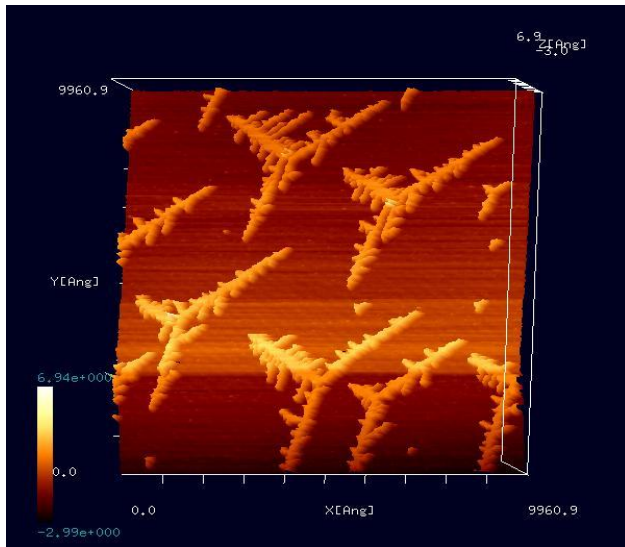


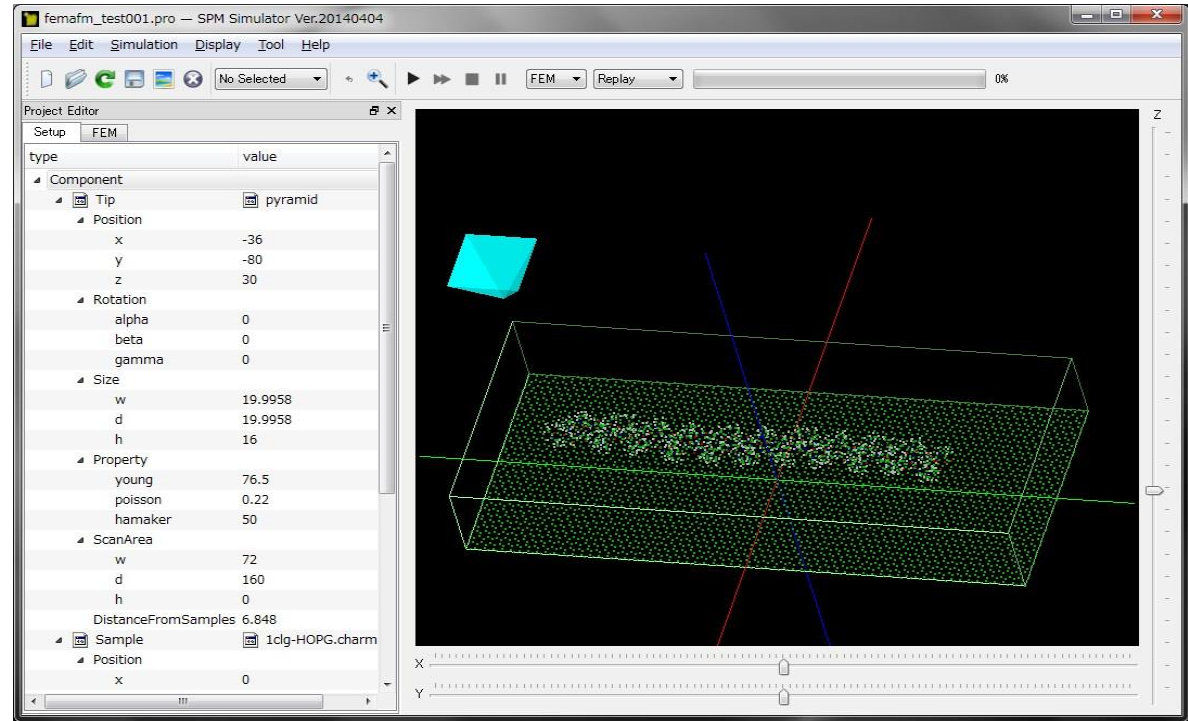
SPMシミュレータ: 走査型プローブ顕微鏡実験画像シミュレータ

用途別機能紹介資料: Part6 金属・無機半導体の観察



[東京大学生産技術研究所 福谷研究室提供
(Ir結晶表面上にAuを蒸着、アニーリングしてフラクタル島状構造を自己形成させたもの)

S. Ogura et al., Phys. Rev. B 73, 125442 (2006); S. Ogura and K. Fukutani, J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 474210.]



株式会社Advanced Algorithm & Systems
2016年9月30日

SPM実験画像処理手法イノベーション

これまで、様々なSPM実験画像データ処理ソフトの代表例として、Image Metrology社のSPIPが有名でしたが、画像から何が見えるのか判別が困難という事実が常に存在していました

SPMシミュレータは、このSPIPを超えるソフトウェアを目指して、実測画像とシミュレーション計算画像を直接比較できるシミュレータとして開発が進められてきました

AFM実験画像が、そのまま試料の形状を反映しているとは限りません

- 探針の形状が、AFM実験画像に影響を与える場合があります
- 探針と試料の間に、水分子が作る薄い被膜が入り込んでいるかもしれません
- 高分子の試料がコロイド溶液中にある場合、電解質の効果が影響します



SPMシミュレータは、実験画像とシミュレーション画像を比較することにより、実際の試料の形状がどのようなものであるかの、ヒントを与えてくれます
8種類の用意されたシミュレーションソルバを、上手く使い分ければ、試料の真の形状を推定することが出来ます

SPMシミュレータは、見かけのSPM実験画像から、原子の真の配置を特定できる、従来とは一線を画すイノベーションです

SPMシミュレータ用途別機能紹介

Part1: 高分子の単分子観察

Part2: 液中環境下での高分子の観察

Part3: バイオ関連試料の観察

Part4: 繊維状高分子の観察

Part5: 有機半導体の観察

Part6: 金属・無機半導体の観察

Part7: 触媒物質の観察

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

Part6: 金属・無機半導体の観察

SPMシミュレータに含まれるソルバのうち金属・無機半導体の観察をシミュレーションできるもの

SetModel

探針・試料モデル作成ツール

結晶構造を作成

DFTB

量子論的SPM像シミュレータ(密度汎関数法)

【SetModel】原子モデル作成

SetModel

結晶情報を与えて
任意の大きさの
原子モデルを作成

原子の削除・複製・移動・
元素の変更など

水素原子の付加、
MM3力場パラメータの
生成など

SPMシミュレータの
各ソルバーに適した
形式で出力

欠陥のあるグラファイトを作成

結晶情報

空間群番号: 194

格子定数:

$a = 2.464 \text{ \AA}$

$b = 6.711 \text{ \AA}$

Fractional座標:

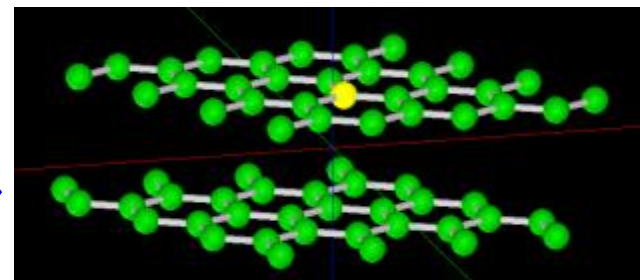
C (0, 0, 1/4)

C (1/3, 2/3, 1/4)

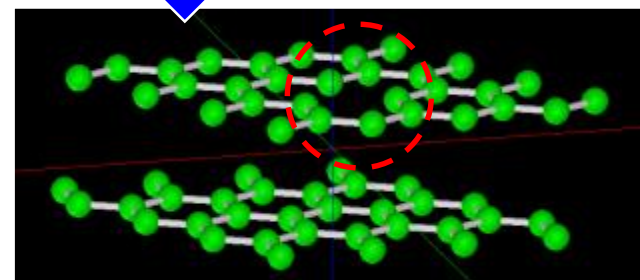
向きや大きさ

ミラー指数: (0 0 1)

格子のサイズ: (4, 4, 1)



原子を選択して削除



MM3力場パラメータの生成

txyz形式で出力

xyz形式で出力

CG

MD

GeoAFM

FemAFM

DFTB

【SetModel】原子モデル作成

SetModel

結晶情報を与えて
任意の大きさの
原子モデルを作成

原子の削除・複製・移動・
元素の変更など

水素原子の付加、
MM3力場パラメータの
生成など

SPMシミュレータの
各ソルバーに適した
形式で出力

シリコンクラスター探針モデルの作成

結晶情報

空間群番号: **227**

格子定数:

$a = 5.4 \text{ \AA}$

Fractional座標:

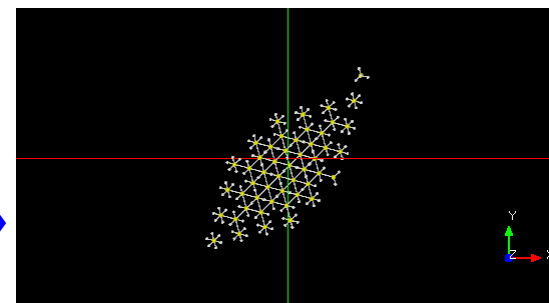
Si (0, 0, 0)

向きや大きさ

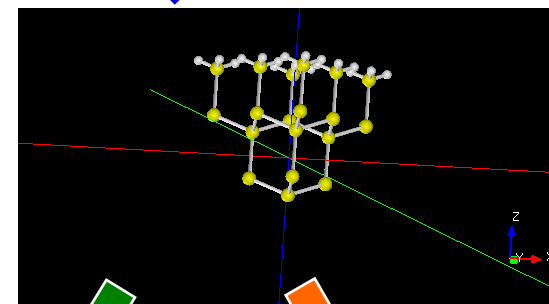
ミラー指数: (1 1 1)

格子のサイズ: (2, 2, 3)

ダングリングボンドを
水素終端する



探針の構造に不要な
原子を選択して削除



MM3力場パラメータの生成

txyz形式で出力

xyz形式で出力

CG

MD

GeoAFM

FemAFM

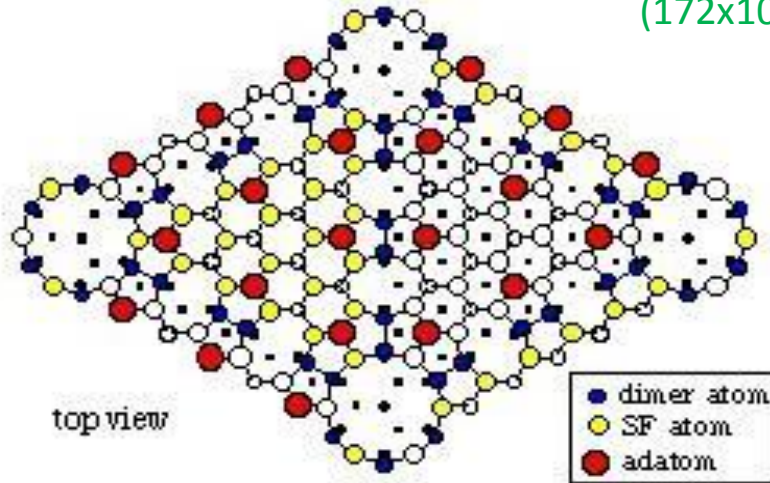
DFTB

【DFTB】Bardeenの摂動法とDFTB法によるSTM像のシミュレーション

-トンネル電流の計算-

$$I(\mathbf{R}, V) = \frac{2\pi e}{\hbar} \int_{E_F^L}^{E_F^R} \sum_{ii'} G_{ii'}^S(E) J_{i'}(\mathbf{R}) G_{jj'}^T(E + eV) J_{ji}(\mathbf{R}) dE$$

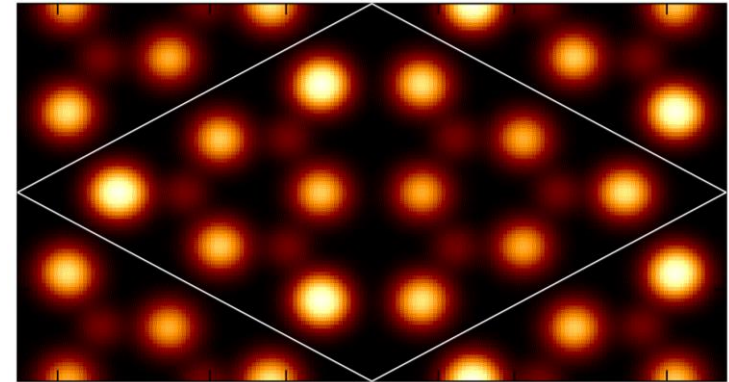
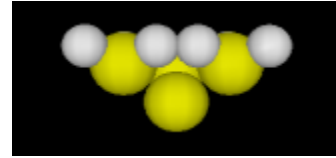
Si(111)-7x7 DAS 構造



Unit cell of Si(111)-7x7 DAS structure

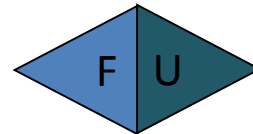
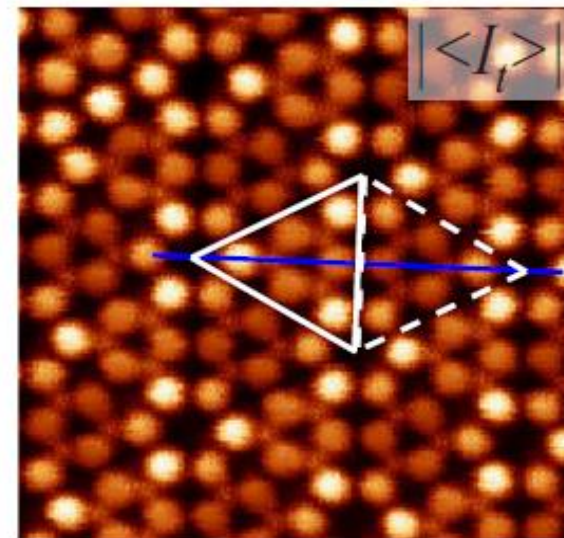
DFTB STMシミュレーション

Si₄H₉ tip; 探針高さ = 4.0 Å



計算時間 1.5 時間
(172x100 pixels)

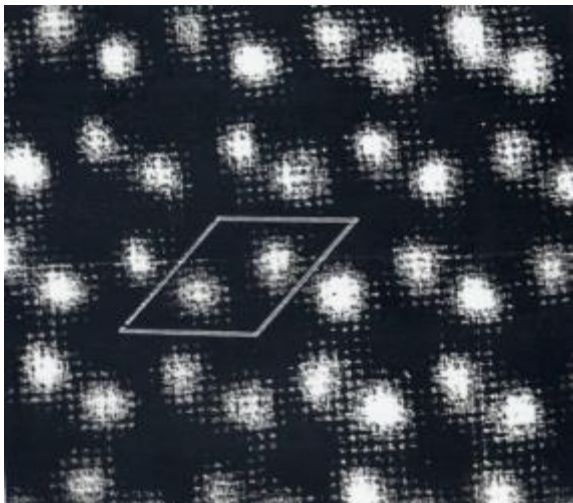
実験 by Sawada et al. (2009)



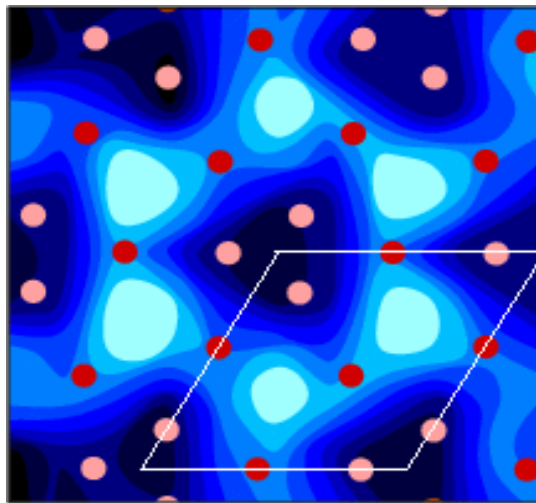
F領域とU領域の明るさの違いを再現
レストアトムがわずかに見えることを再現

【DFTB】SPMは対象の何をどう見るのか？ $\text{Si } \sqrt{3} \times \sqrt{3}\text{-Ag}$ 表面の場合

STM 実験



STM 理論

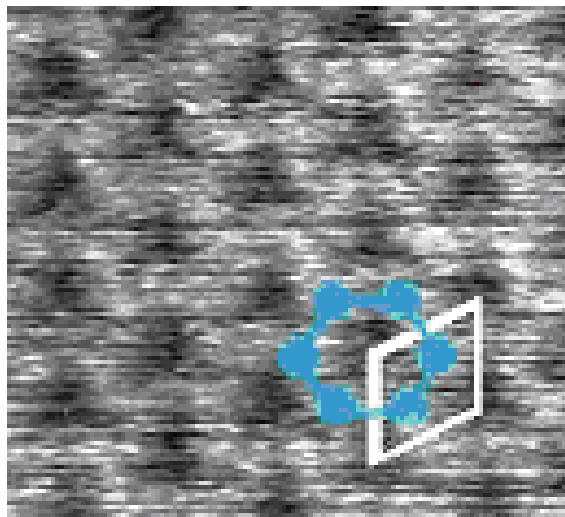


S. Watanabe, M. Aono and M. Tsukada,
Phys. Rev. B. 44, 8330 (1991)

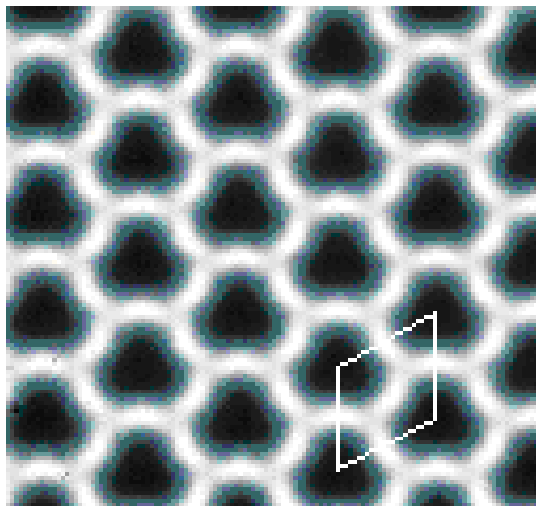
同じ表面だが
STM像とAFM像は
全く異なる??

STM 像は、非占有波動関数の
振幅を見ている。

ncAFM 実験



ncAFM 理論

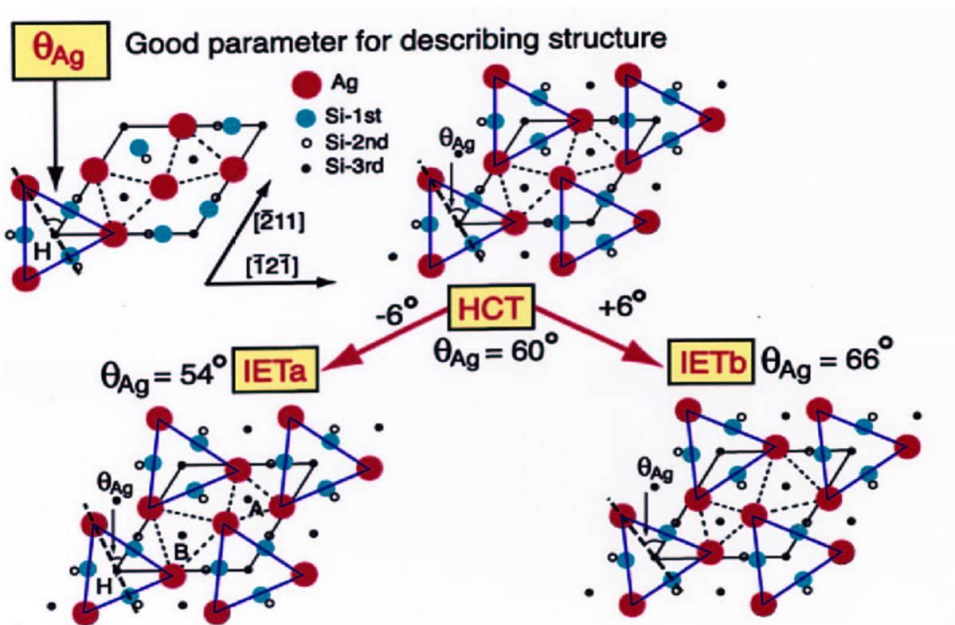


N. Sasaki, S. Watanabe, M. Tsukada,
Phys. Rev. Lett. 88, 046106 (2002).

**AFM像の再現は、理論計
算によって再現される
が.....**

【DFTB】Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 表面のncAFM像の温度依存性

N. Sasaki, S. Watanabe, M. Tsukada,
Phys. Rev. Lett. 88, 046106 (2002).

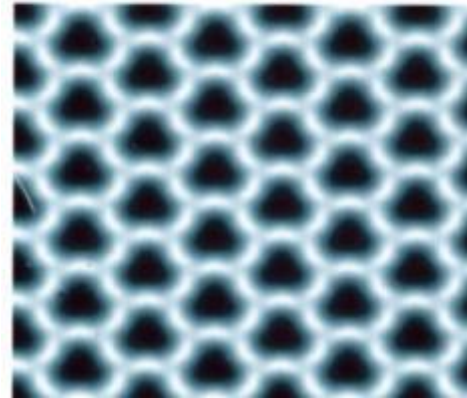


温度依存性は最外層銀原子の
構造揺らぎによって説明できる。

実験と理論の良い
一致が見られた。

理論

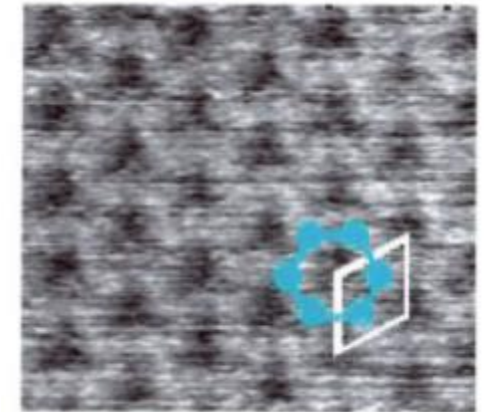
$d=4.50 \text{ \AA}$



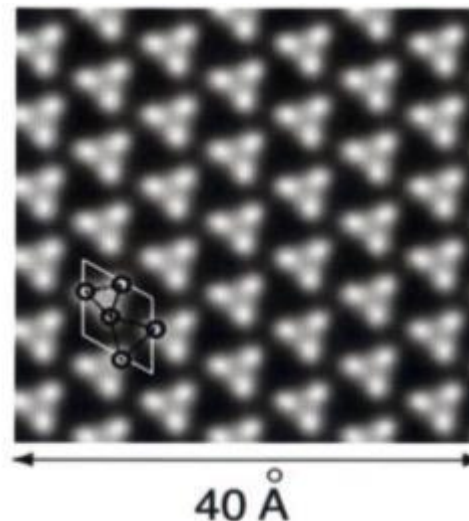
実験

By Prof. Morita

$T=300K$



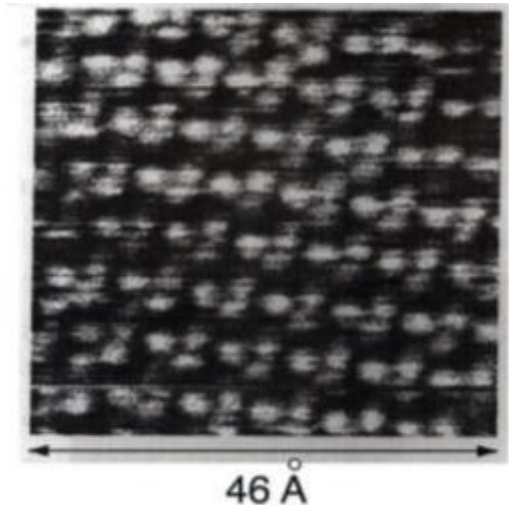
理論



実験

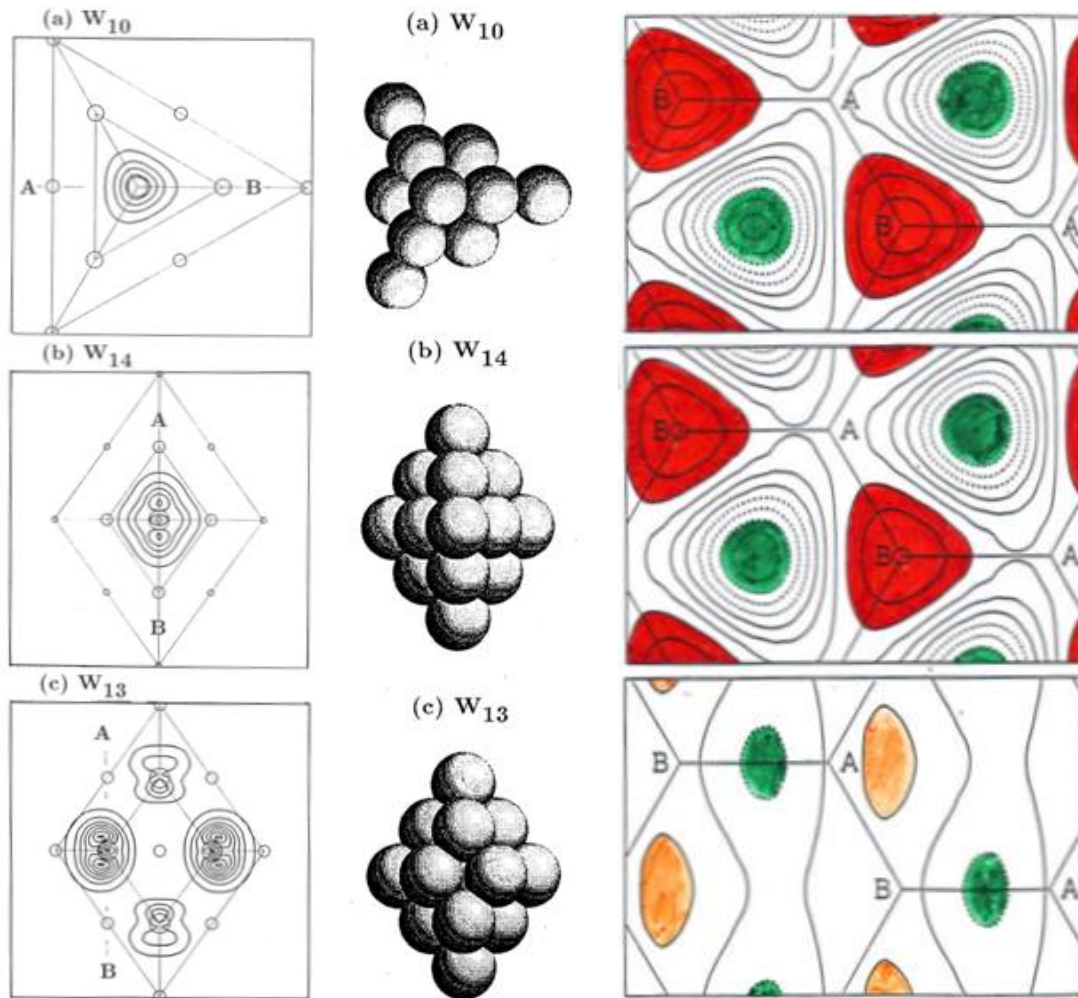
By Prof. Morita

$T=6.2K$

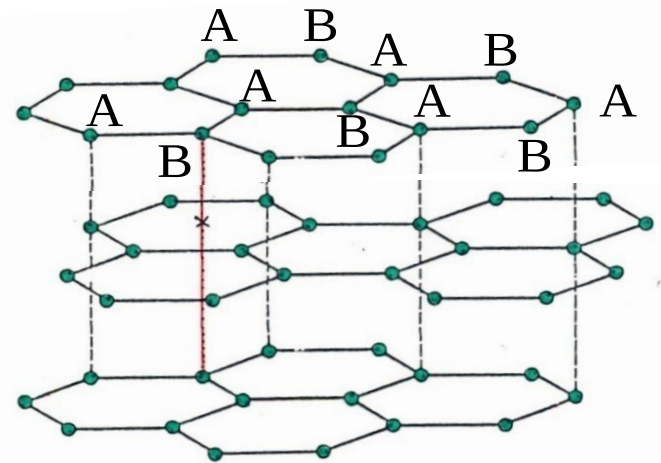


【DFTB】探針形状の効果

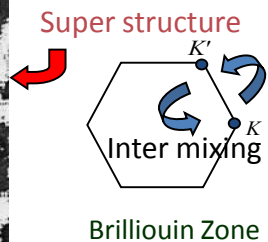
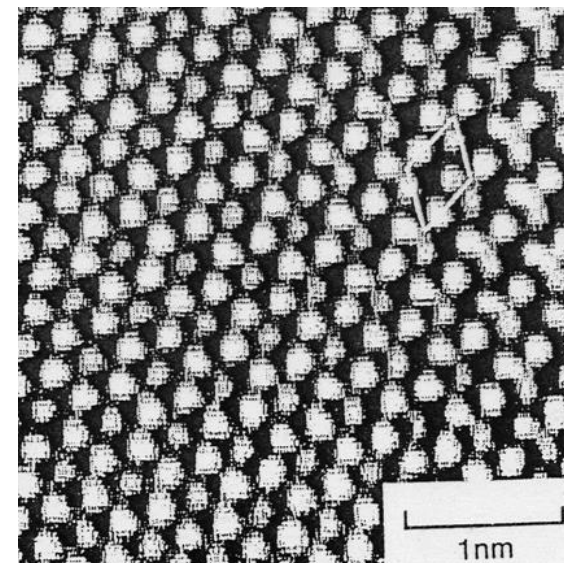
グラファイトのSTM像の場合



N. Isshiki, K. Kobayashi, M. Tsukada,
J. Vac. Sci. Technol. B 9(2), 475 (1991).



Nakagawa et al., Proc. Ann. Meeting of
The Phys. Soc. Jpn, (1989) 374

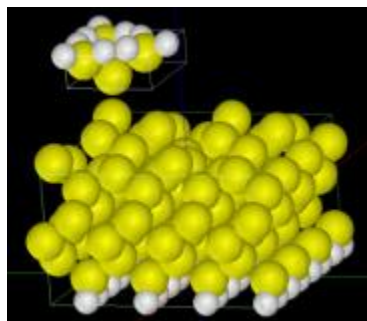


【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面のSTM観察とシミュレーション

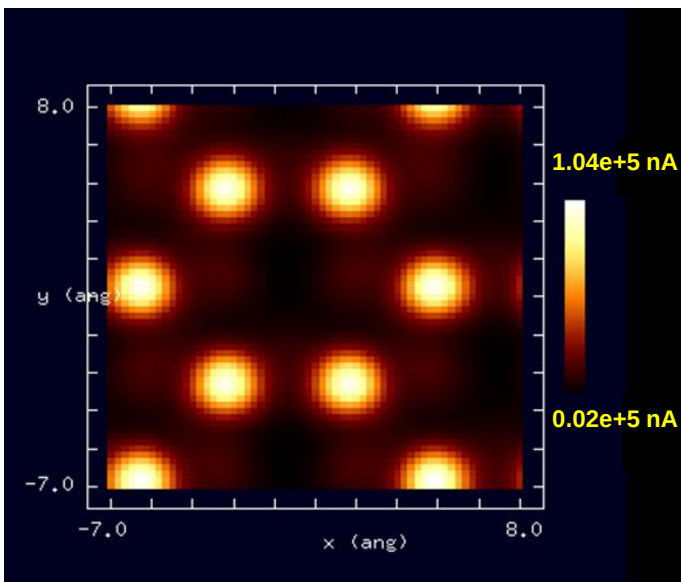
DFTB

探針・試料モデル

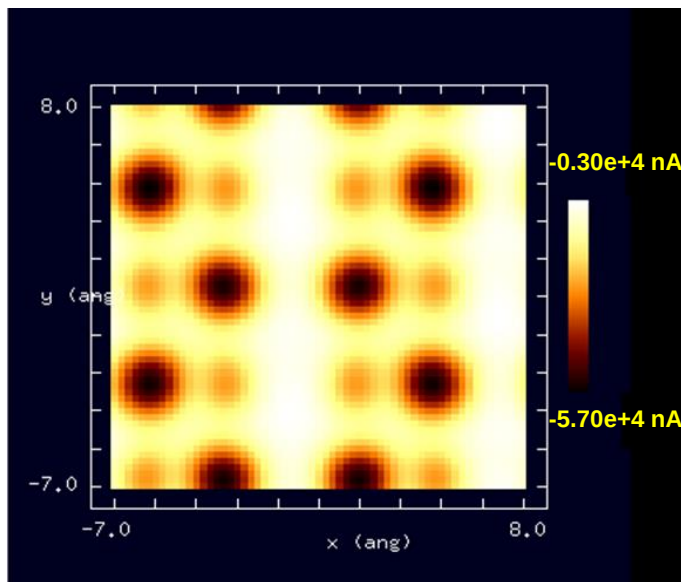
探針: Si_4H_9
試料表面: Si(001)-c(4x2)
探針-試料間の距離: 2.32 Å



