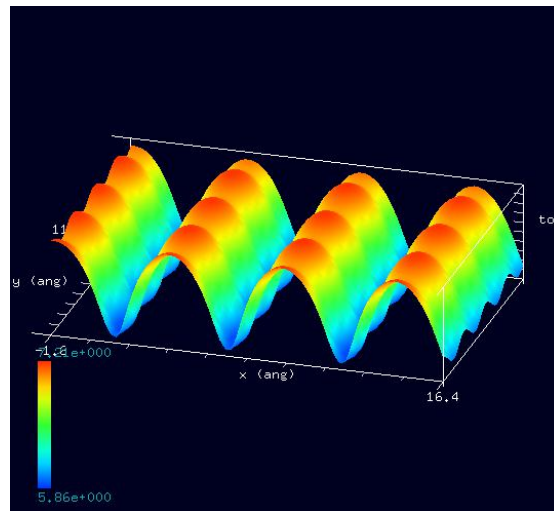
以下に、シミュレーション結果を3D-ViewのRainbow色表示で、TOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。参考としてGradation表示TOP画像を示します。



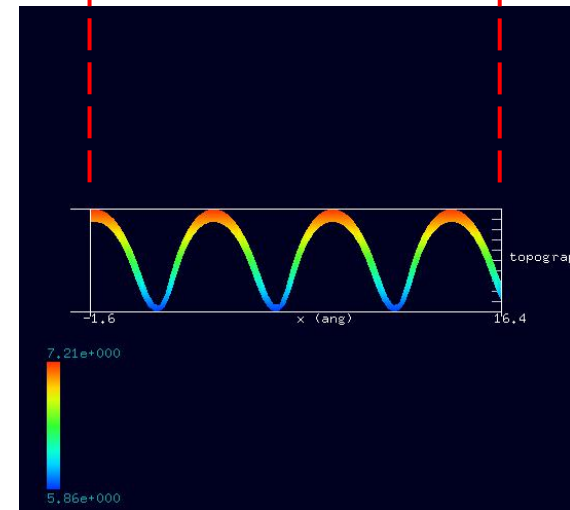
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

⑥酸化亜鉛の透明電極作用について

- 『酸化亜鉛の結晶はもともと可視光に対しては透明である（光子を吸収しない）けれども紫外光は吸収するという性質を持っています。白く見えるのは、「水晶の大きな結晶は透明だが細かく砕くと白く見える」ということと共通した現象であると理解できます。つまり、薄膜のような適当な形状であれば、本来の可視光に対する透明性を実現できます。加えて、原子の添加や加熱などの適当な処理によって、電子ドーピングが可能であり、透明なままで電気を通すことができるというわけです。』（Copyright c 2006 Kochi University of Technology Material Design Center ホームページより抜粋）

http://www.kochi-tech.ac.jp/zno/story/story_01.html

- 『ZnO は、バンドギャップがヘリウム温度で 3.436eV の直接遷移型ワイドギャップ 半導体である[1]。紅亜鉛鉱として天然に産出し、六方ウルツ鉱結晶構造を持つ。ZnO の結晶は可視光に対しては透明であるが、紫外光は吸収するという性質を持つ。そのため、透明であるが電気を通すことが可能である。現在、この透明で導電性を持つという特性より、液晶ディスプレイなどに使われる透明電極の材料や、半導体でもあるため、発光デバイスなどへの応用が期待されている。また、ZnO の透明導電膜は、スズ添加酸化インジウム (ITO) の代替物としてきわめて有望とされている。』（「ZnO 薄膜中の励起子発光の温度依存性」 堀本真弘 様、中田博保 様 大阪教育大学教養学科 より抜粋）

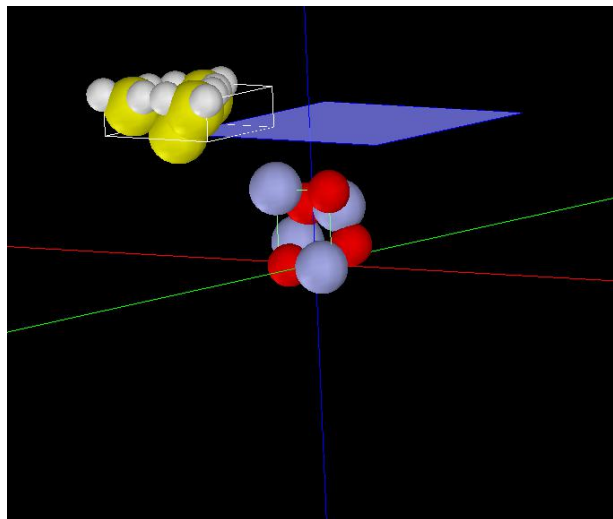
<http://phys.ipps.kumamoto-u.ac.jp/HIKARI/2012/ProgHTML/pdf/2012-066.pdf>

[1] D.C.Reynolds. et al, Phys.Rev. 143, 512 (1966)

3-2●DFTB_STM・高さ一定モードによる透明導電膜 ZnO の STM 像シミュレーション (c) 探針バイアス +2.0 V 計算事例⑥

ソルバ・モード・計算例アドレス [[project_file_DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_ZnO2_2V](#)]

分類：DFTB_STM（高さ一定STM画像シミュレーション）、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等



試料モデルとスキャンエリアの俯瞰図

① 概要

本参考事例は、透明導電膜ZnOを、探針バイアス電圧 +2.0 V、DFTB高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。

探針バイアス電圧 +2.0 の本参考事例と探針バイアス電圧 -2.0 の次の事例のシミュレーション結果を比較する事により、透明導電膜 ZnO が半導体としての性質を持つかどうかを、検証します。

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のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください。

本計算事例の入力条件について記載します。

操作全般についての説明は最初の計算事例①（P4, P6, P7）に記してあります。

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。

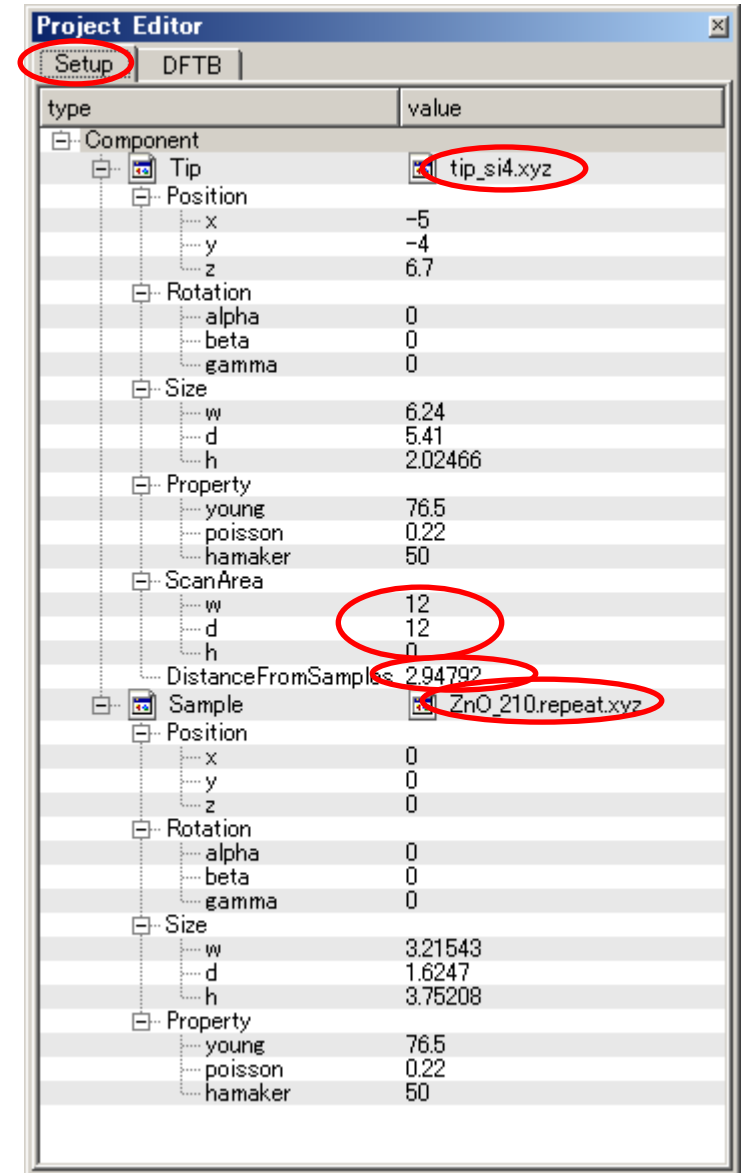
本計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W12\text{\AA} \times D12\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針は登録済みデータ「Si4H9」を用います。

探針試料間距離は約 3.0\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)



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

[Project Editor]の[Setup]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。

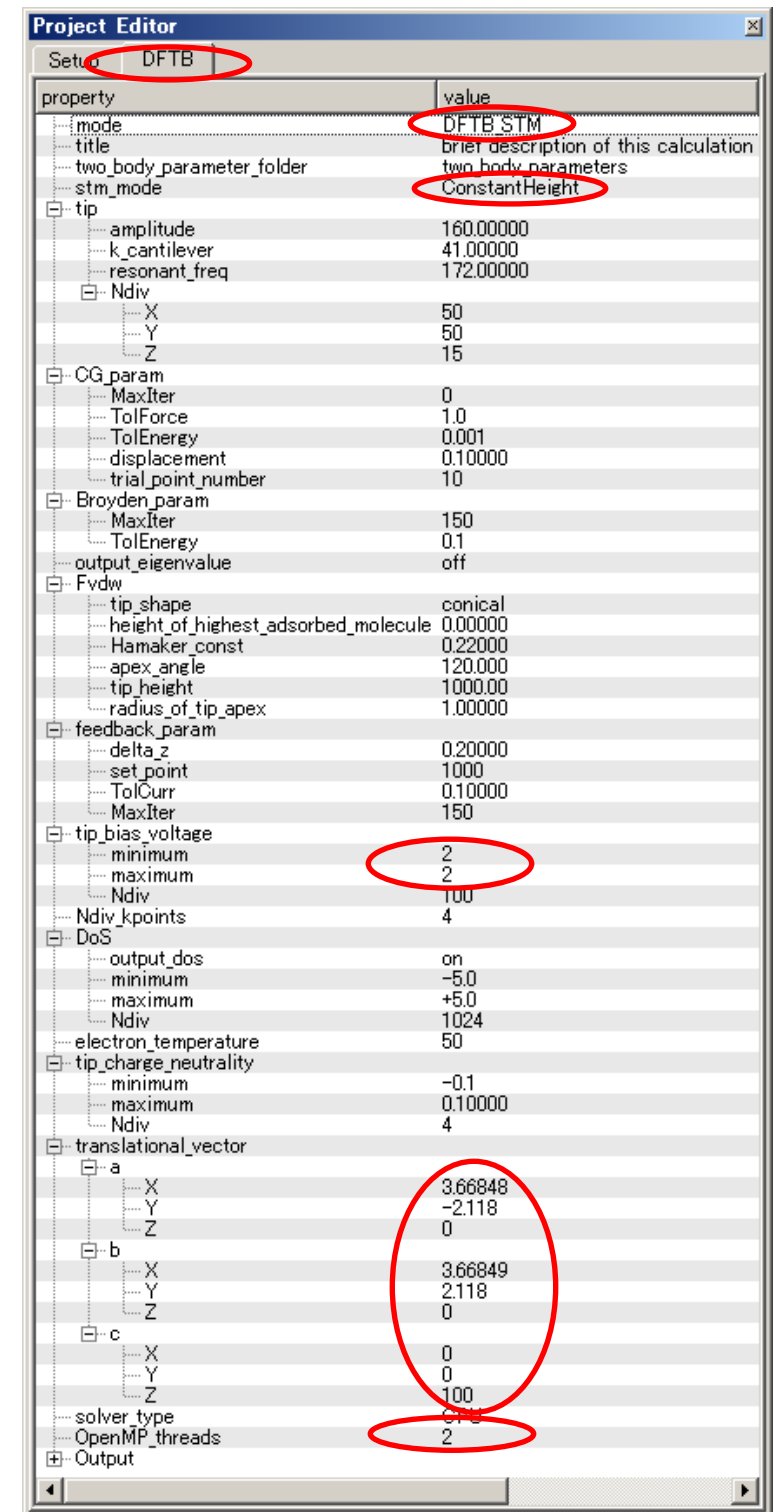
周期境界条件を考慮します(但し、単位格子ベクトル $c = (0, 0, 100)$ とし、 x - y 方向のみ有効です)。

TIPバイアス電圧を+2.0V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(2スレッド対応)。

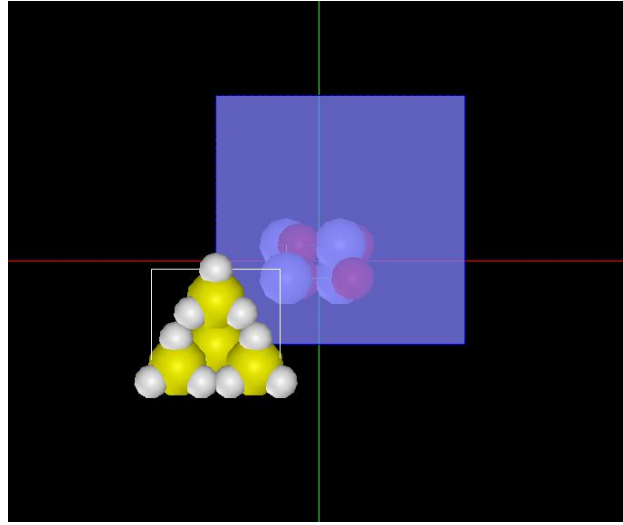
(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください。

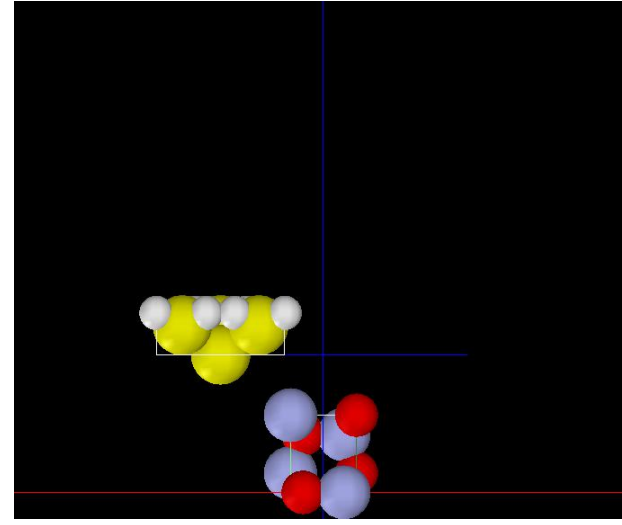


④ 探針、試料モデル

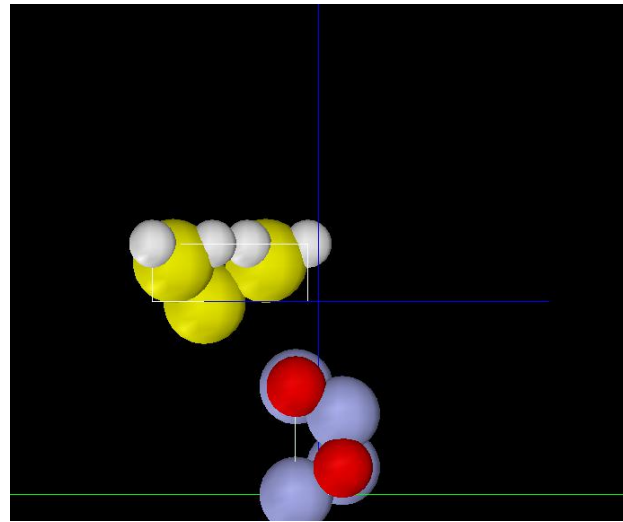
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



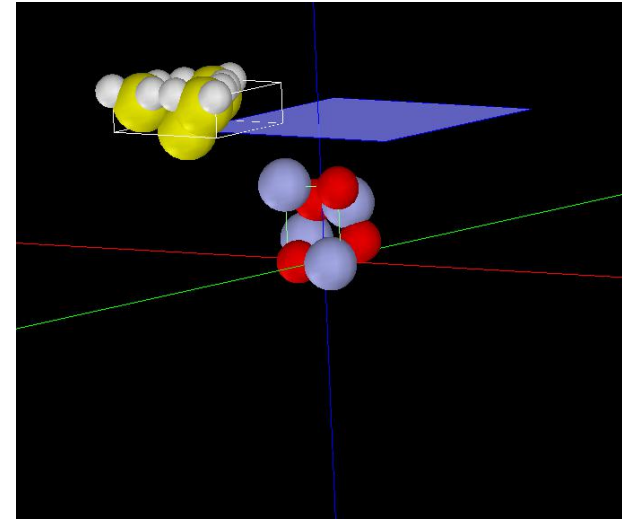
TOP



SIDE



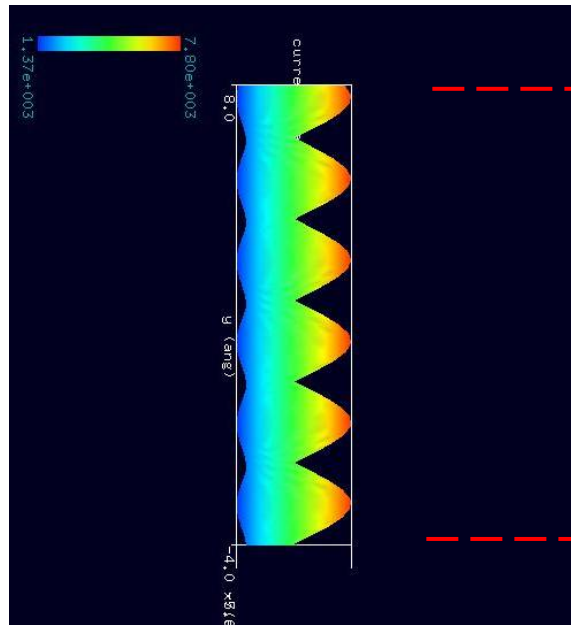
FRONT



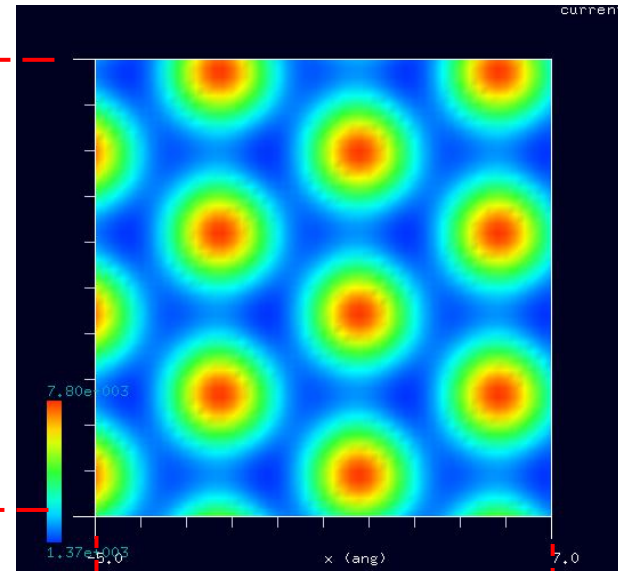
俯瞰

⑤ シミュレーション結果

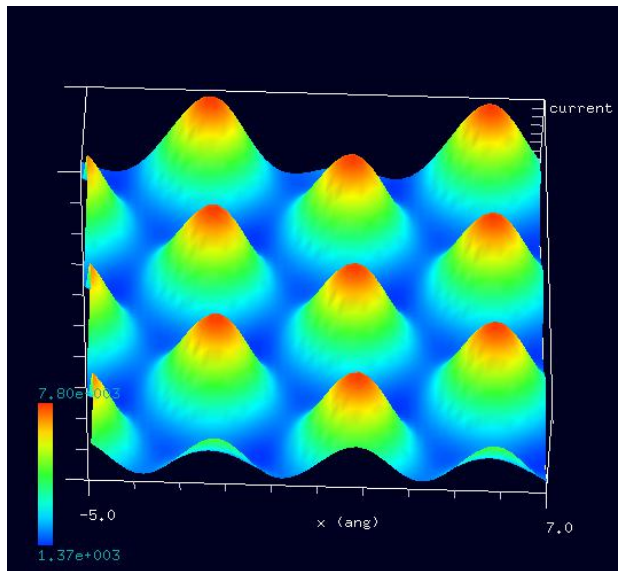
Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



