

第3回 走査プローブ顕微鏡 (SPM) シミュレータの開発セミナー モデリング (原子初期構造作成) 機能の使い方

【背景】

SPMシミュレータによる原子レベルのシミュレーションは、適切な原子構造モデルを必要とします。ここでは、SPMシミュレータの補助機能であるモデリングツールを利用した、半導体試料表面の初期構造の作成の方法について記述します。このツールでは、ミクロスケール (DFTB・CG・MD) で使用される原子モデルを作成します。ミクロスケールで使用される原子モデルとして、理想表面を持つ薄膜モデルが作成されます。また、任意の原子の追加・削除・移動の編集を行う事ができます。

【概要】

代表的な構造については、SPMシミュレータのデータベース内に存在しますが、その中にもないもの、あるいは類似しているが別のものについては、別途作成準備する必要があります。これを効率的に行うために提供するのが、モデリングツールです。モデリングツールの基本的な使用法は (とても簡単で)、以下の三つの段階を想定しています。

1. 結晶構造から結晶素片を作成し、
2. これを並べて、
3. 個々の原子を編集

【事例】

SPMシミュレータで使用できる探針のモデルを作成する手順の一例を提案します。探針用のモデルを作成するときは、結晶単位法の角を利用すると簡単に作成できます。その場合、表面を全て水素原子で終端することで、安定な探針構造になります。ただし探針先端部の水素原子については適宜削除してください。

0. 例としてシリコン ($a=5.5 \text{ \AA}$) の探針を仮定、原子数は多くできないことに注意。
 1. モデリングツールの起動
 2. メニューバー>ファイル>NEW を選択して結晶素片の作成画面を表示する
 3. 希望する結晶構造のデータを入力 (結晶素片の作成)
 4. ミラー指数は基本的に編集しない
 5. セル数を編集 (並べる)
 6. 必要に応じて、全てのダングリングボンドを水素で終端
 7. 先端となる角の原子を適宜編集 (個々の原子の編集)
 8. 保存して終了

(注) 並進ベクトルは自動でSPMシミュレータに渡されませんので、コピーの必要がありますが、原則として探針作成では並進ベクトル関係ありません。ただし、試料表面の単位胞サイズを超えると適切な計算結果を得ることができません。

【お断り】

本ツールは開発途上のものです。仕様の変更は極力避けるよう努めますが、やむを得ず変更される可能性があります。予めご理解ご了承ください。

以上