STM像の計算結果



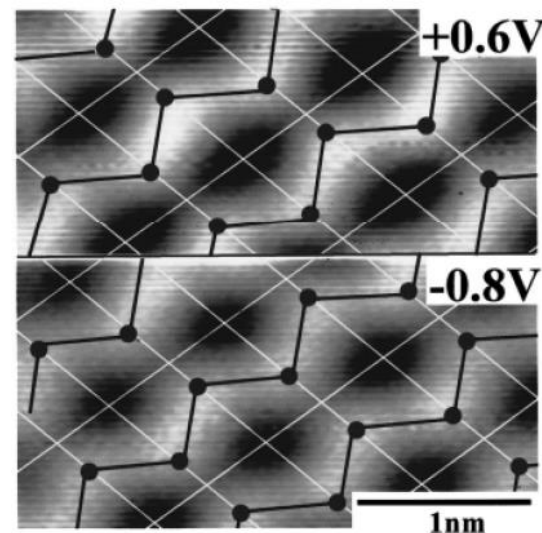
バイアス電圧 +1.0V



バイアス電圧 -1.0V

バイアスによって、蜂の巣構造が反転

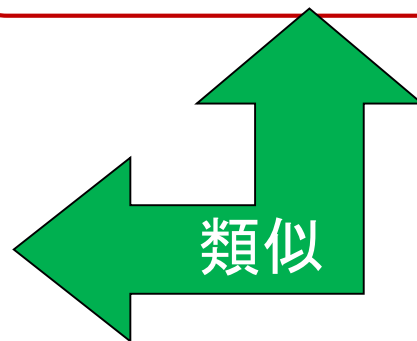
実験



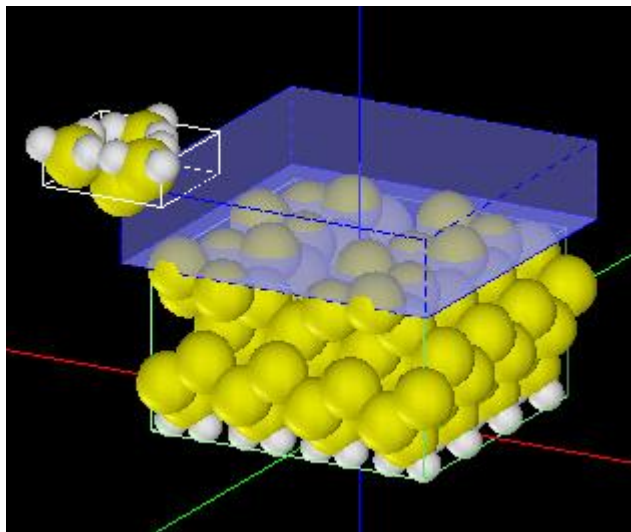
Si(001) 表面のトンネル電流像

バイアスの正負によって蜂の巣構造が反転することが知られている。

K. Hata, S. Yasuda, and H. Shigekawa,
Phys. Rev. B **60**, 8164 (1999).



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

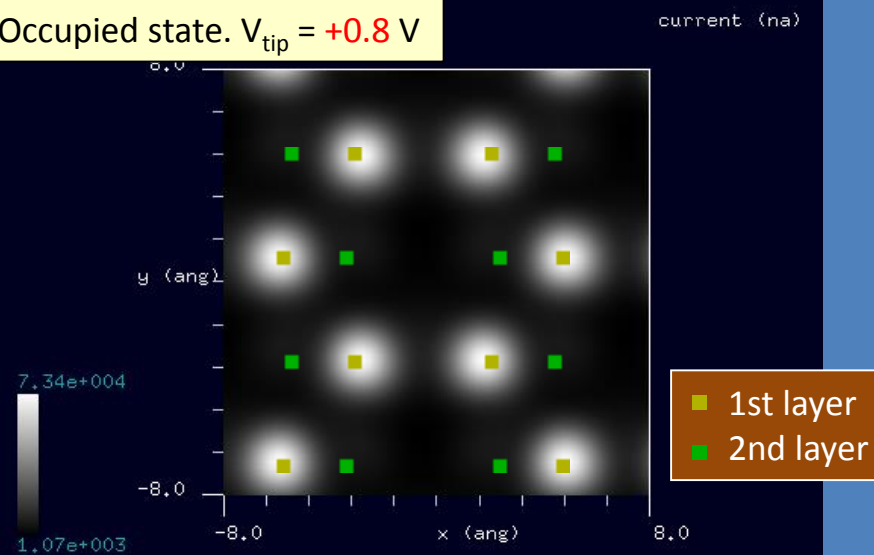


探針: Si_4H_9
試料: Si(001)-c(4x2)結晶表面
探針高さ: 2.6 Å

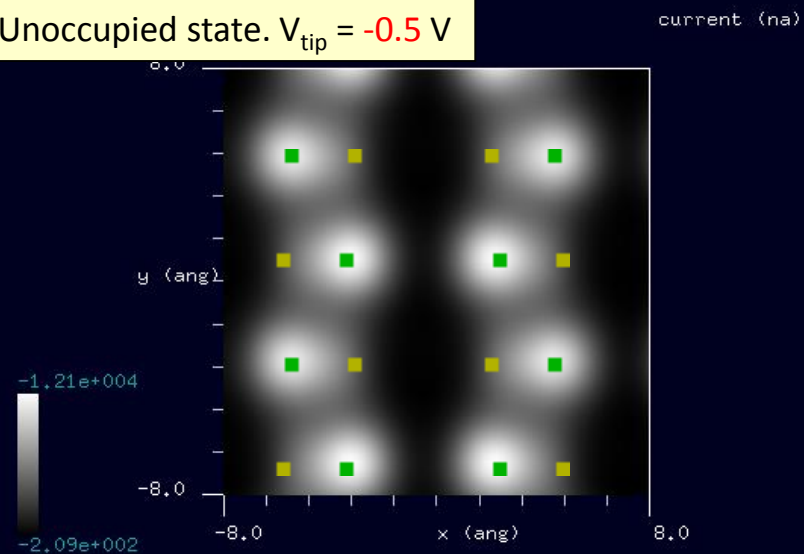
六角形のハニカム構造がバイアスの正負によって反転することを再現した。

Constant height STM. Current map

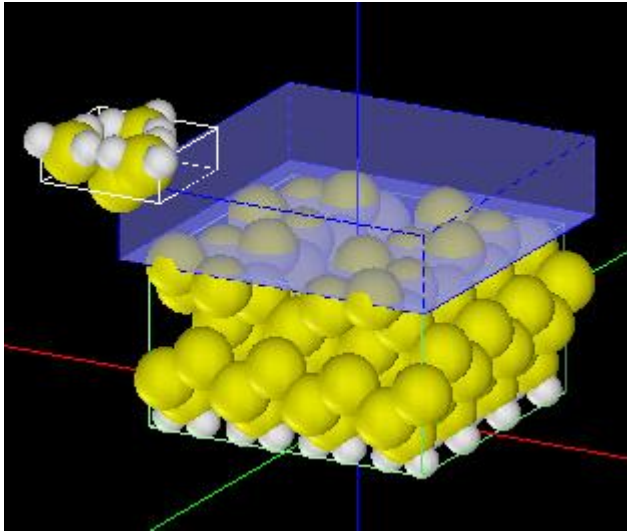
Occupied state. $V_{\text{tip}} = +0.8$ V



Unoccupied state. $V_{\text{tip}} = -0.5$ V



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

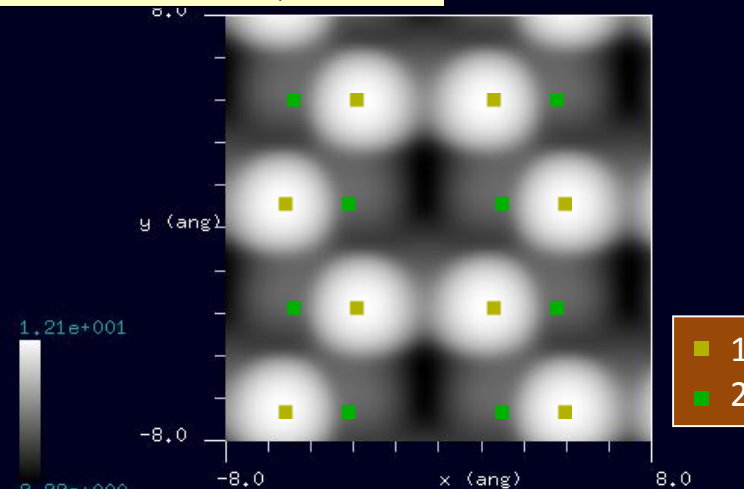


探針: Si_4H_9
試料: Si(001)-c(4x2)結晶表面
Current = 6000 nA
for both calculations

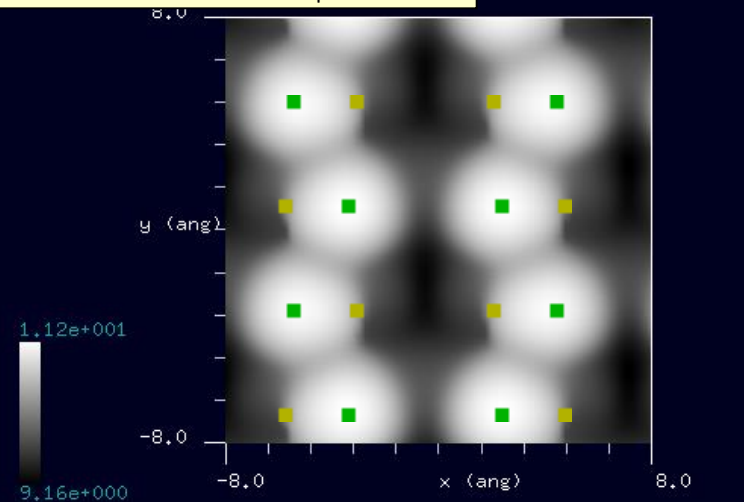
六角形のハニカム構造がバイアスの正負によって反転することを再現した。

Constant current STM topography

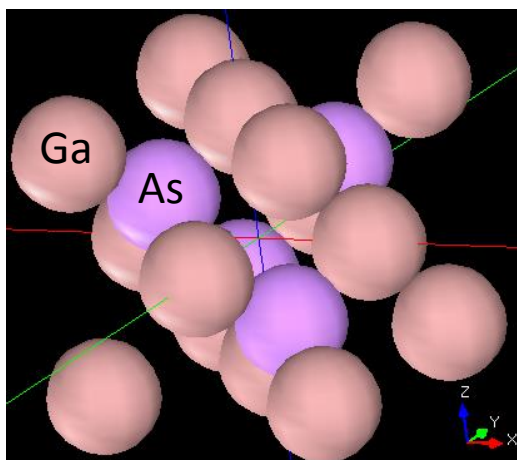
Occupied state. $V_{\text{tip}} = +0.8 \text{ V}$



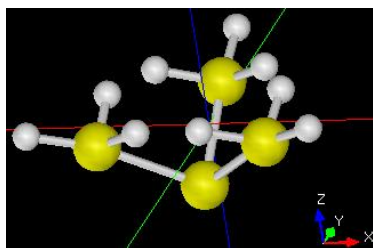
Unoccupied state. $V_{\text{tip}} = -0.5 \text{ V}$



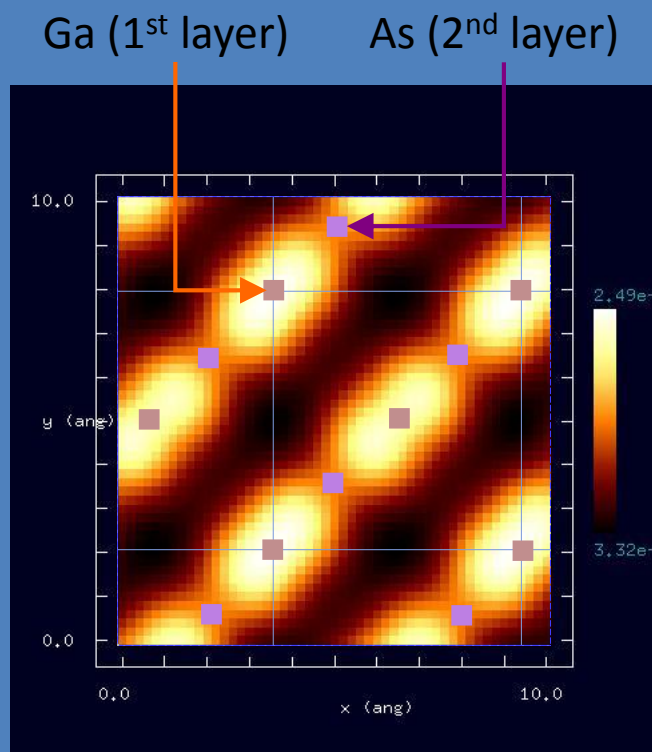
【DFTB】GaAs(100)表面のSTMシミュレーション



試料:GaAs(100)の単位格子



探針:Si₄H₉



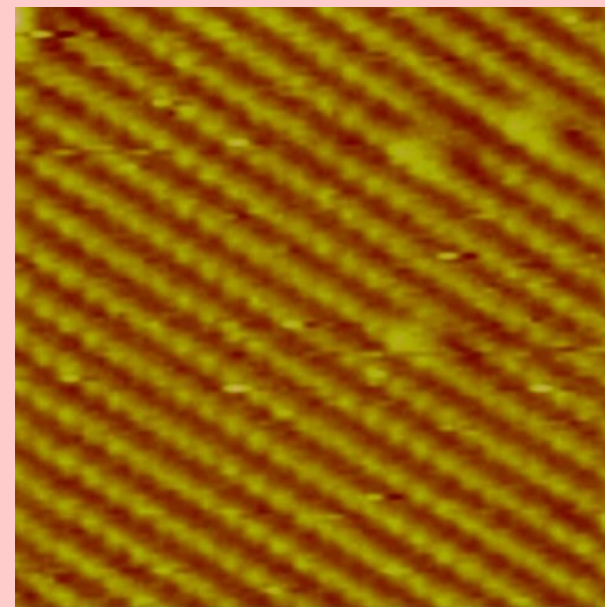
シミュレーション結果

探針 - 試料間の距離: 3.0[Å]

探針バイアス: +2.0[V]

高さ一定STM計算

cf. Experiment



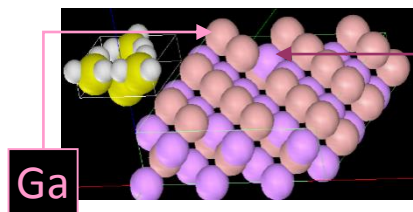
GaAs (100) surface cleaved in UHV (7.2 nm x 7.2 nm) (STM).

<http://info.ifpan.edu.pl/~wawro/subframes/Surfaces.htm>

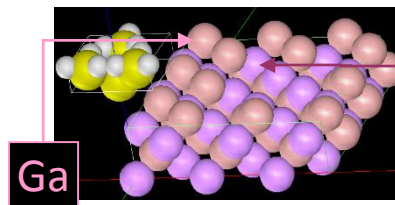
探針の種類、スキャンモード、バイアス、電流の情報なし。

第2層目のAsの影響で電流値の高い領域が斜めになった。

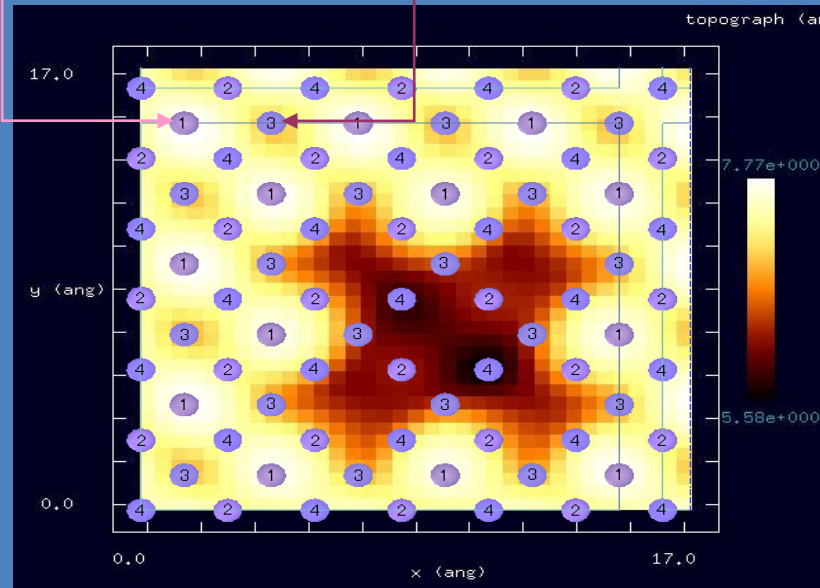
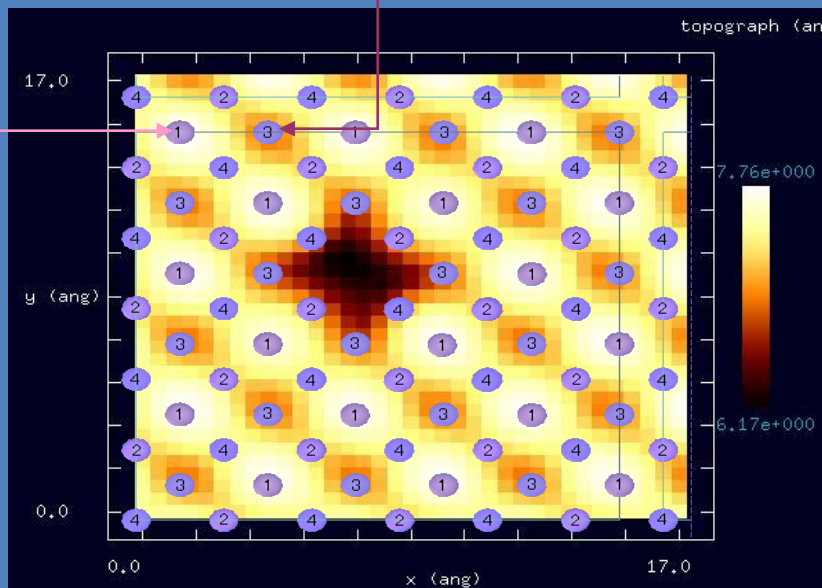
【DFTB】GaAs(100)結晶表面の欠陥のconstant current STMシミュレーション



探針: Si_4H_9
試料: GaAs(100)表面の
最表面からGa原子を
1つ除去したモデル



探針: Si_4H_9
試料: GaAs(100)表面の
最表面からGa原子を
5つ除去したモデル



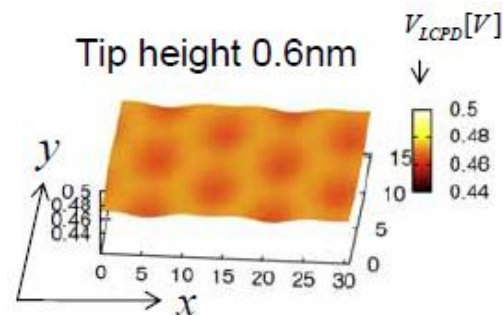
シミュレーション結果
constant current モード
電流値: 10,000[nA]
探針バイアス: 1.0[V]
範囲: 17.0[Å] × 17.0[Å]

最表面からGa原子を5つ除去すると、第2層目のAs原子の凹凸が見える

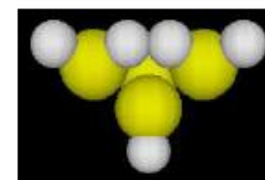
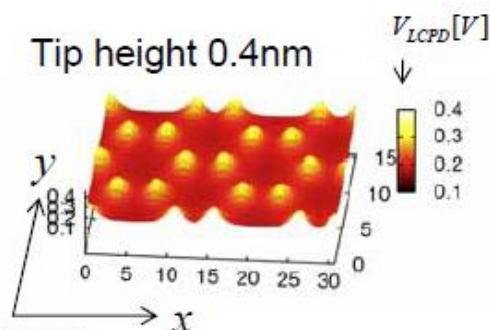
【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物のKPFM像

DFTB

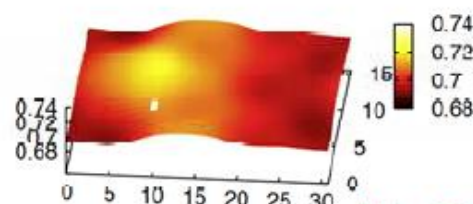
-局所接触電位差の分布像-



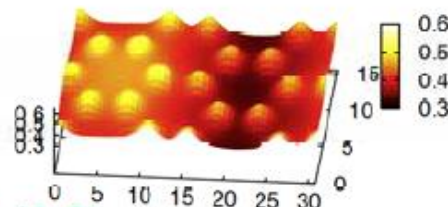
Si(100)c(4x2)



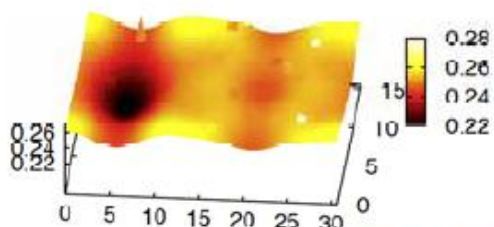
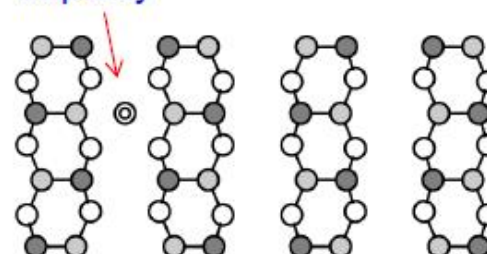
Si₄H₉ tip



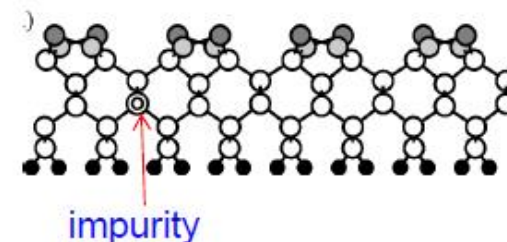
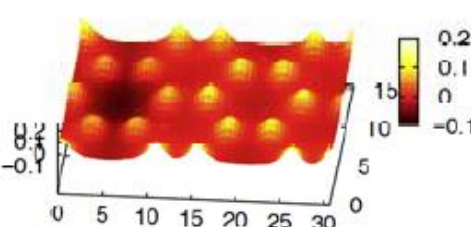
Al in Si(100)c(4x2)



impurity



P in Si(100)c(4x2)

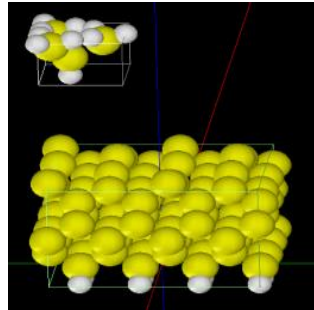


impurity

A.Masago et al, Phys. Rev. B 82 (2010)195433

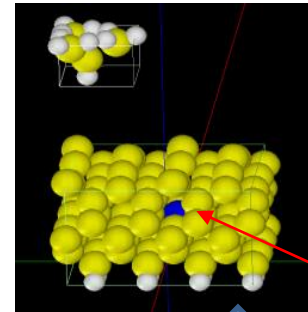
試料表面のごく浅い部分に不純物を持っているとしたシリコン表面を、KPFMで走査したときのシミュレーション結果。不純物の表面位置に原子スケールよりもやや大きいスポットが現れている。また、試料表面の原子によるスポットも確認することができる。

【DFTB】Si(001)-c(4x2)表面の埋め込まれた不純物(N原子)のKPFM像



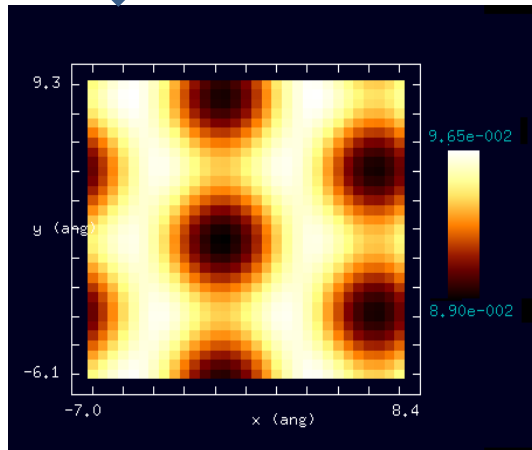
探針: $\text{H-Si}_4\text{H}_{10}$
試料表面: Si(001)-c(4x2)

探針-試料間の距離: 6 Å

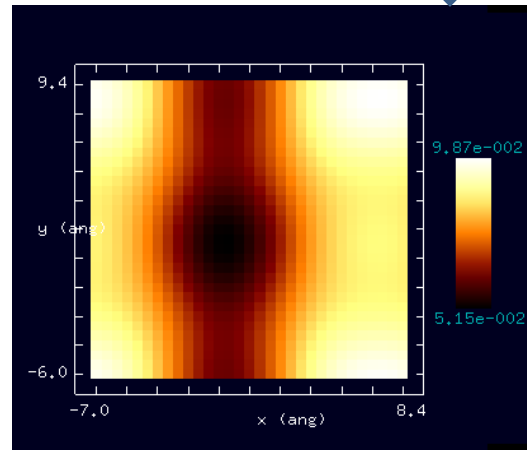


探針: $\text{H-Si}_4\text{H}_{10}$
試料表面:
 Si(001)-c(4x2) に
窒素原子をドーピングしたもの

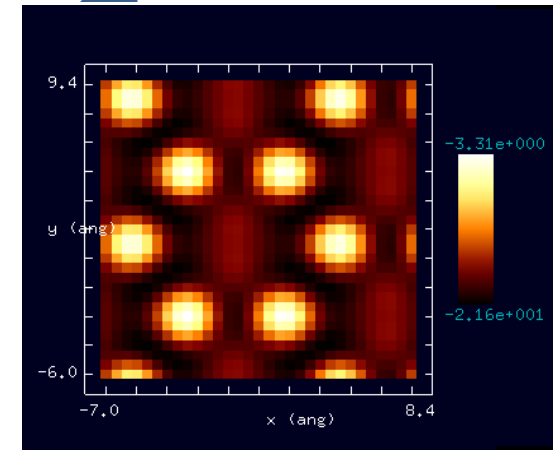
窒素原子



KPFM 局所接触電位差像
窒素原子ドーピングなし



KPFM 局所接触電位差像
窒素原子ドーピングあり
窒素をドーピングすることで、
局所接触電位差が
マイナスにシフトしている。

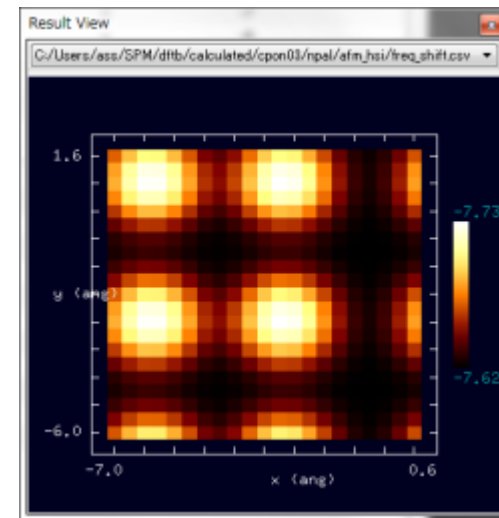
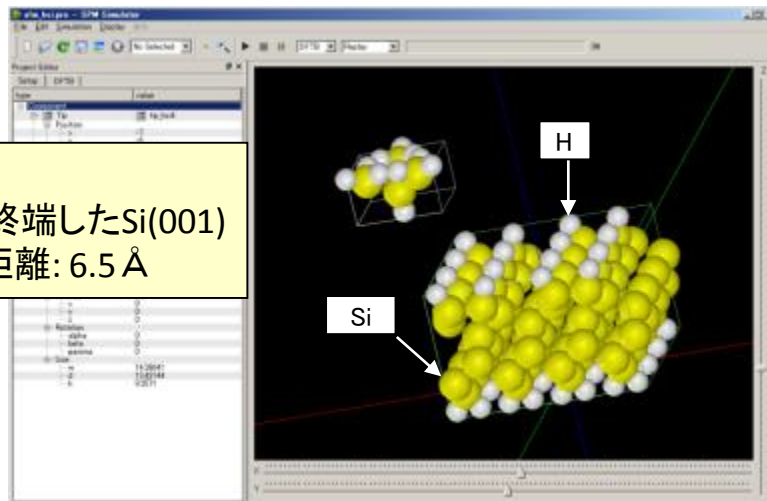


AFM 周波数シフト像
窒素原子ドーピングあり
周波数シフト像では
原子の高さを反映した像が
得られている。

【DFTB】周波数シフトAFM像、KPFM像の計算例

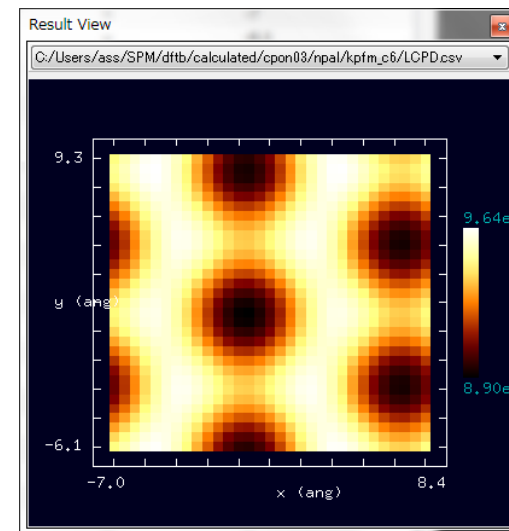
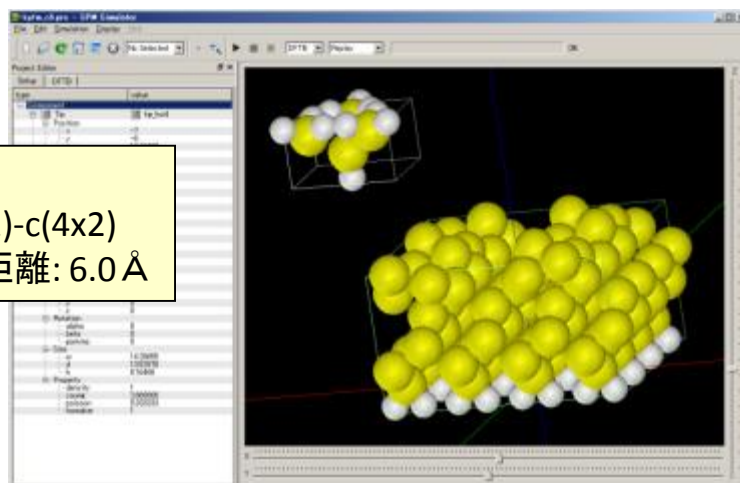
DFTB 周波数シフト像のシミュレーション