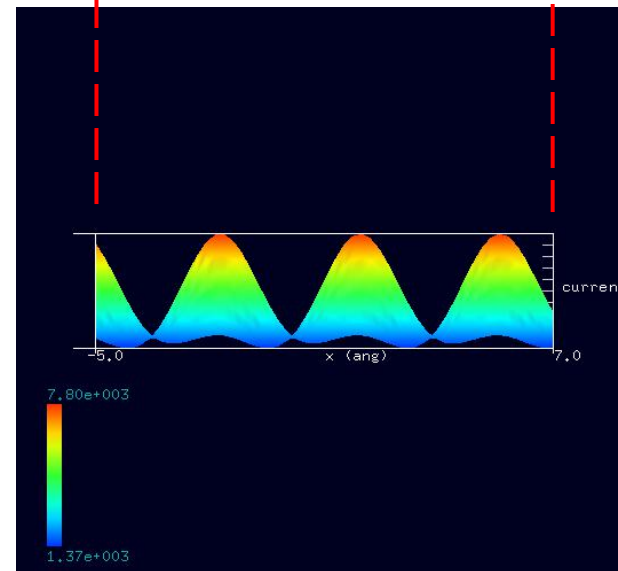
SIDE



TOP



俯瞰

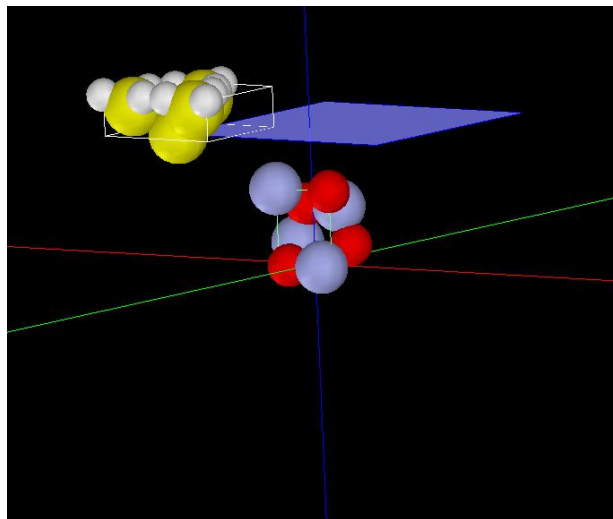


FRONT

3-3●DFTB_STM・高さ一定モードによる透明導電膜 ZnO の STM 像シミュレーション (c) 探針バイアス -2.0 V 計算事例⑦

ソルバ・モード・計算例アドレス [[project_file_DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_ZnO2_-2V](#)]

分類：DFTB_STM（高さ一定STM画像シミュレーション）、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等



試料モデルとスキャンエリアの俯瞰図

① 概要

本事例は、透明導電膜ZnOを、探針バイアス -2.0 V 、DFTB高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。

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のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください。

本計算事例の入力条件について記載します。

操作全般についての説明は最初の計算事例①（P4, P6, P7）に記してあります。

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。

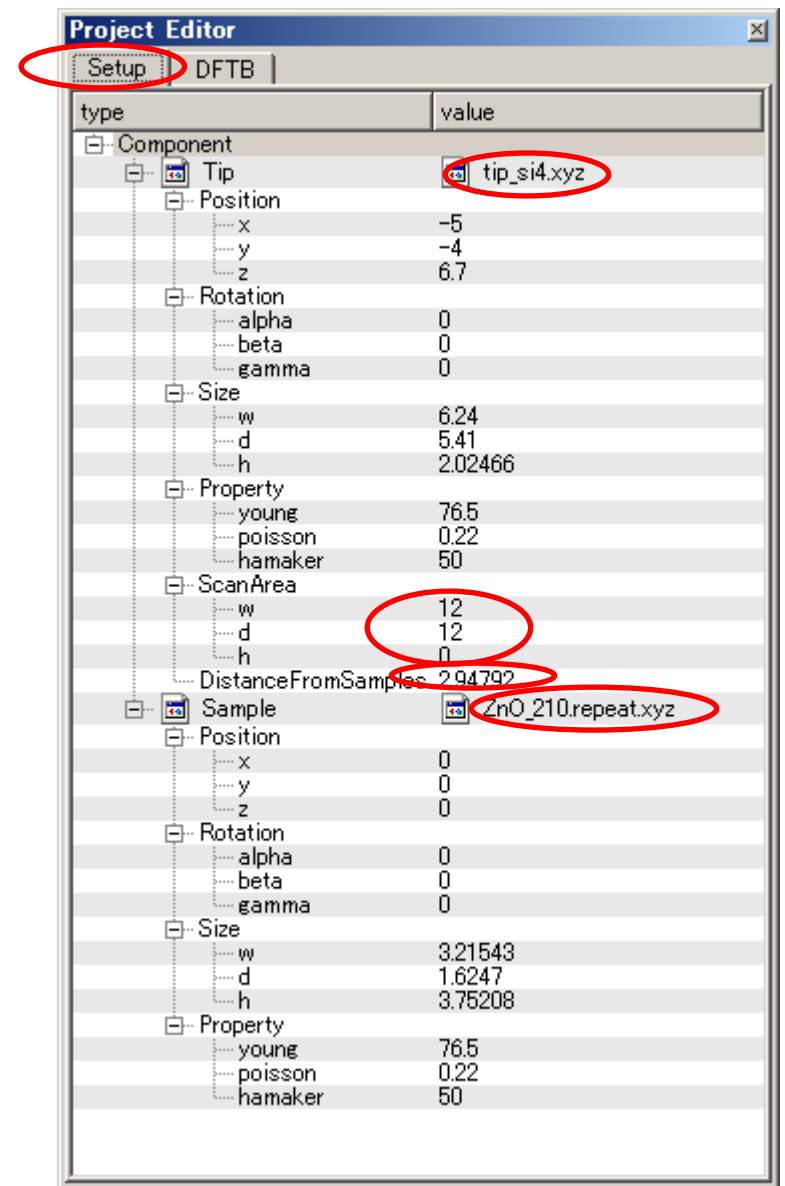
本計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W12\text{\AA} \times D12\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針は登録済みデータ「Si4H9」を用います。

探針試料間距離は約 3.0\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)



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

[Project Editor]の[Setup]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。

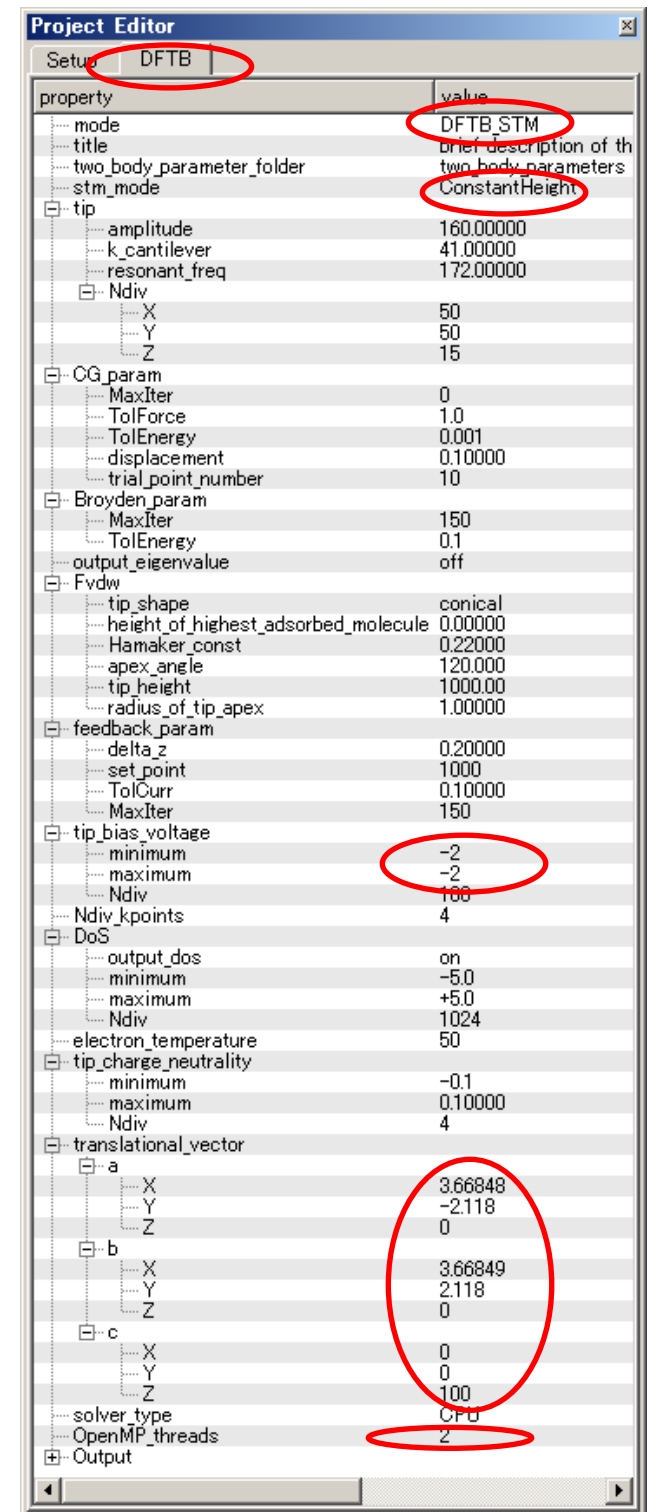
周期境界条件を考慮します(但し、単位格子ベクトル $c = (0, 0, 100)$ とし、 x - y 方向のみ有効です)。

TIPバイアス電圧を-2.0V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)。

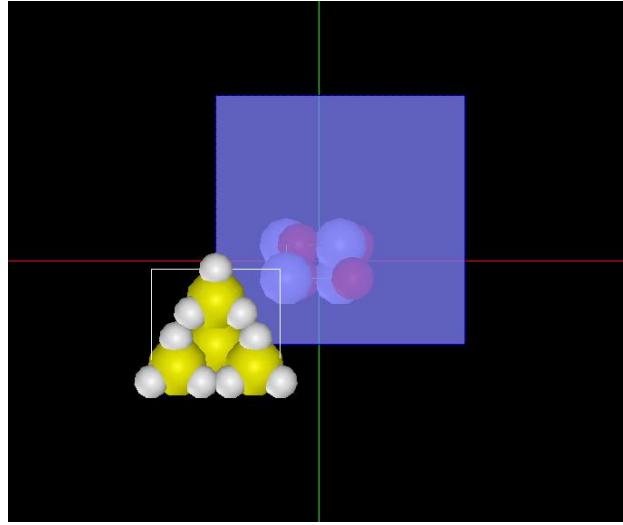
(探針の設定方法等は、[チュートリアル・プロジェクトの編集](#)を参照して下さい)

各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください。

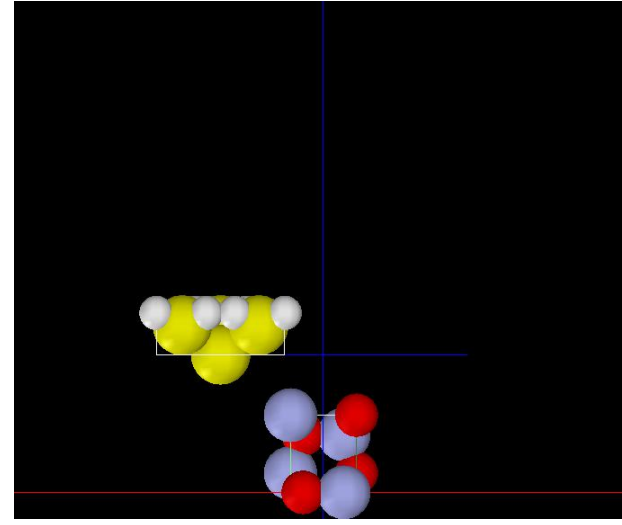


④ 探針、試料モデル

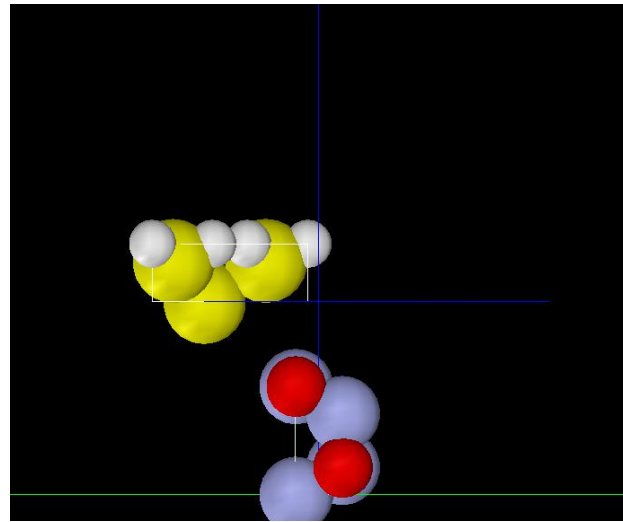
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



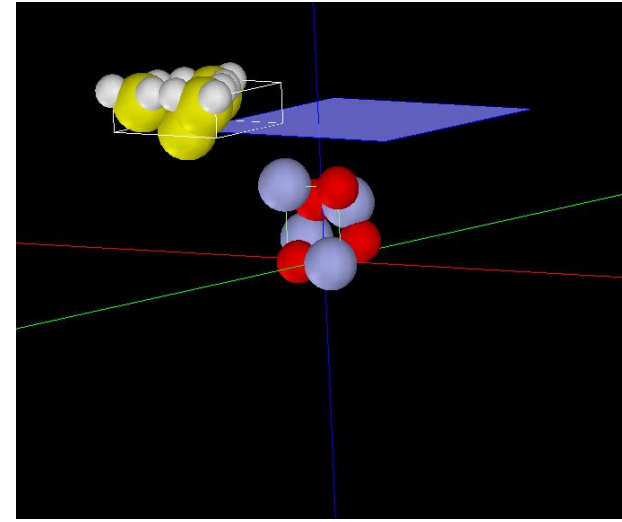
TOP



SIDE



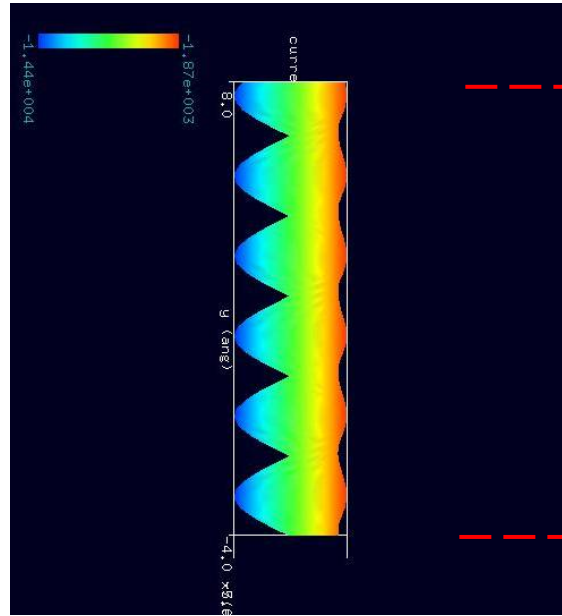
FRONT



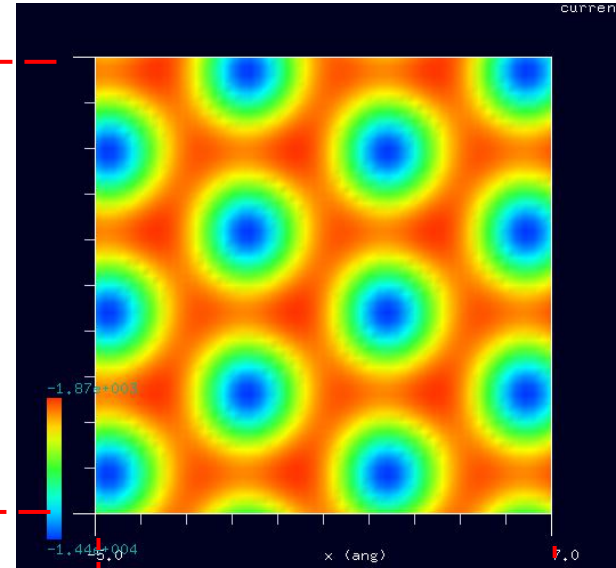
俯瞰

⑤ シミュレーション結果

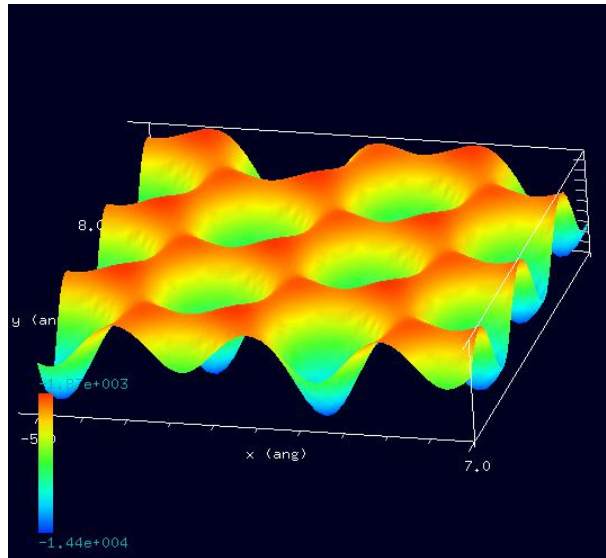
Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



