

Advanced Algorithm & Systems

〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿 1-13-6 恵比寿 IS ビル 7F

TEL: 03-3447-5501 (代) FAX: 03-3447-4100

URL: <http://www.aasri.jp/>

[商品シミュレータ名]

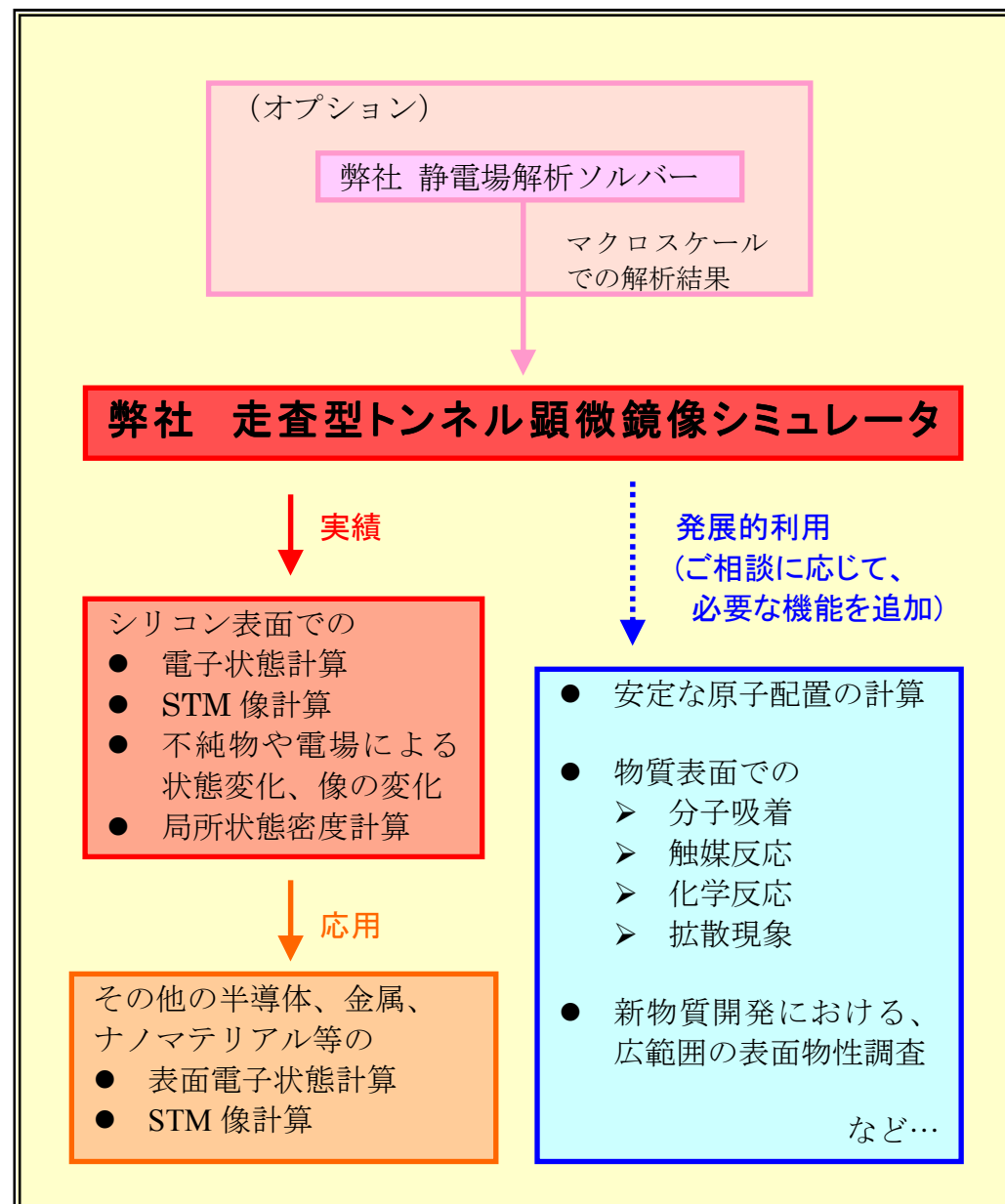
AA&S 走査型トンネル顕微鏡像シミュレータ

[商品紹介とご提案]