探針: Si_4H_{10}
試料表面: 水素終端したSi(001)
探針-試料間の距離: 6.5 Å



DFTB 接触電位差像のシミュレーション

探針: Si_4H_{10}
試料表面: Si(001)-c(4x2)
探針-試料間の距離: 6.0 Å



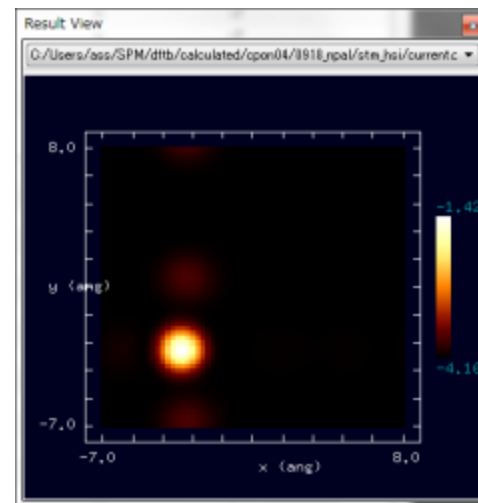
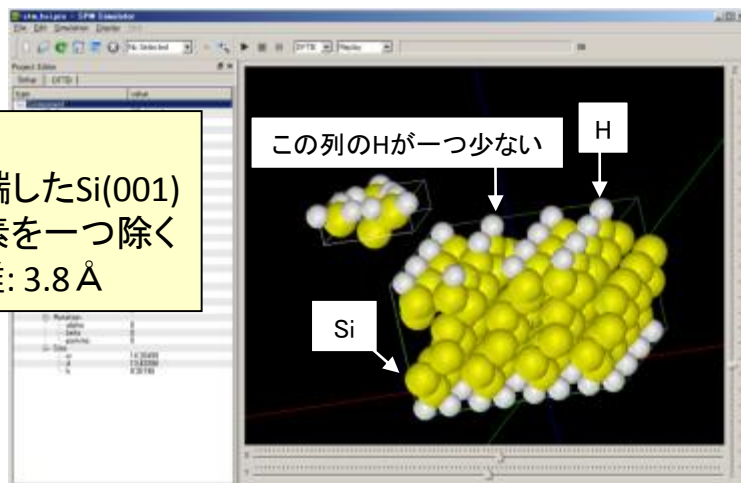
表面のアップダイマーを繋ぐようにした電位差の大きい領域が見られる。

【DFTB】トンネル電流像、トンネル電流スペクトルの計算例

DFTB

トンネル電流像 (STM) のシミュレーション

探針: Si_4H_9
試料表面: 水素終端した $\text{Si}(001)$
表面から水素を一つ除く
探針-試料間の距離: $3.8 \text{ \AA}$

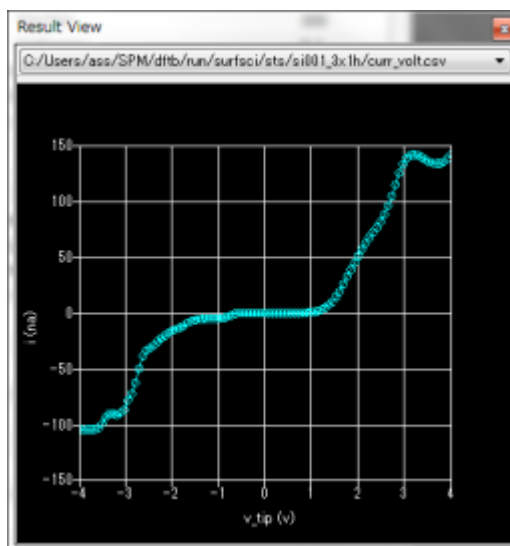
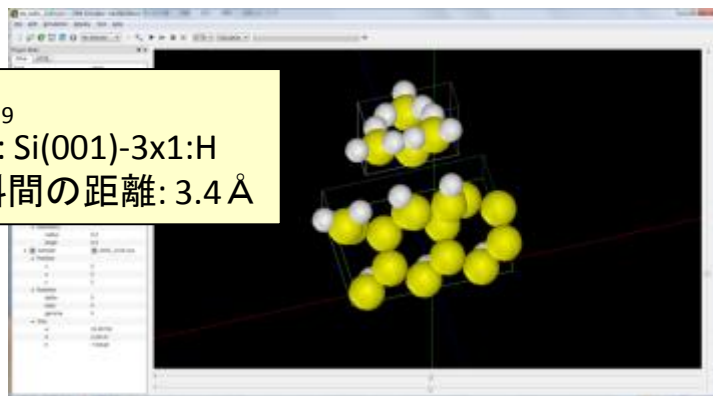


水素が抜けている位置にダングリングボンドがあることにより、電流値が大きくなることが分かる。

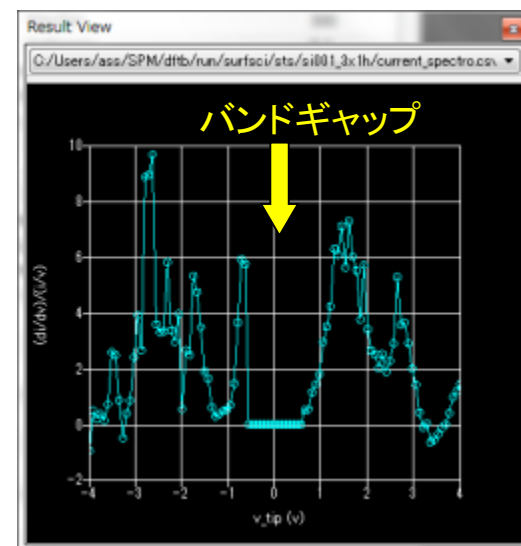
DFTB

トンネル電流スペクトル (STS) の計算

探針: Si_4H_9
試料表面: $\text{Si}(001)-3\times 1:\text{H}$
探針-試料間の距離: $3.4 \text{ \AA}$



I-V特性曲線



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

横軸は試料に対する探針の電圧

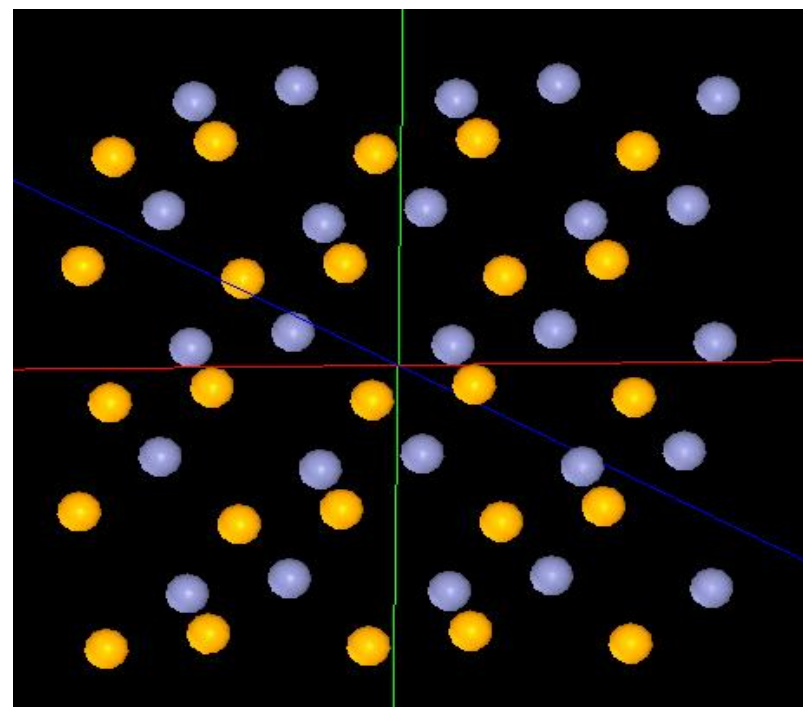
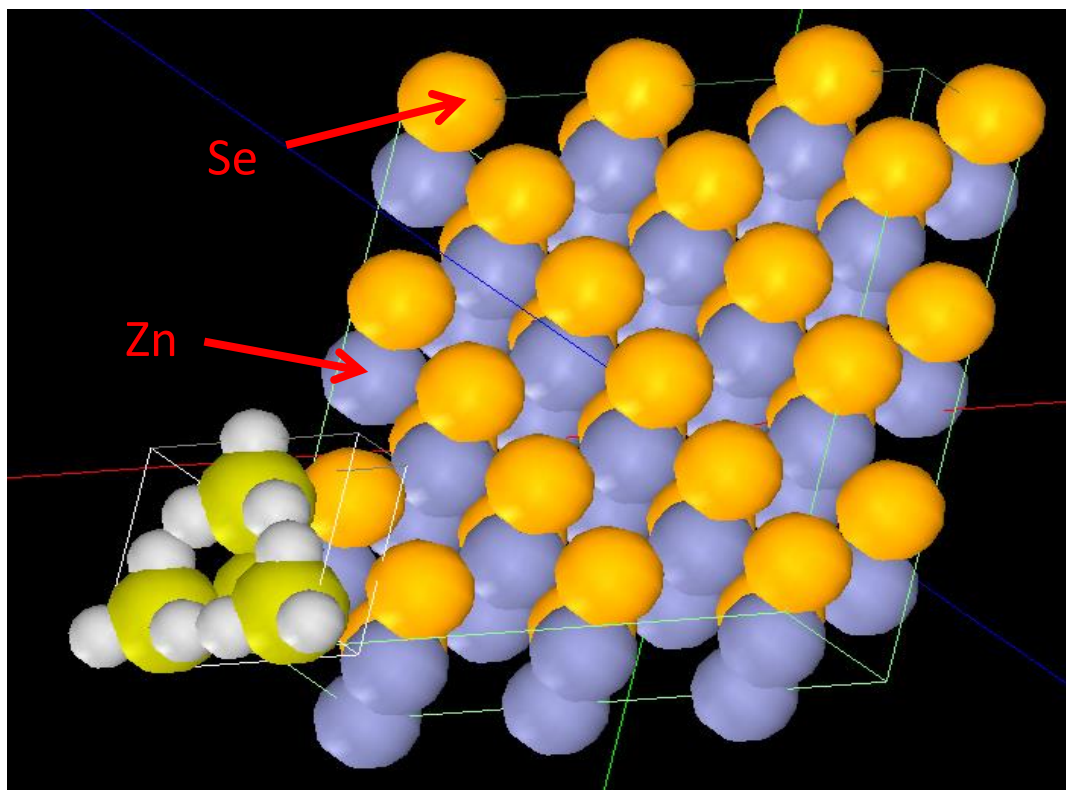
半導体関連トピック

DFTB

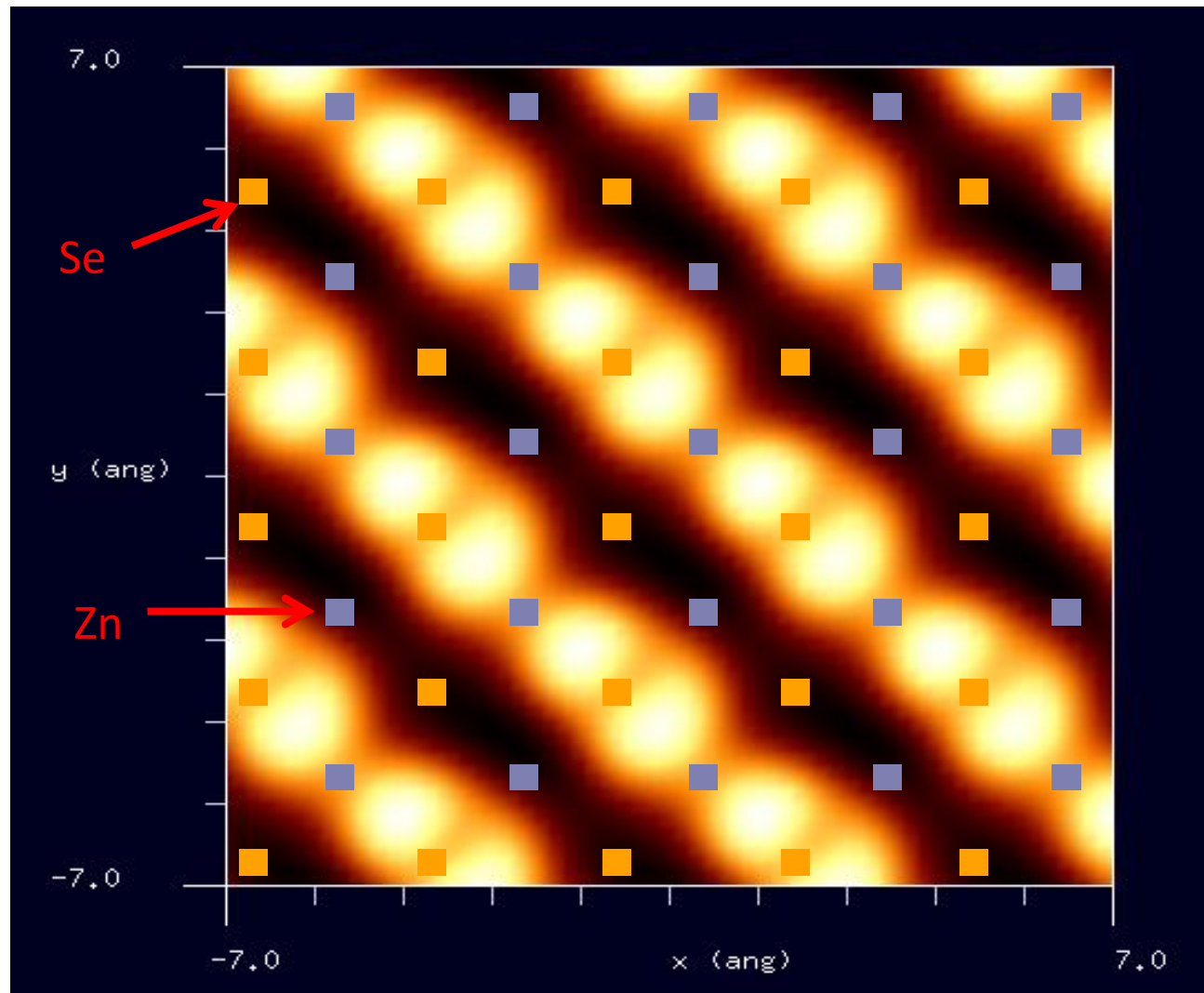
ZnSe (セレン化亜鉛 発光ダイオード、半導体レーザーの材料)

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

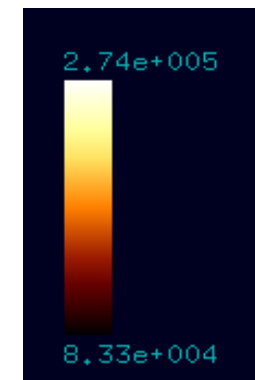
空間群番号や格子定数が分かっている
ば、SetModelでどのような結晶形状データも作成可能です



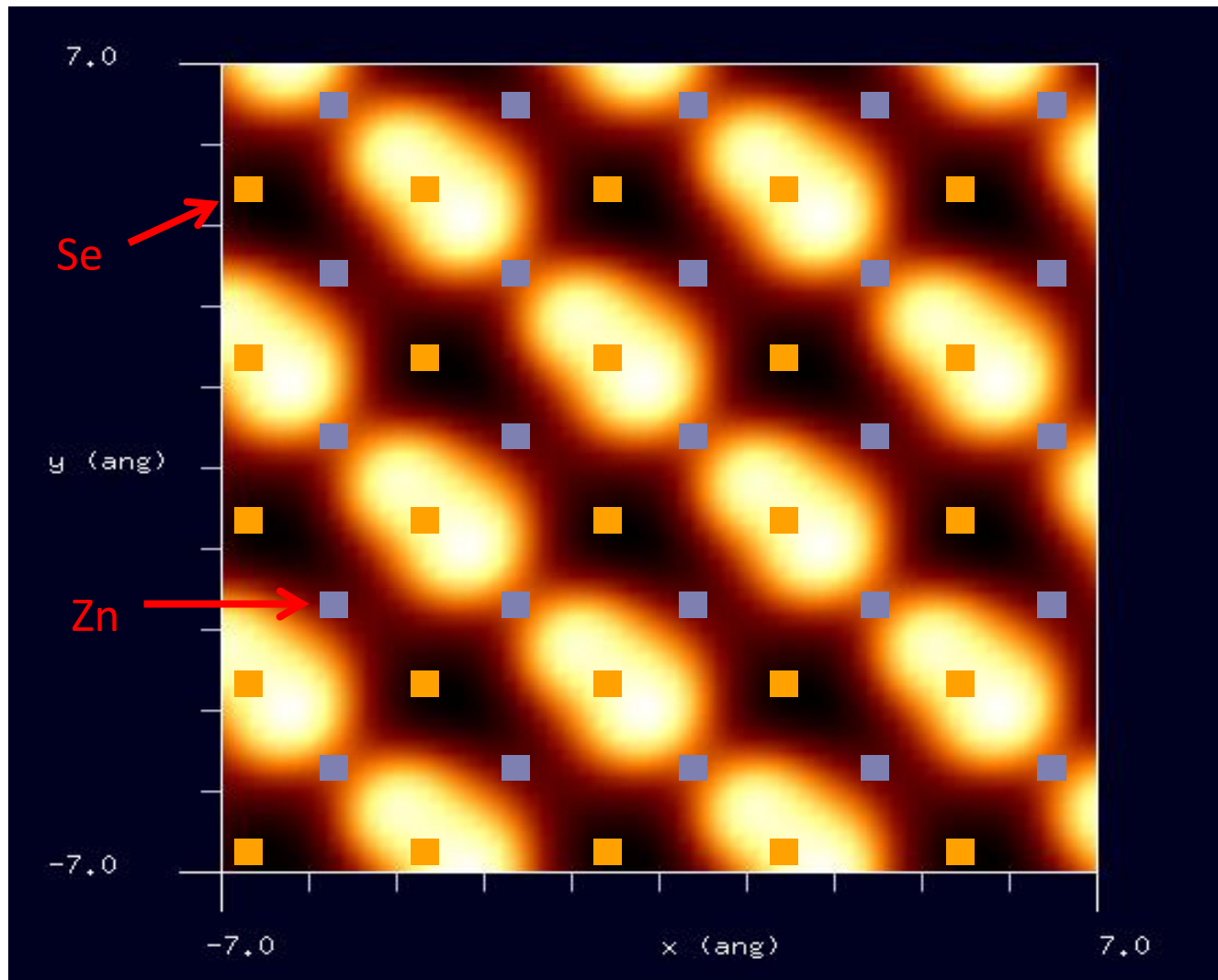
STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.2 Å
最大電流 2.74×10^5 nA、最小電流 8.33×10^4 nA



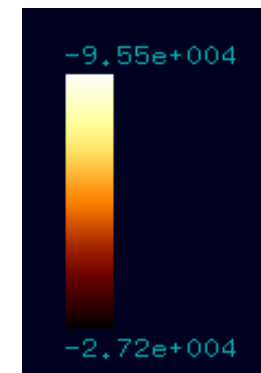
STM像は、印可電圧
の正負によって大きく
変化することがあります



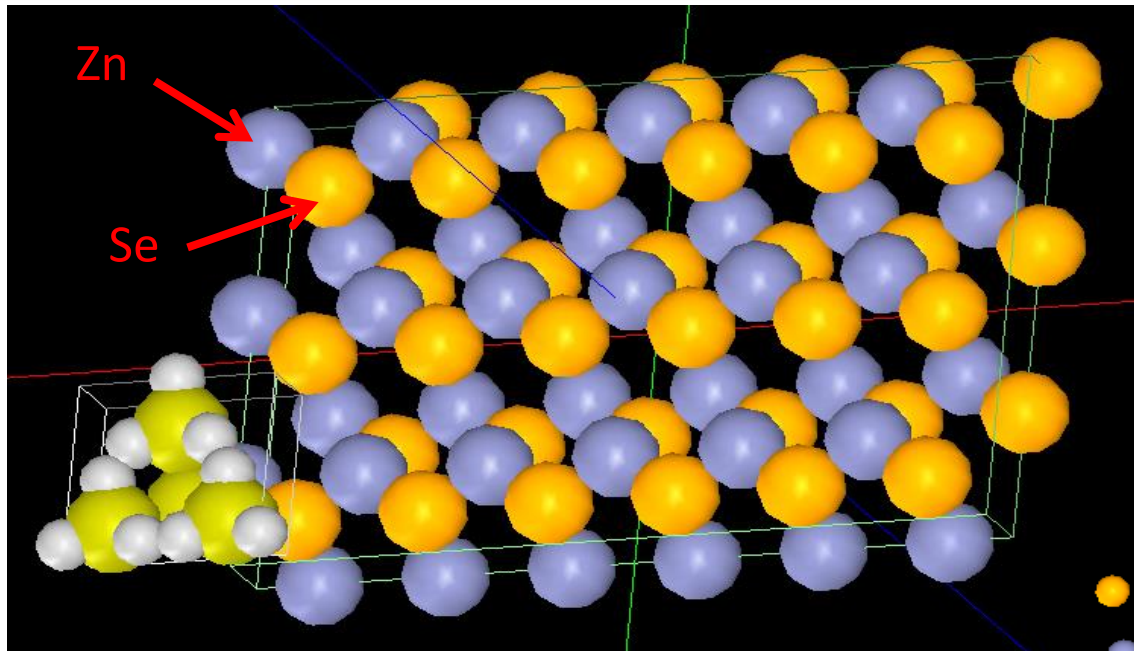
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.2 Å
最大電流 -2.72×10^4 nA、最小電流 -9.55×10^4 nA



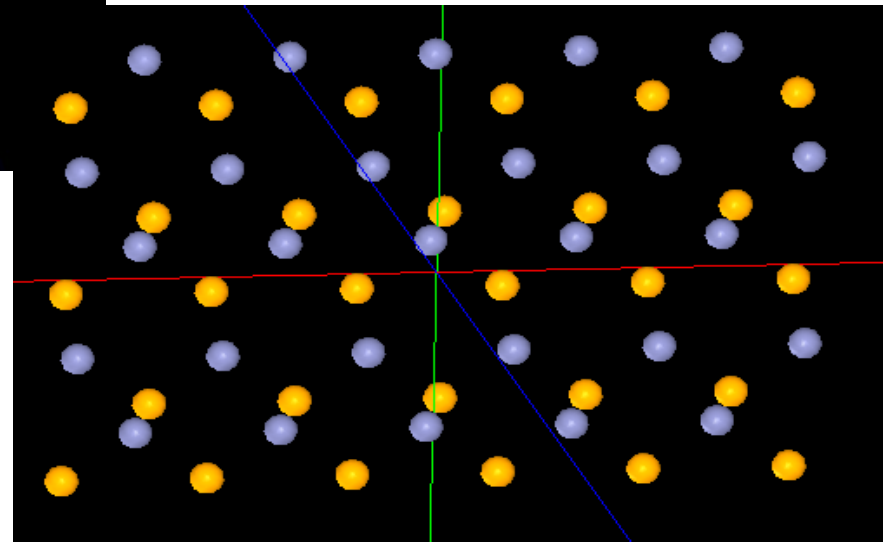
STM像は、印可電圧の正負によって大きく変化することがあります



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

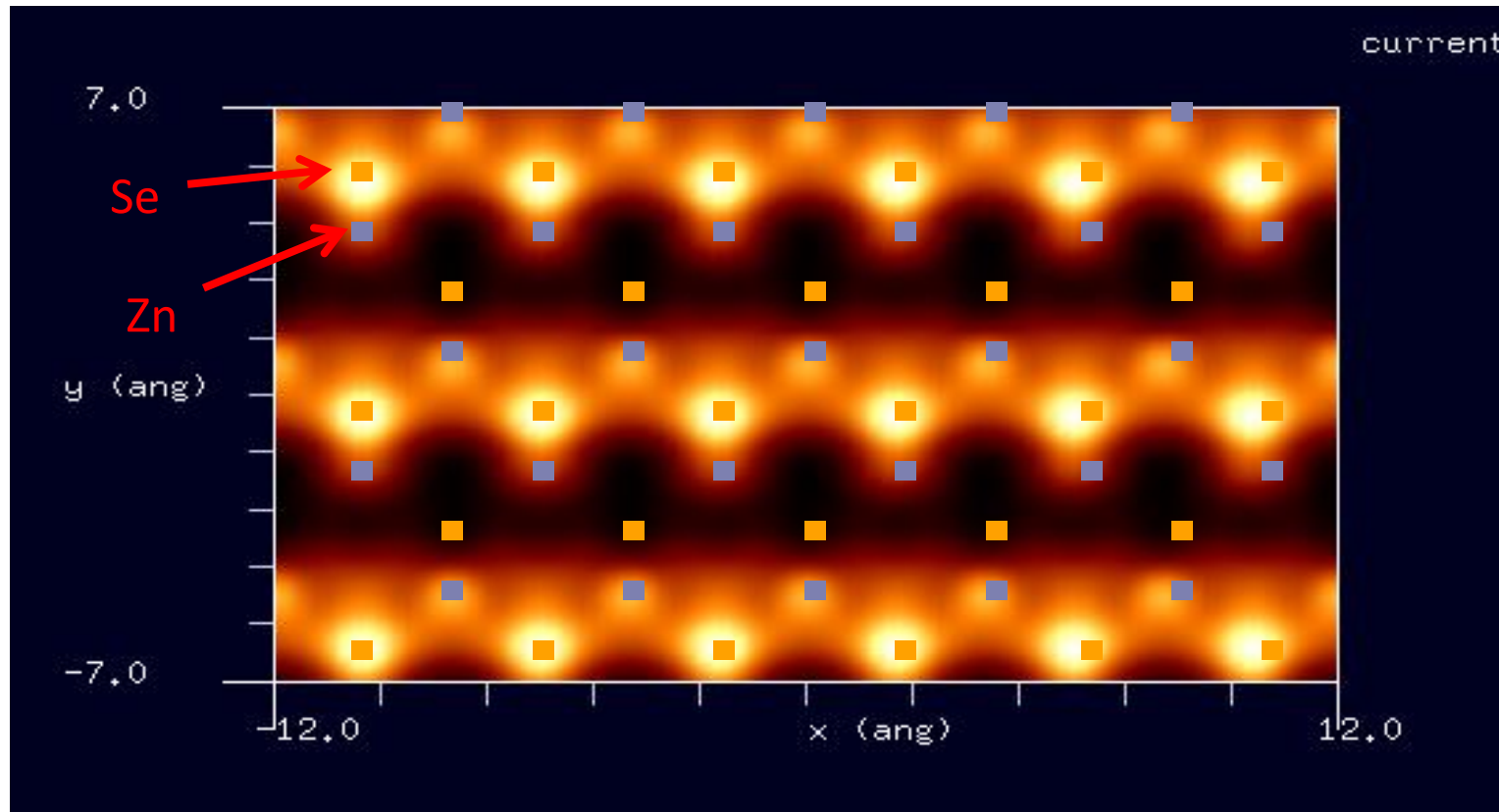


同じ結晶でも、劈開面が異なると、表面の構造は大きく変わります



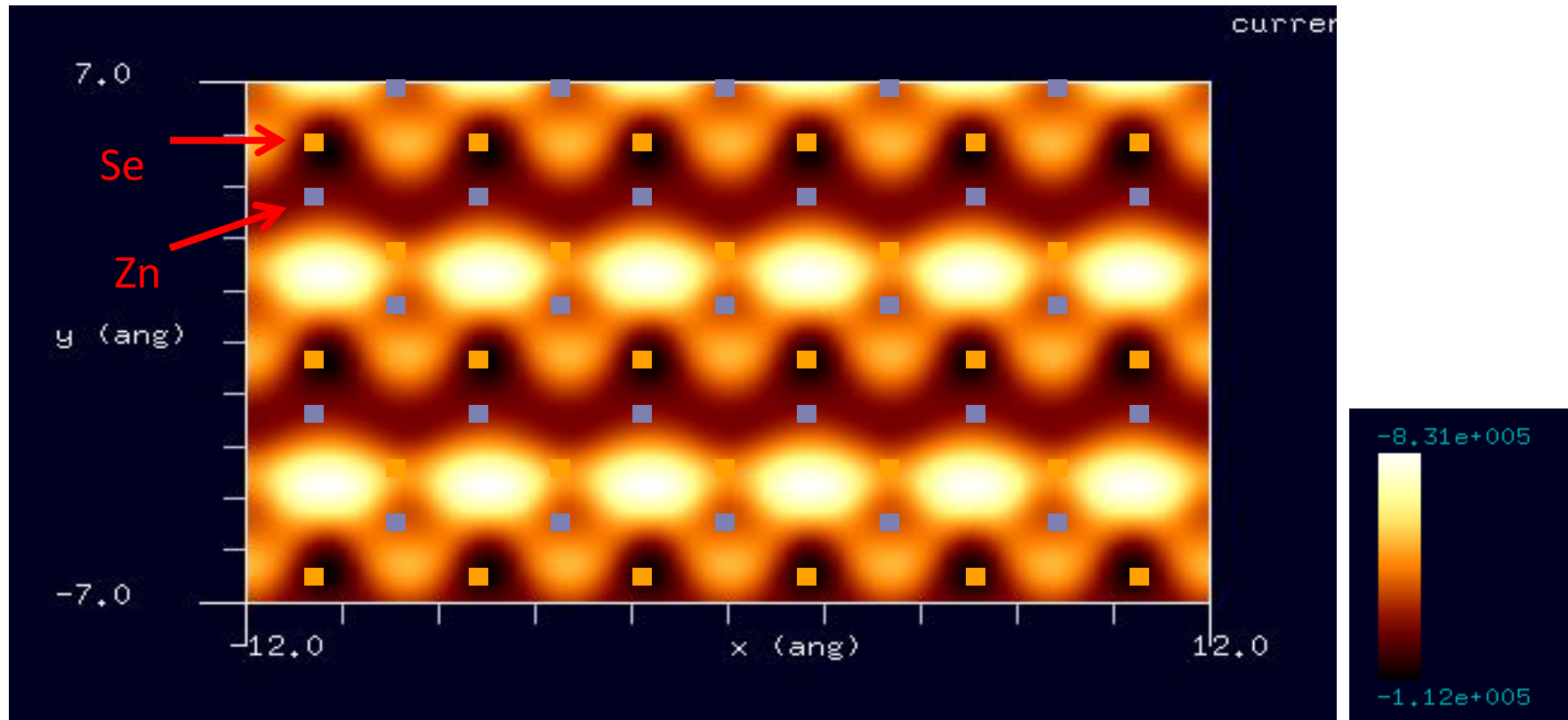
STM像は、印可電圧の
正負によって大きく変化
することがあります

STM画像: 印加電圧4V, 探針と試料の最短距離0.99 Å
最大電流 7.27×10^5 nA、最小電流 2.71×10^5 nA



STM像は、印可電圧の
正負によって大きく変化
することがあります

STM画像: 印加電圧-4V, 探針と試料の最短距離0.99 Å
最大電流 -1.12×10^5 nA、最小電流 -8.31×10^5 nA

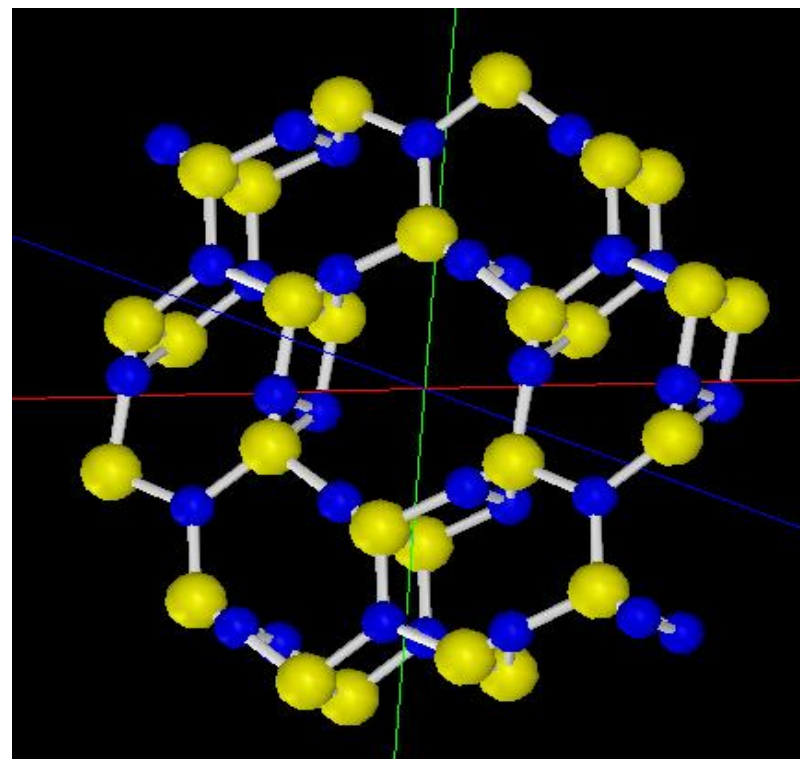
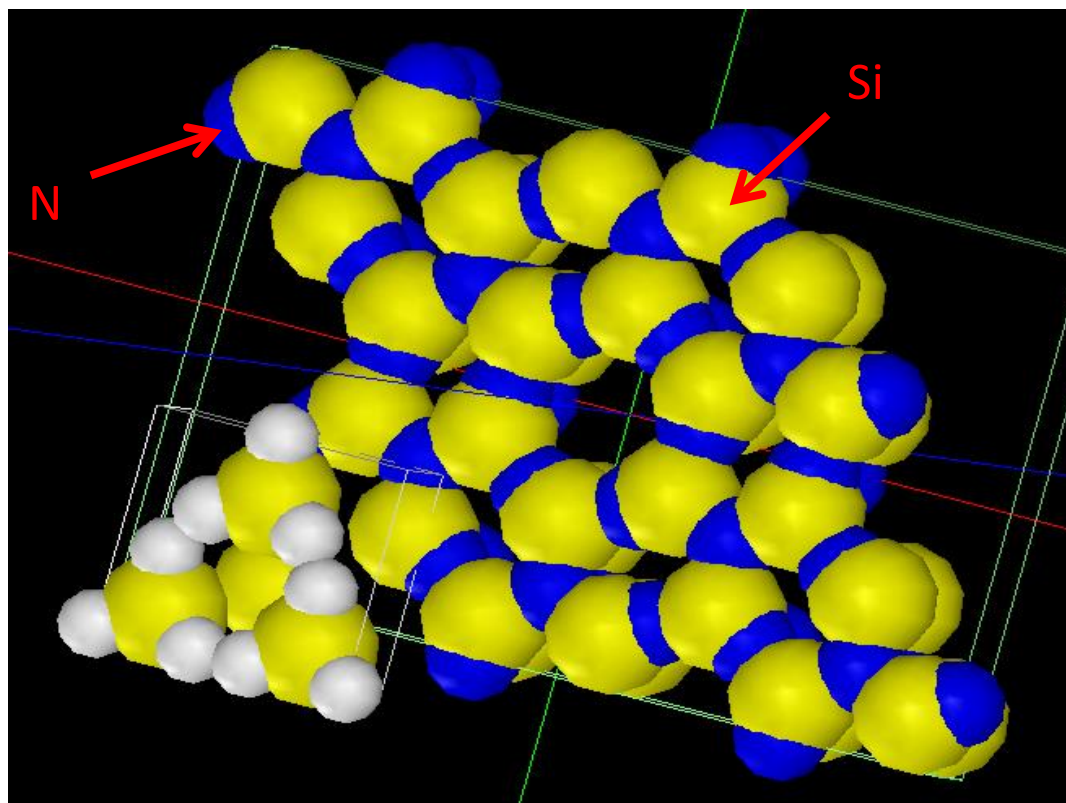