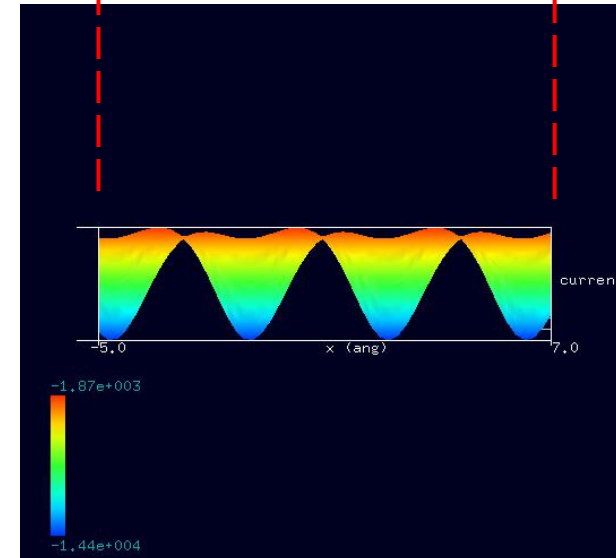
SIDE



TOP



俯瞰

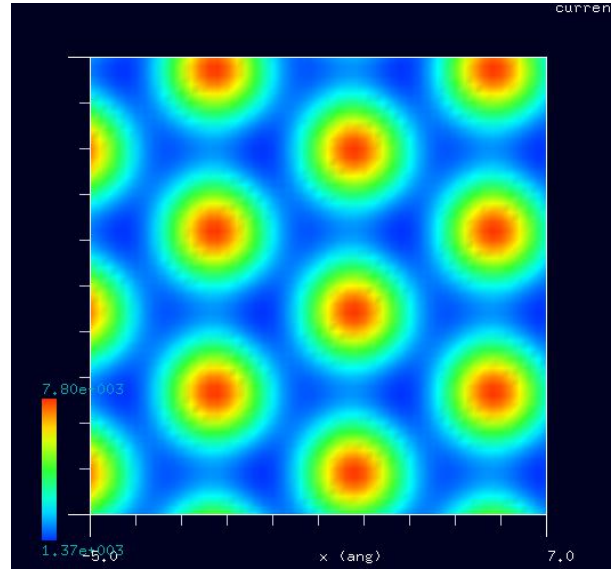


FRONT

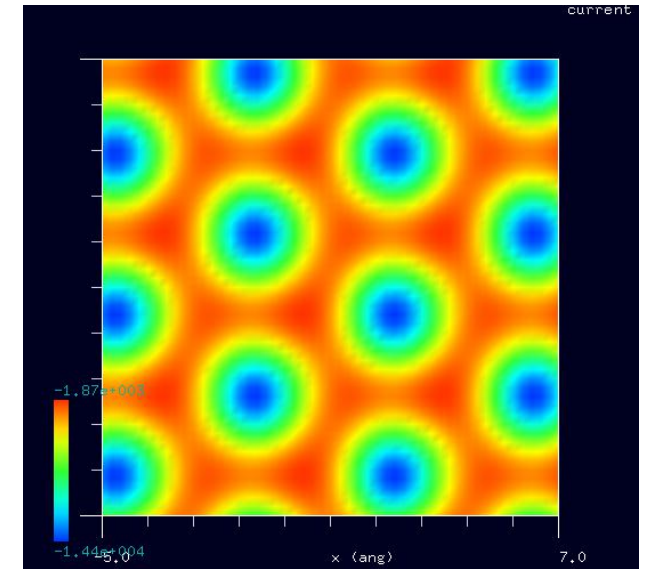
⑥シミュレーション結果の3D-ViewのRainbow色表示でのTOP画像比較

TIPバイアス電圧の正負で、トンネル電流最大最小が逆転する事から、半導体の性質を持っていることがわかります。

TIPバイアス電圧 2.0V



TIPバイアス電圧 -2.0V



3-4 ● DFTB_STS 透明導電膜 ZnO のトンネル電流分光 計算事例⑧

分類：DFTB_STS (トンネル電流分光シミュレーション)、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等

① 概要

本参考事例は、透明導電膜ZnOを、DFTBトンネル電流分光でシミュレートします。

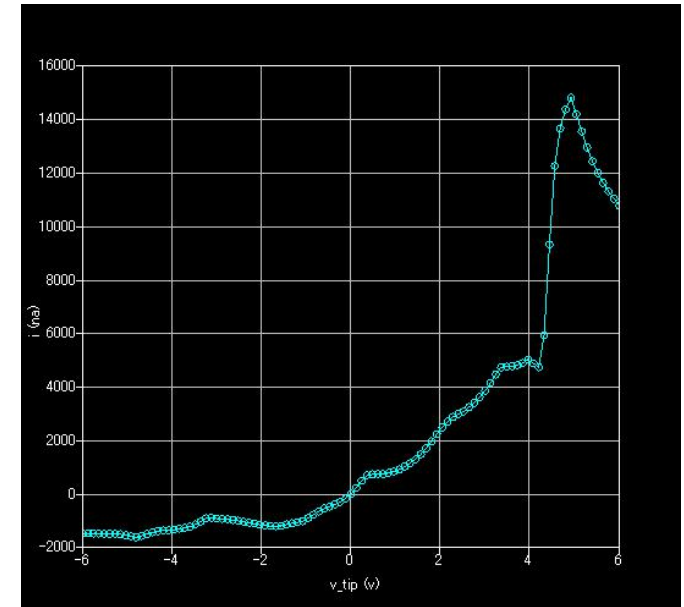
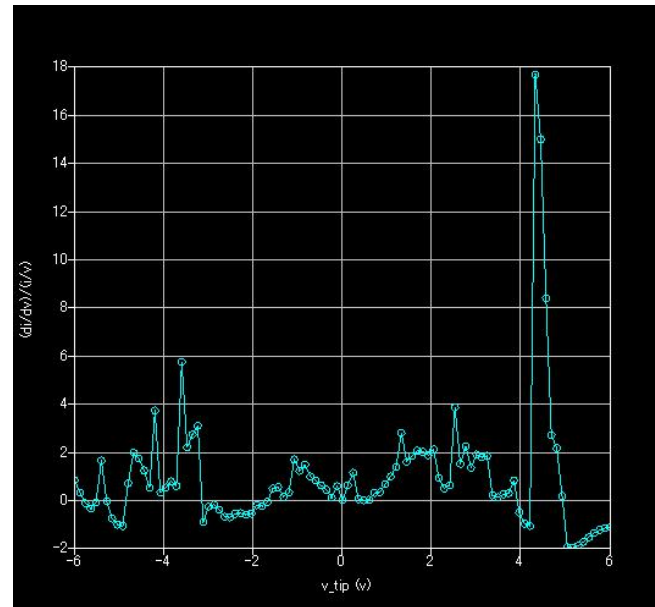
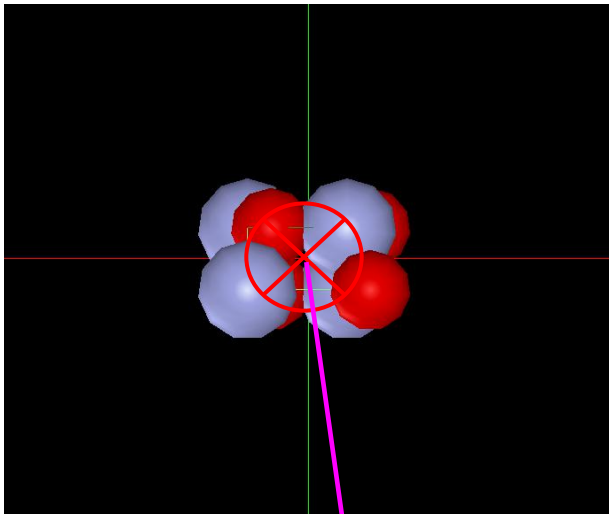
STM によるトンネル電流像は表面原子の位置ではなく、表面の電子の局所的な状態密度(LDOS, local density of states)に敏感に反応します。そのことを利用し、探針の位置を固定してバイアス電圧を変化させて電圧・電流曲線を求め、その微分から探針直下の局所状態密度を求められます。これが、STS(走査トンネル分光、scanning tunnelingspectroscopy)です。

操作全般についての説明は最初の計算事例① (P4, P6, P7) に記してあります。

シミュレーション計算・探針ポイント

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

バンドギャップの存在を再現していることがわかります。ただし、密度汎関数に基づいているので、ギャップを過小評価しています。

探針ポイント：計算モード識別番号：[\[project_file_DFTB_STS_Inorganic_ZnO2_execute\]](#)

上記計算モード識別番号リンクより、AASホームページにアクセスし、計算モード識別番号のプロジェクト・ファイルをダウンロードし、解凍の上、SPMシミュレータを起動して、読み込んでください。

4・(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)

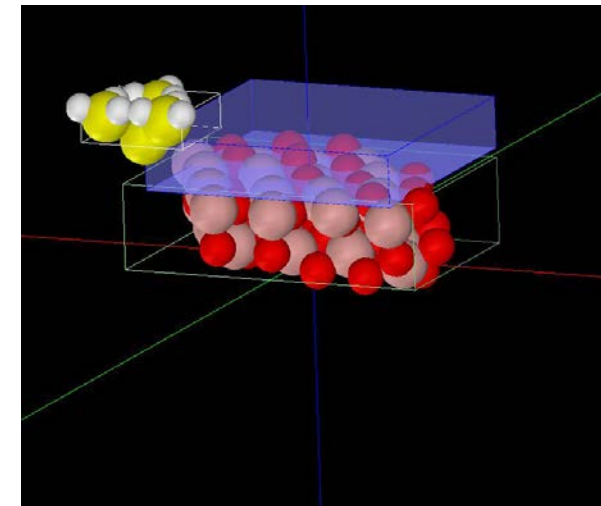
4-1●DFTB_STM・電流一定モードによる透明導電膜ITO (Indium Tin Oxide) In₂O₃(001)表面のSTM像シミュレーション 計算事例⑨

計算モード識別番号: [DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_022a]

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_STM (電流一定STM画像シミュレーション)、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等

事例紹介ページを下左図に示します。



シミュレーション・モデル俯瞰画像とスキャンエリア

① 概要

In₂O₃ (001) 表面のトポグラフィ像を計算しました。

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のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください (「SampleProject」 としてプログラムフォルダ内にもプロジェクト・ファイルが保存されています)。

本計算事例の入力条件について記載します。

操作全般についての説明は最初の計算事例① (P4, P6, P7) に記してあります。

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。

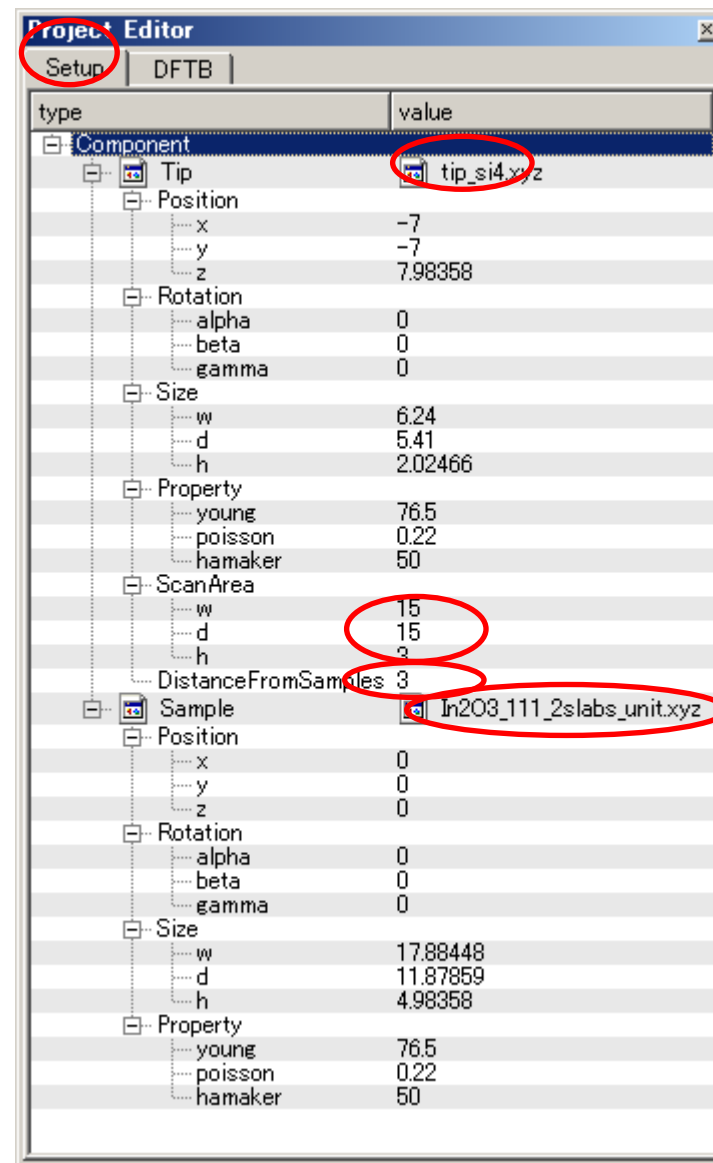
本計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W15\text{\AA} \times D15\text{\AA} \times H3.0\text{\AA}$ 」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。

(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)

[Project Editor]の[Setup]タブをクリックします。

「mode」は、「DFTB_STM」とします。

「stm_mode」は、「ConstantCurrent」とします。

周期境界条件は考慮されます。

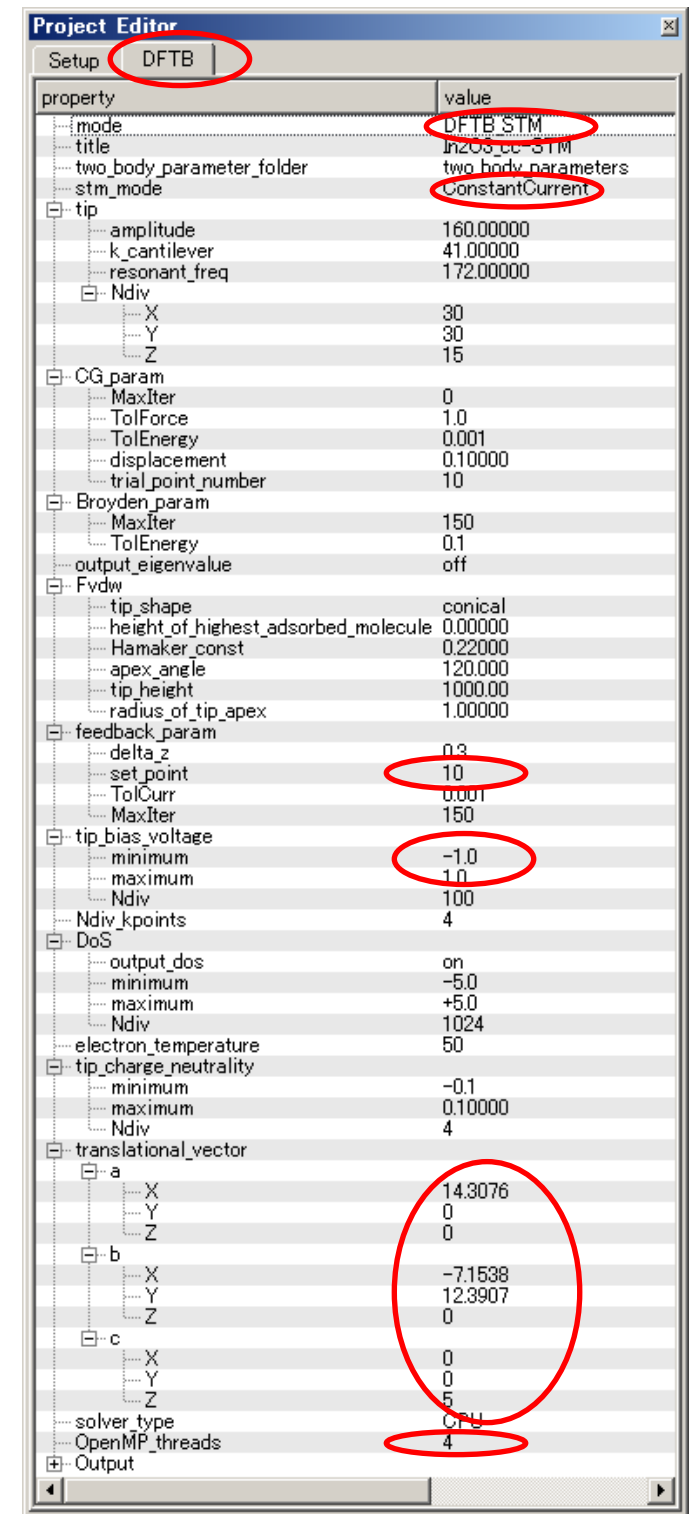
電流のセットポイント (set_point) を **10 nA**とします。

TIPバイアス電圧 minimum設定**-1.0V**, maximum設定**+1.0V**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)

各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください。

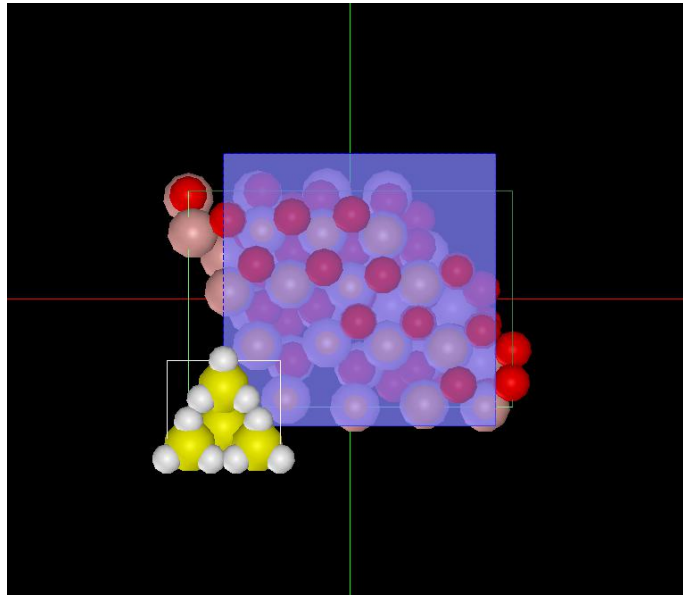


設定条件

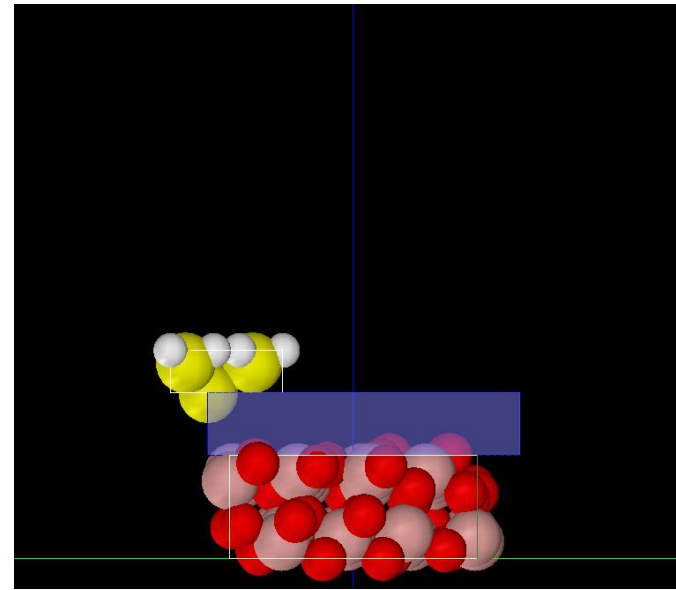
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

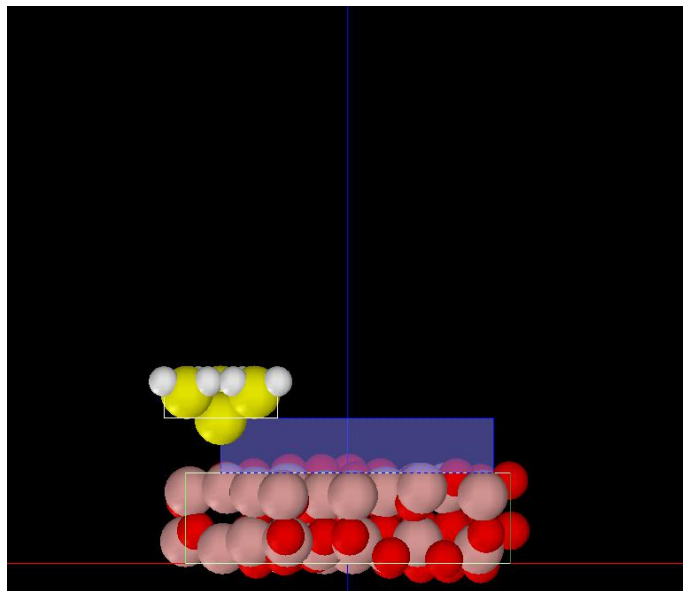
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



