

先端計測分析技術・機器開発プログラム

最先端研究基盤領域「実証・実用化タイプ」平成26年度 課題申請

SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ用パラメータ・データベース構築

質問時対応用資料

チームリーダー: Advanced Algorithm & Systems 吾妻広夫

サブリーダー: 京都大学 工学研究科 黒川修 准教授

原子間相互作用パラメータの作成方法について

- DFTB法では、電子状態を展開する際に、原子の軌道を模した擬原子軌道を用いる
- 計算上は擬原子軌道を直接使用するのではなく、擬原子軌道から作成されるホッピング積分、重なり積分などを用いて計算を行う
- 電荷の移動を計算するため、エネルギーが収束するまで反復計算(自己無撞着計算)を行う

$$\langle i | H | j \rangle = H_{i,j} = H_{i,j}^0 + \frac{1}{2} S_{i,j} \sum_{a \in \text{atom}} (\gamma_{\alpha(i)a} + \gamma_{\alpha(j)a}) \Delta q_a$$

$$E = \sum_n f_n \langle \psi_n | H^0 | \psi_n \rangle + \frac{1}{2} \sum_{a,b \in \text{atom}} \gamma_{ab} \Delta q_a \Delta q_b$$

$H_{i,j}^0$: ホッピング積分、 $S_{i,j}$: 重なり積分

γ_{ab} : ハバードパラメータと原子 a, b の距離から算出される値

$\alpha(i)$: 基底 i が属する原子、 $\Delta q_a = q_a - q_a^0$: 原子 a の電荷の参照電荷からのずれ

f_n : n 番目の状態の占有数、 $|\psi_n\rangle$: n 番目の電子状態

元素と元素の組に対するホッピング積分、重なり積分、元素に対するハバードパラメータ、軌道のエネルギーをデータベース化したものが**原子間相互作用パラメータ**

結晶のバンド構造は、電子状態を決めるための重要な指標



該当元素を含む典型的な単体・化合物結晶でバンド構造を出来るだけ良く再現するよう原子間相互作用パラメータの元となる擬原子軌道を最適化

原子間相互作用パラメータの作成の手順(アルゴリズム)

価電子、カットオフ距離、軌道の電子数などの入力値を指定して擬原子軌道を作成 (OpenMXを使用)



作成した擬原子軌道を用いて重なり積分などを計算することで、原子間相互作用パラメータを作成する (「パラメータ作成ツール」を使用)



作成したパラメータを用い、DFTBソルバのバンド計算機能でバンド計算 (「パラメータ作成ツール」を使用)



先行論文のバンド構造と比較 バンド構造を再現しているか?



YES

パラメータ完成

NO



SPM(走査型プローブ顕微鏡)シミュレータ用
パラメータ・データベース構築 補足資料

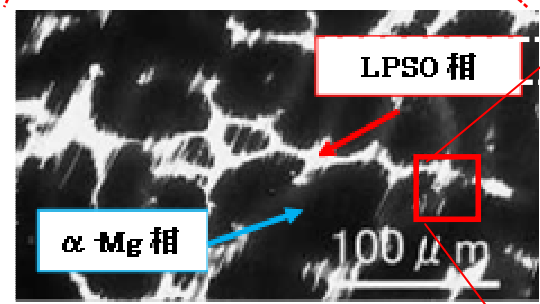
原子～ナノスケールの構造の重要性

Mgを主成分としたMg—遷移金属—希土類三元系合金

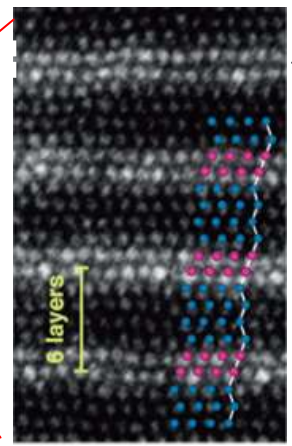


特徴

- ・軽量 …… Alの約2/3(構造用金属材料で**最も軽量**)
- ・高強度 …… 降伏強度~512MPa(**超々ジュラルミンに匹敵**)
- ・高延性 …… 伸び率~6% → **良加工性**