走査型トンネル顕微鏡 (Scanning Tunneling Microscope ; 以下STM と略記) は、今や、物質表面のナノスケール構造や物性を研究するのに欠かすことのできない技術となっています。しかしSTM での測定結果を正しく解釈するためには、理論的な解析、すなわち、定量的に信頼できる高精度の表面電子状態計算が必要となります。

このような目的のために、弊社では、STM 像シミュレータを開発いたしました。現在、シリコン表面での電子状態計算やSTM 像計算などを行うことに成功しております。もちろん、シリコン以外の半導体、金属、ナノマテリアル等の表面電子状態計算、STM 像計算などへもご利用いただけるものと考えております。

また弊社では、本シミュレータの販売だけでなく、新たな機能の追加などのご要望につきましても、文献調査の段階からお受けしております。お客様のニーズにあわせたシミュレータをご用意いたしますので、まずはお気軽にご相談ください。



[計算方法と本シミュレータの特色]

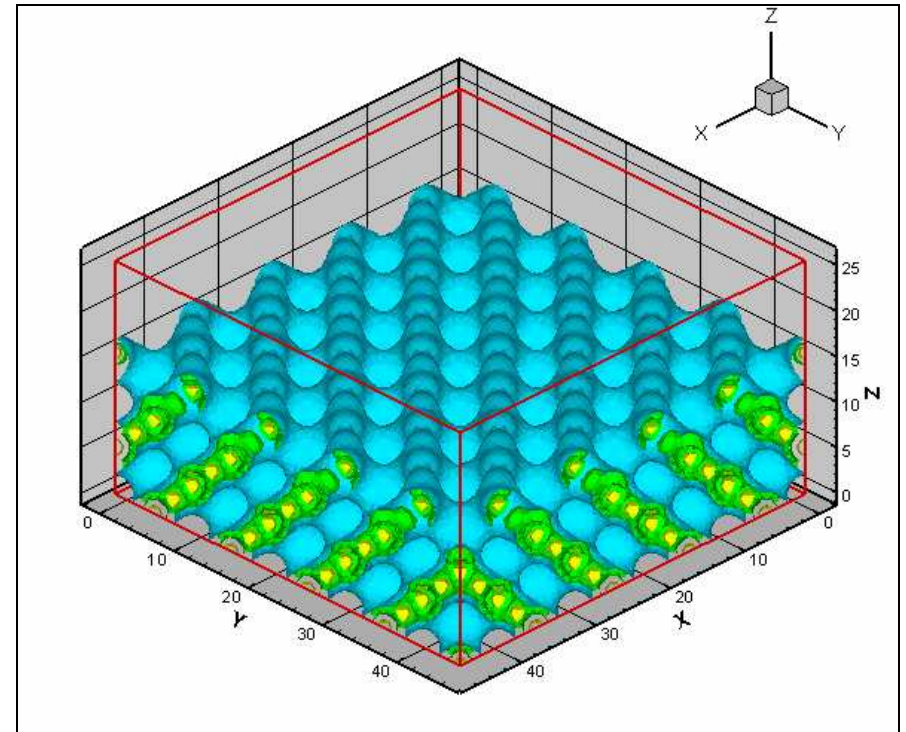
弊社の STM シミュレータでは、ミクロスケールでの電子の運動を記述するシュレディンガー方程式と呼ばれる微分方程式を数値的に解くことにより、表面電子状態を計算しております。より具体的には、多電子系のシュレディンガー方程式を密度汎関数理論によって有効的な一電子の方程式に還元し、その式の自己無撞着な解（電子の波動関数）を求めております。

この方法は第一原理計算と呼ばれるものであり、金属や半導体のバンドエネルギー計算などにおいて標準的に用いられている手法ですが、物質の表面のような 2 次元的な対称性を持つ系にも拡張できることが知られております。弊社のシミュレータではその方法を採用しております。