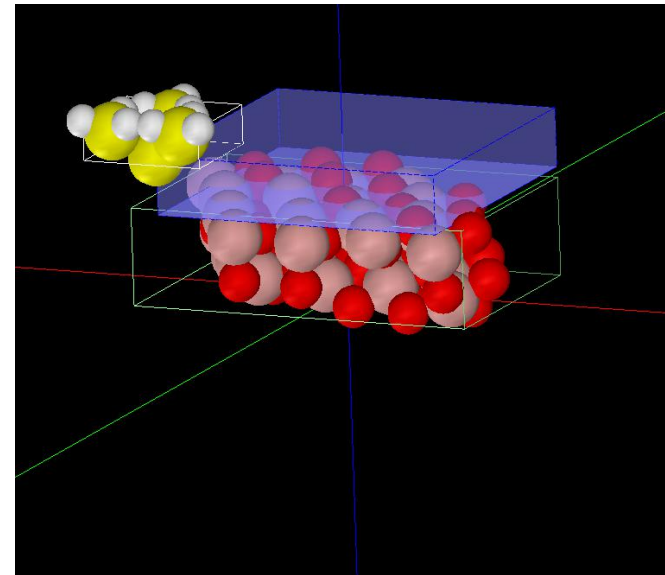
TOP



SIDE



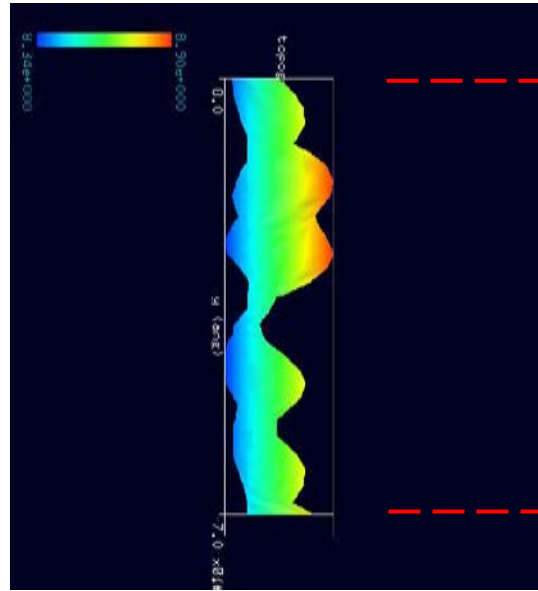
FRONT



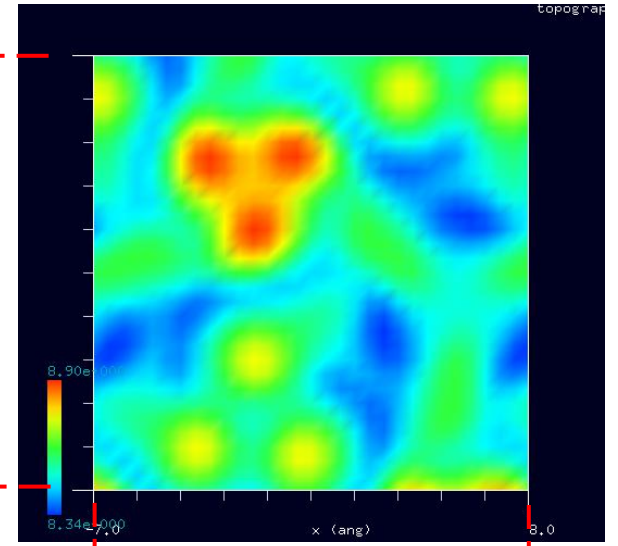
俯瞰

⑤ シミュレーション結果

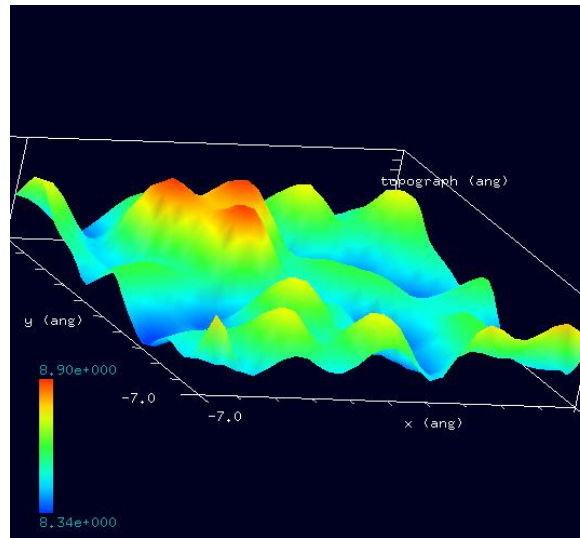
Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



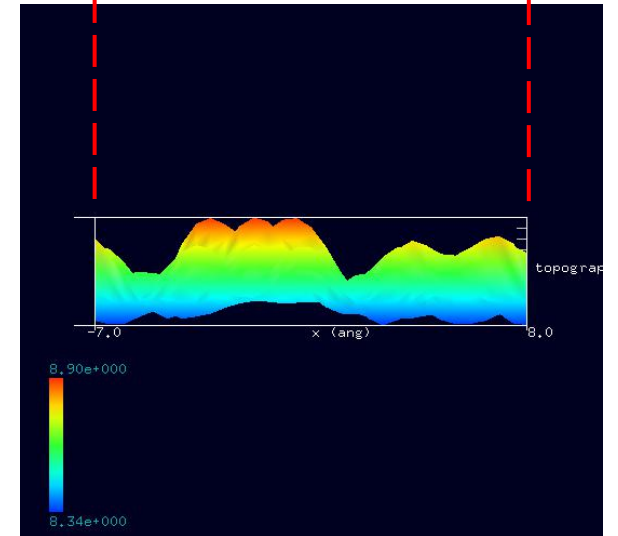
SIDE



TOP



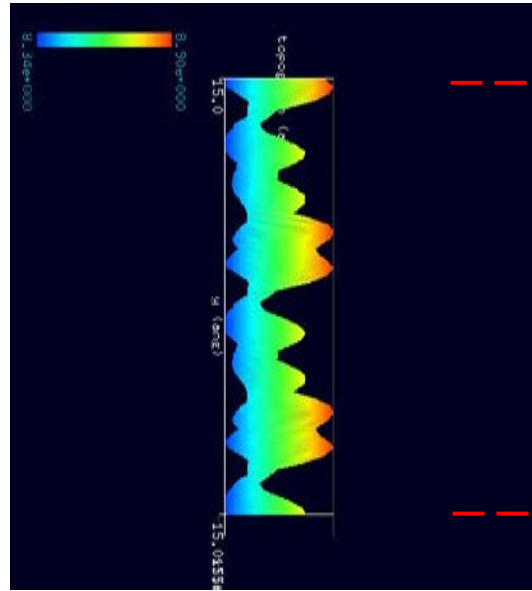
俯瞰



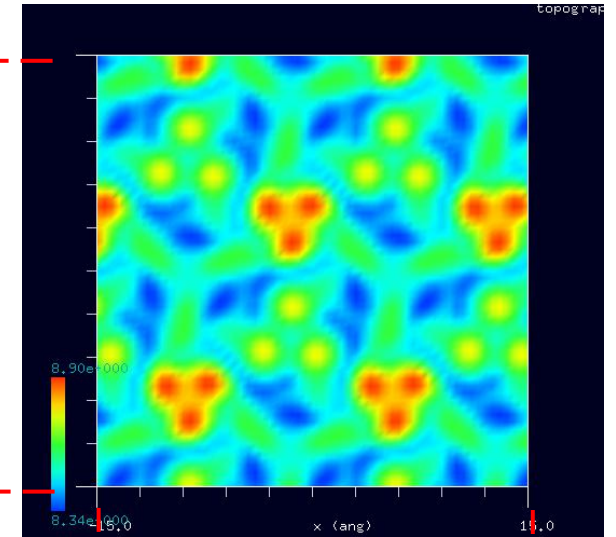
FRONT

⑥ スキャンエリアを「 $W30\text{\AA} \times D30\text{\AA} \times H3.0\text{\AA}$ 」と設定した場合のシミュレーション結果。

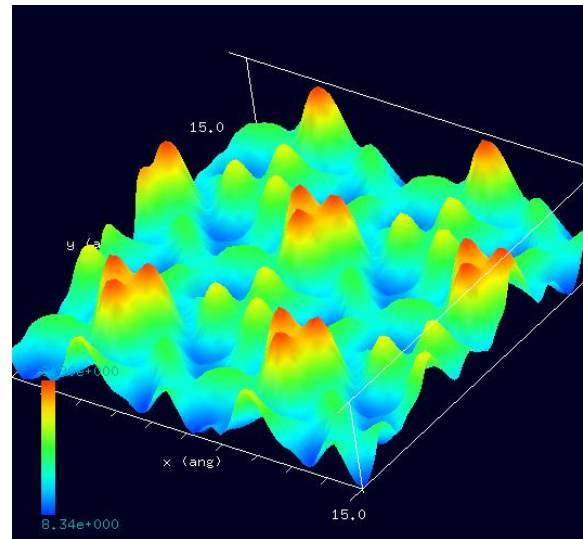
Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



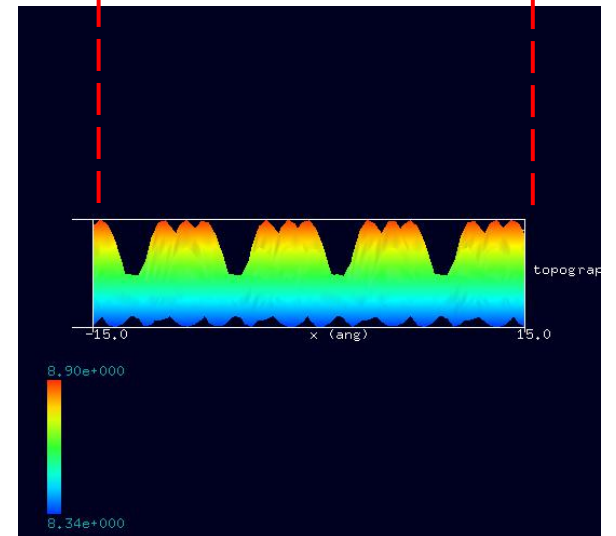
SIDE



TOP



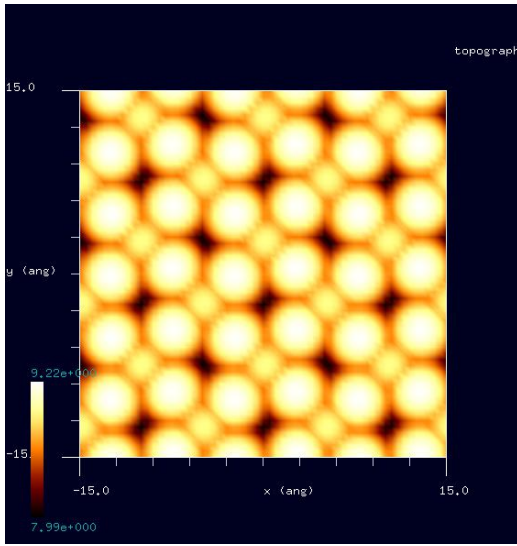
俯瞰



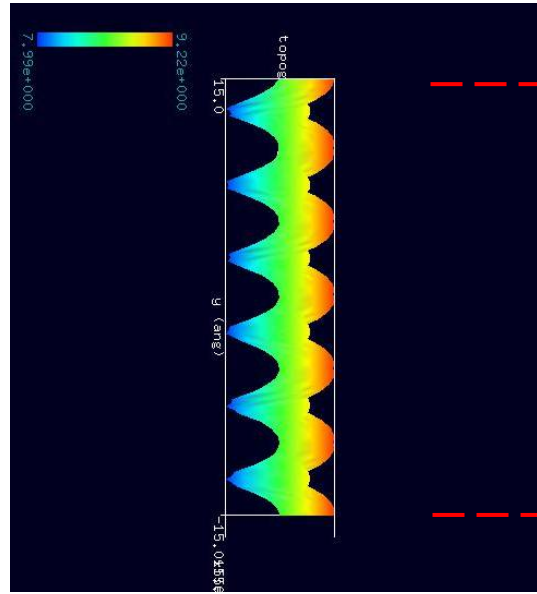
FRONT

⑥ スキャンエリアを「 $W30\text{\AA} \times D30\text{\AA} \times H3.0\text{\AA}$ 」、次の事例「DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_022b」の Sn を In とした場合のシミュレーション結果。Gradation 表示 TOP 画像と Rainbow 色表示モデルを SIDE、TOP、FRONT、俯瞰図として示します。

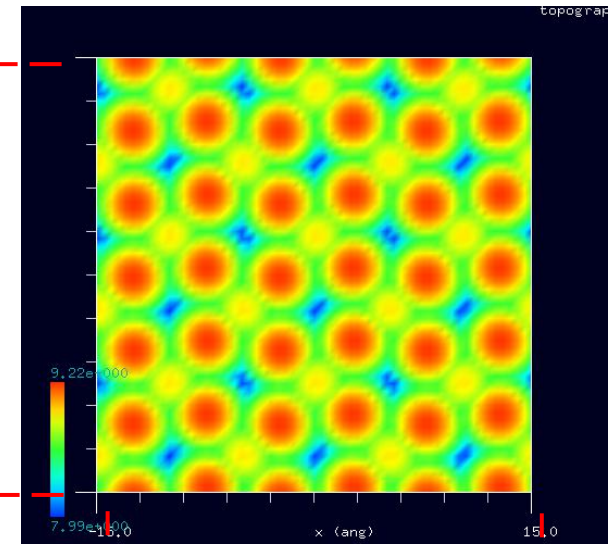
計算モード識別番号: [[project_file_DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_022a_execute_30by30_c_eval](#)]



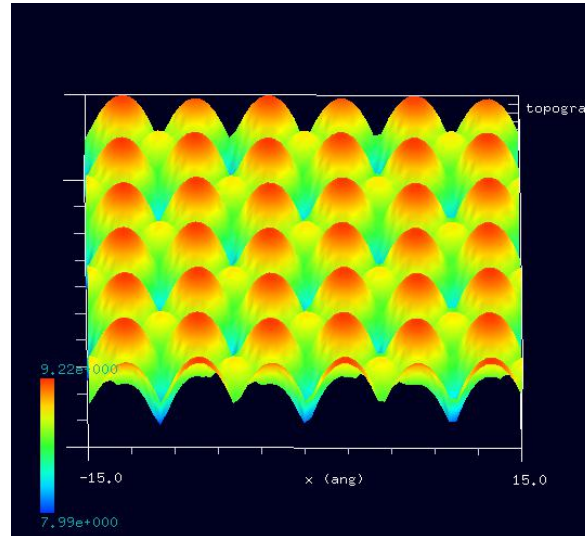
Gradation表示TOP画像



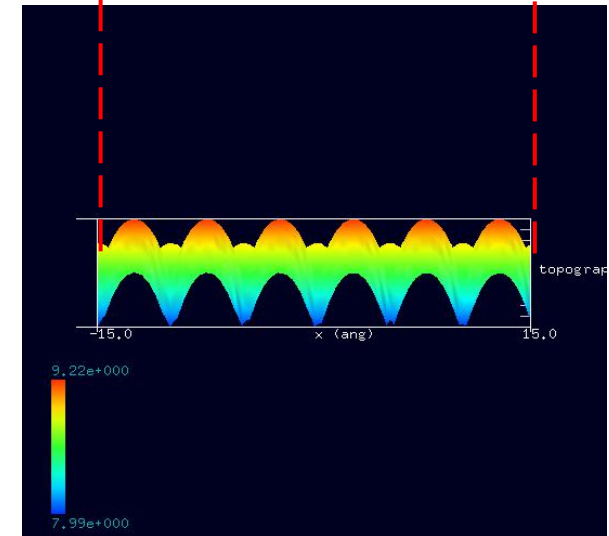
SIDE



TOP



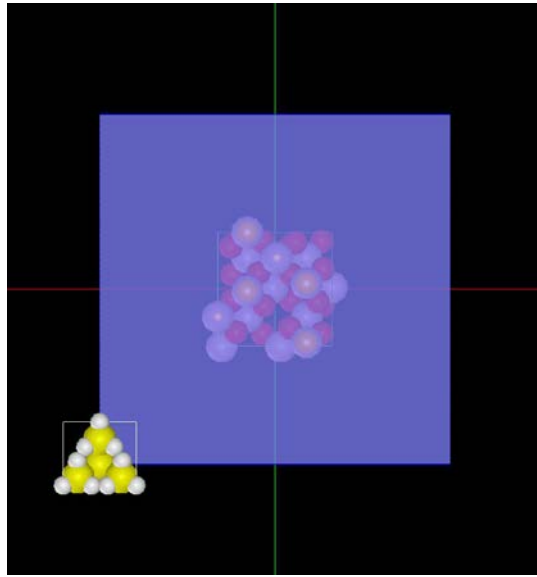
俯瞰



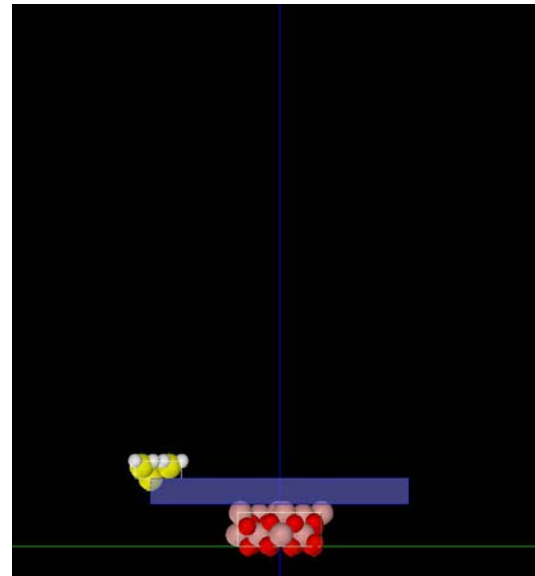
FRONT

「DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_022a」の試料モデルは、事例1とは異なります。本類例における試料モデルが事例1の試料モデルに近いモデルです。

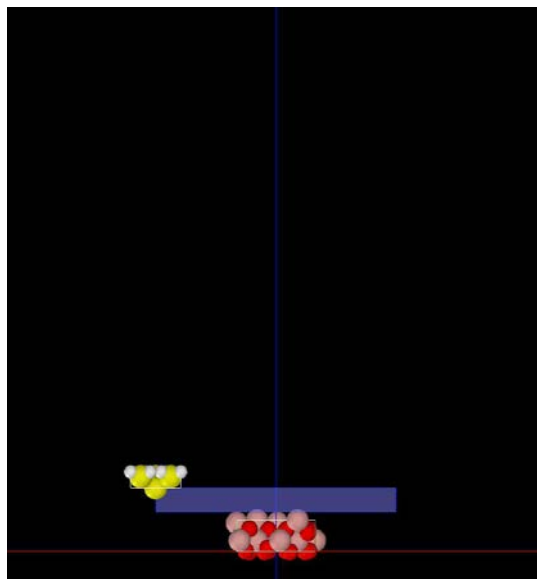
⑦ スキャンエリアを「 $W30\text{\AA} \times D30\text{\AA} \times H3.0\text{\AA}$ 」、次の事例「DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_022b」のSnをInとした場合の探針、試料モデル以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