DFTB

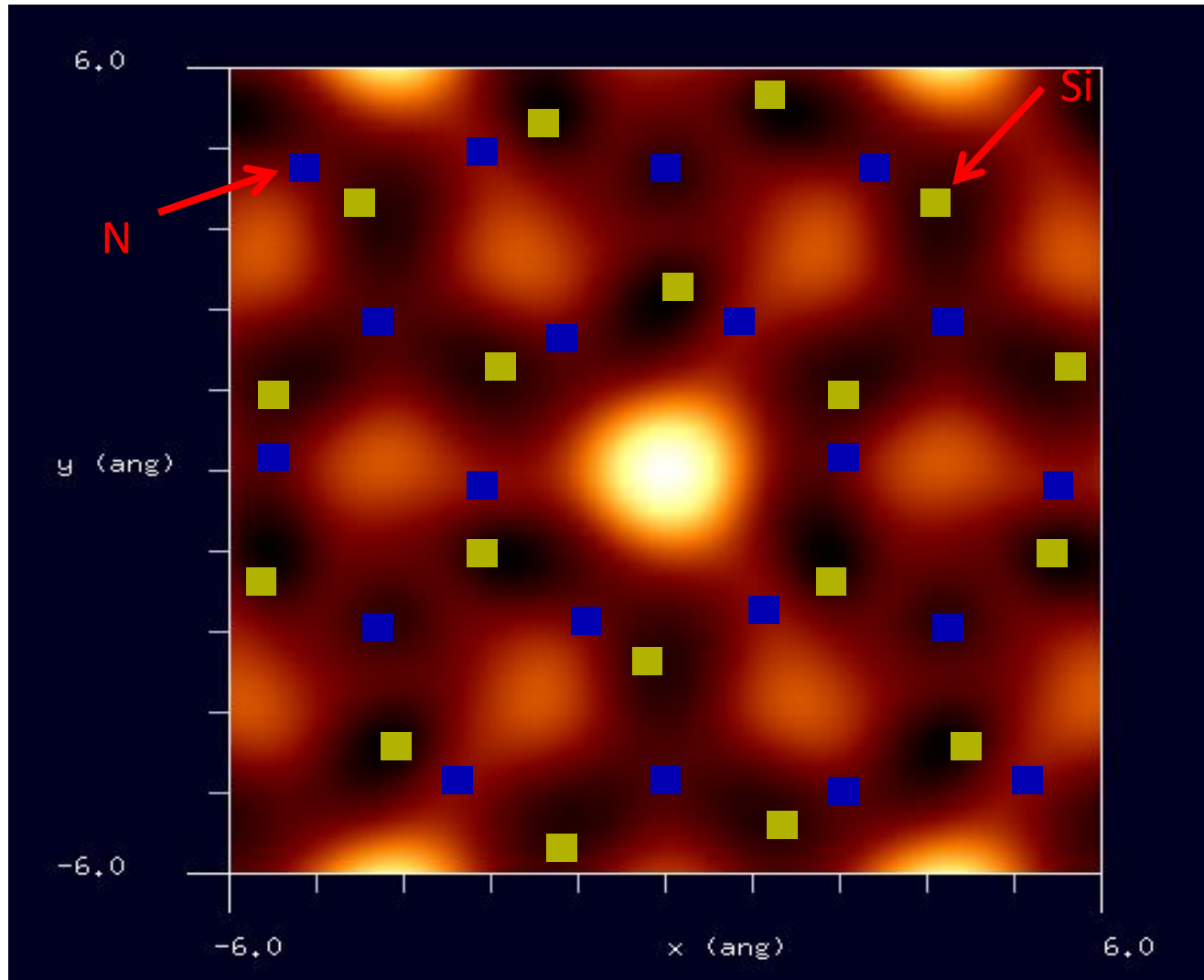
Si_3N_4 (シリコンナイトライド、エンジン部品に使用されるファインセラミック)

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

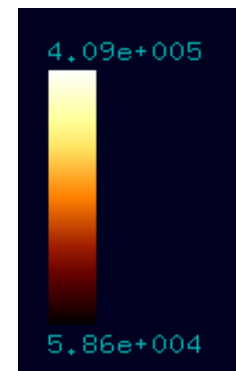
空間群番号や格子定数が分かっている
ば、SetModelでどのような結晶形状データも作成可能です



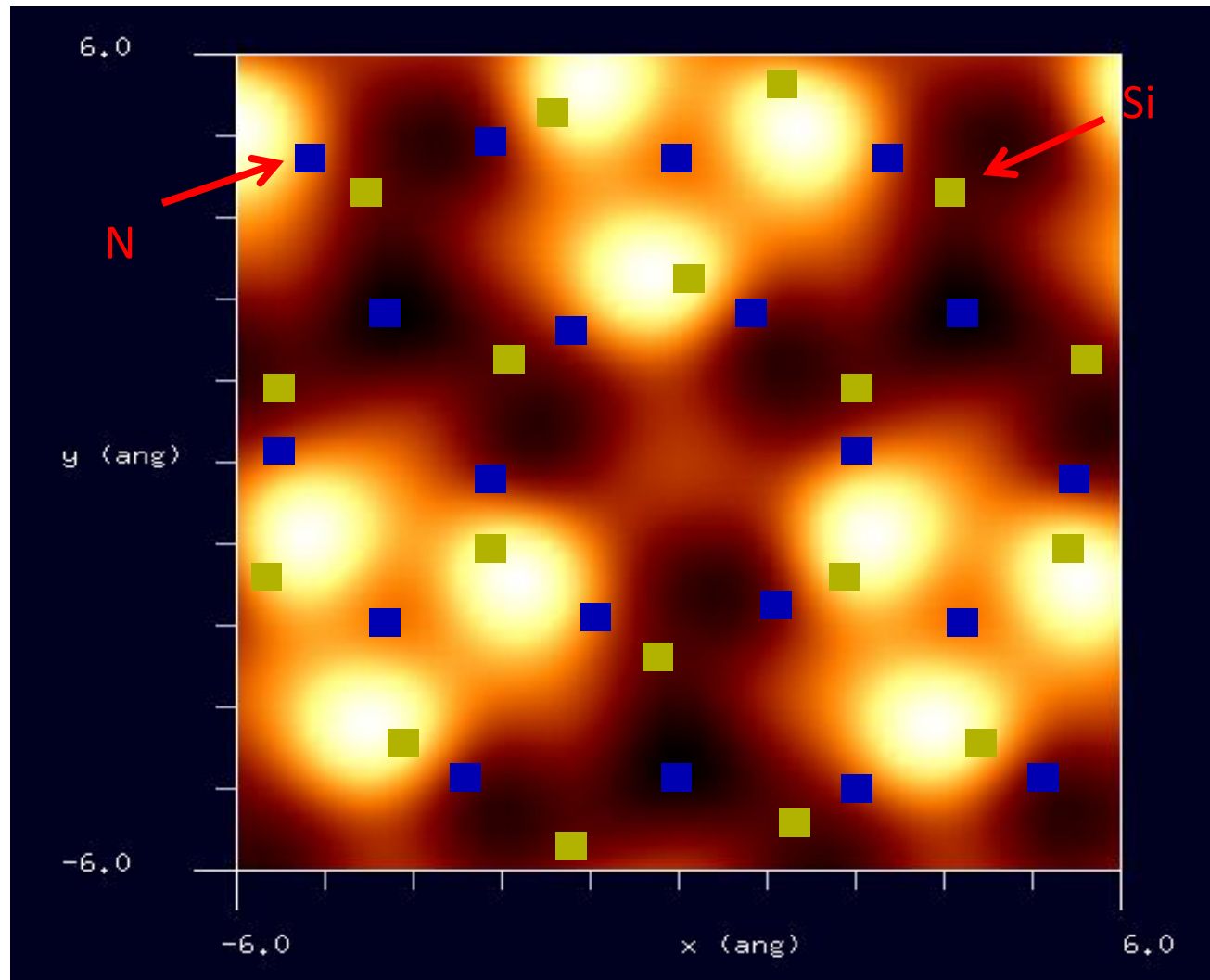
STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.0 Å
最大電流 4.09×10^5 nA、最小電流 5.86×10^4 nA



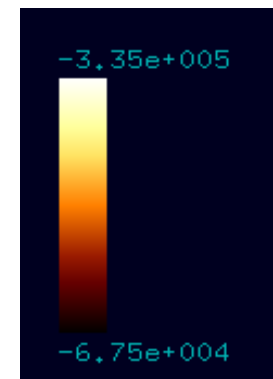
STM像は、印可電
圧の正負によって大
きく変化することが
あります



STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離2.0 Å
最大電流 -6.75×10^4 nA、最小電流 -3.35×10^5 nA



STM像は、印可電
圧の正負によって大
きく変化することが
あります

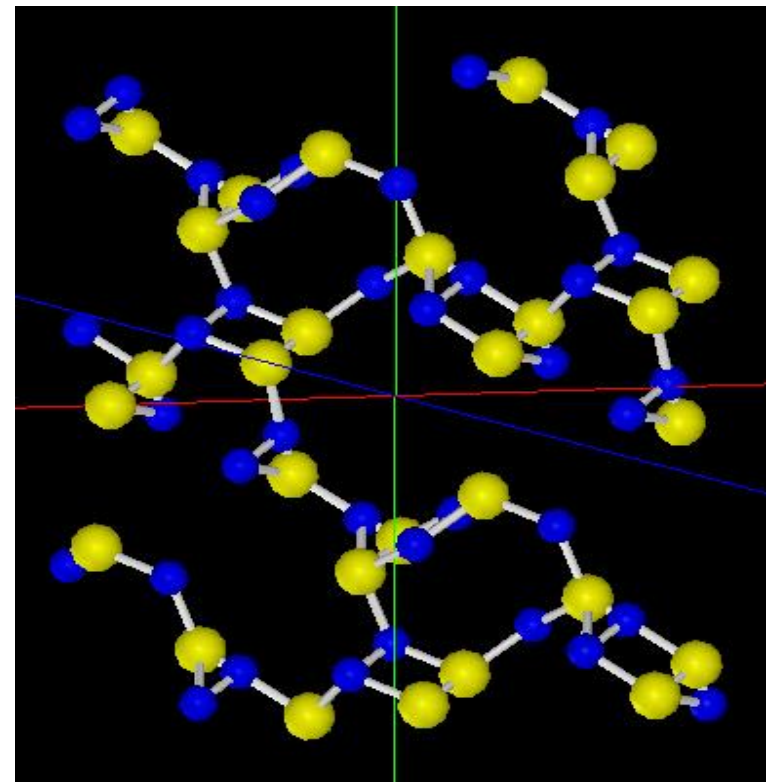
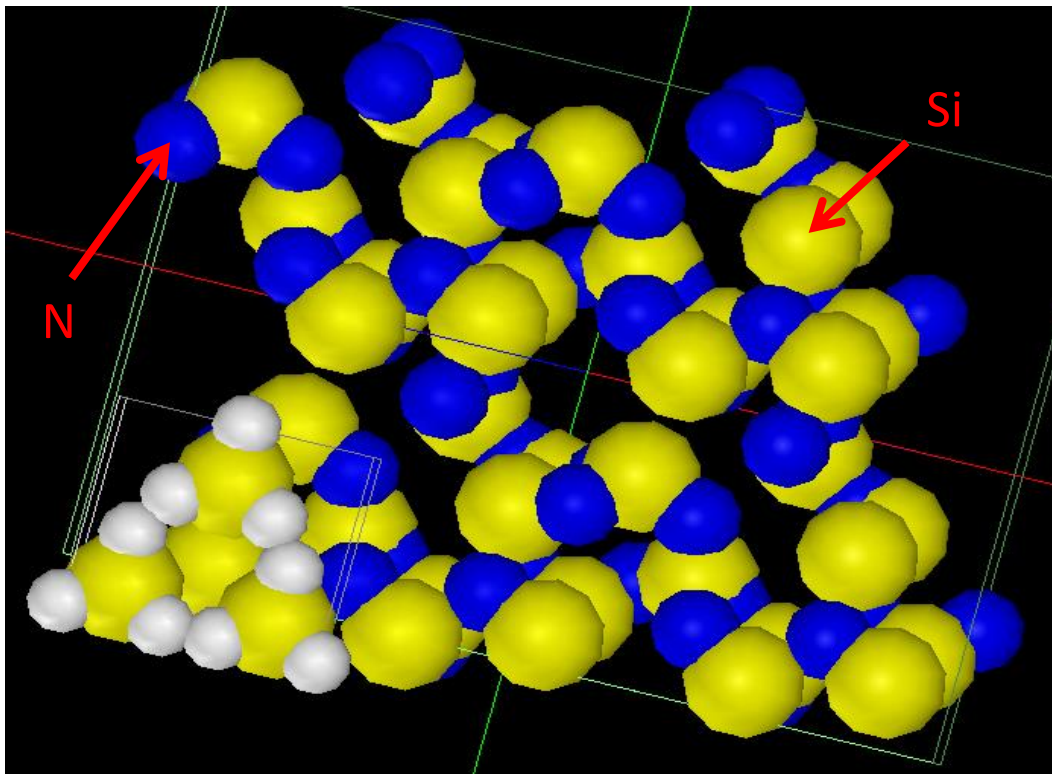


DFTB

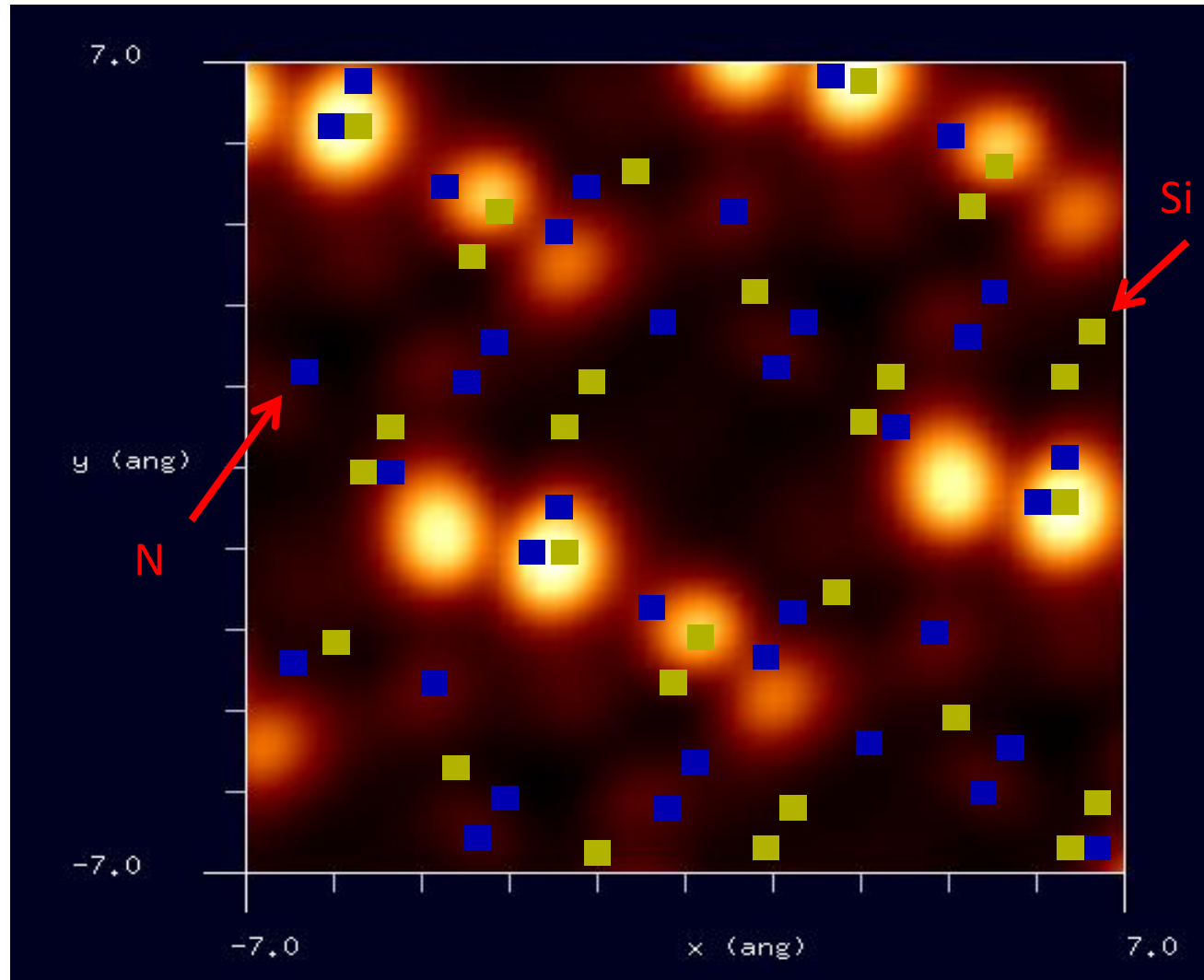
Si_3N_4 (シリコンナイトライド、エンジン部品に使用されるファインセラミックス)

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

同じ結晶でも、劈開面が異なると、表面の構造は大きく変わります



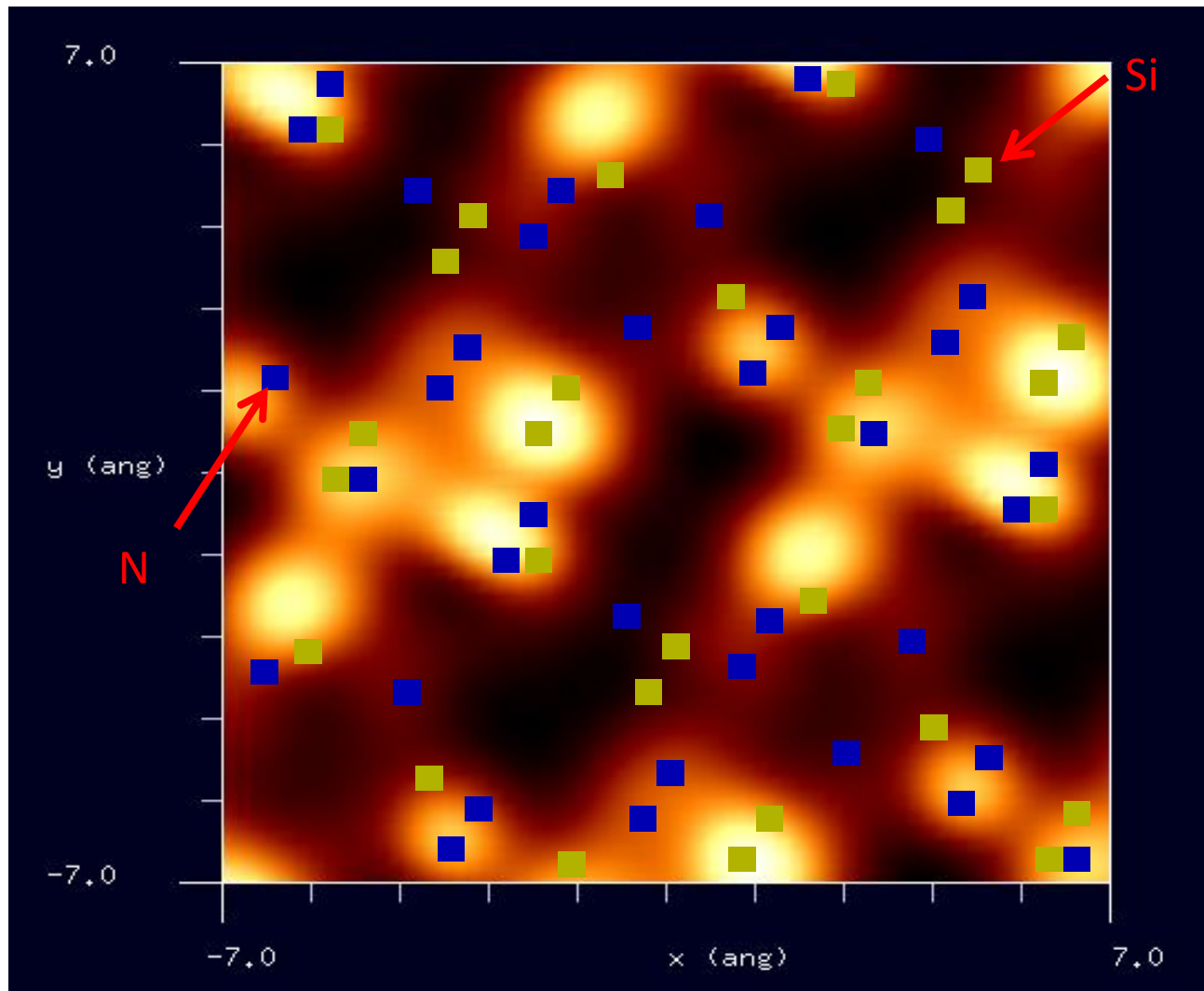
STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.1 Å
最大電流 5.03×10^5 nA、最小電流 2.35×10^4 nA



STM像は、印可電
圧の正負によって大
きく変化することが
あります



STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離1.8 Å
最大電流 -9.49×10^3 nA、最小電流 -7.86×10^4 nA

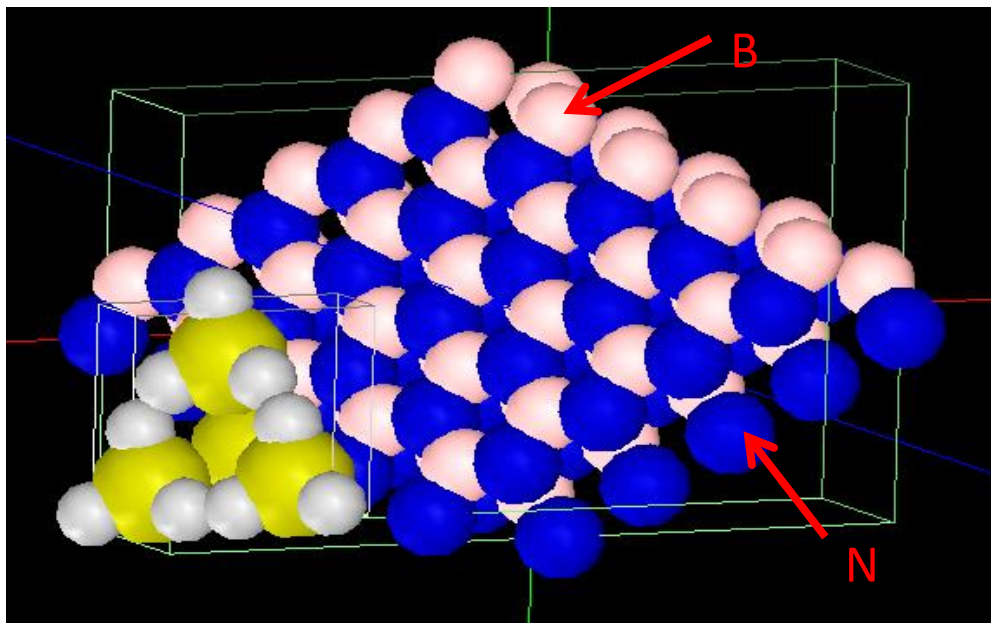


STM像は、印可電
圧の正負によって大
きく変化することが
あります

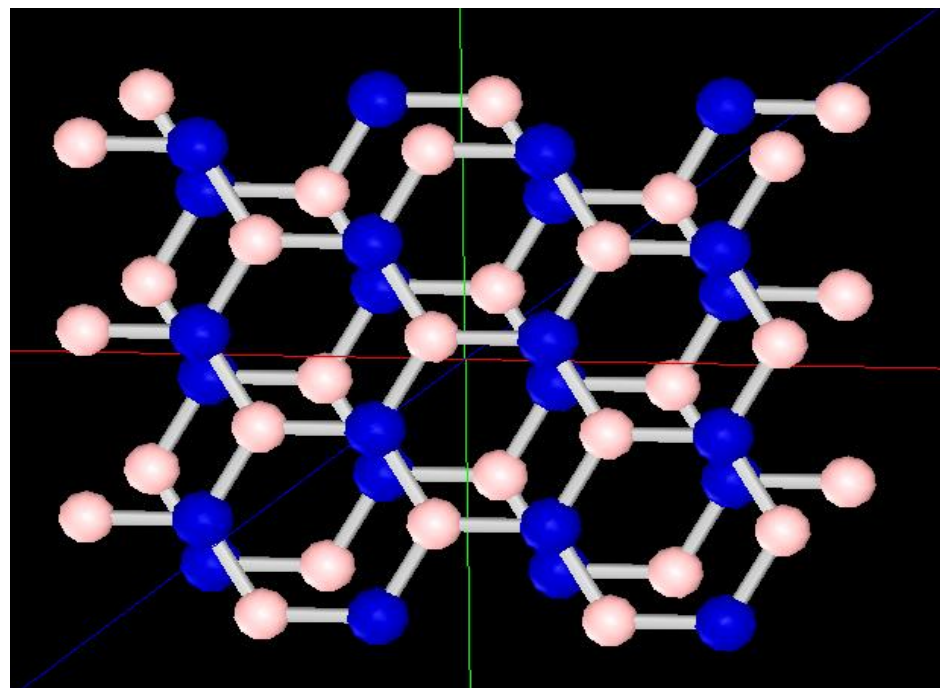
DFTB

BN (窒化ホウ素 発光ダイオード、半導体レーザーの材料)

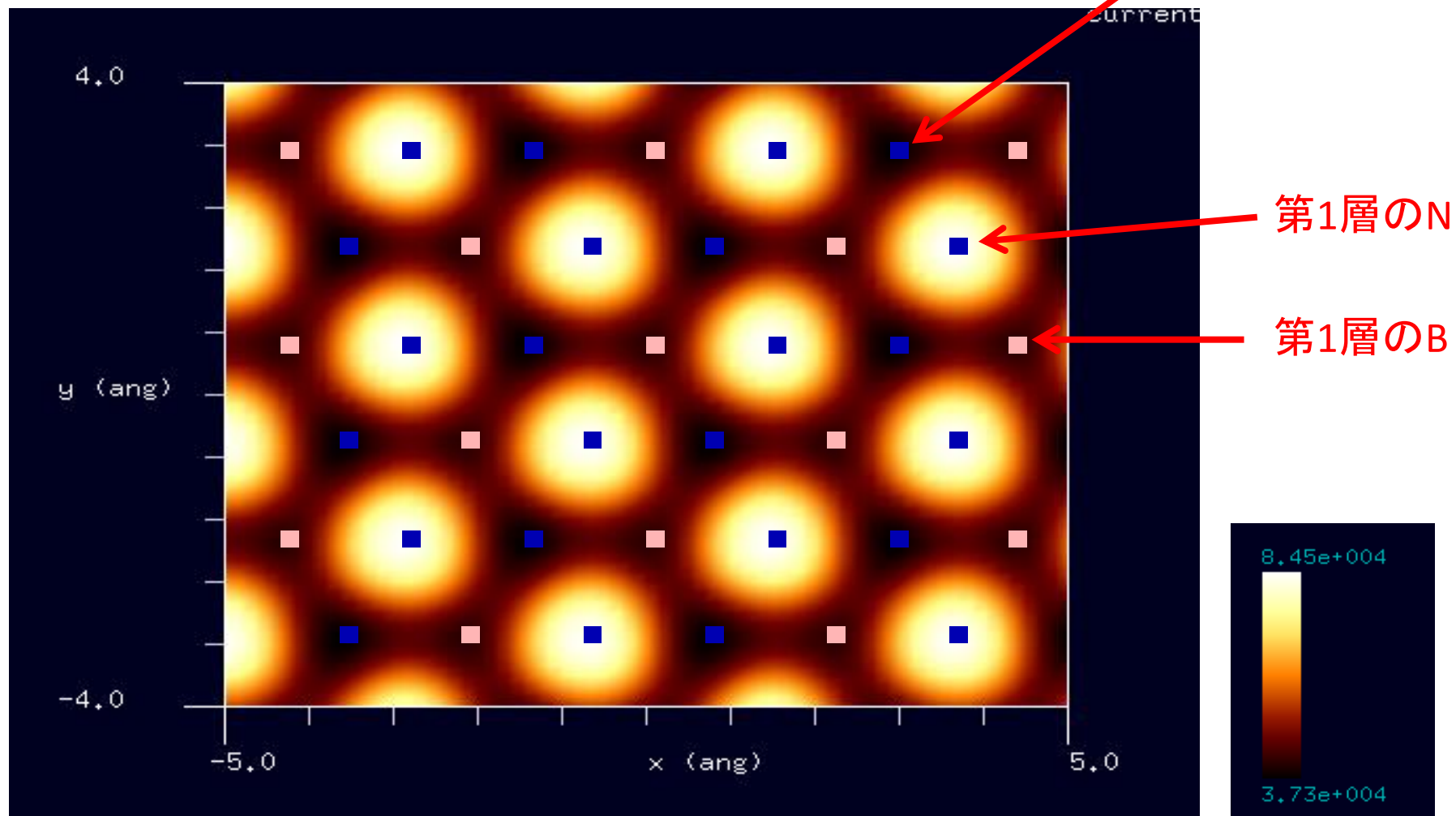
水素終端されたシリコン探針を使用
六方晶(空間群番号:194)