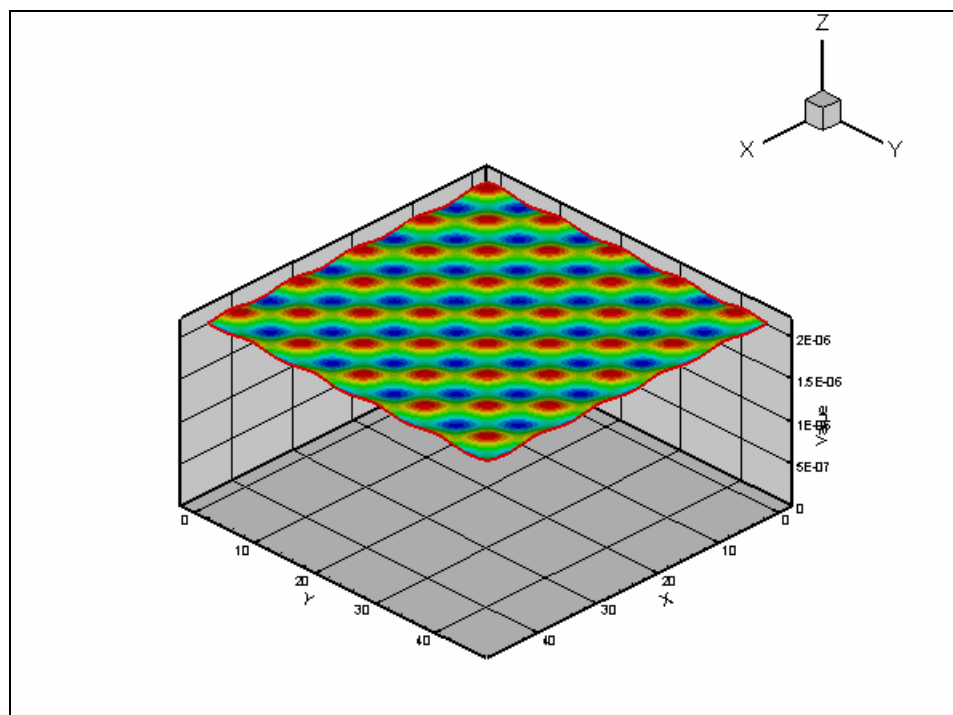
この方法の特徴は、物質表面に垂直な方向の方程式を表面方向とは独立に解く点にあります。それにより、3次元計算用のシミュレータを用い、周期的に配置された薄膜の系を物質表面に見立てて計算を行う、周期スラブモデルのような方法と比べ、より正確な結果を期待することができます。

[計算例]

水素終端シリコン(001)表面での計算例を紹介いたします。表面での電子密度は以下のような様子になります。XY 平面が物質表面に平行な面であり、Z 軸が表面に垂直な軸となります。そして、Z=10 付近（単位は a.u.=0.529 Å）がバルク層（シリコン原子が規則的に並んでいる層）と表面層の境界です。水色が電子密度の低いところ、緑、黄となるにしたがって電子密度が増加していきます。