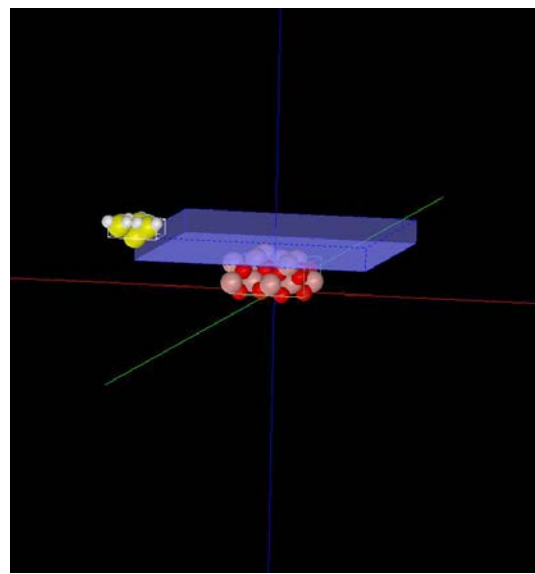
TOP



SIDE



FRONT



俯瞰

4-2 ●DFTB_STS 透明導電膜 ITO (Indium Tin Oxide)、In2O3(001)表面のトンネル電流分光 計算事例⑩

分類：DFTB_STS (トンネル電流分光シミュレーション)、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等

① 概要

本参考事例は、In2O3(001)を、DFTBトンネル電流分光でシミュレートします。

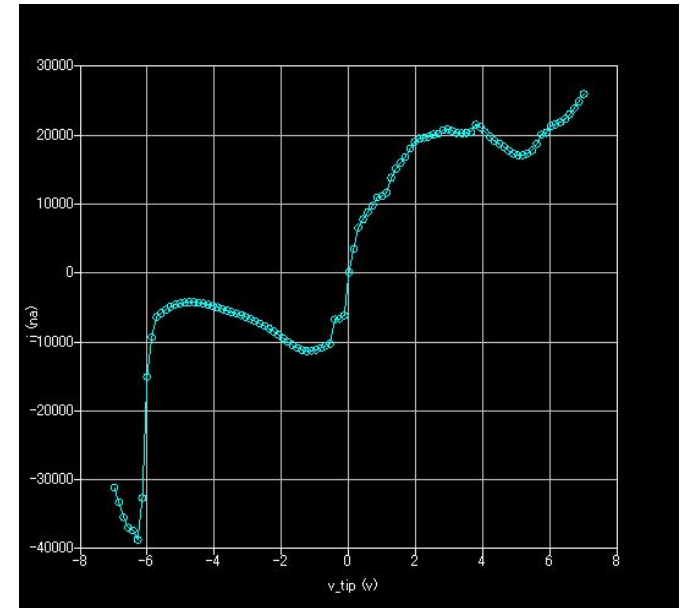
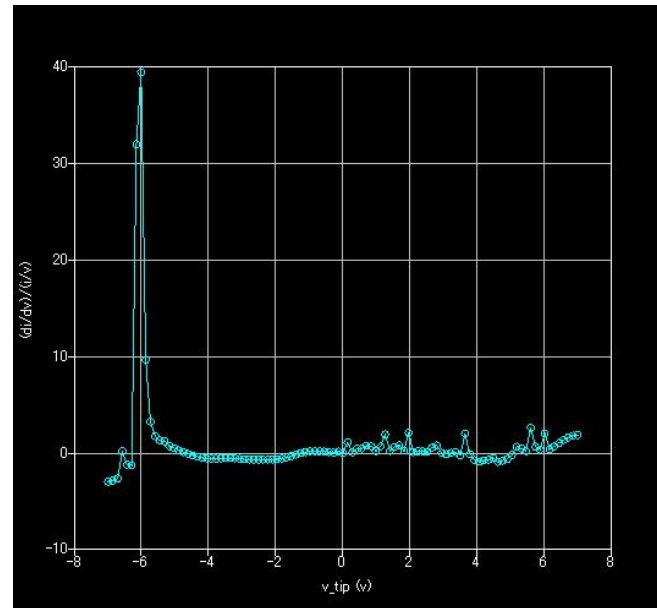
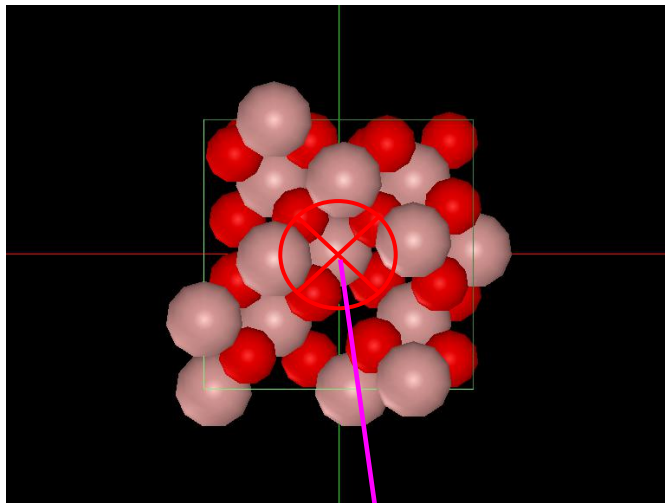
STM によるトンネル電流像は表面原子の位置ではなく、表面の電子の局所的な状態密度(LDOS, local density of states)に敏感に反応します。そのことを利用し、探針の位置を固定してバイアス電圧を変化させて電圧・電流曲線を求め、その微分から探針直下の局所状態密度を求められます。これが、STS(走査トンネル分光、scanning tunnelingspectroscopy)です。

操作全般についての説明は最初の計算事例① (P4, P6, P7) に記してあります。

シミュレーション計算・探針ポイント

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

バンドギャップの存在を再現していることがわかります。ただし、密度汎関数に基づいているので、ギャップを過小評価しています。

探針ポイント：計算モード識別番号：[\[project_file_DFTB_STS_Inorganic_In2O3_execute\]](#)

上記計算モード識別番号リンクより、AASホームページにアクセスし、計算モード識別番号のプロジェクト・ファイルをダウンロードし、解凍の上、SPMシミュレータを起動して、読み込んでください。

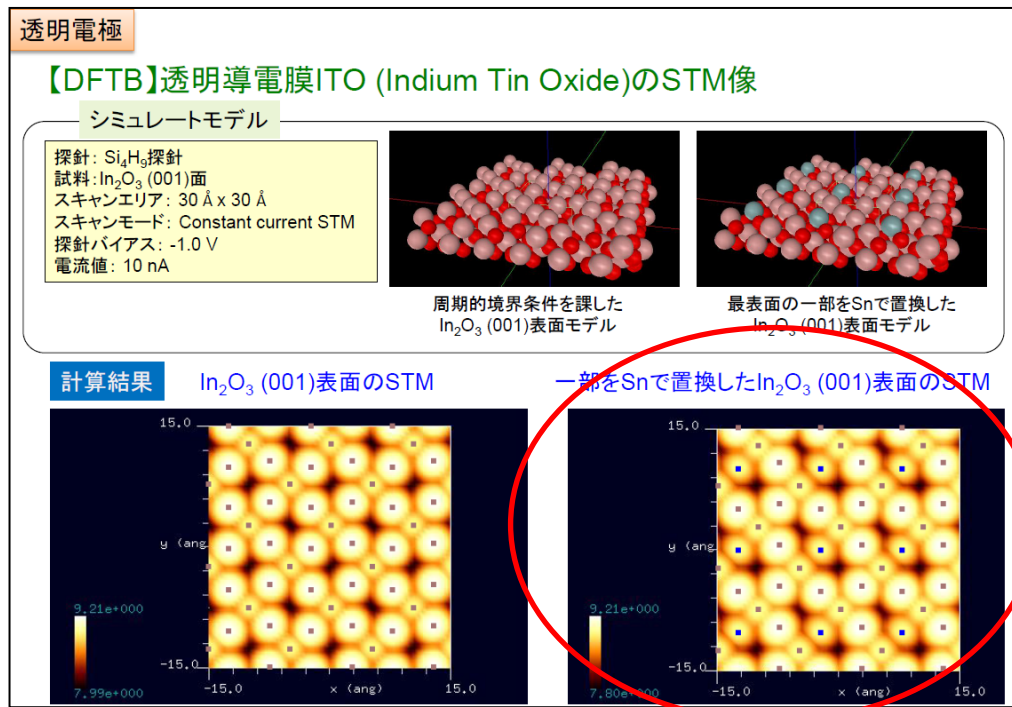
4-3 ●DFTB_STM・電流一定モードによる、透明導電膜ITO (Indium Tin Oxide) 一部をSnで置換したIn₂O₃(001)表面のSTM像シミュレーション 計算事例①

計算モード識別番号：[DFTB_ConstCurrentSTM_Inorganic_022b]

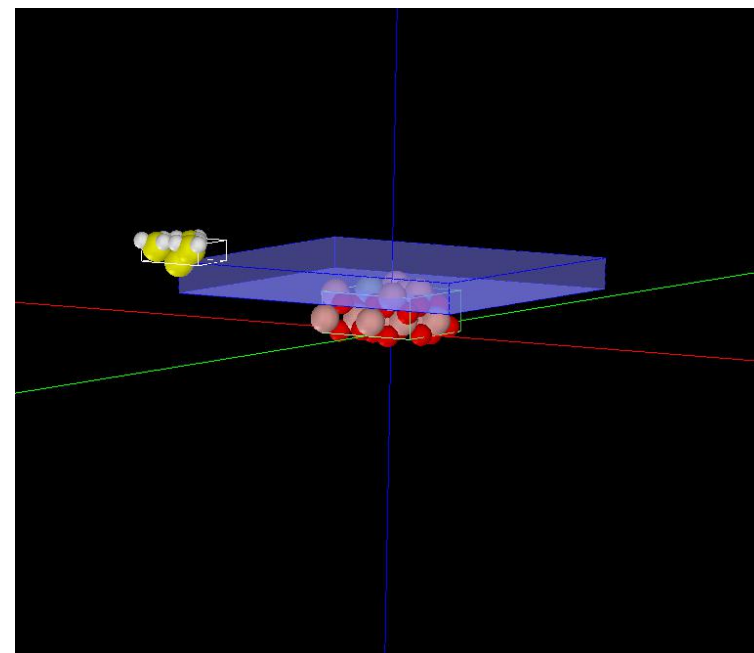
ソルバ・モード・計算例アドレス [https://www.aasri.jp/pub/spm/project_samples/DFTB/ConstCurrentSTM/DFTB_ConstCurrentSTM.php]

分類：DFTB_STM (電流一定 STM 画像シミュレーション)、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等

事例紹介ページを下左図に示します。



事例紹介ページ



シミュレーション・モデル俯瞰画像とスキャンエリア

① 概要

一部を Sn で置換した In₂O₃(001) 表面のトポグラフィー像を計算しました。

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のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください (「SampleProject」 としてプログラムフォルダ内にもプロジェクト・ファイルが保存されています)。

本計算事例の入力条件について記載します。

操作全般についての説明は最初の計算事例① (P4, P6, P7) に記してあります。

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。

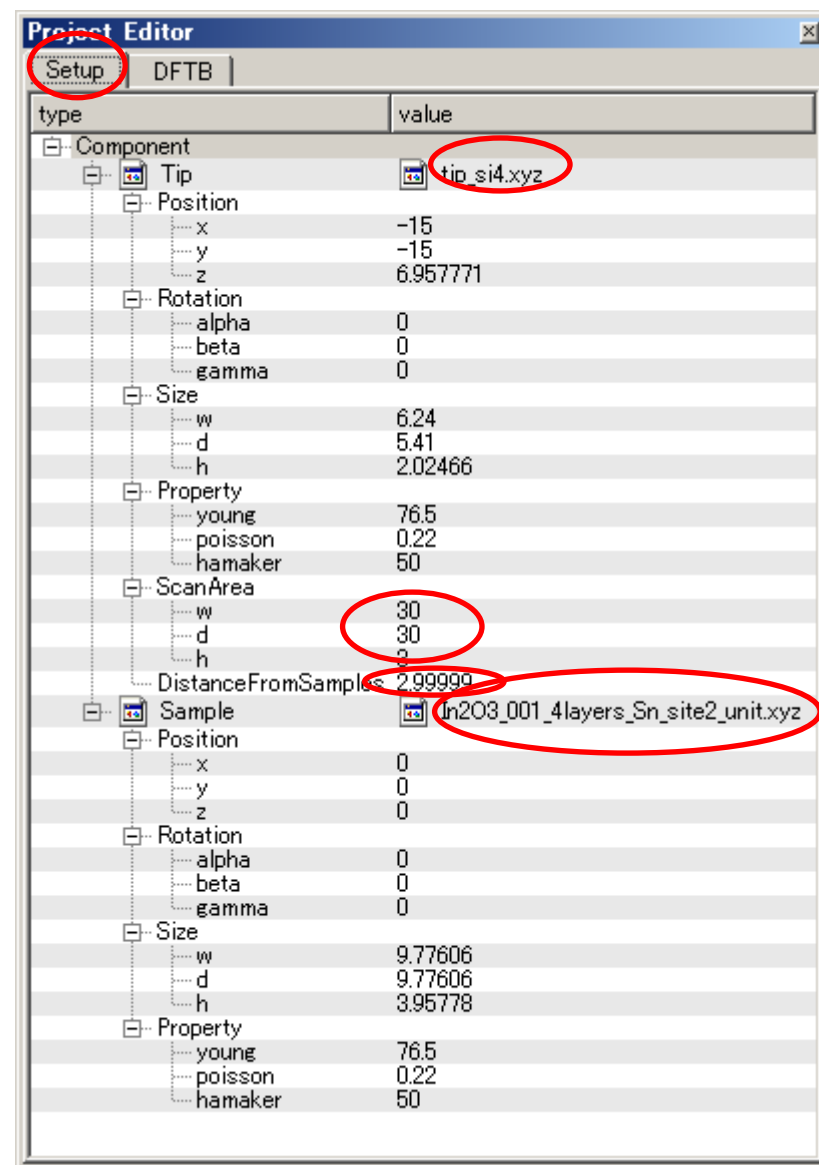
本計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W30\text{\AA} \times D30\text{\AA} \times H3.0\text{\AA}$ 」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。

探針試料間距離は約 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。

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、「ConstantCurrent」とします。

周期境界条件は考慮されません。

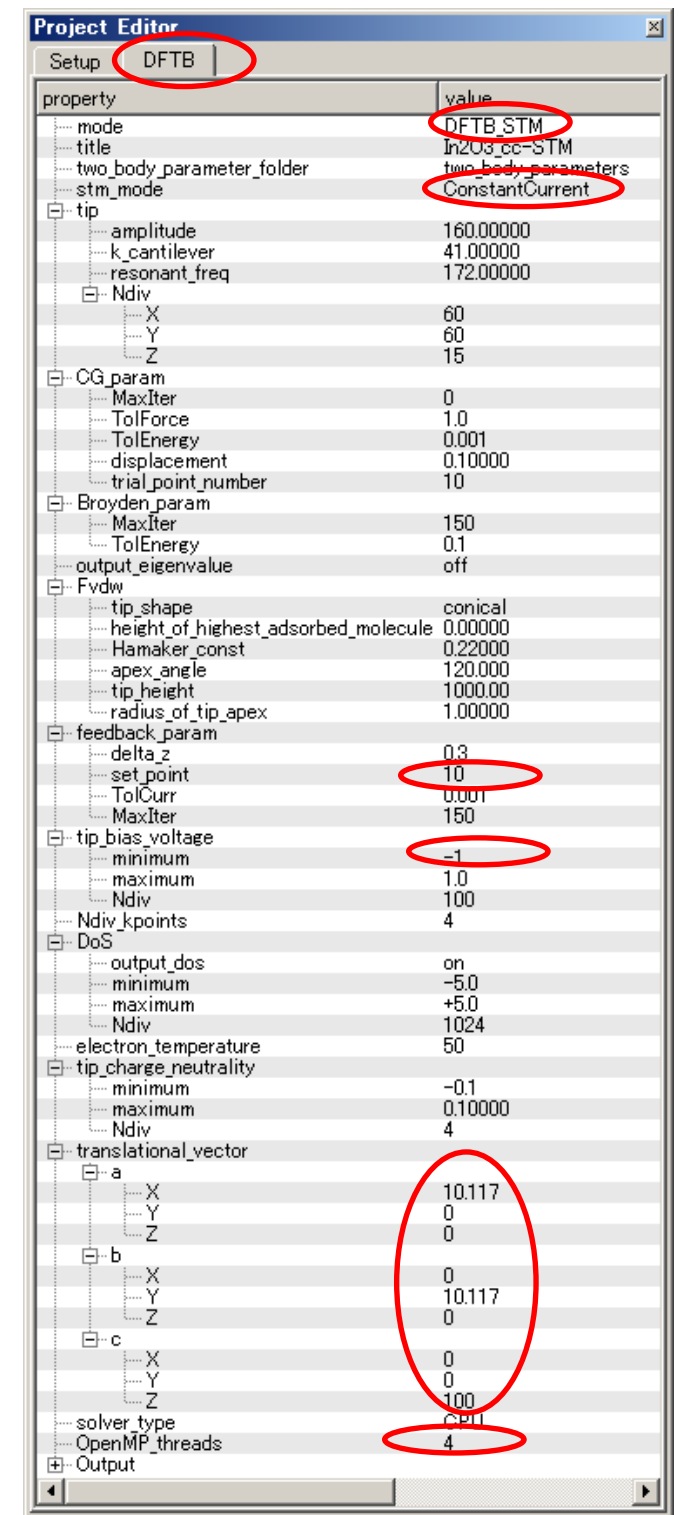
電流のセットポイント (set_point) を **10 nA**とします。

T I Pバイアス電圧 **-1.0V**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)

各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください。

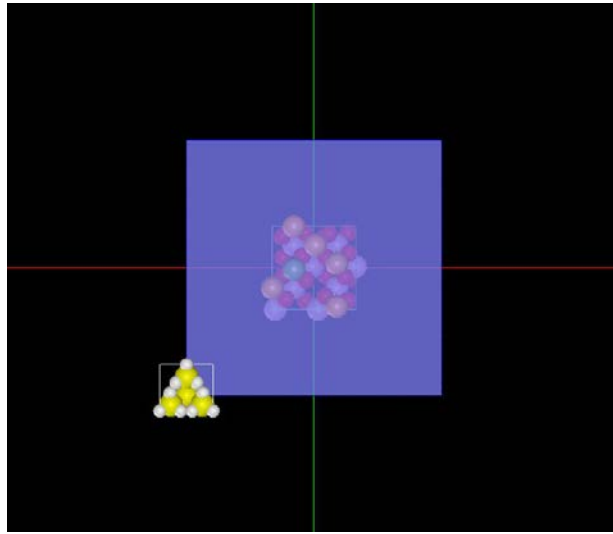


設定条件

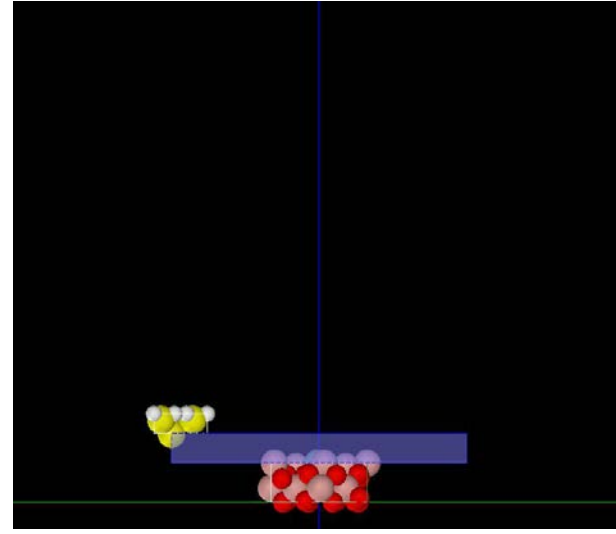
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