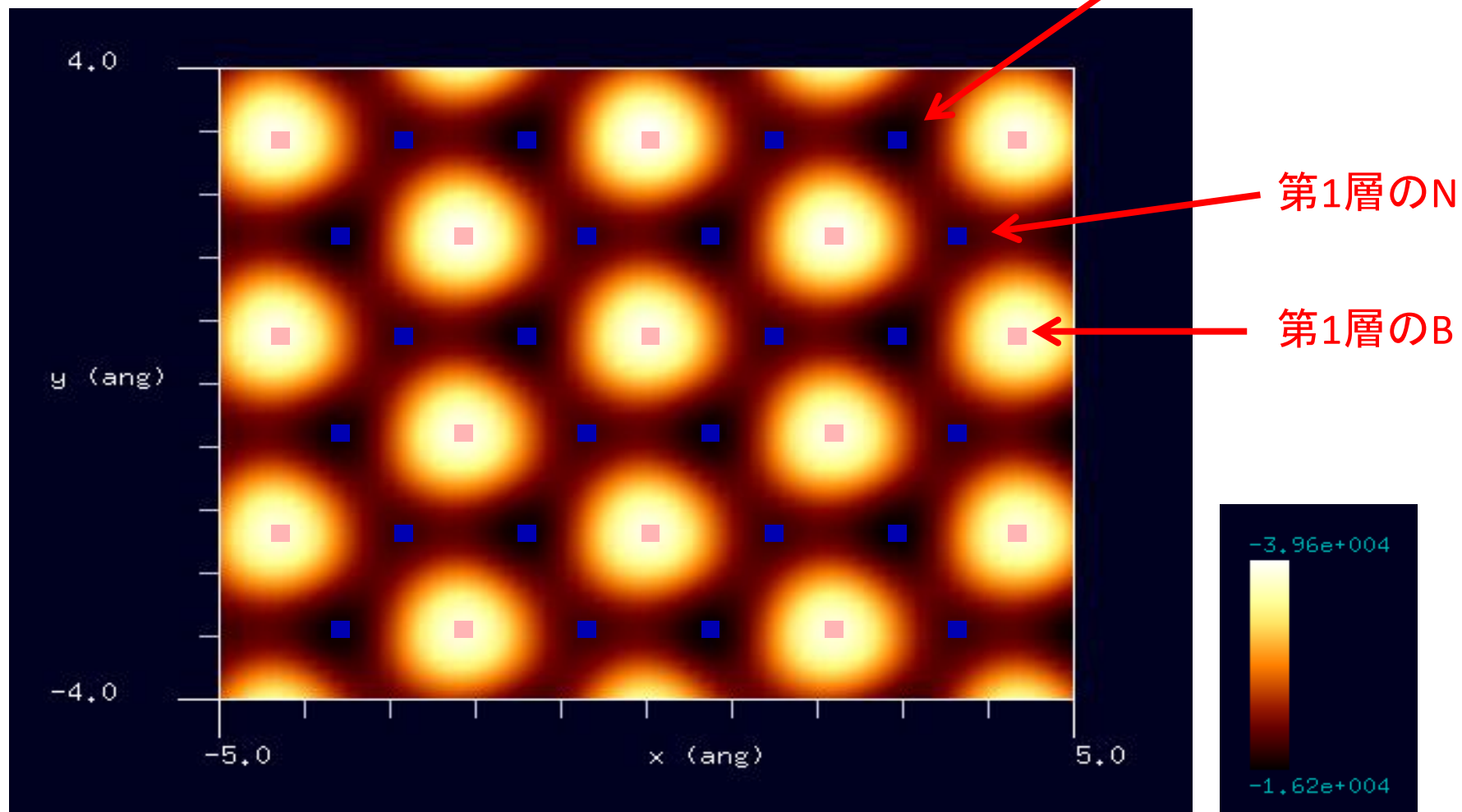
空間群番号や格子定数が分かっている
ば、SetModelでどのような結晶形状データも作成可能です

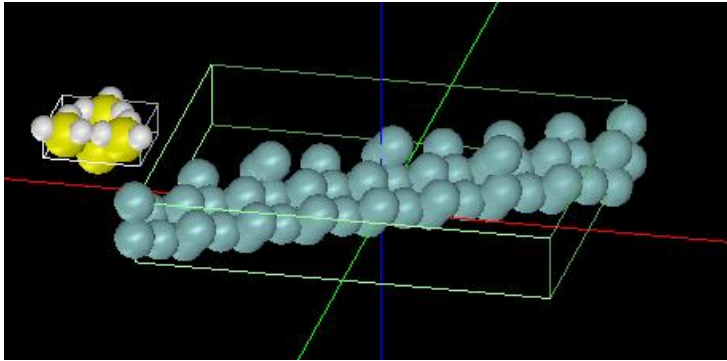


STM画像: 印加電圧2V, 探針と試料の最短距離1.0 Å
最大電流 8.45×10^4 nA、最小電流 3.73×10^4 nA



STM画像: 印加電圧-2V, 探針と試料の最短距離1.0 Å
最大電流 -1.62×10^4 nA、最小電流 -3.96×10^4 nA





探針: Si_4H_9

試料: Ge(111)-c(2×8).

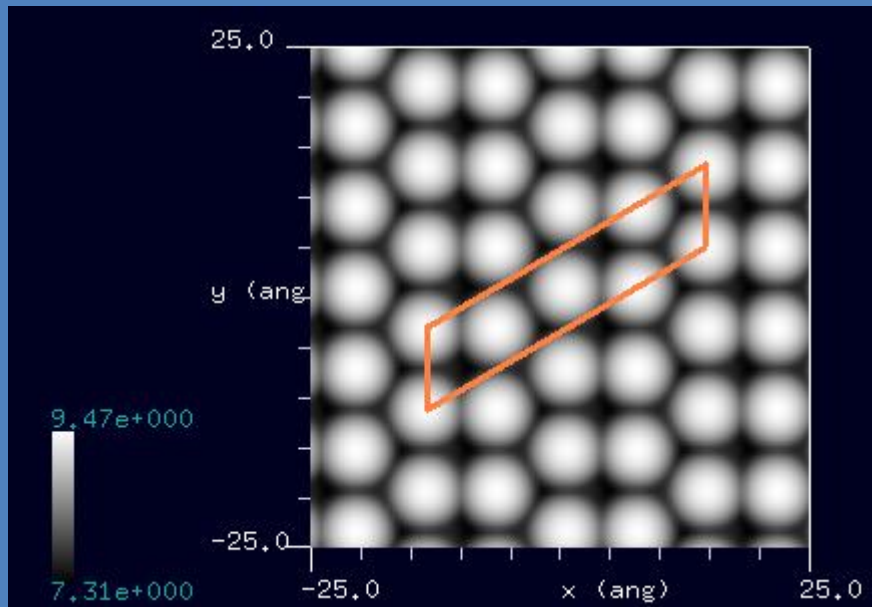
手法: constant current STM

電流セットポイント: 10 nA

探針バイアス: +0.5 V

constant current STMシミュレート結果

50 Å × 50 Å



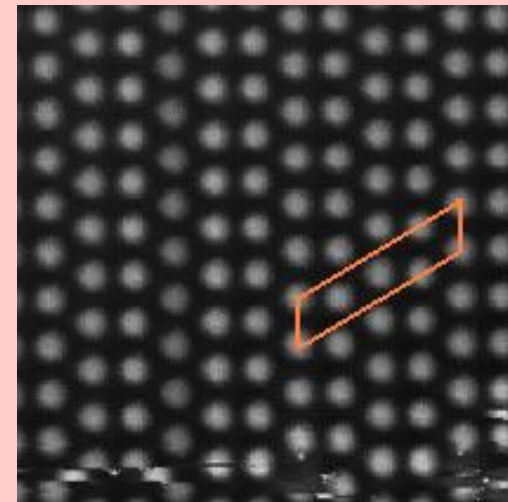
cf. Experiment

試料: Ge(111)-c(2×8)

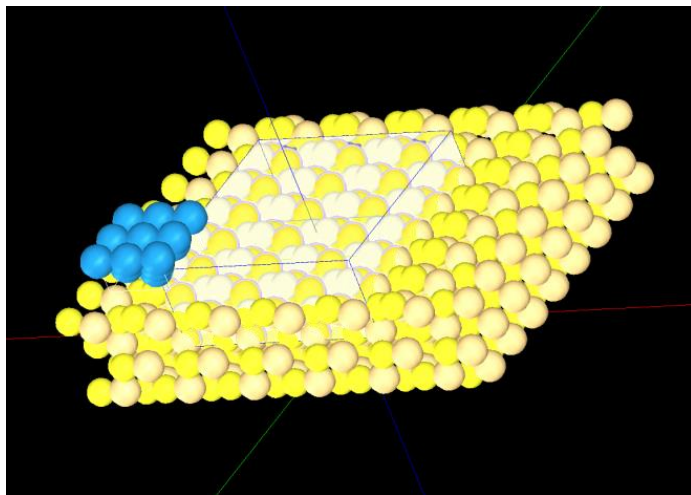
手法: STM

探針バイアス: +0.5V

80 Å × 80 Å

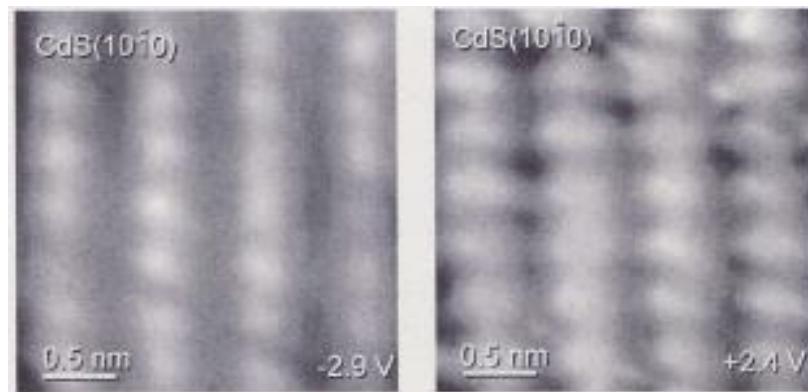


DFTB: CdS(100)-(1x1) STM

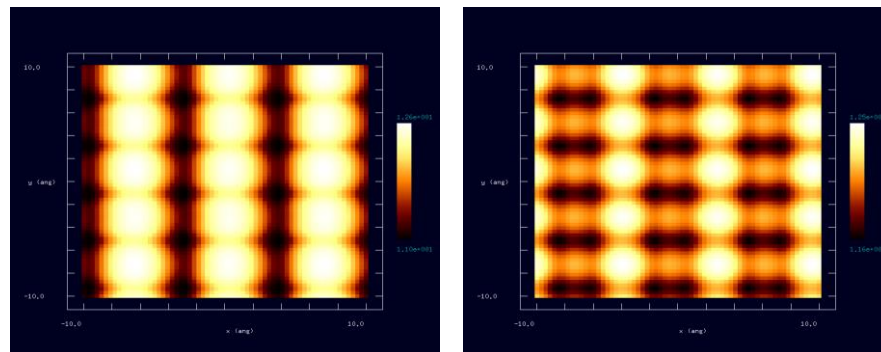


探針: タングステン探針
試料表面: CdS (10 $\bar{1}$ 0) -(1x1)

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

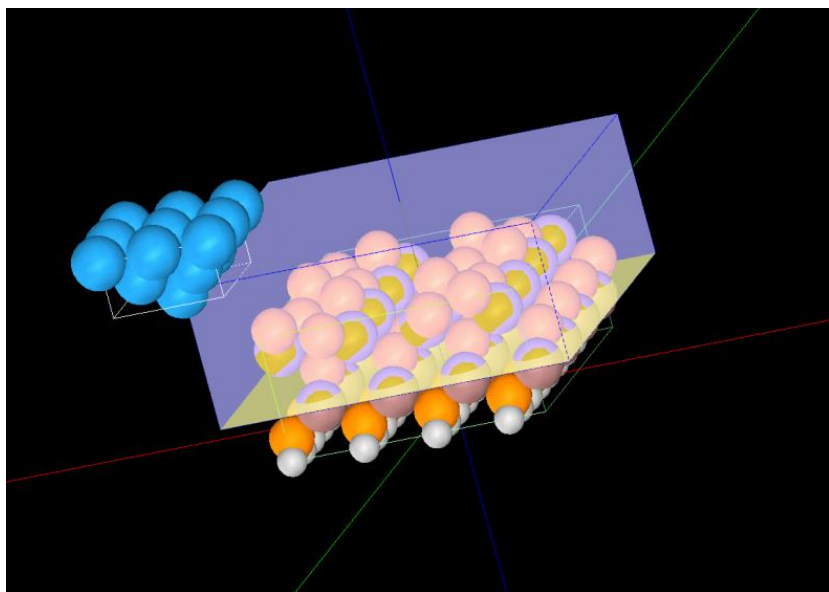


STM実験結果(Phys. Rev. B 56, 12321)
左:占有状態、試料バイアス-2.9V
右:非占有状態、試料バイアス+2.4V



DFTB STM 電流一定像
左:占有状態、探針バイアス2.0V
右:非占有状態、探針バイアス-2.0V

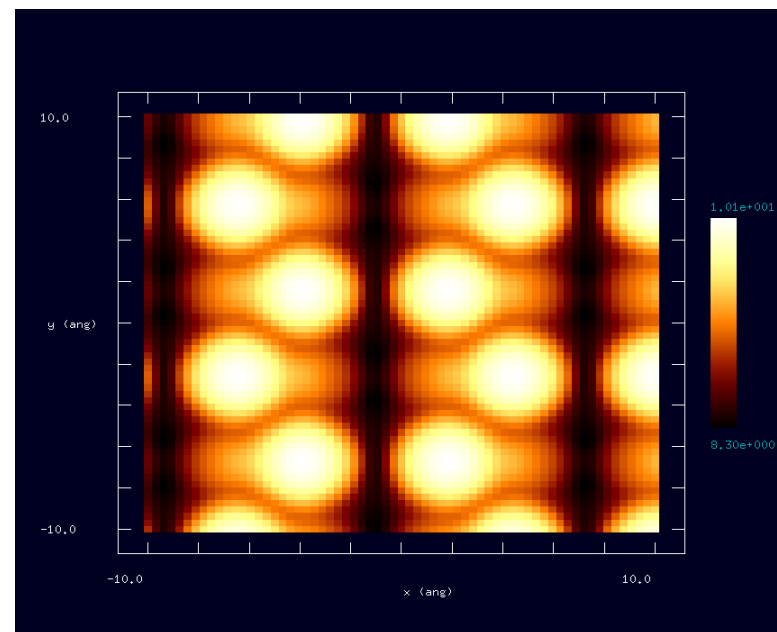
DFTB: InP(001)-c(4x2) STM



探針: タングステン

試料表面: InP(001)-c(4x2)

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



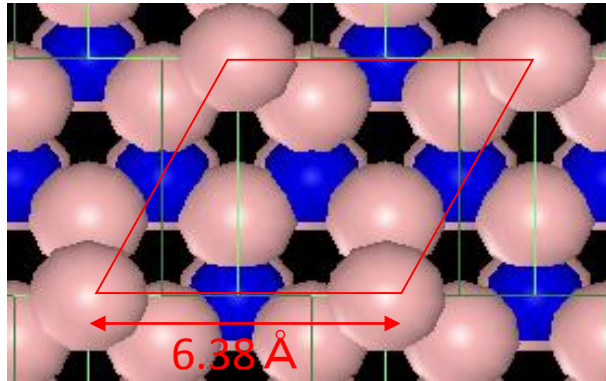
STM コンスタントカレントモード

探針バイアス: 1.5V

電流値: 10000nA

【DFTB】GaNの結晶面のSTMシミュレーション

GaN(0001)の2×2再構成



試料のモデル(赤枠は単位格子)

探針: Si_4H_9

試料: GaN

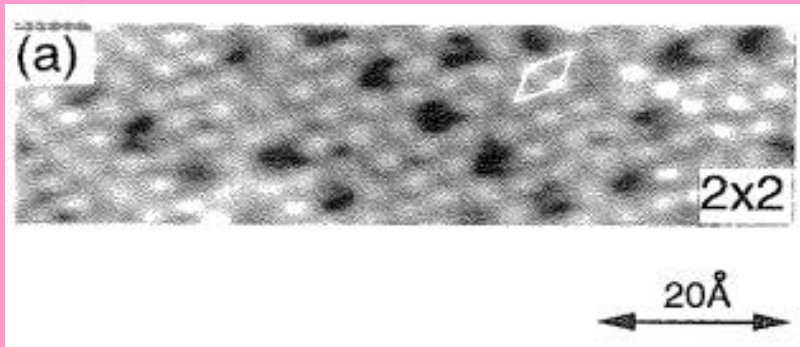
スキャンエリア: $20 \text{ Å} \times 12 \text{ Å}$

スキャンモード: constant current STM

探針バイアス: +1.0[V]

電流値: 2400[nA]

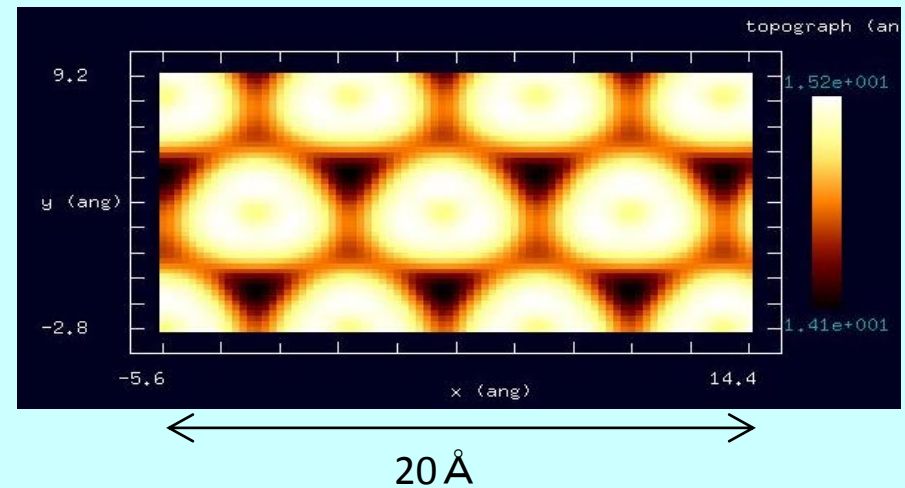
実測画像



サンプル電圧: -3.0[V]

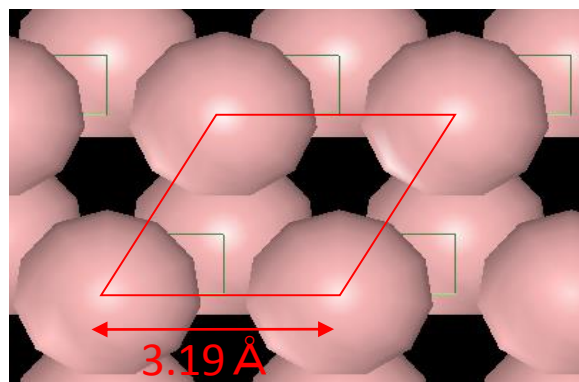
表面科学Vol.21, No3, pp.134-141,2000

constant current STMシミュレーション



【DFTB】GaNの結晶面のSTMシミュレーション

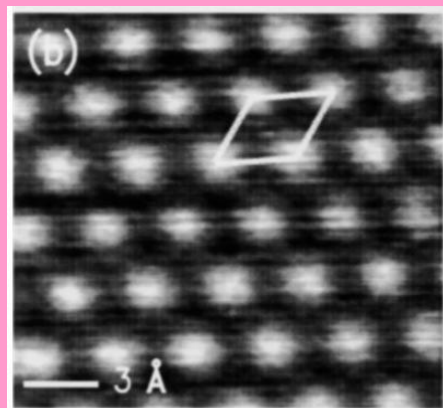
GaN(000 $\bar{1}$)の1×1再構成



試料のモデル(赤枠は単位格子)

探針: Si_4H_9
 試料: GaN
 スキャンエリア: $10 \text{ \AA} \times 6 \text{ \AA}$
 スキャンモード: constant current STM
 探針バイアス: +1.0[V]
 電流値: 8500[nA]

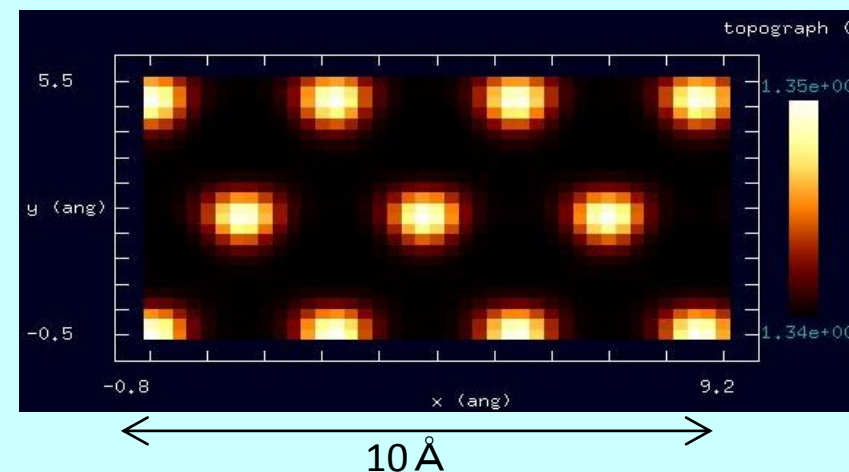
実測画像



試料バイアス電圧:
 -0.75[V]
 電流値:
 0.03~0.11[nA]

PHYSICAL REVIEW LETTERS VOLUME 79, NUMBER 20 17 NOVEMBER 1997

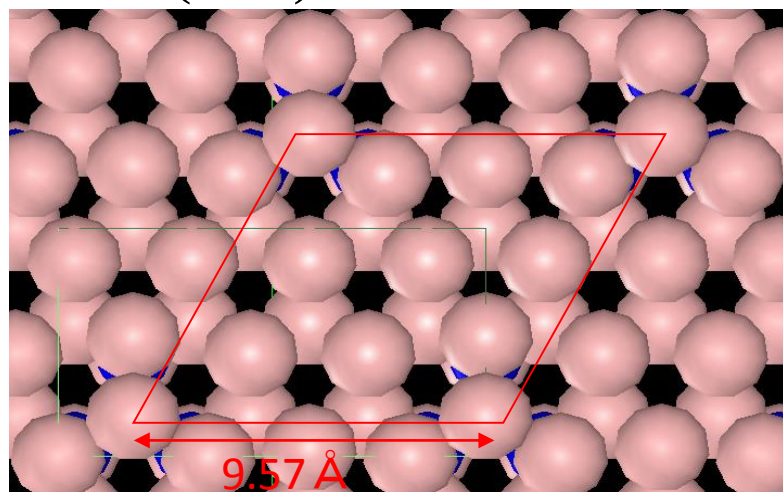
constant current STMシミュレーション



画像はコントラスト調整後

【DFTB】GaNの結晶面のSTMシミュレーション

GaN(000 $\bar{1}$)の3×3再構成



試料のモデル(赤枠は単位格子)

探針: Si_4H_9

試料: GaN

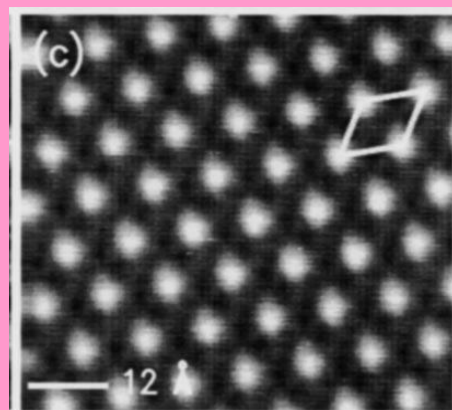
スキャンエリア: $20 \text{ \AA} \times 15 \text{ \AA}$

スキャンモード: constant current STM

探針バイアス: +1.0[V]

電流値: 800[nA]

実測画像



試料バイアス電圧:

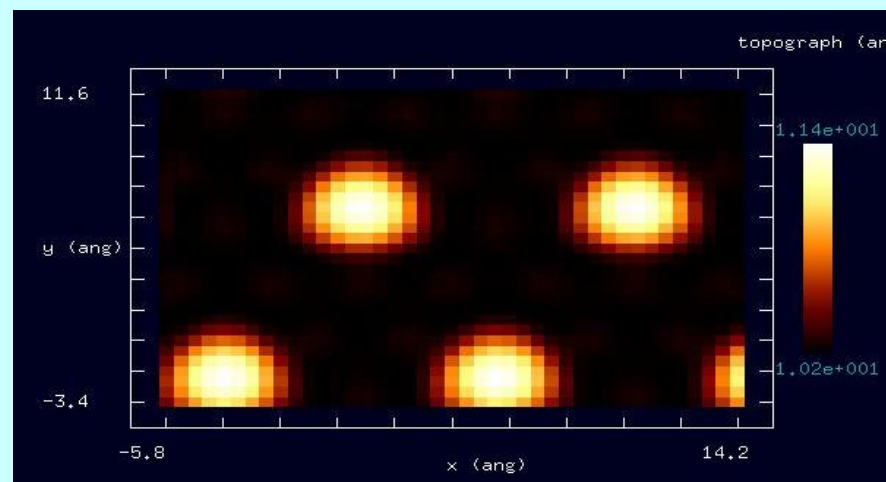
-0.1[V]

電流値:

0.03~0.11[nA]

PHYSICAL REVIEW LETTERS VOLUME 79, NUMBER 20 17 NOVEMBER 1997

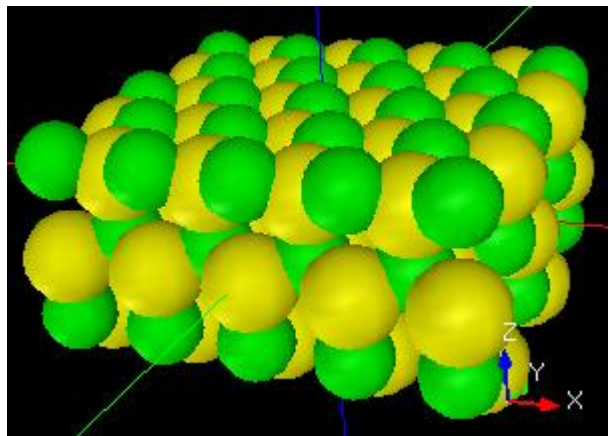
constant current STMシミュレーション



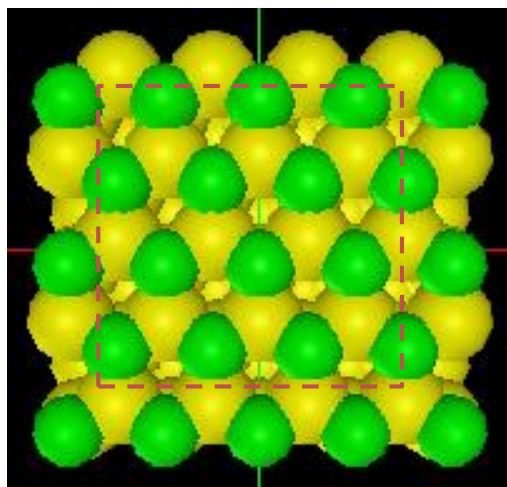
画像はコントラスト調整後

【DFTB】4H-SiC (0001) 表面の constant current STM像シミュレーション

4H-SiC (0001) 表面の構造



緑＝炭素原子。黄＝Si原子。

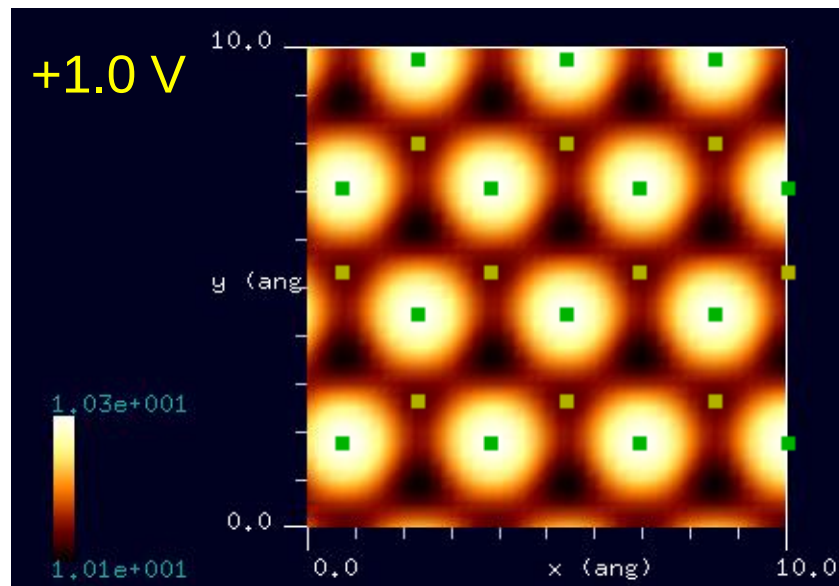


Scan area

探針
バイアス

探針高さ

高
↑
低

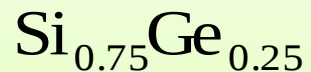


STM像シミュレーションには、constant heightモードと、constant currentモードが準備されています

DFTB

SiGe (トランジスタの材料)

水素終端されたシリコン探針を使用

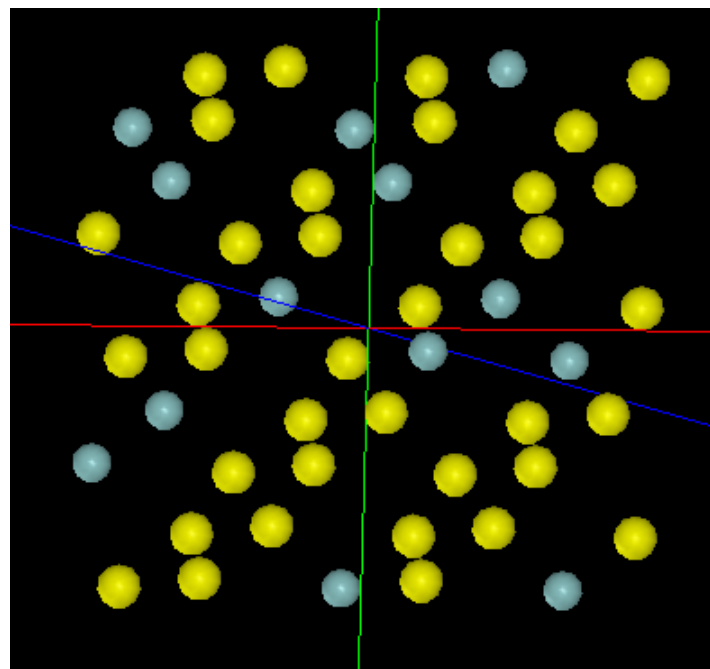
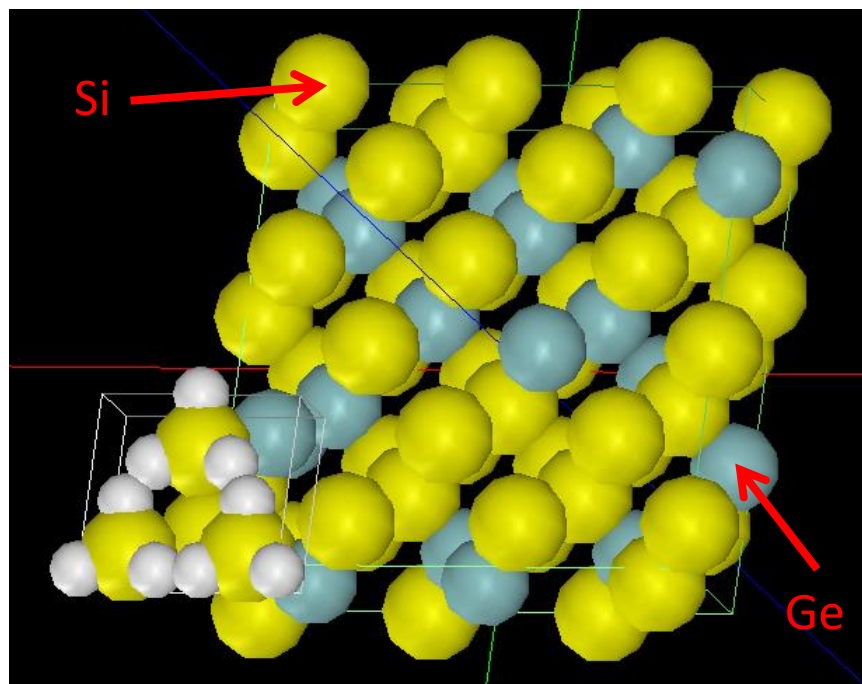