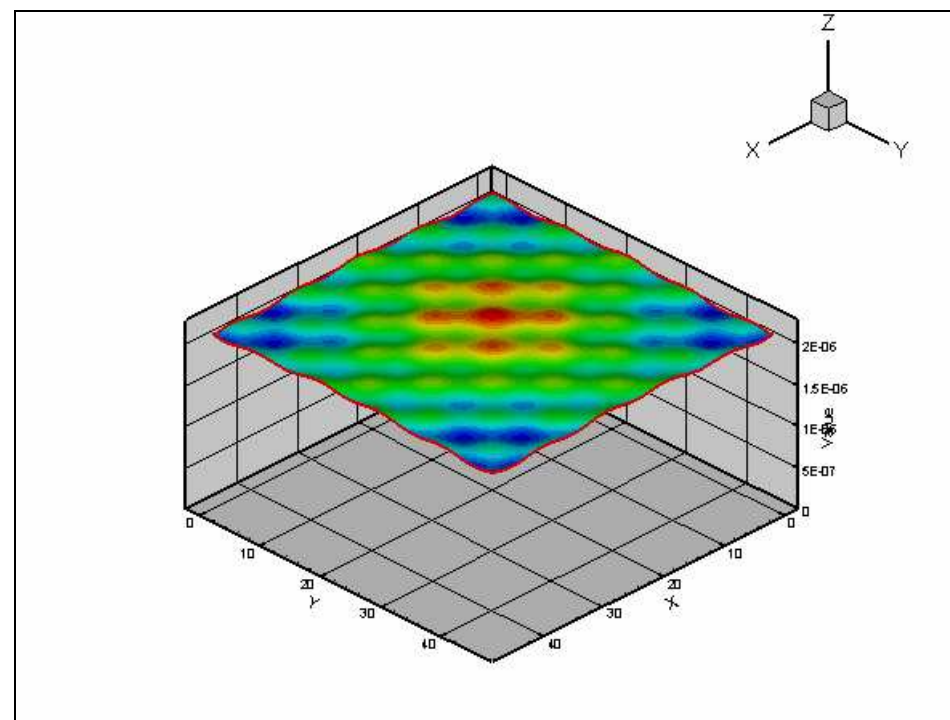


次に水素終端シリコン(001)表面からおよそ 5Å 上方での電子状態密度をお見せします。バルクでのフェルミエネルギーから、その上方 1.5eV までのエネルギー帯域、つまり、伝導バンドの底部近傍における電子状態密度の積分値を表示しています。赤が値の大きいところであり、黄、緑、青となるにしたがって減少していきます。なおこの図は、トンネル電流の強さを見ていることにもなっております。(ただし、STM チップ先端付近の電子の波動関数が等方的な場合に対応します。) その場合、赤い箇所にはチップがあるときには電流が強い、青い箇所にあるときは弱い、ということになります。



また、不純物を入れた場合にも同様の計算が可能です。以下の図は、不純物としてドナーをバルク層と表面層の境界からおよそ 5Å 下方に入れた場合の、ドナーによる変化のみを取り出した結果です。先ほどと

同様、水素終端シリコン(001)表面からおよそ 5Å 上方、バルクでのフェルミエネルギーから、その上方 1.5eV までの電子状態密度の積分値であり、チップ先端付近での電子の波動関数が等方的な場合に流れるトンネル電流の強さを表しています。ドナーの存在がトンネル電流値に反映されることが解ります。



そのほかにも、STM チップ先端付近での電子の波動関数が等方的でない場合の計算や表面付近に存在する電場の影響を考慮した計算、空間のある点における状態密度（局所状態密度）の計算も行うことが可能です。表面での原子の配置につきましても、シリコン(001)だけでなく、自由な設定が可能となっています。(例として、弊社にてシリコン(110)、シリコン(111)での計算が可能であることを確認しております。その結果は、弊社ウェブサイトにてご覧になることができます。)

また、計算にあたり、マクロスケールでの静電場解析から得られるデータ（チップ電極や物質表面でのフェルミエネルギーの値）を利用したい場合のために、専用の静電場解析ソルバーをご用意してありますので併せてご利用ください。

[入出力のデータ]

入力：第一原理的手法を用いておりますので、離散化のためのパラメータを除き、以下のような非経験的パラメータを中心に入力することになります。

- バルク層および表面層に配置する原子の種類や位置
- 不純物の種類や位置
- 表面付近での摂動電場の値
- 結果を表示する空間の領域、エネルギーの範囲（チップ電極とベース電極との電位差の範囲）
など

原子の擬ポテンシャルなどの必須データは弊社にてご用意いたします。

出力：バルク、表面および真空の各領域での、任意の空間領域における以下の物理量が得られます。

- 電子の波動関数（電荷密度）
- 静電ポテンシャル値（仕事関数）
- 局所状態密度分布関数
- トンネル電流値
など

[ソフトの状態]

[言語]

主としてFortran90/77（入力ファイル処理に一部Cを利用）

[作業の流れ]

- ① Fortran およびC コンパイラを用いてコンパイル
- ② 計算に必要なパラメータをテキストファイルにて設定
- ③ 計算を実行
- ④ 目的の計算に応じて、②と③を必要回繰り返す
- ⑤ 出力データをTecplotにて可視化
出力データの形式は、お手元の描画ソフト用にカスタマイズ可能ですので、ご相談ください

[計算結果サンプル]

本カタログでは、水素で終端したシリコン(001)表面についての計算例の一部をお見せいたしました。弊社ホームページではそのほかの計算例についても載せておりますので、ぜひご覧ください。

http://www.aasri.jp/pub/demo/proposal/STM_samples.pdf