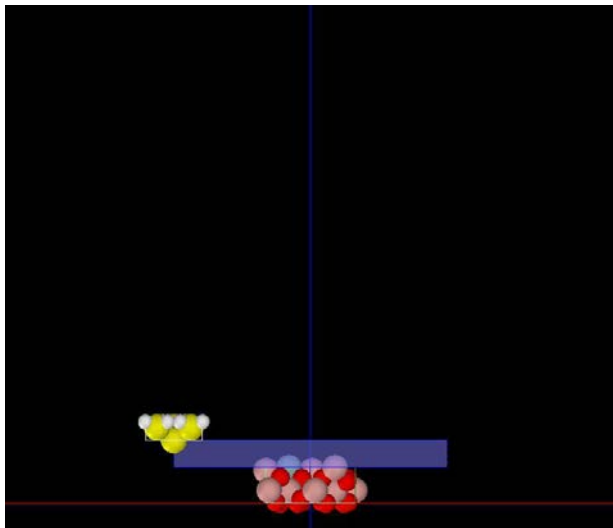
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



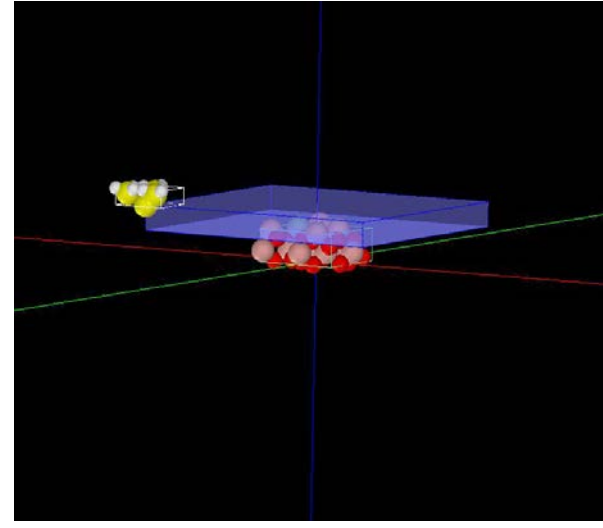
TOP



SIDE



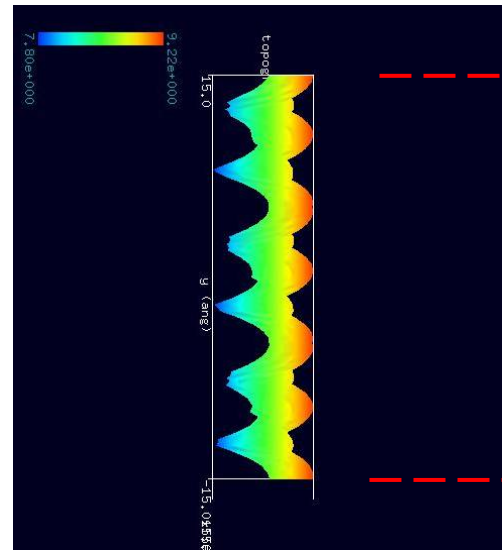
FRONT



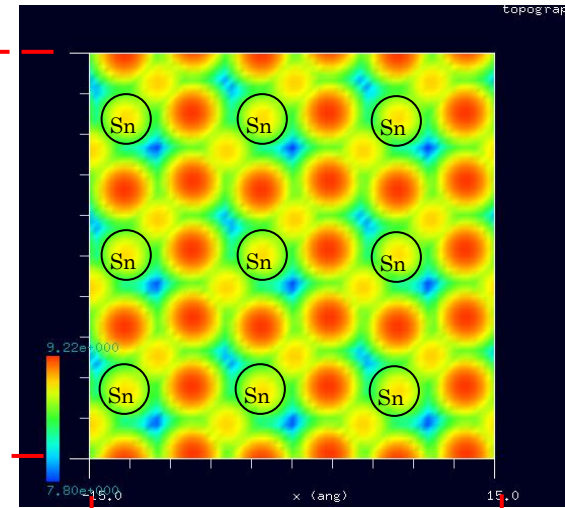
俯瞰

⑤ シミュレーション結果

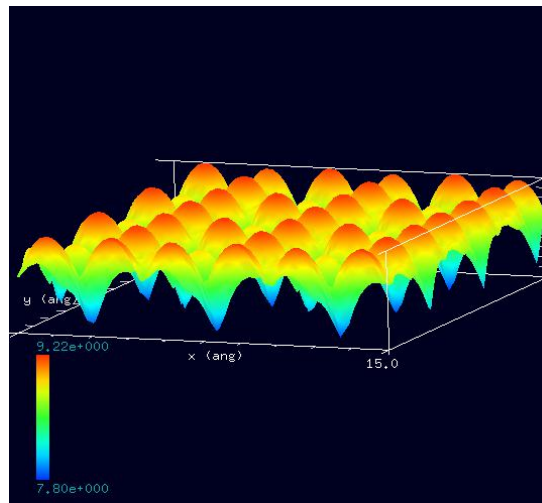
Rainbow色表示モデルをSIDE（左上図）、TOP（右上図）、FRONT（右下図）、俯瞰図（左下図）として示します。



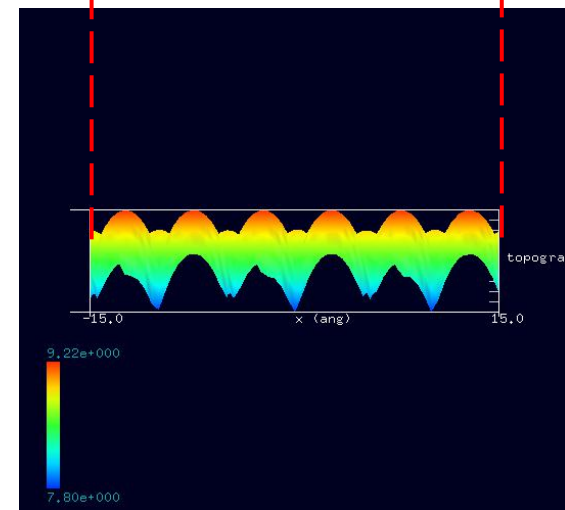
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

4-4●DFTB_STS 透明導電膜ITO (Indium Tin Oxide)、一部をSnで置換したIn2O3のトンネル電流分光 計算事例⑫

分類：DFTB_STS (トンネル電流分光シミュレーション)、Åオーダー、リチウム電池・透明電極等

① 概要

本参考事例は、一部をSnで置換したIn2O3を、DFTBトンネル電流分光でシミュレートします。

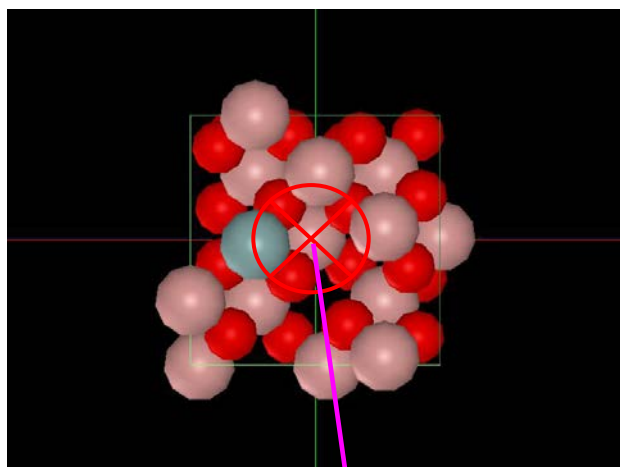
STMによるトンネル電流像は表面原子の位置ではなく、表面の電子の局所的な状態密度(LDOS, local density of states)に敏感に反応します。そのことを利用し、探針の位置を固定してバイアス電圧を変化させて電圧・電流曲線を求め、その微分から探針直下の局所状態密度を求められます。これが、STS(走査トンネル分光、scanning tunnelingspectroscopy)です。

操作全般についての説明は最初の計算事例① (P4, P6, P7) に記してあります。

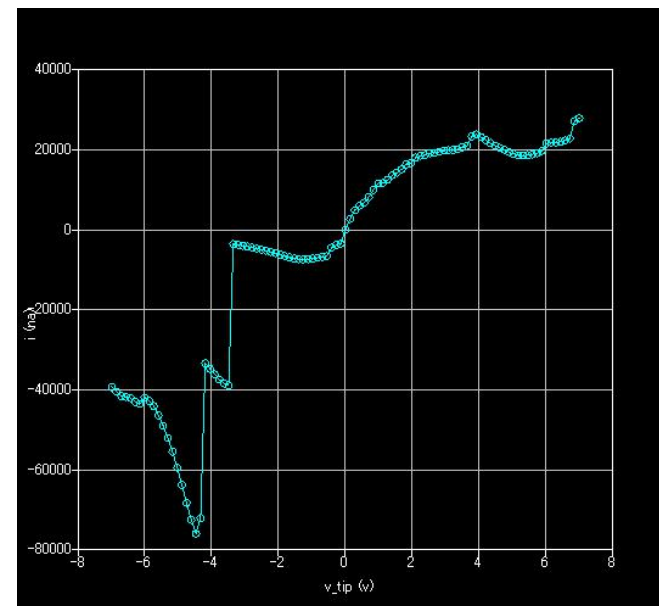
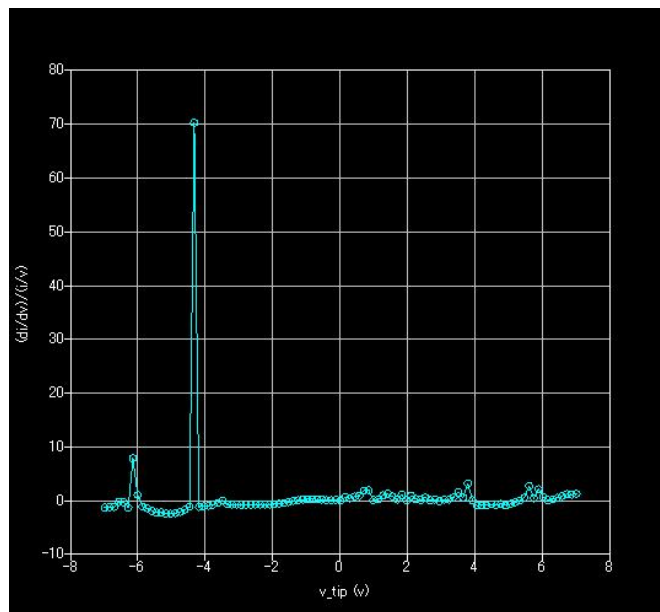
シミュレーション計算・探針ポイント

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



バンドギャップの存在を再現していることがわかります。ただし、密度汎関数に基づいているので、ギャップを過小評価しています。

探針ポイント：計算モード識別番号：[\[project_file_DFTB_STS_Inorganic_In2SnO3_execute\]](#)

上記計算モード識別番号リンクより、AASホームページにアクセスし、計算モード識別番号のプロジェクト・ファイルをダウンロードし、解凍の上、SPMシミュレータを起動して、読み込んでください。

5. 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)

5-1 ●DFTB_STM・高さ一定モードによる LiCoO₂(リチウムイオン電池の正極活物質)の三方晶の(001)面の STM 像観察 バイアス電圧 +1.0 V 計算事例⑬

計算モード識別番号: [DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_028a]

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、リチウム電池・透明電極等

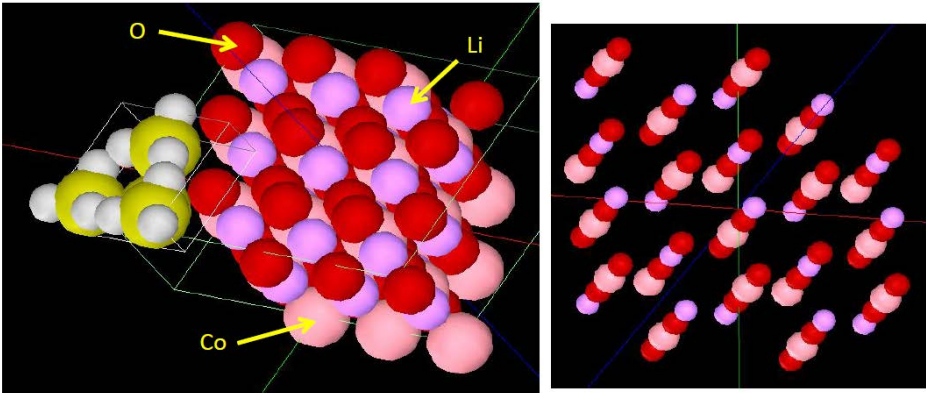
事例紹介ページを下図に示します。

リチウムイオン電池関連トピック

DFTB LiCoO₂ (リチウムイオン電池の正極活物質)

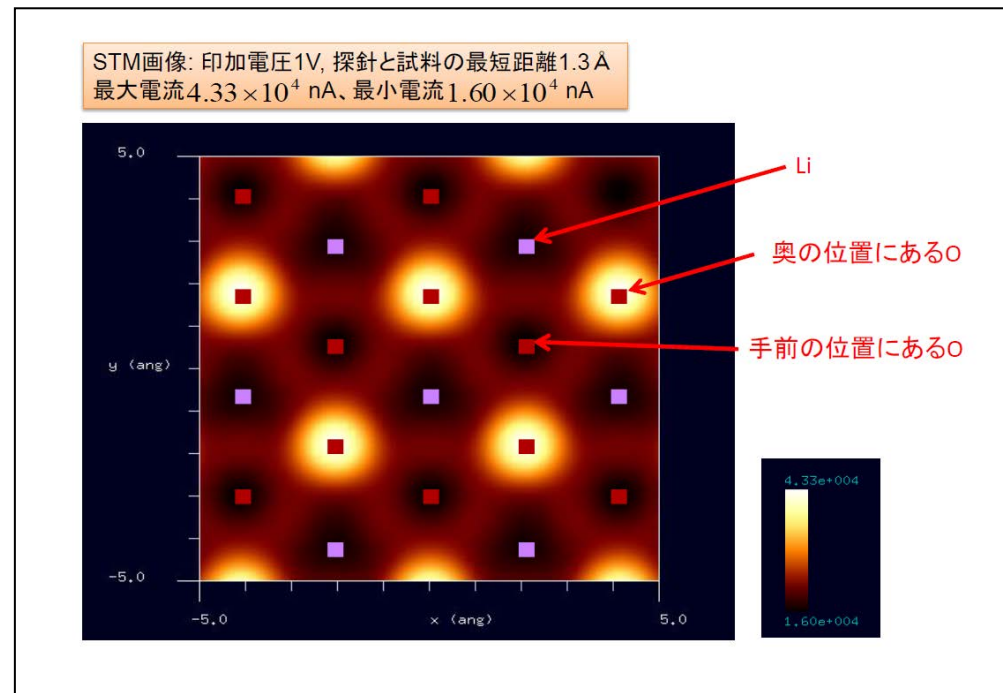
水素終端されたシリコン探針を使用
三方晶(空間群番号:166)
(001)面

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



The figure shows two views of the LiCoO₂ crystal structure. The left view is a 3D ball-and-stick model of the (001) surface, with atoms colored by element: red for oxygen (O), purple for lithium (Li), and pink for cobalt (Co). Yellow arrows point to O, Li, and Co atoms. The right view is a 2D projection of the same structure, showing the arrangement of atoms in the plane.

事例紹介ページ1



事例紹介ページ2

① 概要

本事例は、LiCoO₂(リチウムイオン電池の正極活物質)の三方晶の(001)面を、探針バイアス +1.0 V、DFTB 高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。

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のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください(「SampleProject」としてプログラムフォルダ内にもプロジェクト・ファイルが保存されています)。

計算事例の入力条件について記載します。

操作全般についての説明は最初の計算事例①(P4, P6, P7)に記してあります。

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。

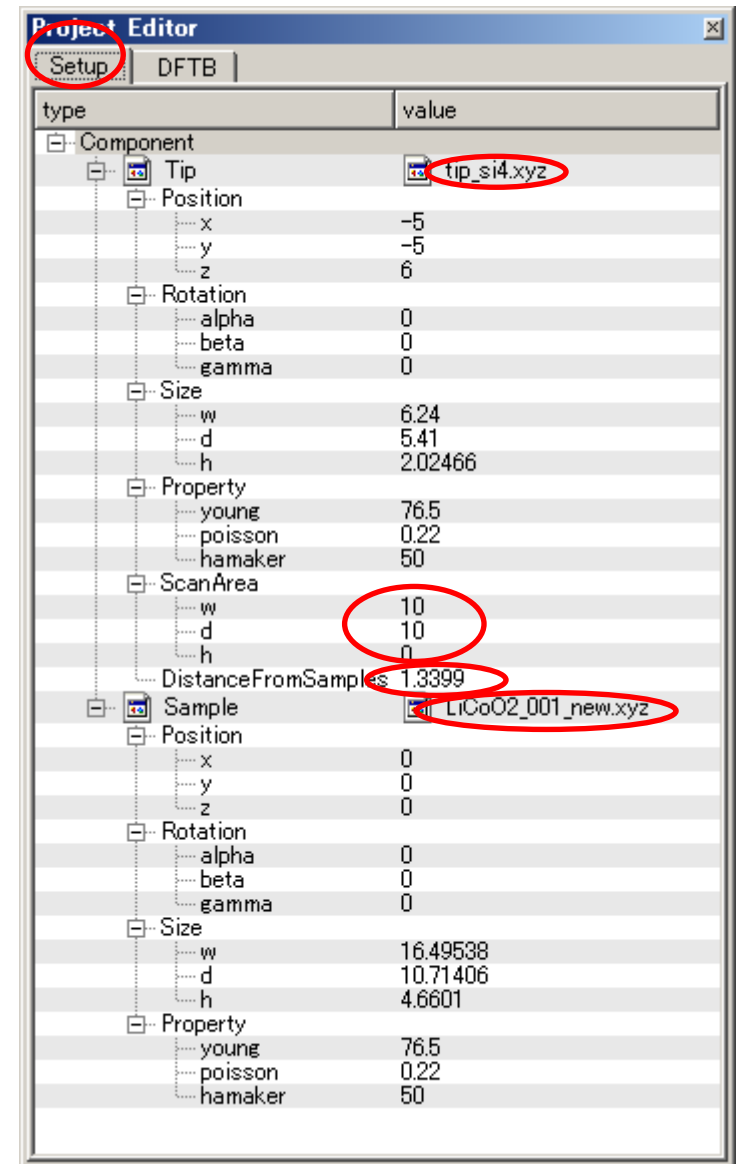
本計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W10.0\text{\AA} \times D10.0\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 1.3399\AA 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)