立方晶(空間群番号:227)

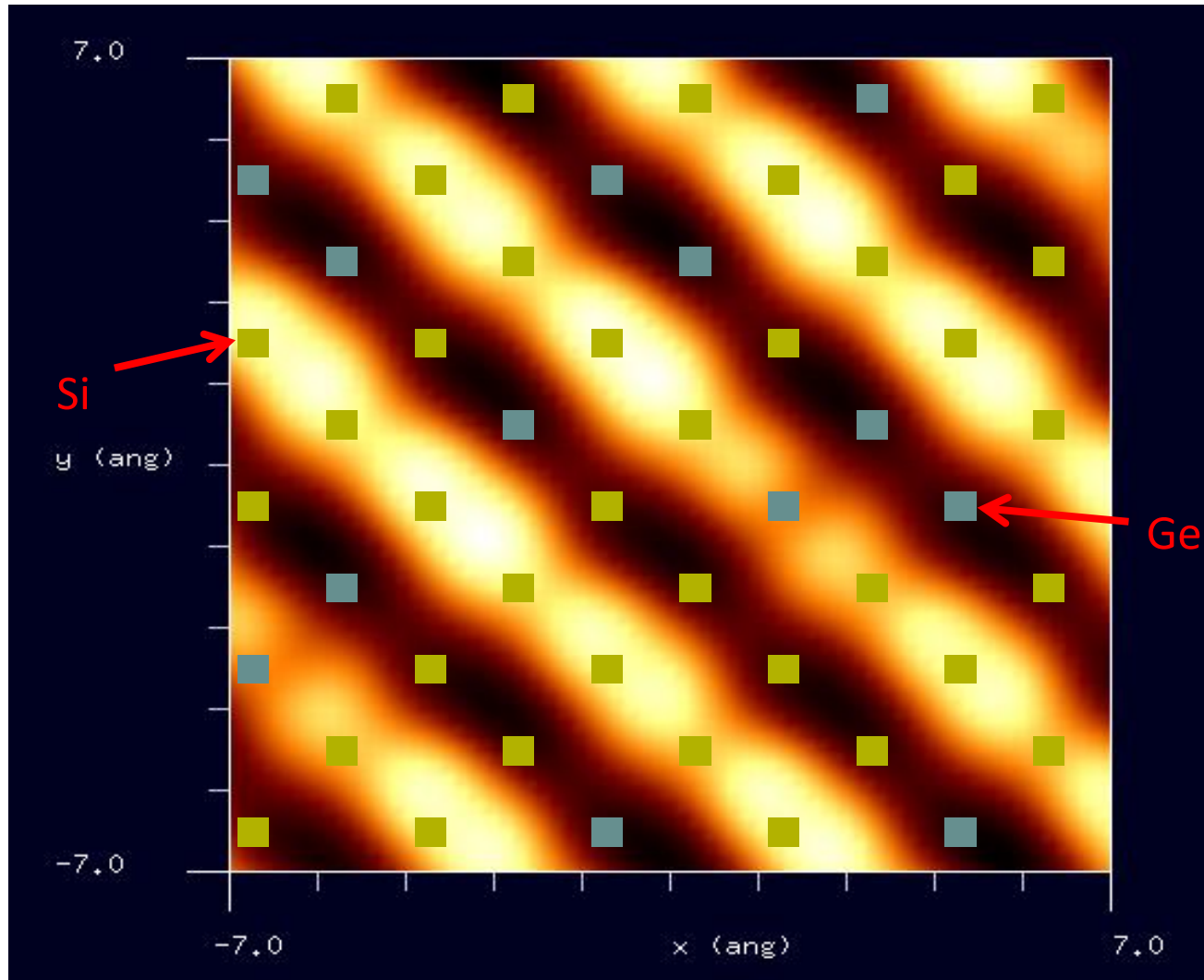
(001)面

Si結晶中のSi原子をランダムにGeと置き換えたもの

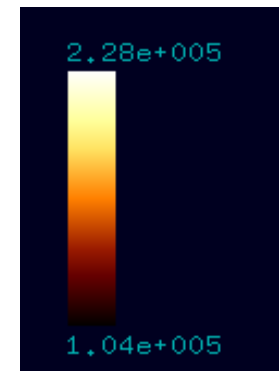
空間群番号や格子定数が
分かっているならば、SetModel
でどのような結晶形状デー
タも作成可能です



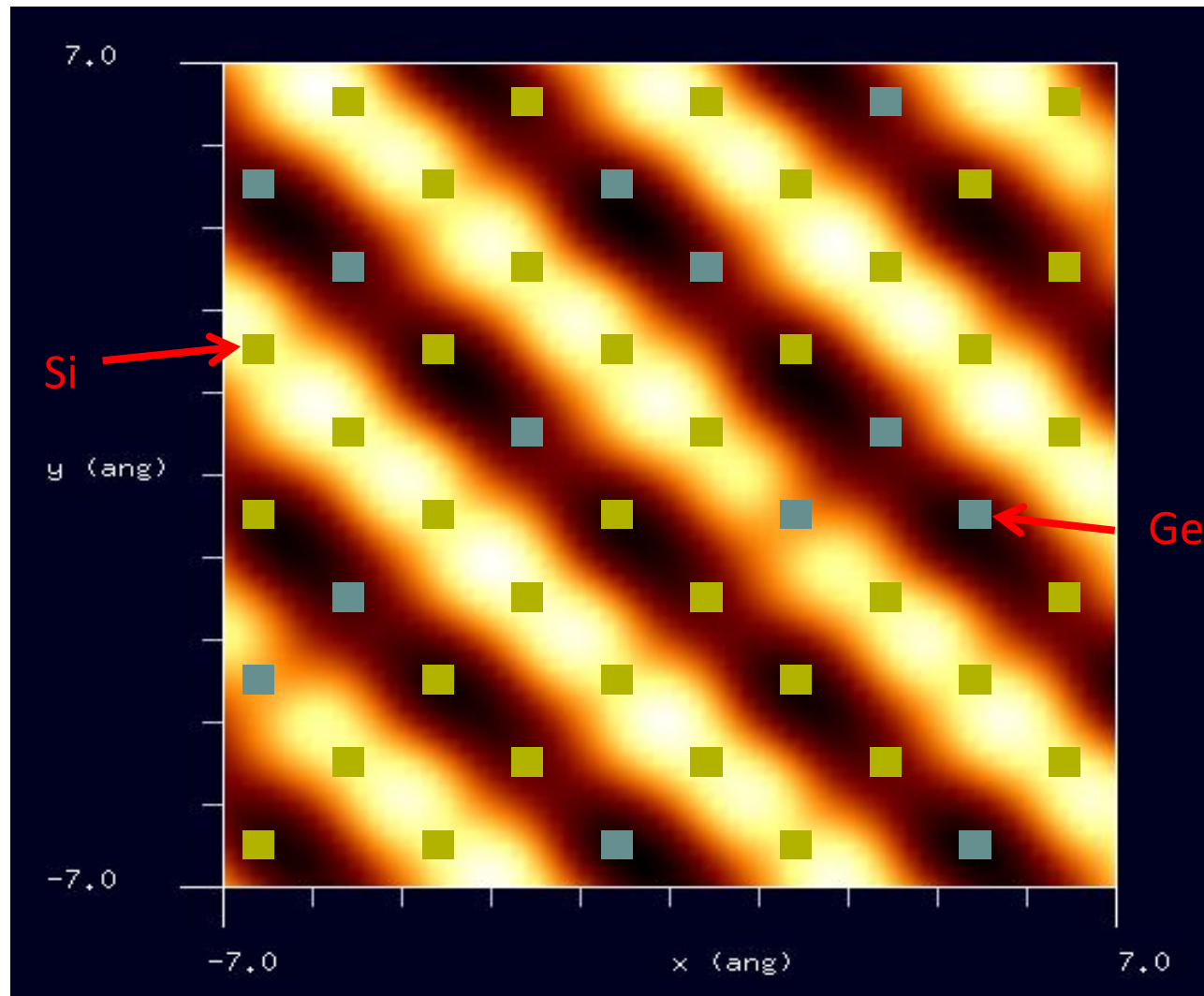
STM画像: 印加電圧1V, 探針と試料の最短距離1.5 Å
最大電流 2.28×10^5 nA、最小電流 1.04×10^5 nA



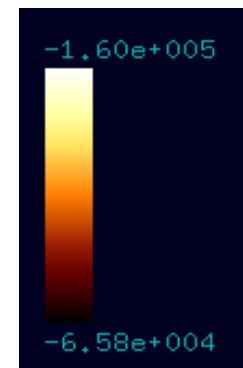
STM像は、印可電
圧の正負によって大
きく変化することが
あります



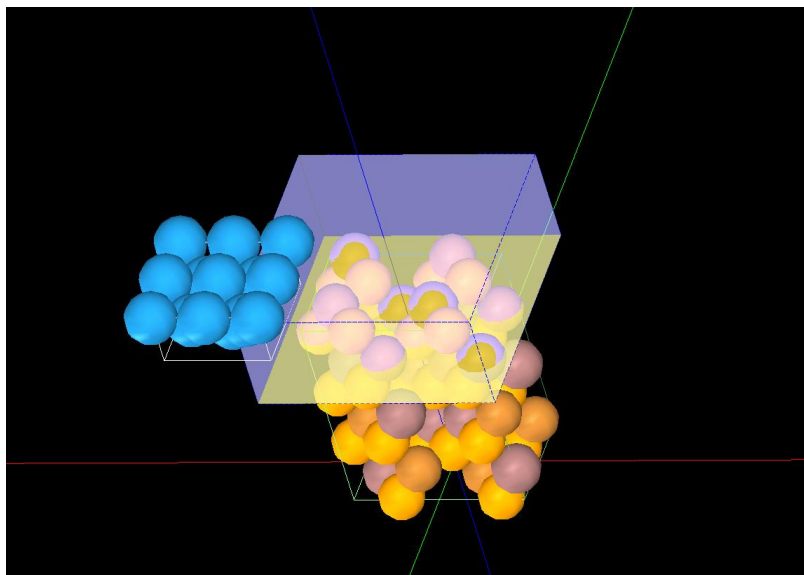
STM画像: 印加電圧-1V, 探針と試料の最短距離 $1.5 \text{ \AA}$
最大電流 $-6.58 \times 10^4 \text{ nA}$ 、最小電流 $-1.60 \times 10^5 \text{ nA}$



STM像は、印可電
圧の正負によって大
きく変化することが
あります

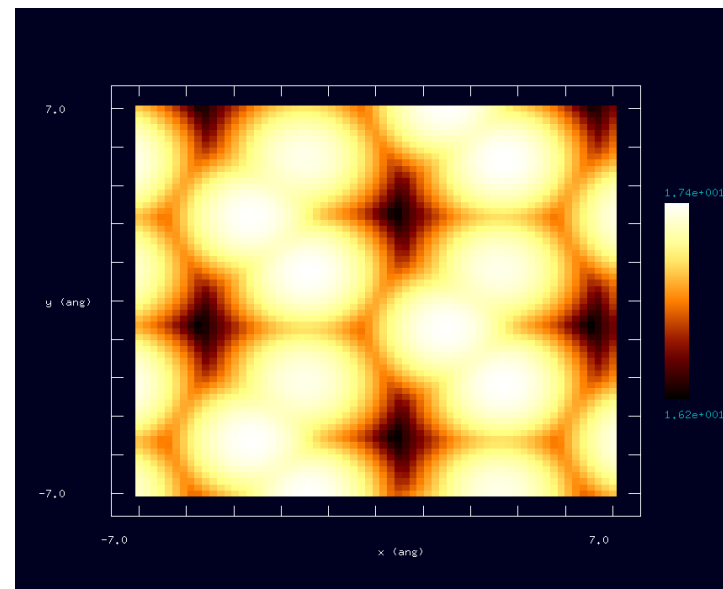


DFTB: CuInSe₂(001) STM



探針: タングステン
試料表面: CuInSe₂(001)

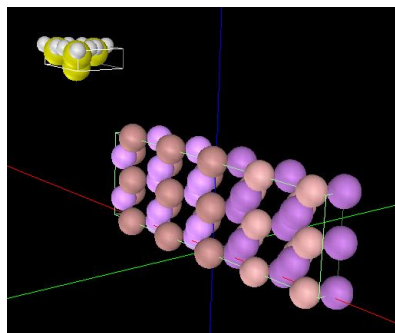
空間群番号や格子定数が分かっている
ば、SetModelでどのような結晶形状データも作成可能です



STM コンスタントカレントモード
探針バイアス: 1.0V
電流値: 1.0nA

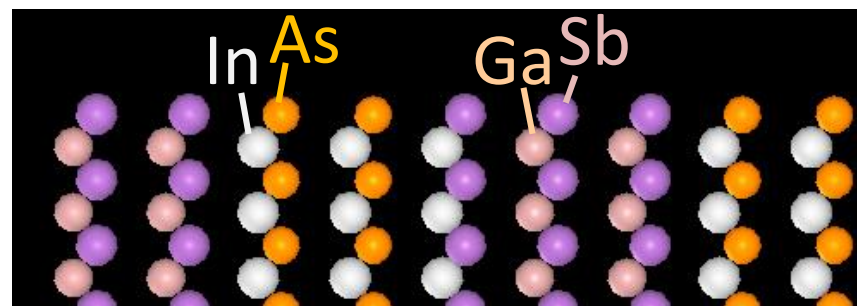
【DFTB】InAs-GaSb界面の(110)面のconstant current STM像

シミュレートモデル

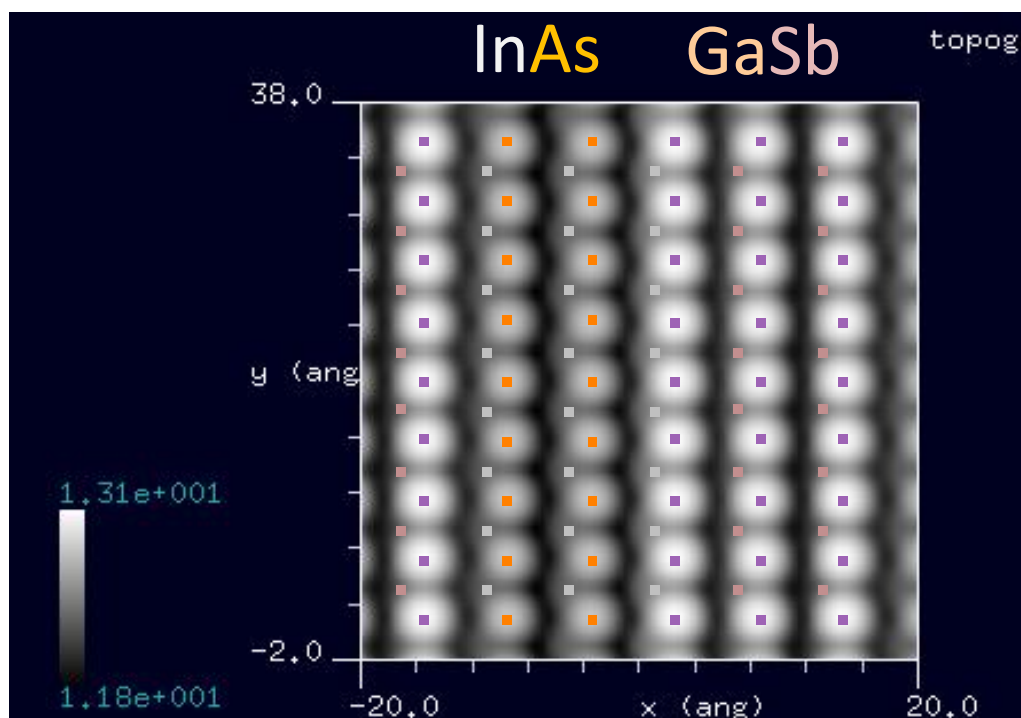


探針: Si_4H_9
 試料: InAs-GaSb界面の(110)面
 スキャンエリア: $40 \text{ \AA} \times 40 \text{ \AA}$
 スキャンモード: constant current STM
 探針バイアス: $+1.0 \text{ V}$
 電流値: 1000 nA
 解像度: $0.5 \text{ \AA}$

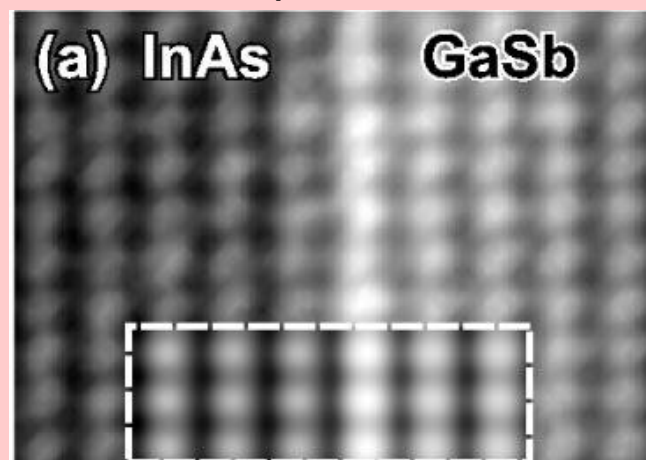
最表面の原子配置(周期的境界条件を適用)



計算結果



cf. Experiment

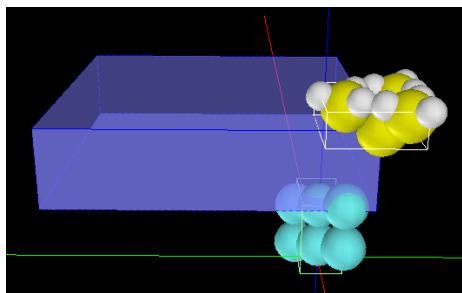


An XSTM image of an InAs-GaSb interface with InSb interfacial bonds. Inset: Simulated XSTM image of this structure. Both gray scales span about $1 \text{ \AA}$.

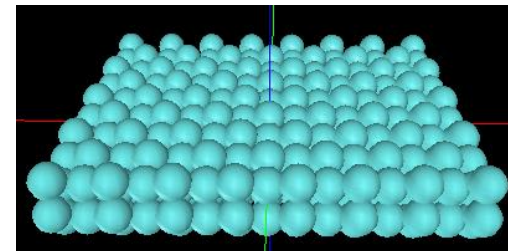
S. G. Kim, S. C. Erwin, B. Z. Noshov, L. J. Whitman, Phys. Rev. B 67, 121306(R) (2003).

【DFTB】Mo(111)のconstant current STM像

シミュレートモデル

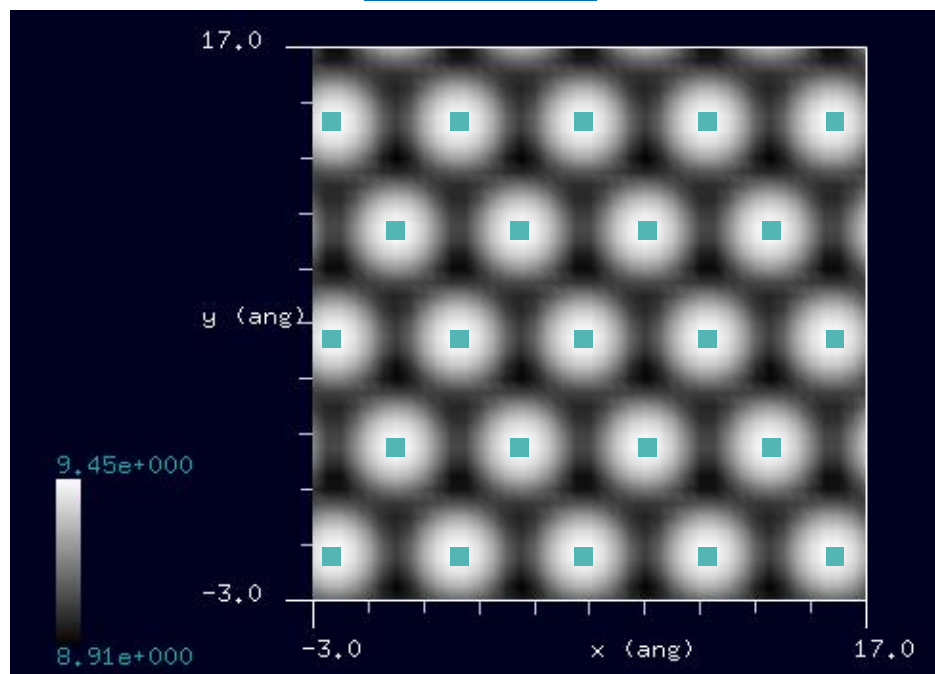


探針: Si_4H_9
 試料: Mo(111)表面
 スキャンエリア: $20 \text{ \AA} \times 20 \text{ \AA}$
 スキャンモード: constant current STM
 探針バイアス: +0.5 V
 電流値: 10 nA

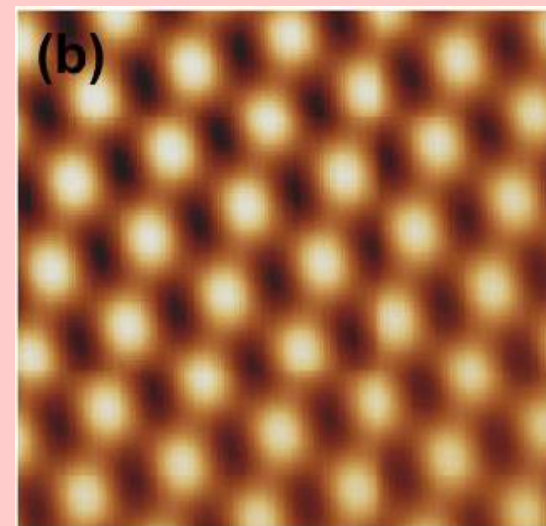


周期的境界条件を課したMo(111)モデル

計算結果



cf. Experiment

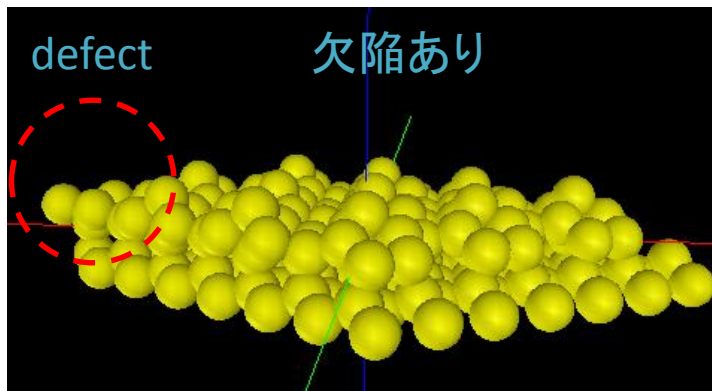
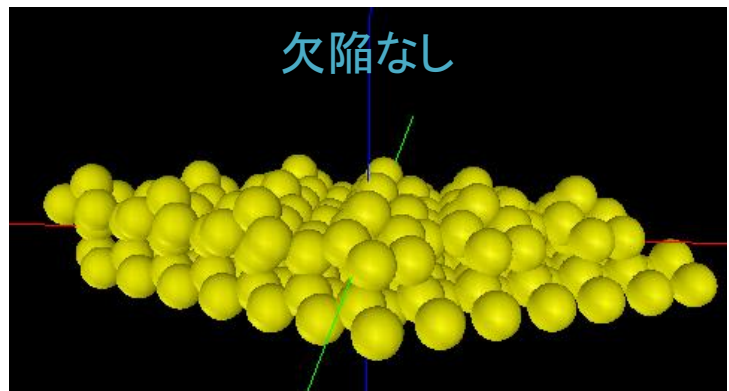


STM image of Mo(111) surface.

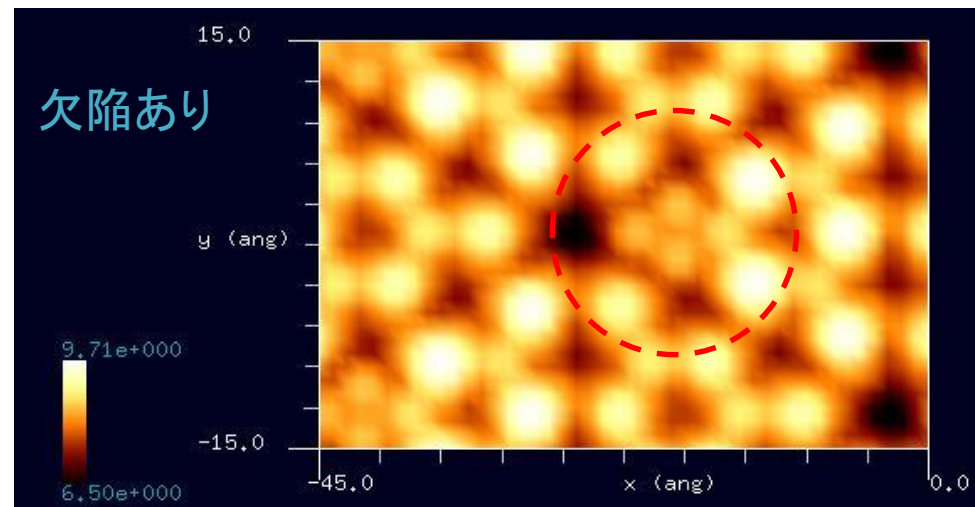
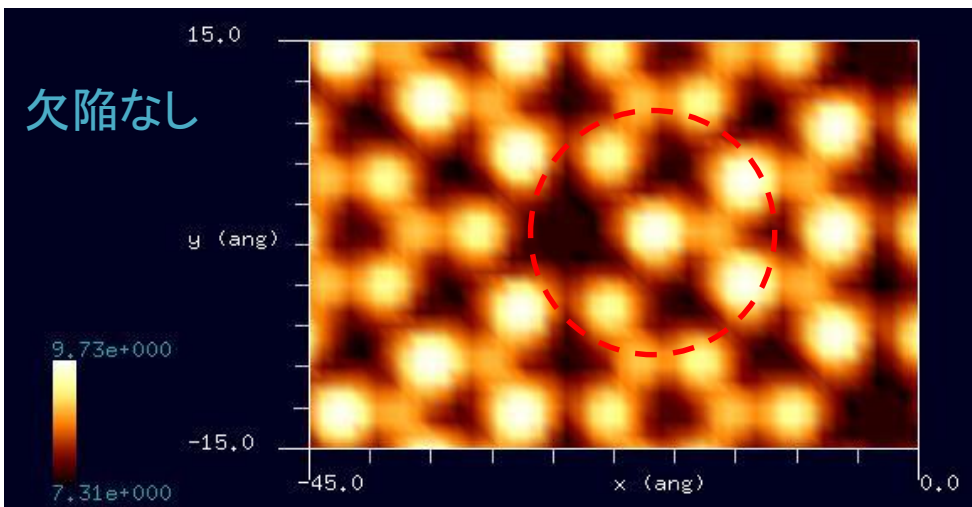
<http://www.cmu.edu/physics/stm/publ/107/LB-STM.pdf>
 Scanning Tunneling Microscopy of Metals and Semiconductors

【DFTB】Si表面の欠陥のconstant current STMシミュレーション

シミュレートモデル

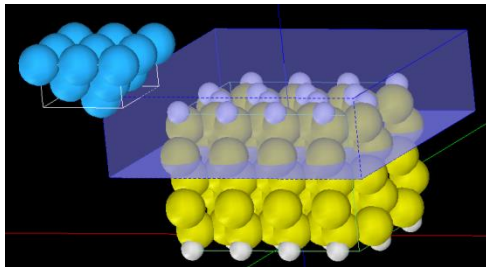


探針: Si_4H_9 探針
試料: Si(111)-DAS構造
スキャンエリア:
45 Å x 30 Å
スキャンモード:
constant current,
探針バイアス: -1.0 V
電流値: 1000 nA



最表面のSi原子の抜けたところに、2層目のSi原子の構造が現れた。

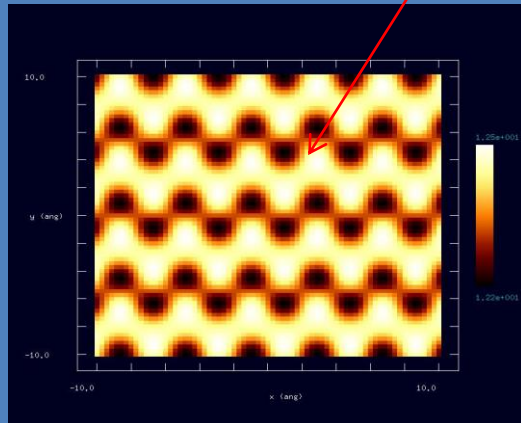
【DFTB】 Constant current STM image of Si(110):H



探針: W_{14}
試料: 水素終端されたSi(110)
手法: constant current STM

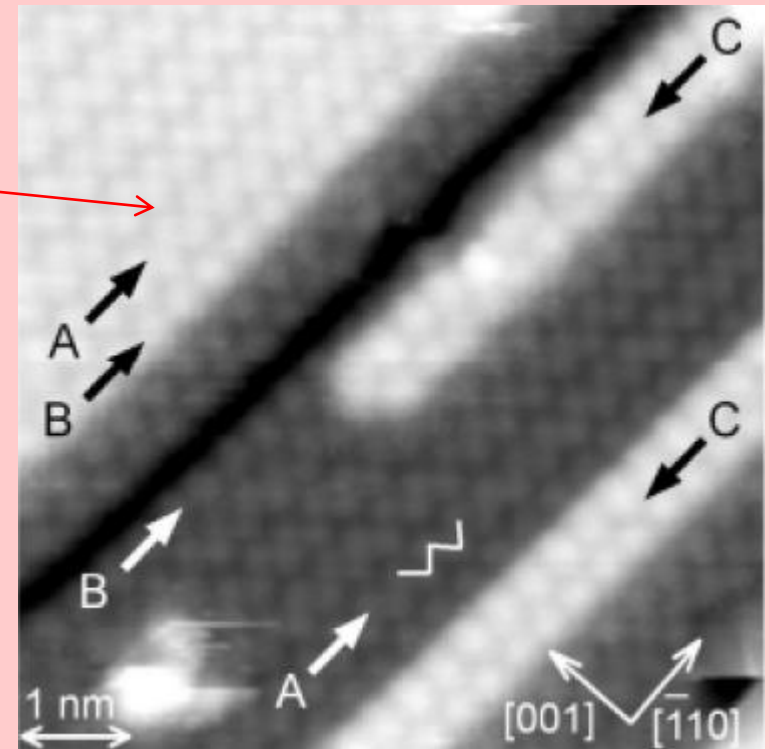
ジグザグの鎖状
構造を再現

Simulated result



探針バイアス+2.0V、電流 2000nA

cf. Experiment

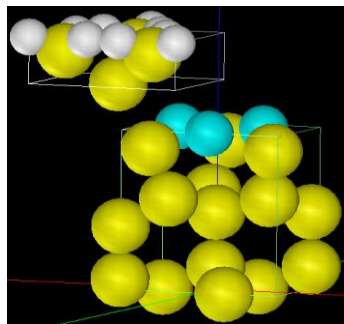


Appl. Phys. Lett. 85, 6254 (2004)

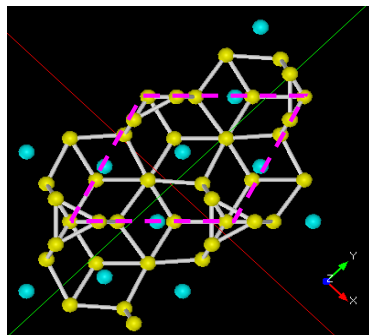
試料バイアス-2.0V、電流 0.3nA

【DFTB】Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -AgのSTM像

Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -AgのSTM像は、正バイアスか負バイアスかで明るく観察されるサイトが変わる。