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、「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。

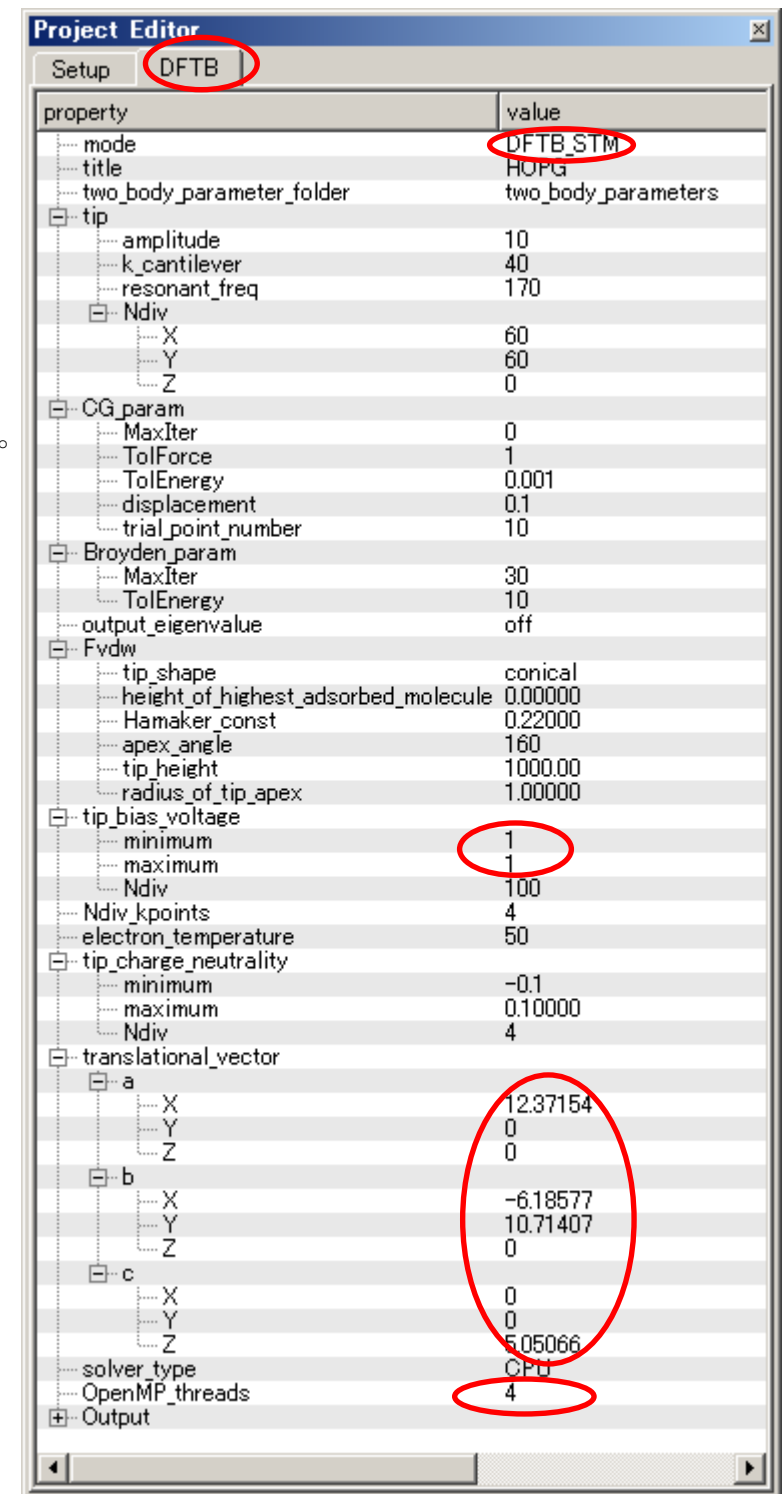
周期境界条件を考慮します(但し、x-y方向のみ有効です)。

TIPバイアス電圧を+1.0V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)

各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください。

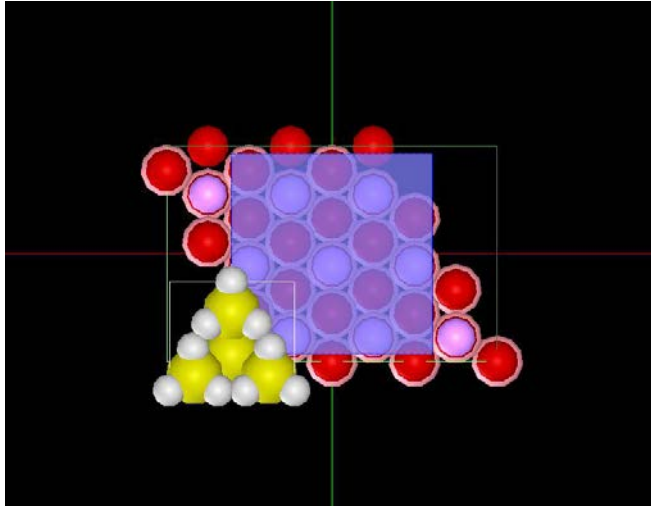


設定条件

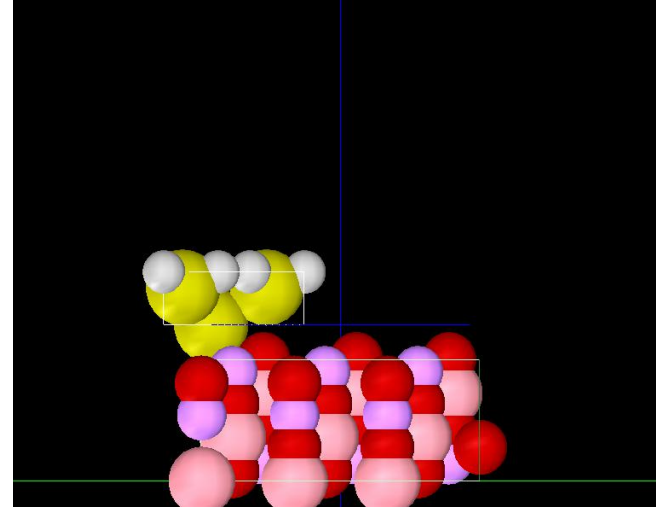
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

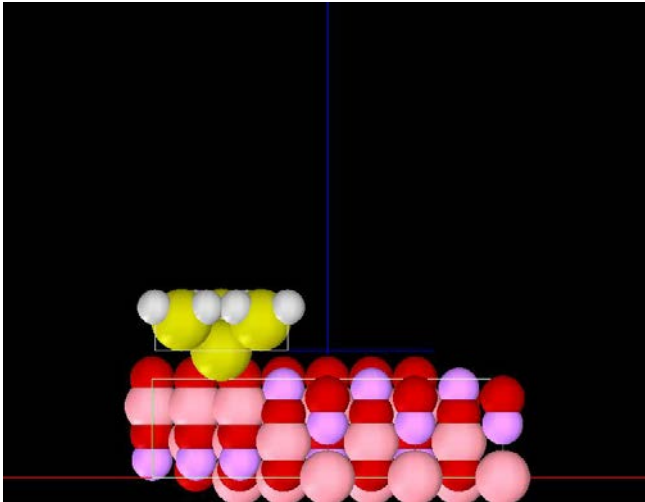
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



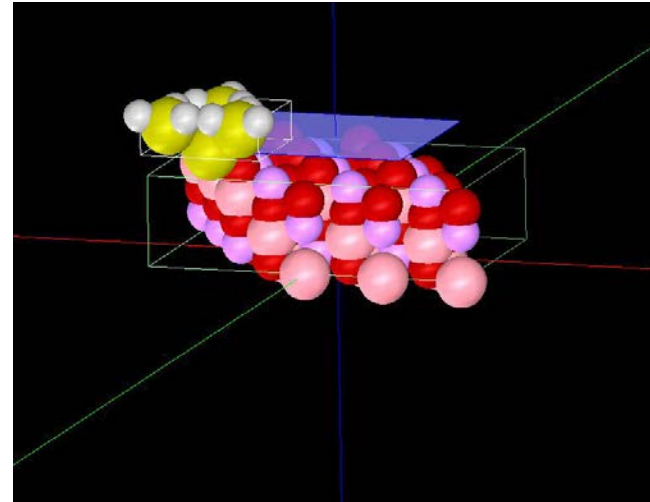
TOP



SIDE



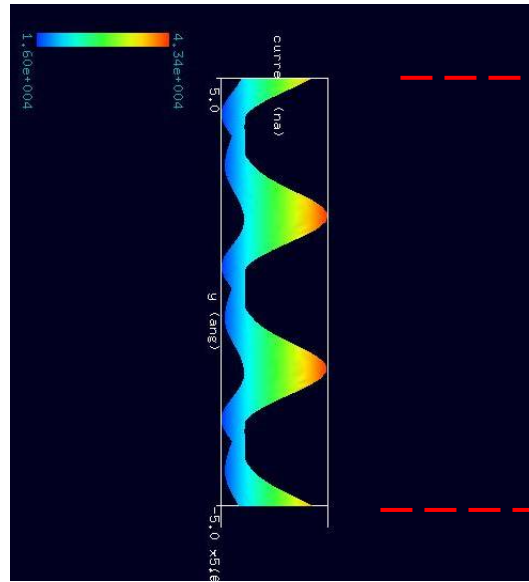
FRONT



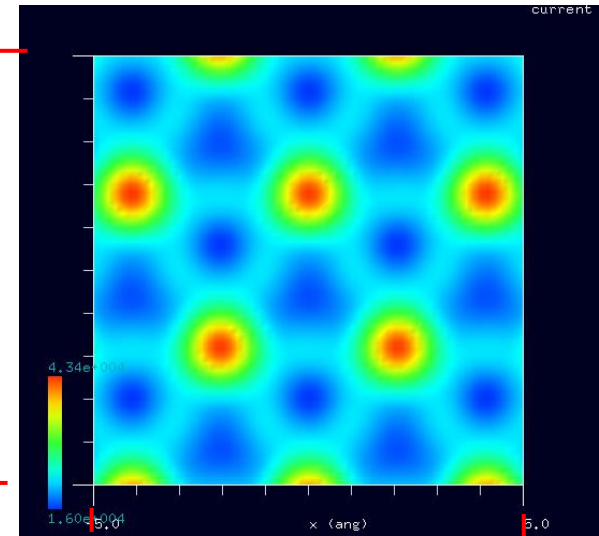
俯瞰

⑤ シミュレーション結果

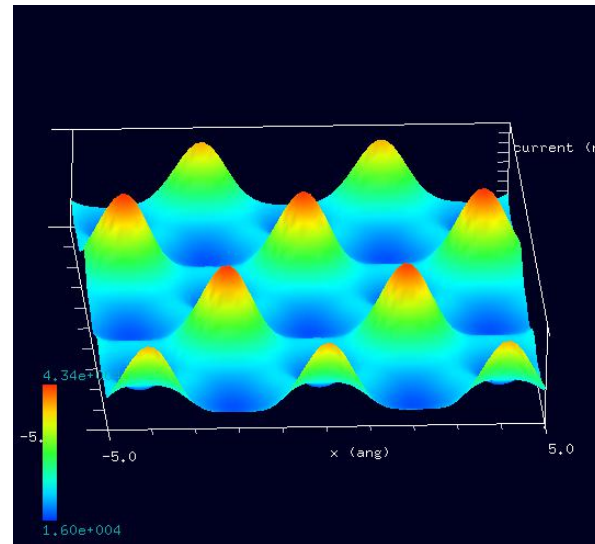
Rainbow 色表示モデルを SIDE (左上図)、TOP (右上図)、FRONT (右下図)、俯瞰図 (左下図) として示します。



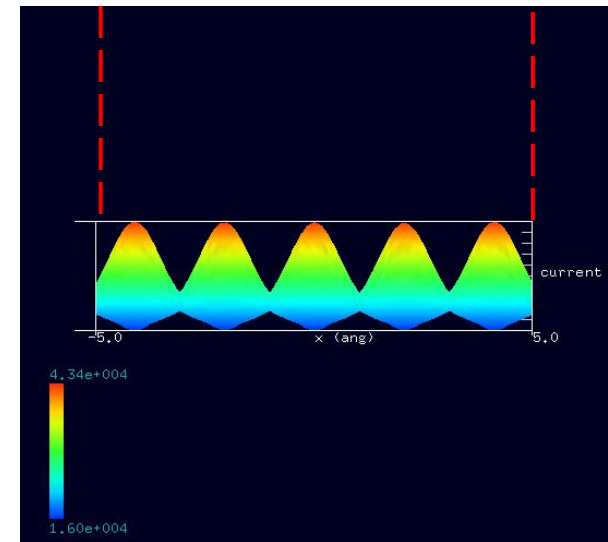
SIDE



TOP



俯瞰



FRONT

⑥LiCoO₂(リチウムイオン電池の正極活物質)について

『リチウムイオン電池には、正極および負極活物質にLi 酸化物，黒鉛など数多くのセラミックス材料が用いられている。正極はリチウムを含む酸化物粉末 (LiCoO₂, LiNiO₂, LiMnO₂ など) が，導電性黒鉛 (主にカーボンブラックなど) および結着材 (PVdF など) とともに塗布されている。』

『電池の充放電はリチウムイオンが正極と負極の間を移動することによって行われる。』

『正極活物質として用いられているのは，主にLiCoO₂, LiNiO₂ あるいは LiMn₂O₄ を基本とする酸化物材料である。これらの活物質に含まれるリチウムイオンが，充放電に伴い活物質に挿入，あるいは活物質から脱離する。』(いずれも「リチウム電池の電極特性と構造」(株)豊田中央研究所 右京特別研究室 室長 右京 良雄様より抜粋) https://www.hosokawamicon.co.jp/jp/service/micromeritics/no_53/pdf/No53_04.pdf

5-2●DFTB_STM・高さ一定モードによるLiCoO₂(リチウムイオン電池の正極活物質)の三方晶の(001)面のSTM像観察 バイアス電圧 -1.0 V 計算事例⑭

計算モード識別番号：[DFTB_ConstHeightSTM_Inorganic_028b]

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、リチウム電池・透明電極等

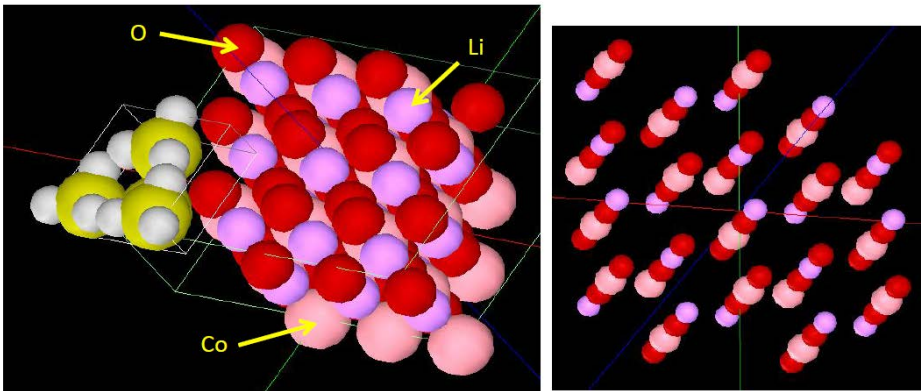
事例紹介ページを下図に示します。

リチウムイオン電池関連トピック

DFTB LiCoO₂ (リチウムイオン電池の正極活物質)

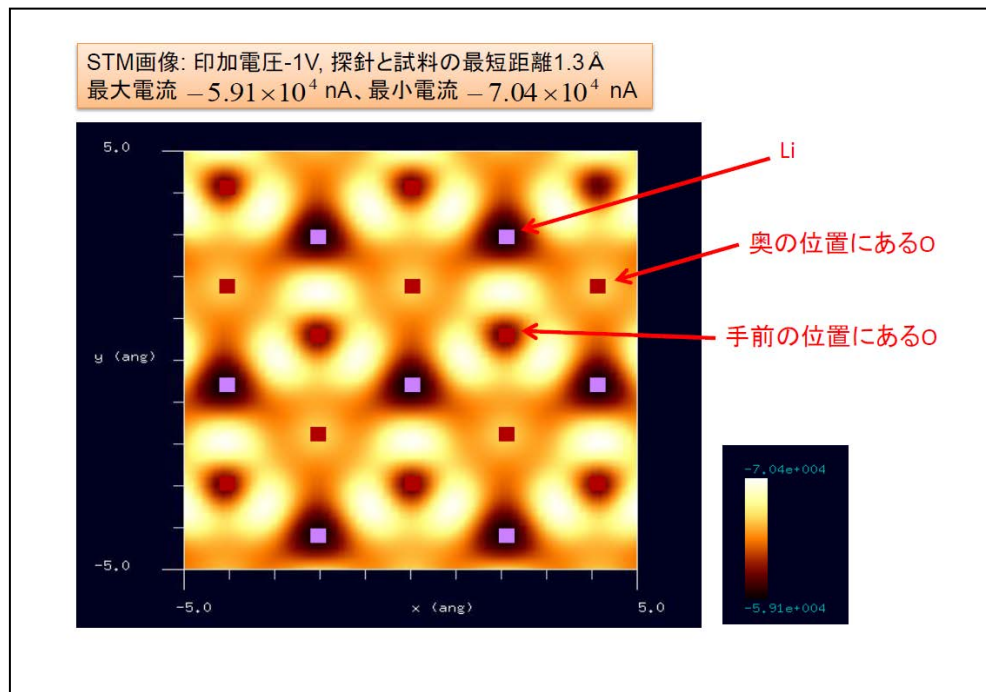
水素終端されたシリコン探針を使用
三方晶(空間群番号:166)
(001)面

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



The image shows two views of the LiCoO₂ crystal structure. The left view is a 3D ball-and-stick model of the (001) surface, with red spheres representing oxygen atoms, pink spheres representing lithium atoms, and purple spheres representing cobalt atoms. Yellow arrows point to an oxygen atom (O), a lithium atom (Li), and a cobalt atom (Co). The right view is a 2D projection of the crystal structure, showing the arrangement of atoms in the plane.