探針 (Si_4H_9) と試料

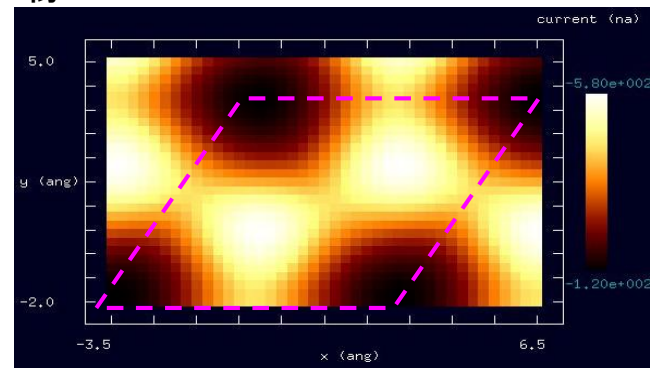


ピンクの菱形が
単位セル

探針の電圧が負の時のSTM像



文献[1]でのSTM像
(empty state)



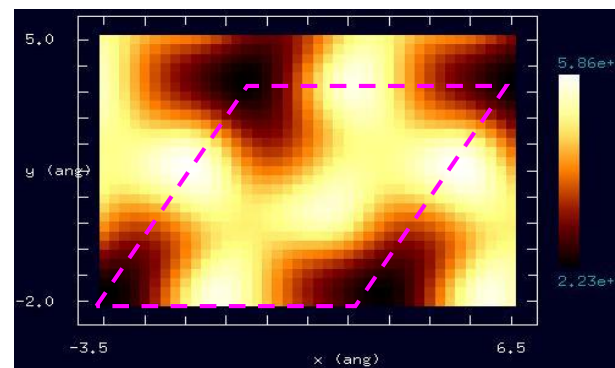
探針電圧:-0.1[V], 探針 - 試料間距離:3.0[Å]での
シミュレーション結果

Ag原子の3量体の成
す三角形の中心が明
るく観察されている。

探針の電圧が正の時のSTM像



文献[1]でのSTM像
(filled state)



探針電圧:0.3[V], 探針 - 試料間距離:2.0[Å]での
シミュレーション結果

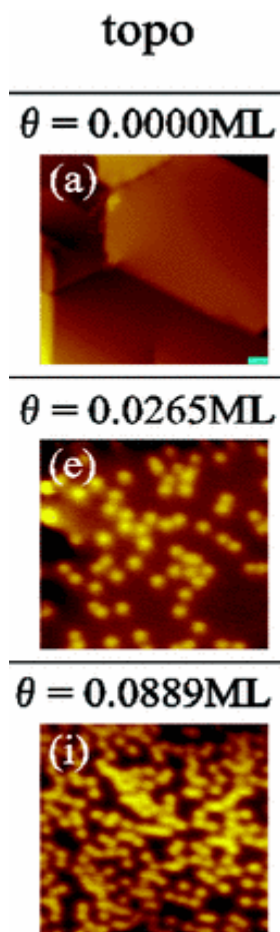
[1]:古橋 隆寿

Ag/Si(111)表面の原子分解能バリアハイトイメージング,

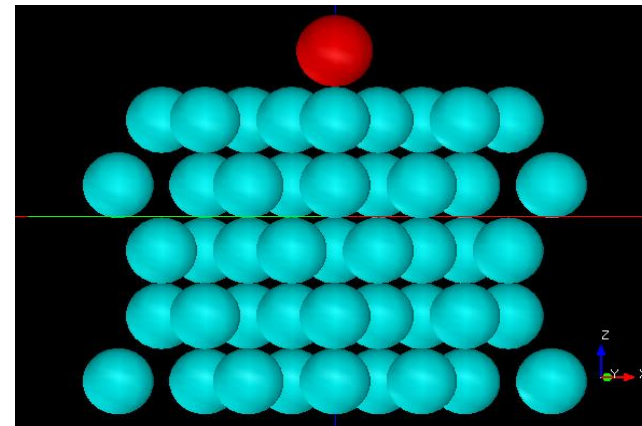
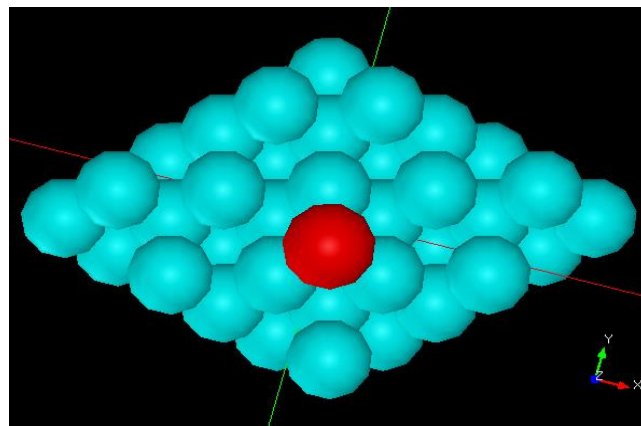
<http://topics.libra.titech.ac.jp/en/recordID/catalog.bib/TT00006729>

【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(1)

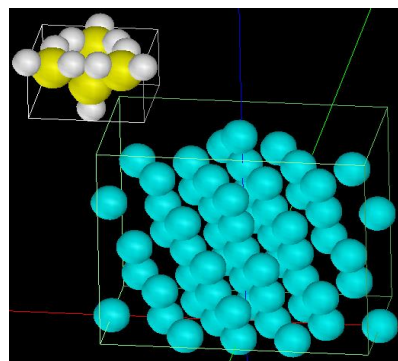
$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造4単位セルに対して1つのBiがある場合
(Ag(111)上に置いた場合)



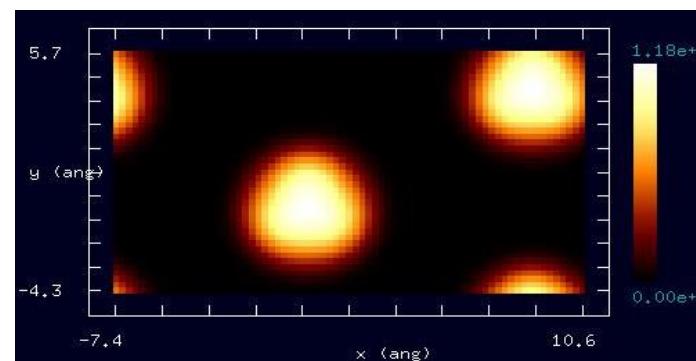
文献[2]でのSTM像
 $V_s = -0.4\text{[V]}$, $I_t = 0.3\text{[nA]}$



シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



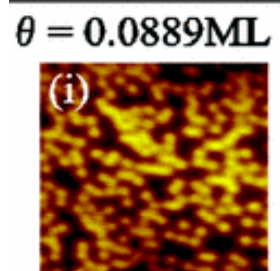
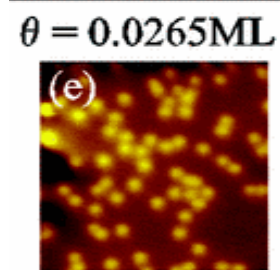
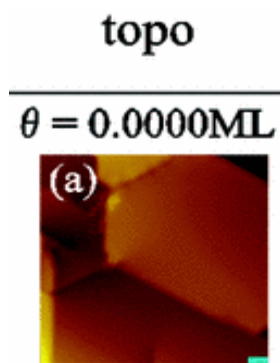
探針(Si_4H_{10})と試料



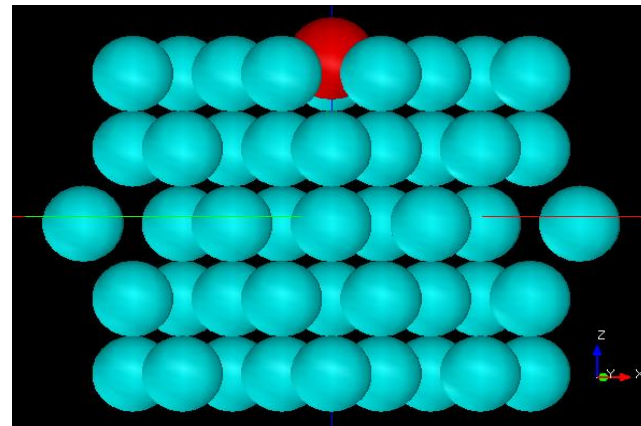
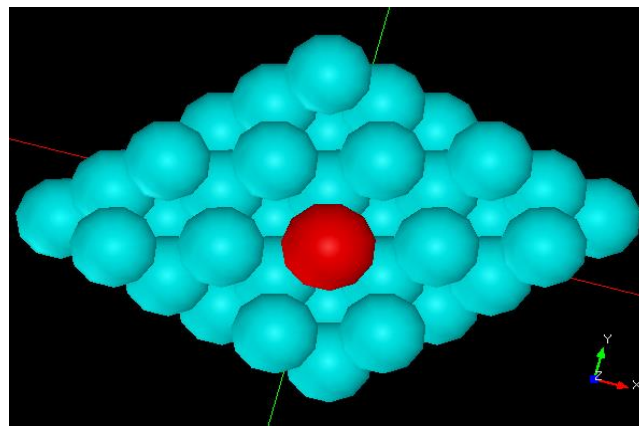
探針電圧: 0.4[V] , 探針 - 試料間距離: 3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(2)

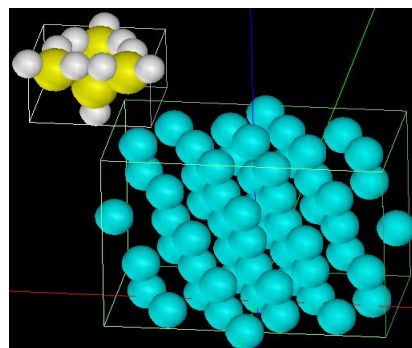
$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造4単位セルに対して1つのBiがある場合
(表面のAgと置換した場合)



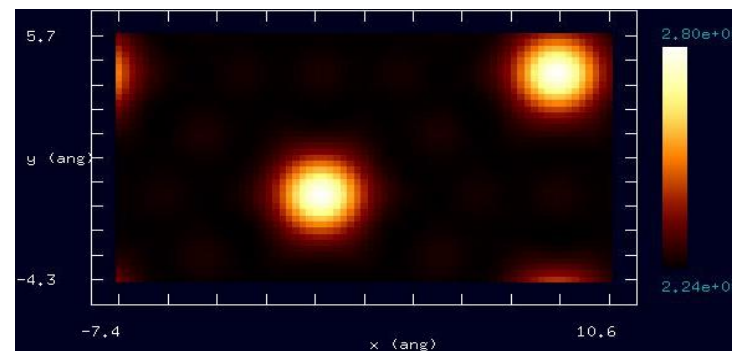
文献[2]でのSTM像
 $V_s = -0.4\text{[V]}$, $I_t = 0.3\text{[nA]}$



シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



探針(Si_4H_{10})と試料

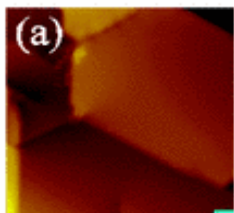


探針電圧: 0.4[V] , 探針 - 試料間距離: 3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

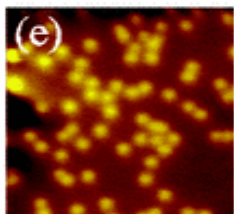
【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(3)

topo

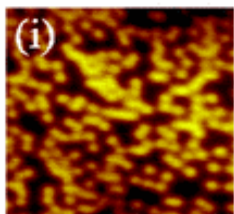
$\theta = 0.0000\text{ML}$



$\theta = 0.0265\text{ML}$

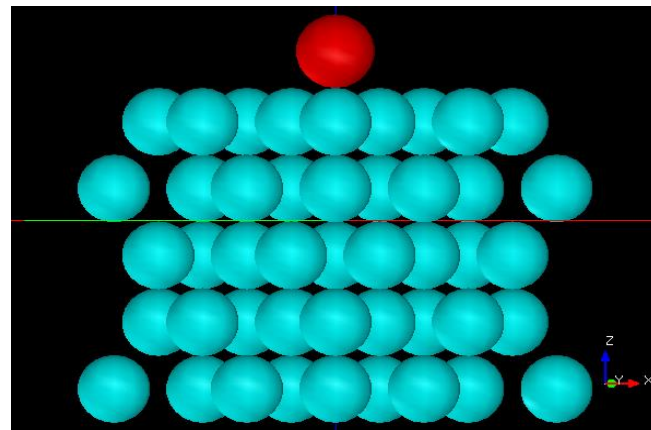
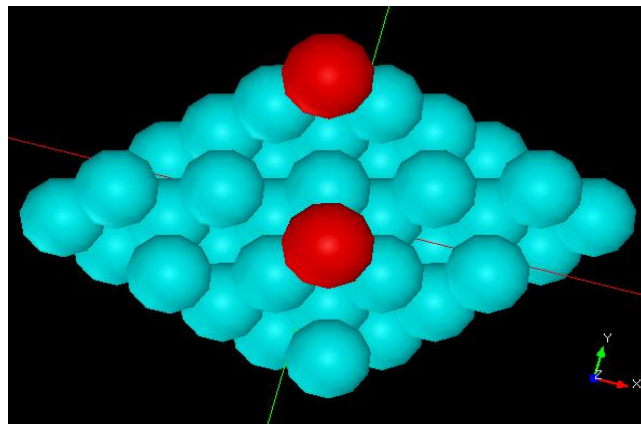


$\theta = 0.0889\text{ML}$

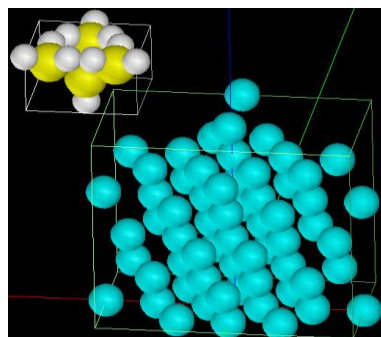


文献[2]でのSTM像
 $V_s = -0.4\text{[V]}$, $I_t = 0.3\text{[nA]}$

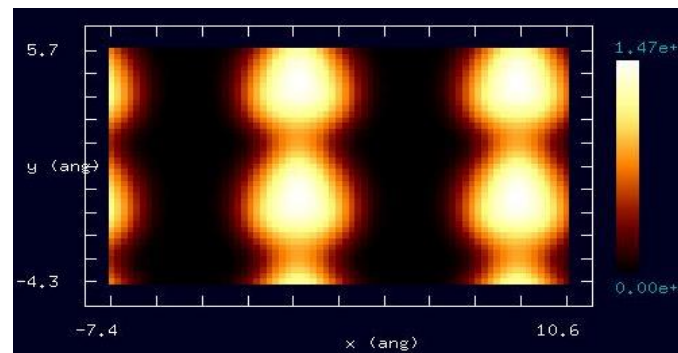
$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造4単位セルに対して2つのBiがある場合
 (Ag(111)上に置いた場合)



シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



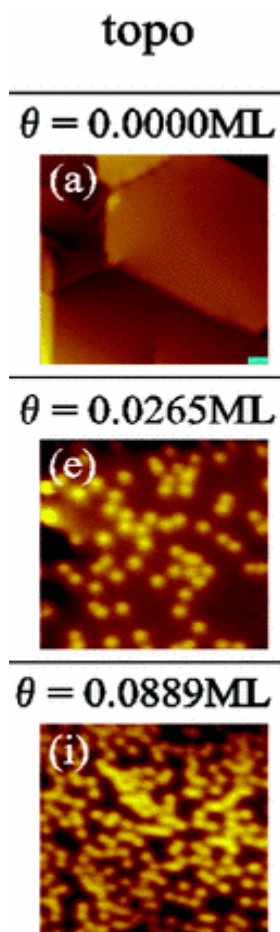
探針(Si_4H_{10})と試料



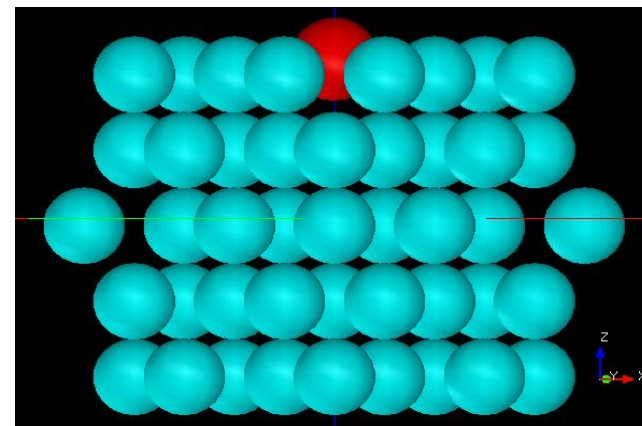
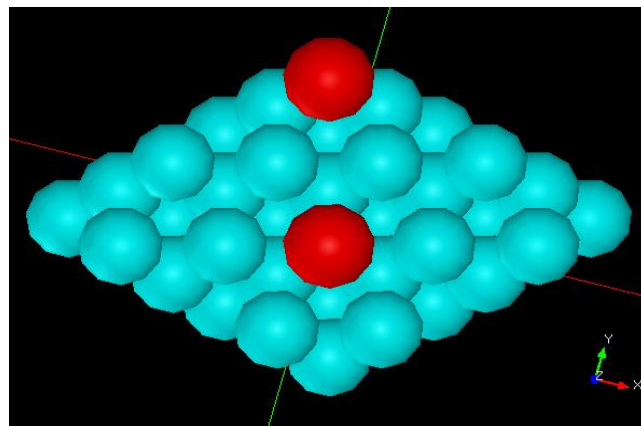
探針電圧: 0.4[V] , 探針 - 試料間距離: 3.0[Å]
 でのトンネル電流像のシミュレーション結果

【DFTB】Ag(111)上の任意の位置に置かれたBi原子のSTM像(4)

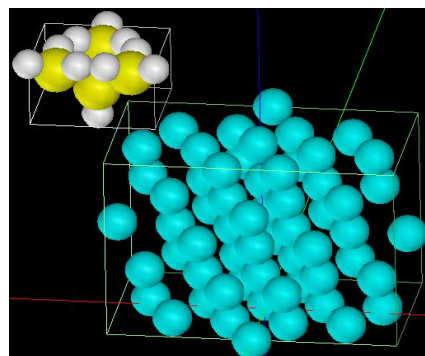
$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 構造4単位セルに対して2つのBiがある場合
(表面のAgと置換した場合)



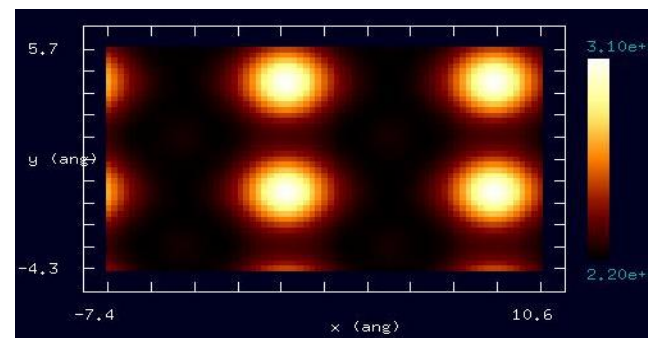
文献[2]でのSTM像
 $V_s = -0.4\text{[V]}$, $I_t = 0.3\text{[nA]}$



シミュレーションに用いたモデルを上から見た図と横から見た図



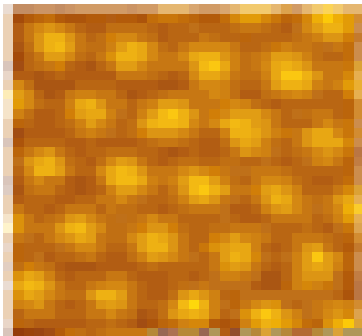
探針(Si_4H_{10})と試料



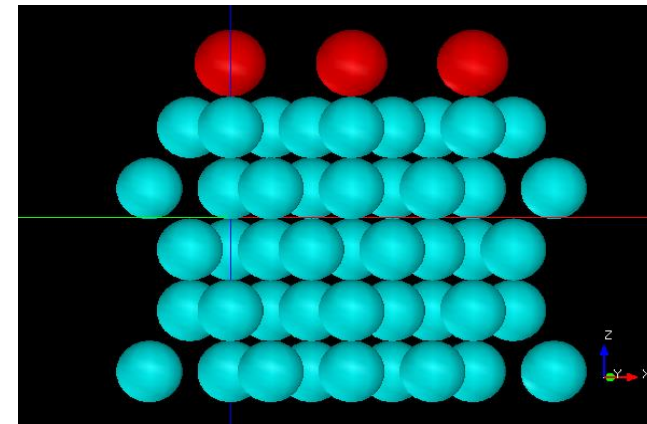
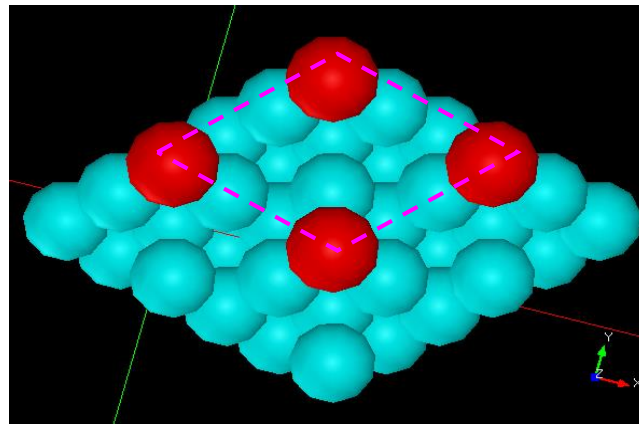
探針電圧: 0.4[V] , 探針 - 試料間距離: 3.0[Å]
でのトンネル電流像のシミュレーション結果

【DFTB】Ag(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -BiのSTM像(1)

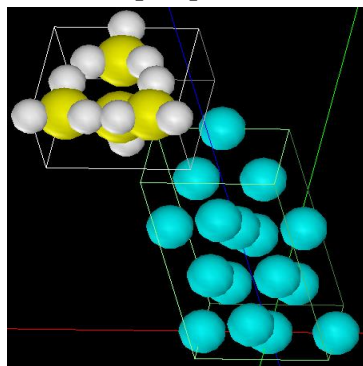
Ag(111)上にBiを置いた場合



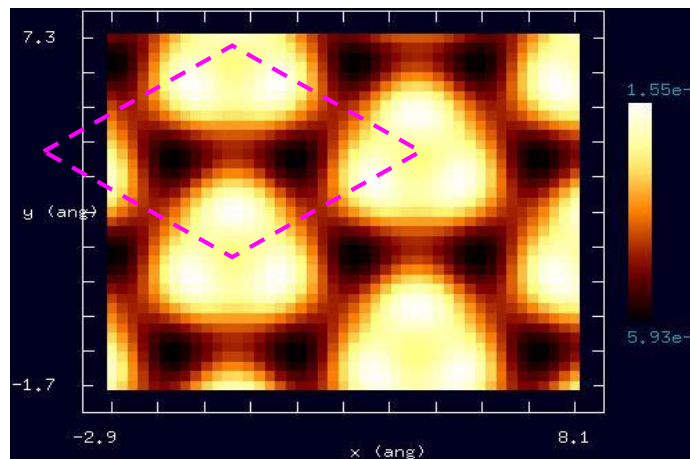
文献[3]でのSTM像
電圧記述なし,
電流0.5[nA]



シミュレーションに用いたモデル(ピンクの破線が単位セル)を上から見た図と横から見た図



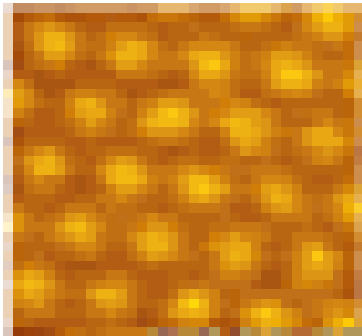
探針(Si_4H_{10})と試料



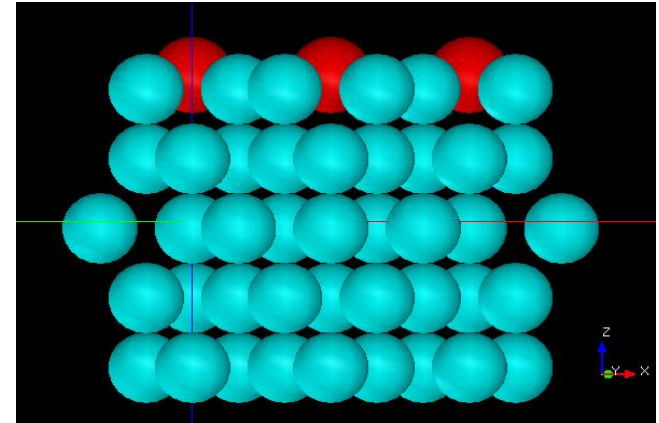
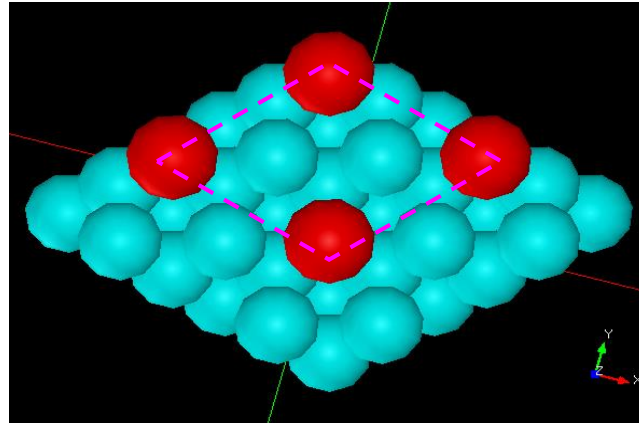
探針電圧:0.003[V],
探針 - 試料間距離:3.0[Å]での
トンネル電流像のシミュレーション結果

【DFTB】Ag(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -BiのSTM像(2)

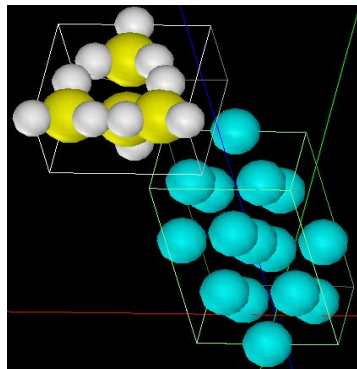
表面のAgとBiが置換した場合



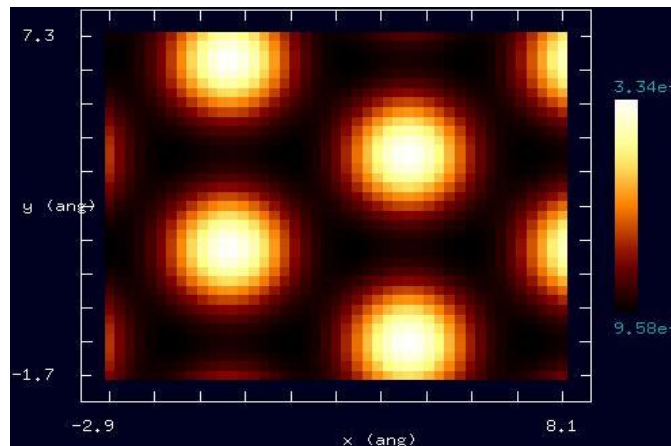
文献[3]でのSTM像
電圧記述なし,
電流0.5[nA]



シミュレーションに用いたモデル(ピンクの破線が単位セル)を上から見た図と横から見た図



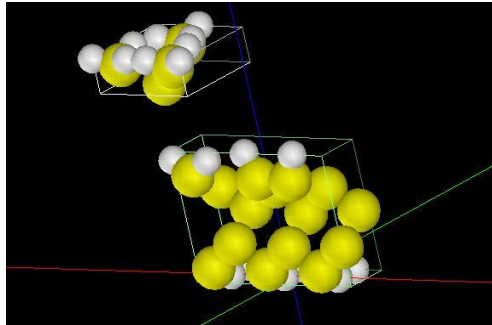
探針(Si₄H₁₀)と試料



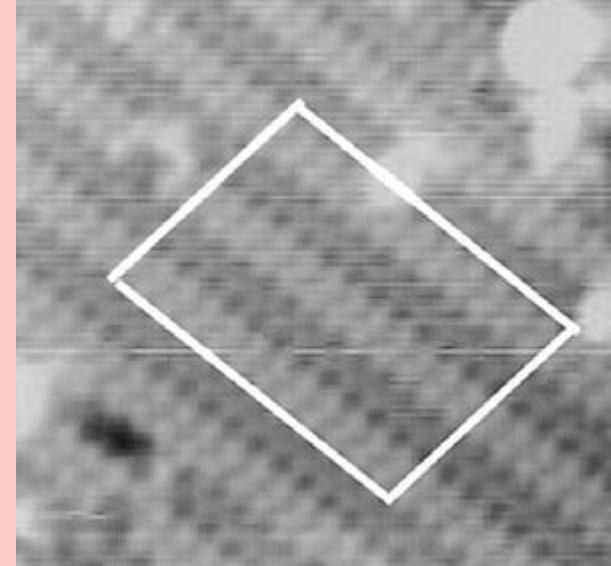
探針電圧:0.003[V],
探針 - 試料間距離:3.0[Å]での
トンネル電流像のシミュレーション結果

【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant height STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant height STM
探針-試料間の距離:	3.4 Å
探針バイアス:	+2.73 V
スキャンエリア:	18.0 Å x 11.5 Å



cf. Experiment

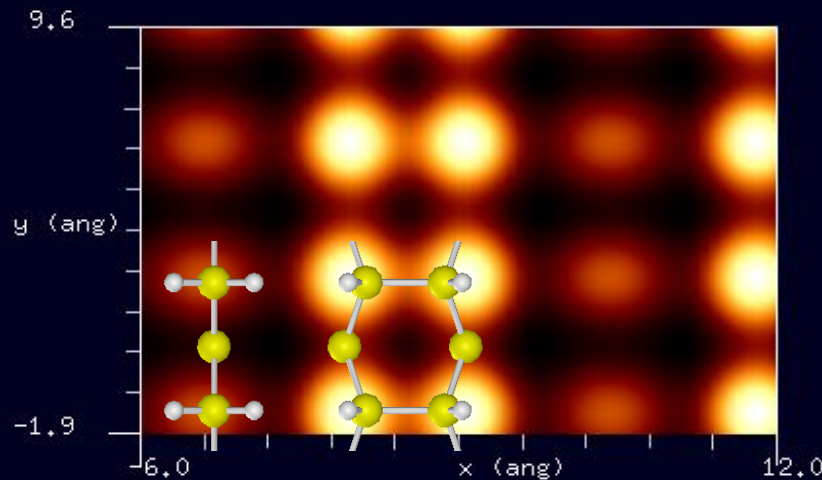


H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

九州工業大学学術機関リポジトリ

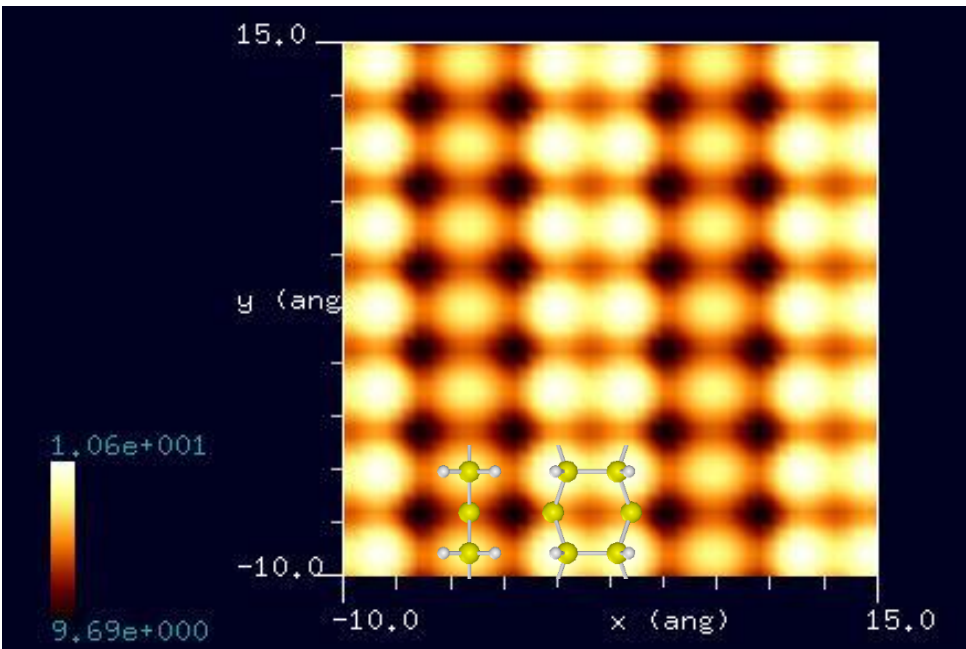
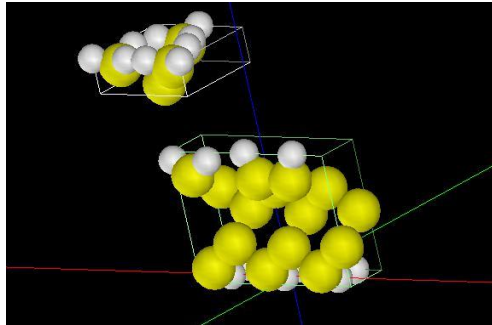
Khan, Arifur Rahman,

Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

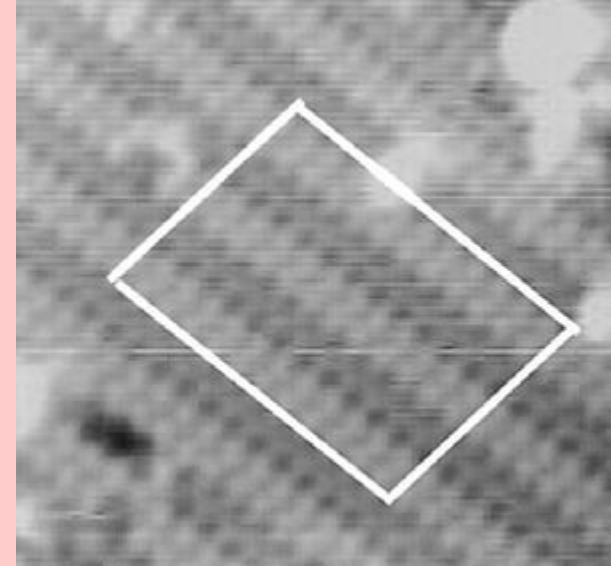


【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	+2.73 V
電流値:	1000 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å



cf. Experiment



H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

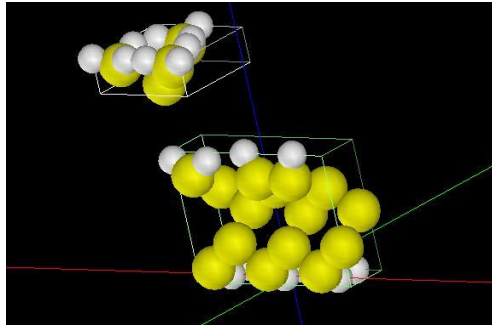
九州工業大学学術機関リポジトリ

Khan, Arifur Rahman,

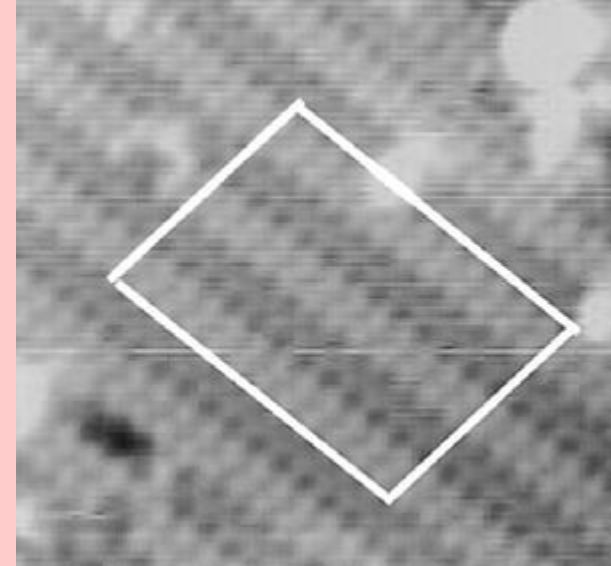
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant height STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant height STM
探針-試料間の距離:	3.4 Å
探針バイアス:	+3.5 V
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å



cf. Experiment

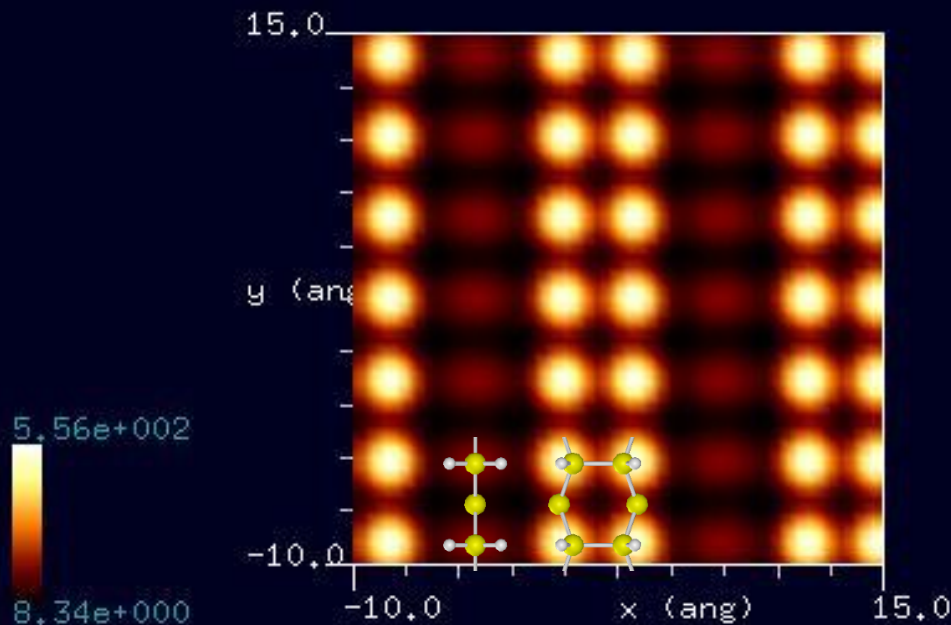


H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

九州工業大学学術機関リポジトリ

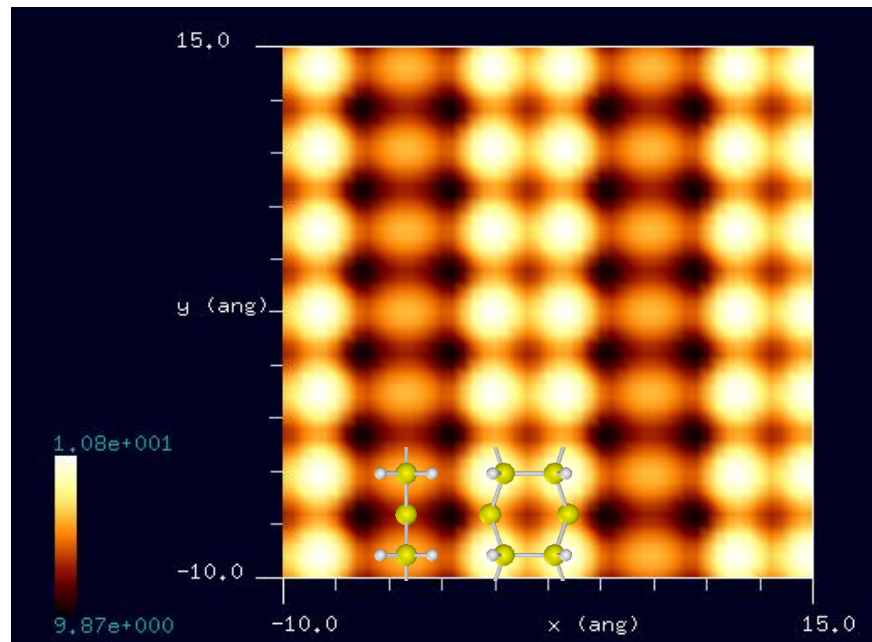
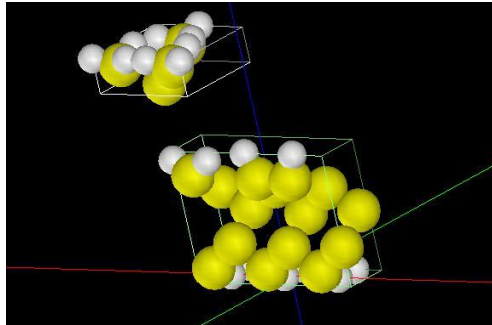
Khan, Arifur Rahman,

Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

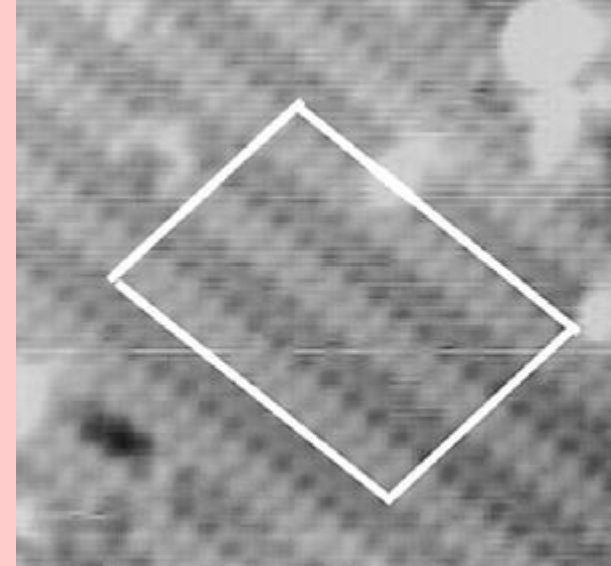


【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	+3.5 V
電流値:	1000 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å



cf. Experiment



H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

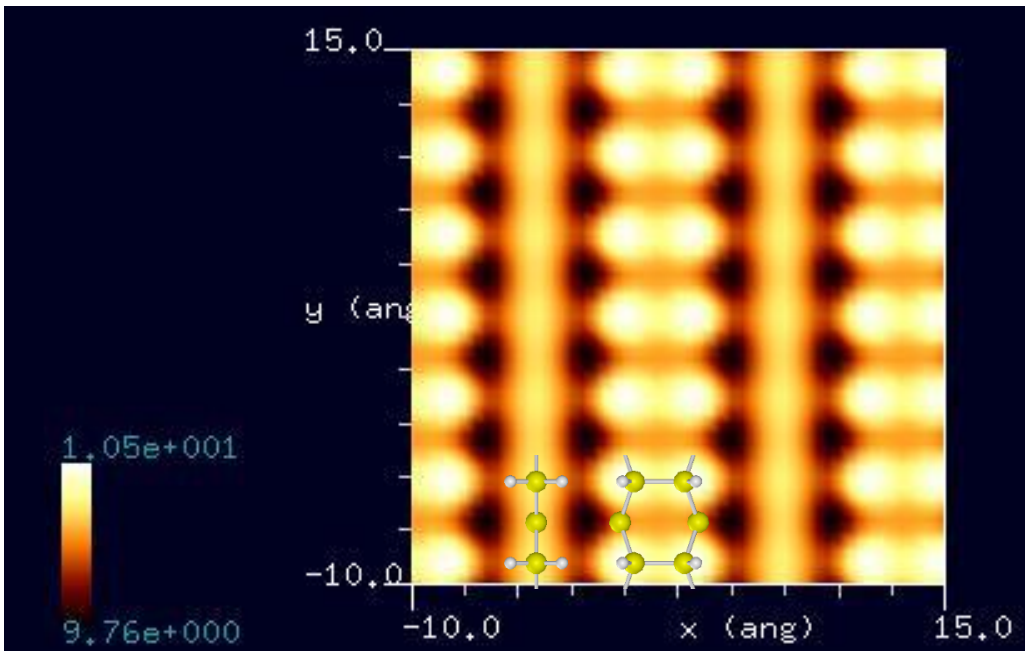
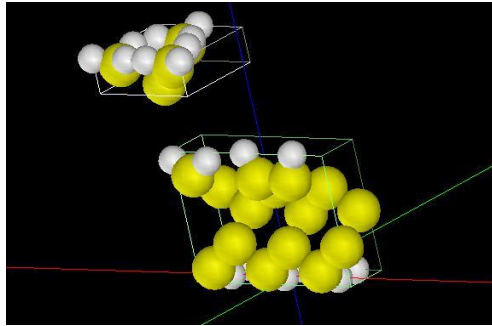
九州工業大学学術機関リポジトリ

Khan, Arifur Rahman,

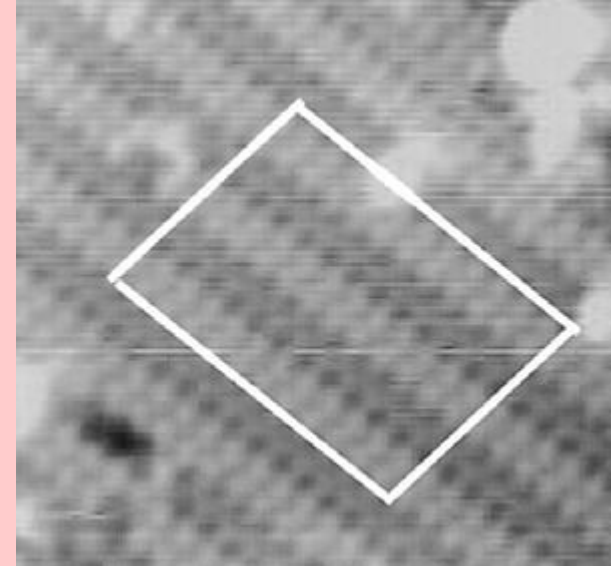
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	-3.5 V
電流値:	1000 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å



cf. Experiment



H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

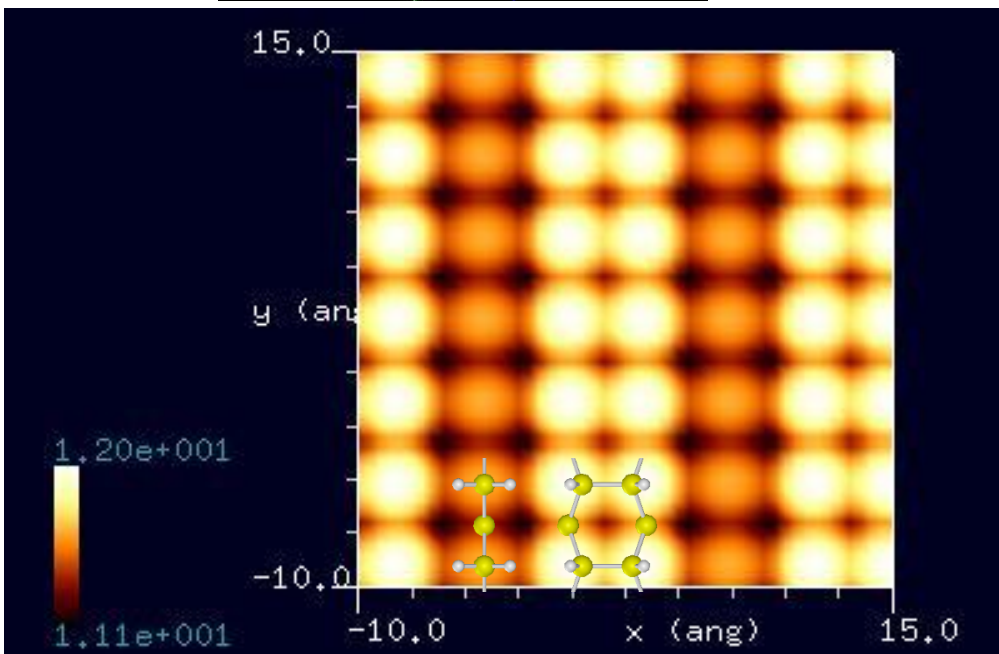
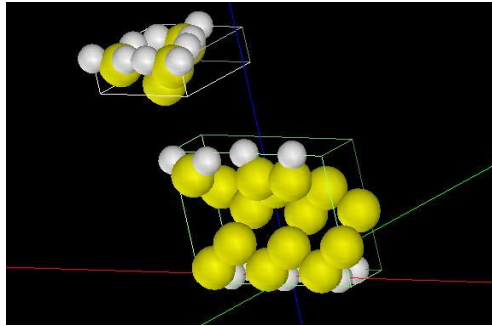
九州工業大学学術機関リポジトリ

Khan, Arifur Rahman,

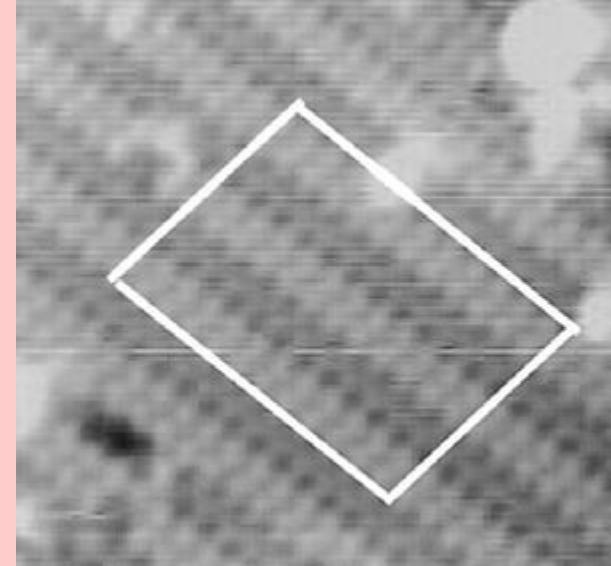
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

【DFTB】Si(001)-3x1:H表面のconstant current STM像シミュレーション

探針:	Si ₄ H ₉
試料表面:	Si(001)-3x1:H
スキャンモード:	constant current STM
探針バイアス:	-3.5 V
電流値:	1 nA
スキャンエリア:	25 Å x 25 Å



cf. Experiment



H/Si(100)-3x1 表面のconstant current STM像。
サンプルバイアスは+3.5 V。
電流値は不明。

九州工業大学学術機関リポジトリ

Khan, Arifur Rahman,

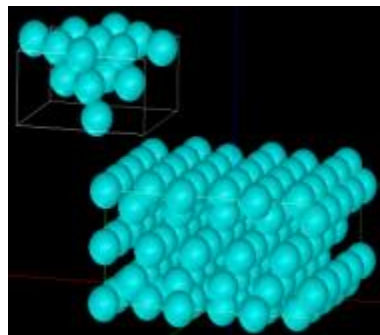
Reaction of atomic hydrogen and oxygen with
deuteriumcovered silicon(D/Si)surfaces. (2008)

【DFTB】Au(001)再構成表面のSTM観察とシミュレーション

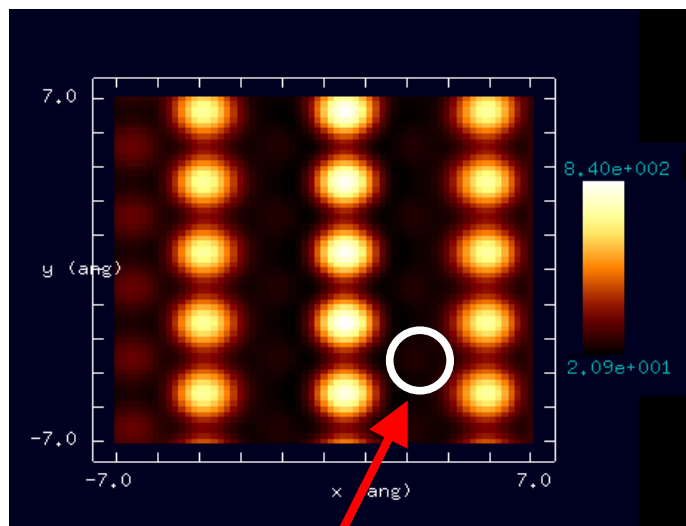
DFTB

探針・試料モデル

探針: Au₁₄
試料表面: Au(001)-5x1 reconstructed
探針-試料間の距離: 4 Å
バイアス電圧(探針の電位): +0.7 V



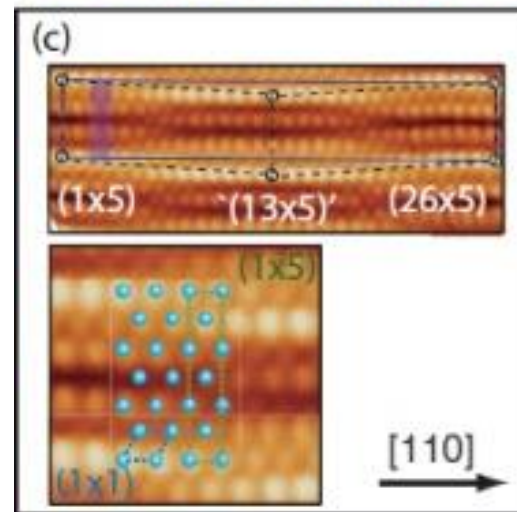
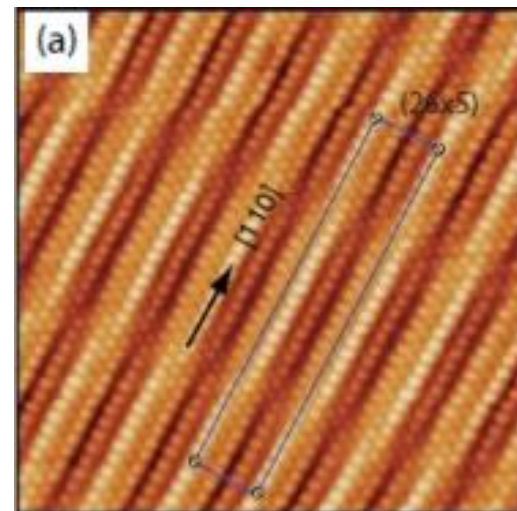
STM像の計算結果



原子は存在するのに、電流があまり流れていない。

電荷の移動が起こっている

実験



類似

S. Bengiό et al., Phys. Rev. B **86**, 045426 (2012).
Au(100)-26x5 reconstructed

DFTBバンド構造計算結果はPHASE/0のプリプロセッサの役割を果たす

2016.12. ICSPM24_ハワイ応用物理学会ポスターセッション

DFTB法による硫化カドミウムのSTMシミュレーション

ウルツ構造の硫化カドミウムのバンド構造の計算工程がコンテンツで示され、[DFTBバンド構造計算実行の手引書](#)の計算手順と対になっています。

DFTBバンド構造計算実行の手引書

その他には、CdS(100)-(1x1)表面のSTM像のシミュレーションが掲載されています。

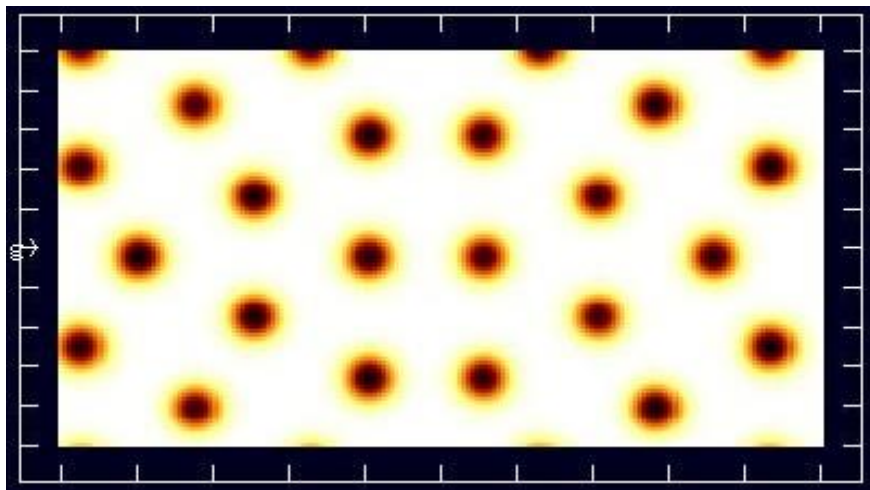
SPMシミュレータはPHASE/0のプリプロセッサとして運用

PHASE/0で精密なバンド計算をする前に、予備的な計算を実行できます。PHASE/0で、興味あり、計算したい材料のバンド構造計算が困難か否かを、[DFTBバンド構造計算実行](#)で事前に判別できます。

DFTBソルバの特徴

DFTBソルバは、実験が専門の研究者でも気軽に理論シミュレーションが行えるように設計されています

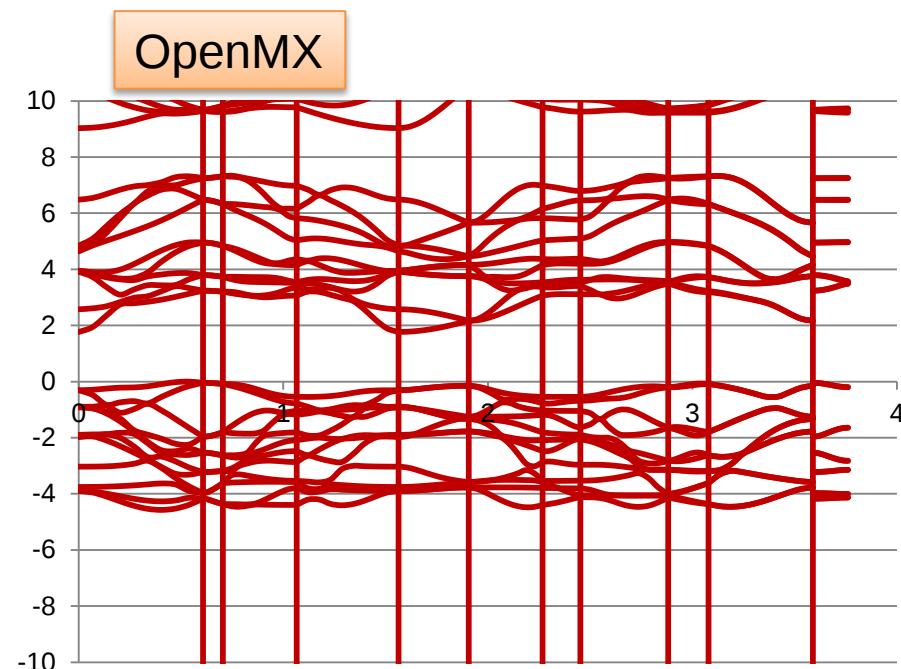
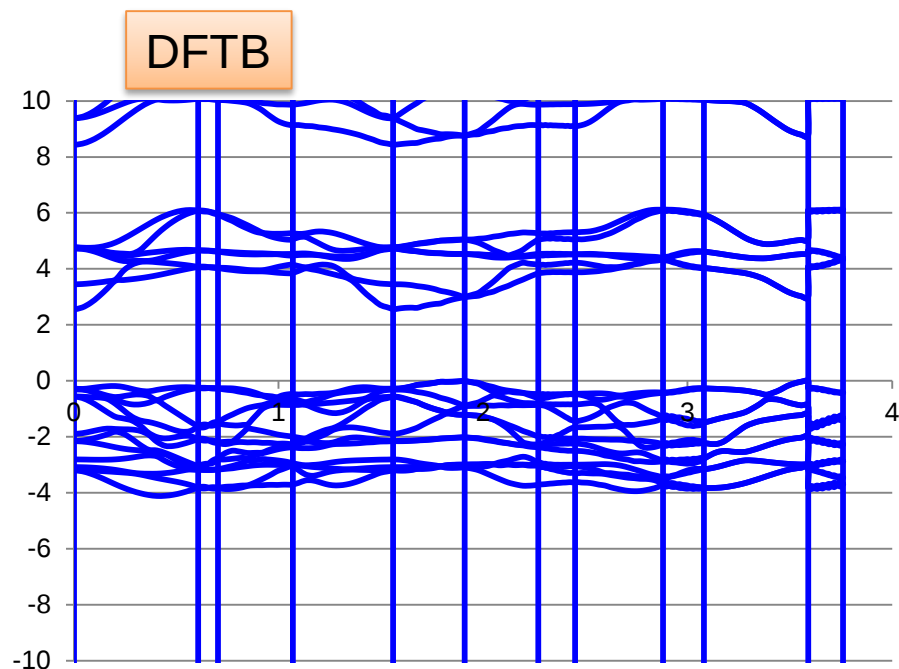
特に、大胆な近似法を採用することで計算時間を大幅に短縮しており、実験作業と並行してシミュレーションが行えるように配慮されています



このように、DFTBソルバは計算精度を犠牲にしている面があるのですが、それでも、一般的な第一原理計算ソフトによる電子状態シミュレーションの計算精度と比較して、遜色のない性能を持っています

DFTBソルバのベンチマークテスト

DFTBソルバとOpenMXで、酸化チタン(TiO_2)のバンド構造を計算した結果の比較



DFTBソルバは、本来、走査型プローブ顕微鏡画像のシミュレーションを行うためのソフトですが、計算途中の過程で密度汎関数法によるバンド構造計算を行います。このDFTBのバンド計算機能と、OpenMXによるバンド計算の結果を比較したのが上の図です。両者は良く一致していることが分かります。(実際に販売されるDFTBソルバには、バンド構造を出力する機能は付与されていません。)

OpenMXは、東京大学物性研究所の尾崎泰助教授が中心となって開発された、フリーの第一原理計算ソフトです。信頼性の高いソフトであることが、広く認められています。

DFTBを活用することにより、以下の新たな知見が得られます

- 周期的境界条件下での、金属・無機半導体結晶のSTM像をÅオーダーで求めることができます
- SetModelにより、ほとんどあらゆる金属・無機半導体結晶の形状データを作成できます
- STM像をシミュレーションする際、探針高さ一定モードとトンネル電流値一定モードが選べます
- KPFM像も求めることができます
- STS(トンネル分光顕微鏡)シミュレーションも可能です
- 今後、金属・無機化合物の結晶の、エネルギー・バンド構造を計算する機能を追加する予定です

今後の開発予定

μm オーダーの系でのKPFMシミュレーションを要望する声が多い

(具体例)基板: SiO_2 , SiC , Cu

基板の上に乗せるもの: グラフェン(単層、二層、多層)、 Pt

探針: Rh (ロジウム)コートされたもの

メゾスコピックな系でのKPFMシミュレーションを行いたい
DFTBソルバは、 nm オーダーなので実現は難しい



マクロKPFMシミュレータの開発

過去に、このようなソフトウェアを企画し、諸般の事情で途中で開発を中止してしまった経緯があり

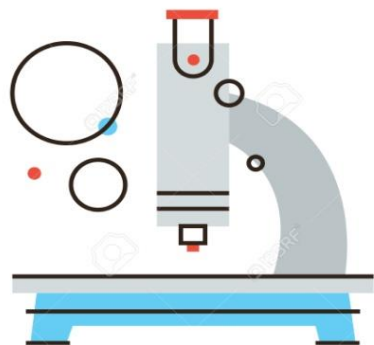
境界要素法と古典電磁気学の理論を組み合わせて実現

開発途中のプログラム・ソースコードが残っているので、これを利用して開発を再開させることも可能

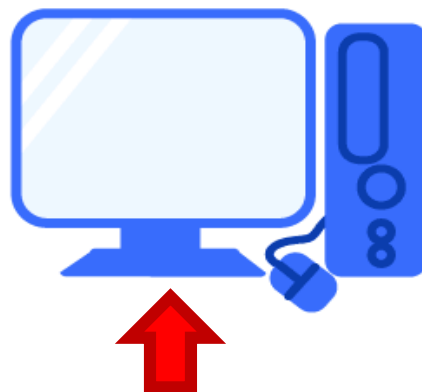
6か月から10カ月程度の開発期間が必要

SPMシミュレータのバンドル販売方法について

- SPM実験装置をお買い上げの顧客に、SPMシミュレータの実行ファイルを収めたDVD-ROMを同時提供します
 - SPM実験装置ユーザーは、すぐに、お手元のWindowsパソコンにSPMシミュレータをインストールして使用できます
 - ライセンスもインターネットで簡単に登録できます
-
- SPMシミュレータを使えば、SPM実験装置で得られた生データを、お手元のWindowsパソコン上でデジタル処理できます
 - シミュレーション計算もWindowsパソコン上で簡単操作できます



SPM実験装置



Linux, GPUにも対応しています
(ただし、Linuxにはグラフィックユーザーインターフェースが付属していません)

SPM実験装置のすぐそばのPCにSPMシミュレータをインストール