事例紹介ページ1



事例紹介ページ2 (逆スケール表示)

① 概要

本事例は、LiCoO₂(リチウムイオン電池の正極活物質)の三方晶の(001)面を、探針バイアス -1.0 V、DFTB 高さ一定のトンネル電流像でシミュレートします。

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のプロジェクト・ファイルをダウンロードしてください(「SampleProject」としてプログラムフォルダ内にもプロジェクト・ファイルが保存されています)。

本計算事例の入力条件について記載します。

操作全般についての説明は最初の計算事例①(P4, P6, P7)に記してあります。

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。

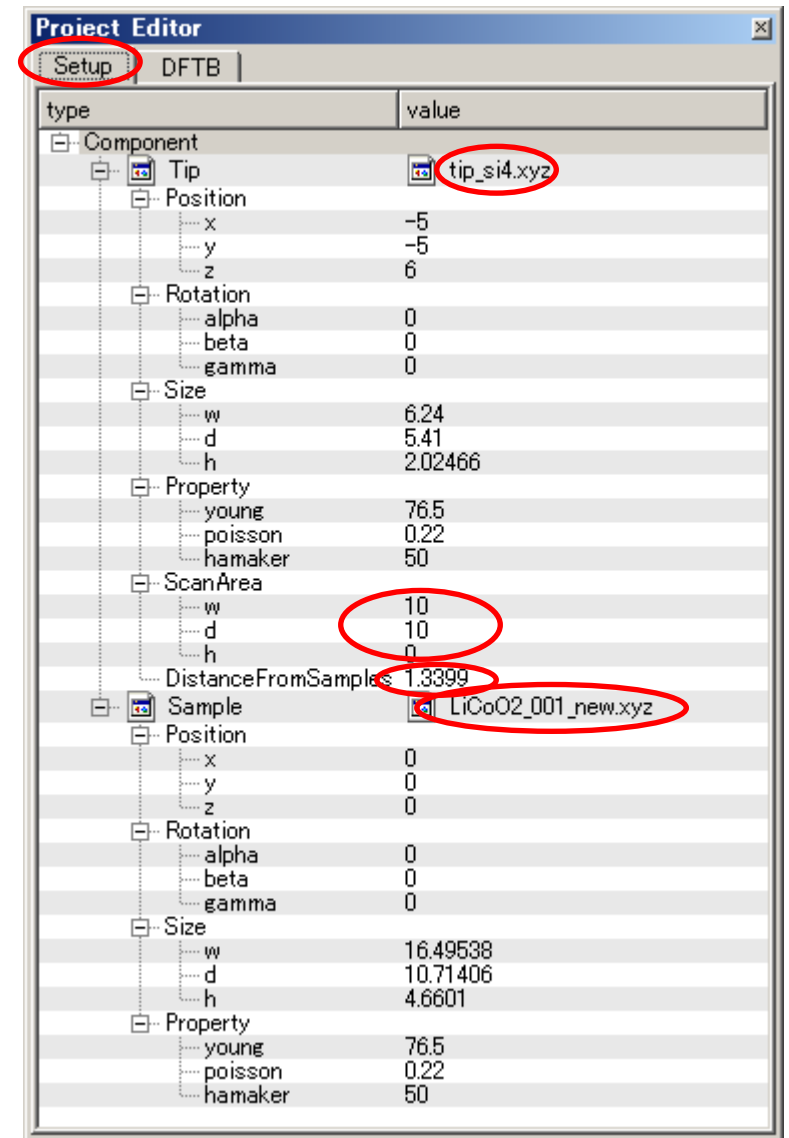
本計算事例の場合、探針がスキャンする範囲であるスキャンエリアは

「 $W10.0\text{\AA} \times D10.0\text{\AA} \times H0.0\text{\AA}$ 」と設定されています。

探針試料間距離は 1.3399\AA 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)



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、「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。

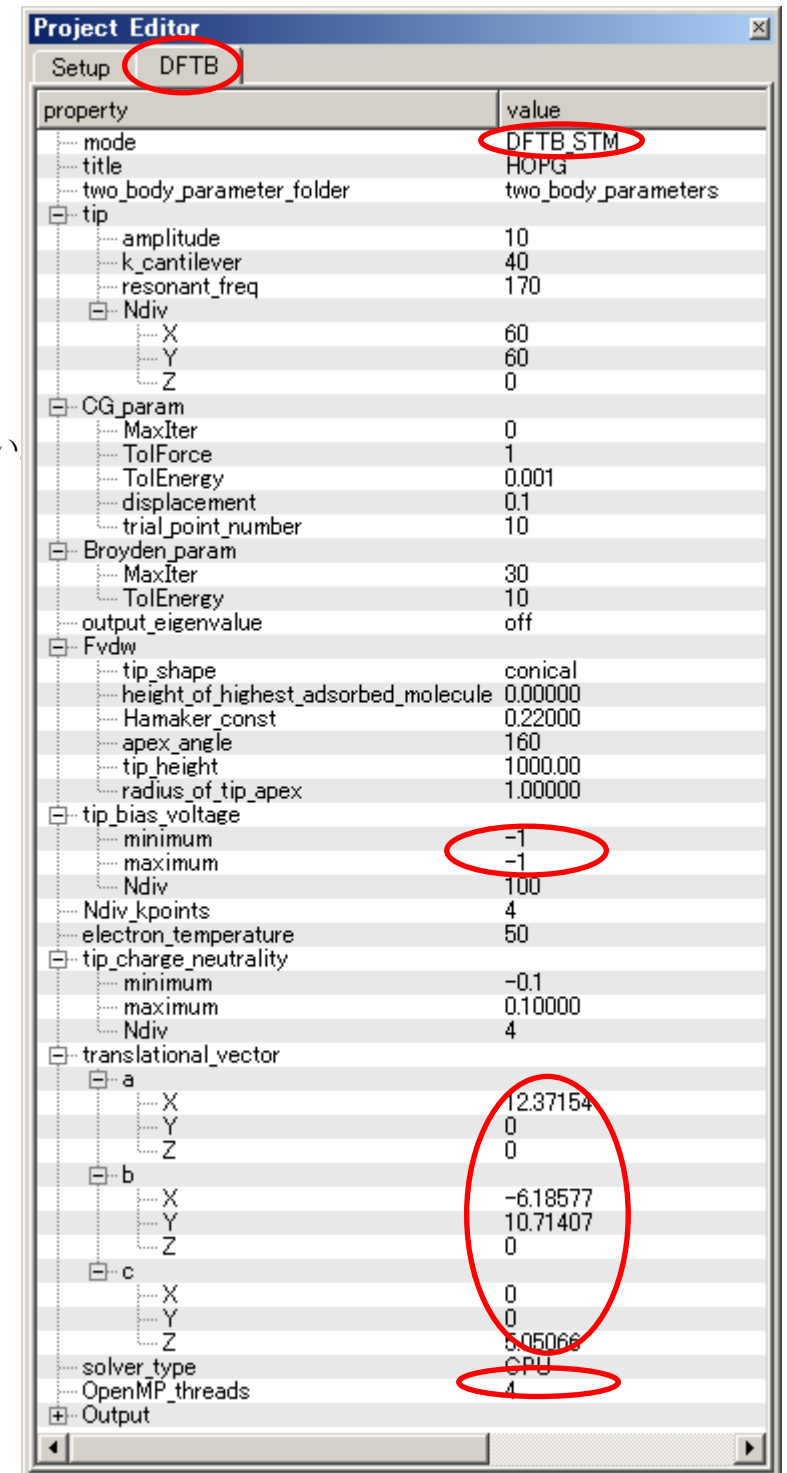
周期境界条件を考慮します(x-y方向のみ有効です)。

TIPバイアス電圧を-1.0V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)

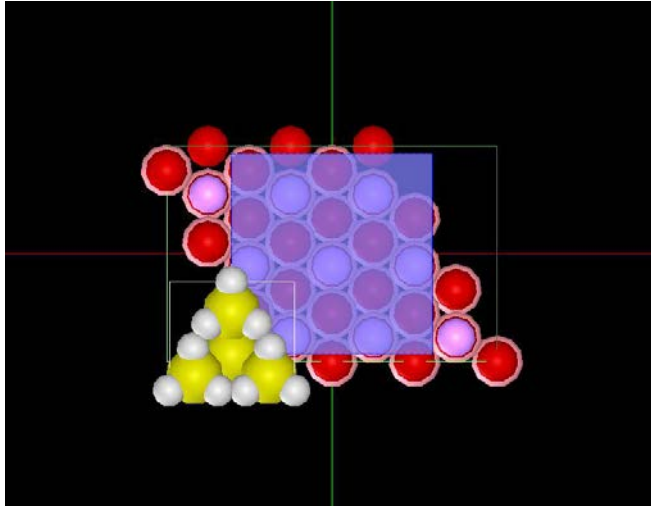
各パラメータの意味については、別紙「[リファレンスマニュアル：DFTB](#)」を参照してください



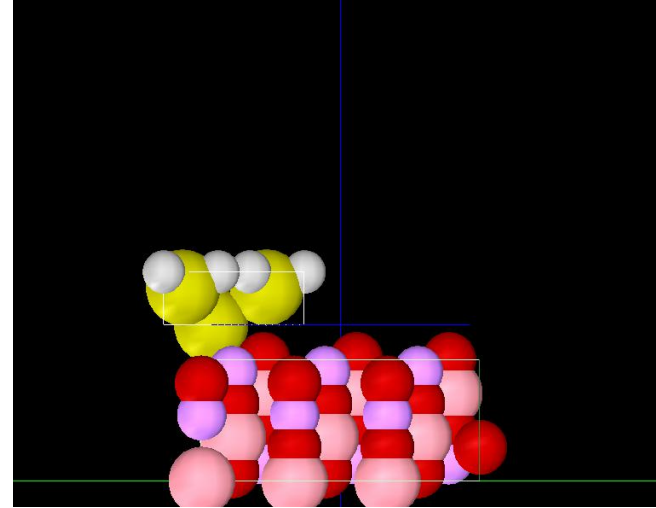
※赤丸は、本モデル解析のための基本条件となります。

④ 探針、試料モデル

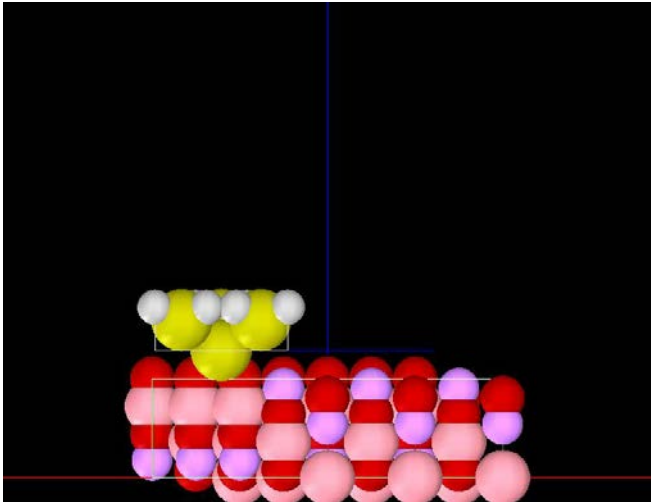
以下に、シミュレーション・モデルとスキャンエリアをTOP、SIDE、FRONT、俯瞰として示します。



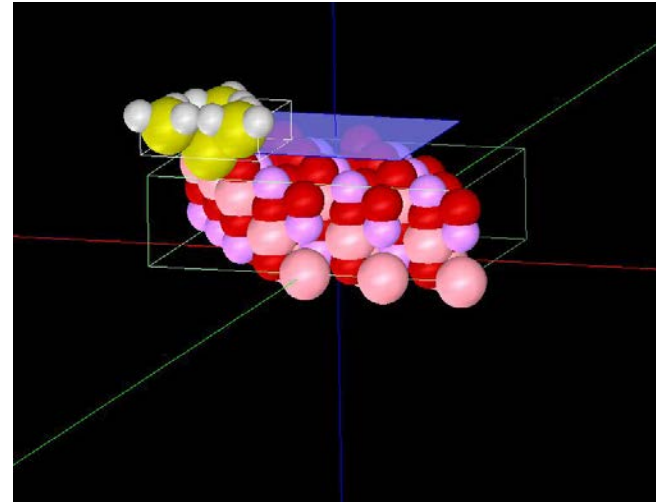
TOP



SIDE



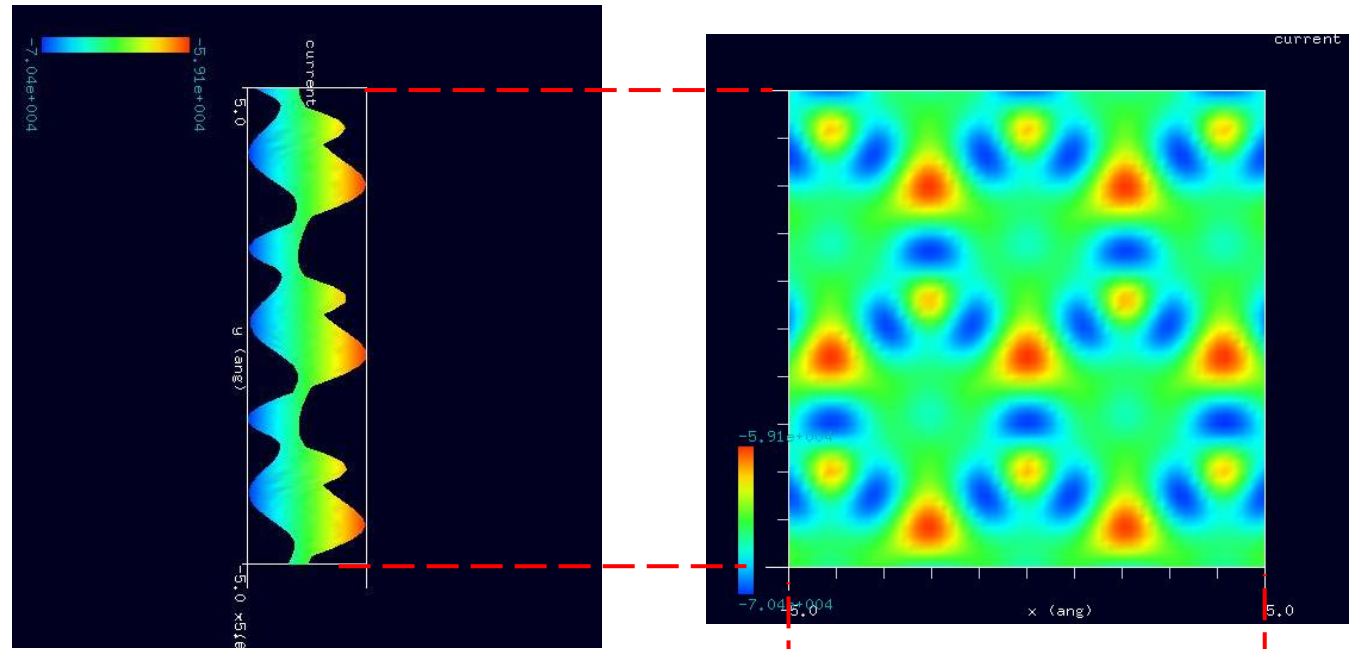
FRONT



俯瞰

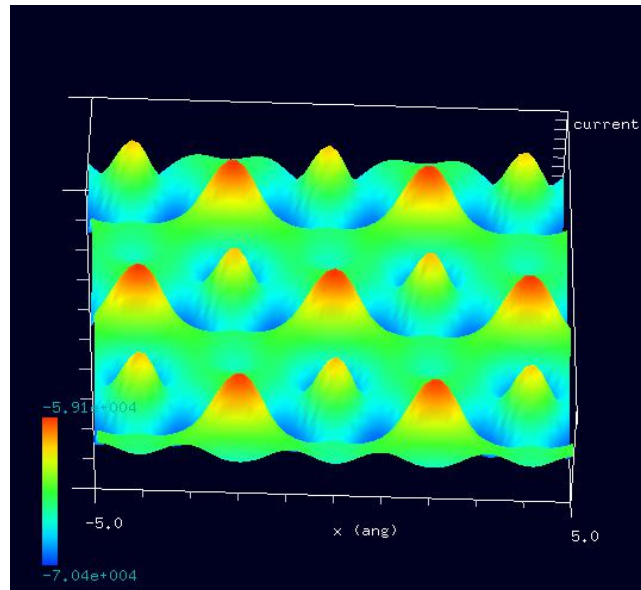
⑤ シミュレーション結果

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。

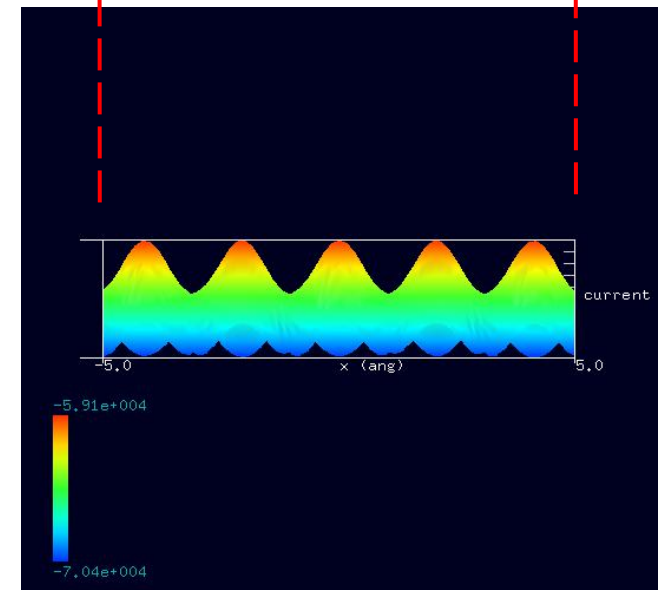


SIDE

TOP



俯瞰



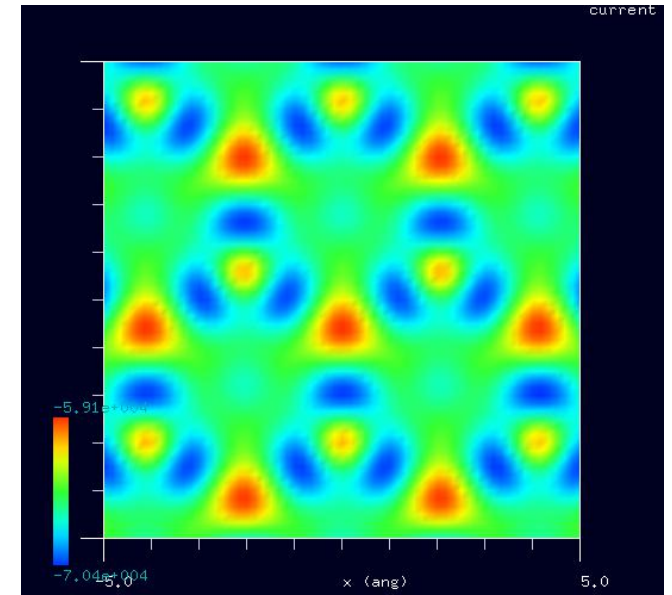
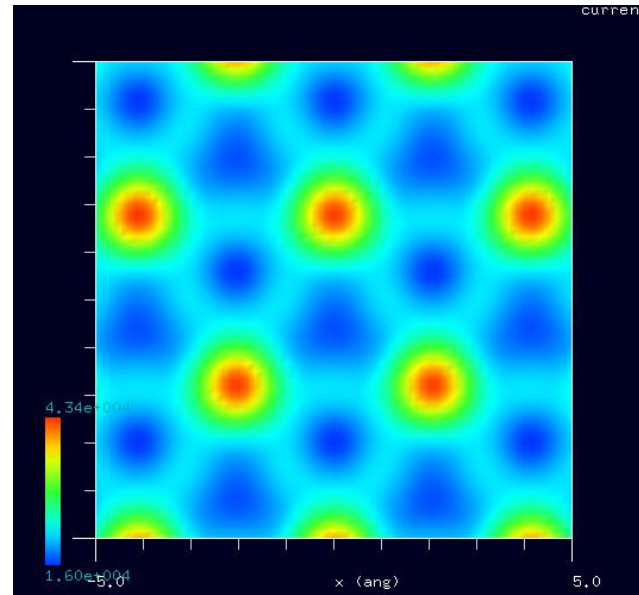
FRONT

⑥TIPバイアス電圧 +1.0 VとTIPバイアス電圧 -1.0 Vのシミュレーション結果比較

TIPバイアス電圧 +1.0 V

TIPバイアス電圧 -1.0 V

TIPバイアス電圧の正負により、トンネル電流値が反転することから、半導体ないしは導体の性質を示している事がシミュレート出来た。



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	