Mg-LPSO型合金組織の電子顕微鏡像



18R

LPSO相の透過型電子顕微鏡像



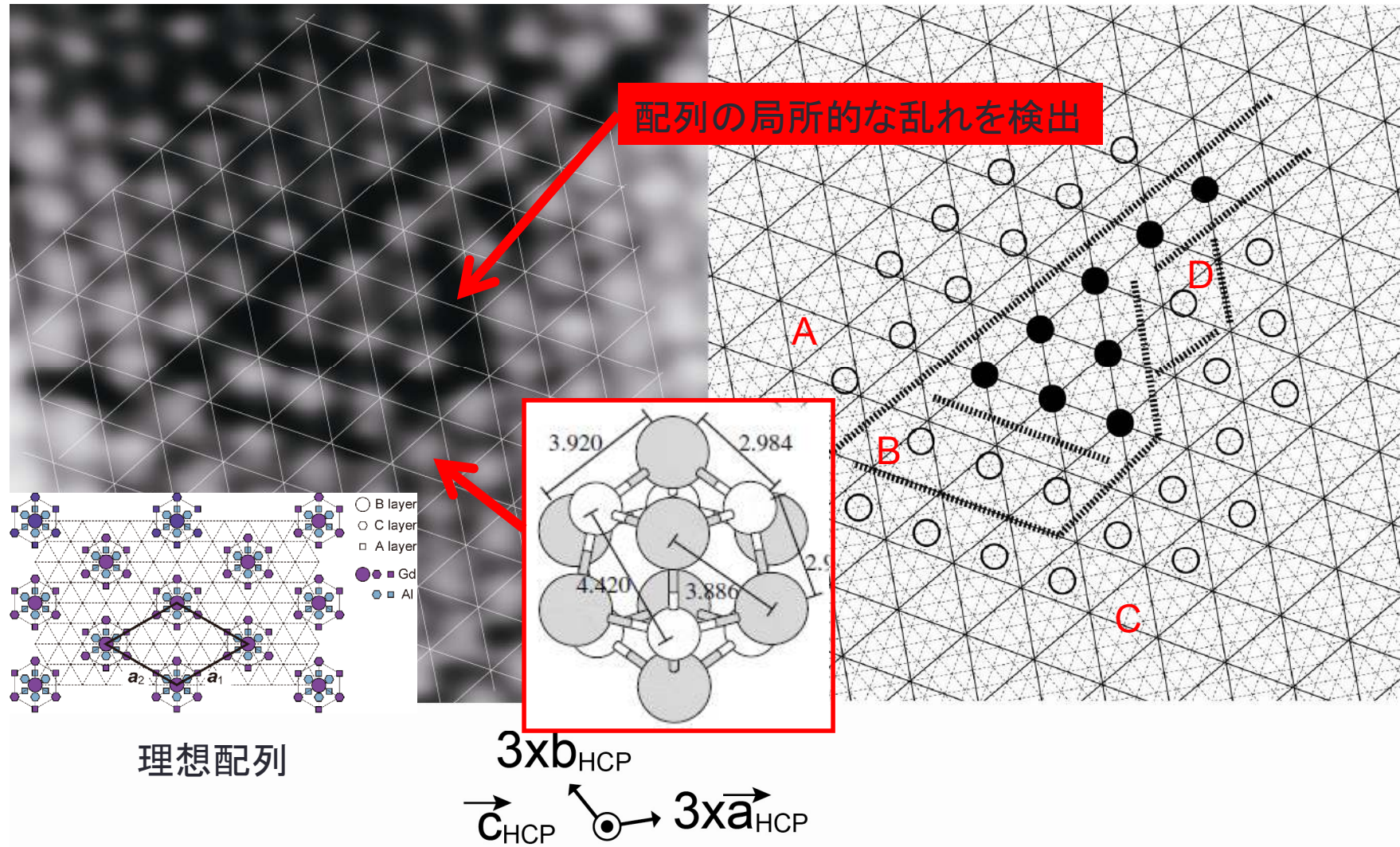
希土類, 遷移金属濃化層

原子～ナノスケールの構造が機能発現の鍵

単独で原子の配列を完全に明らかにできる手法は存在しない

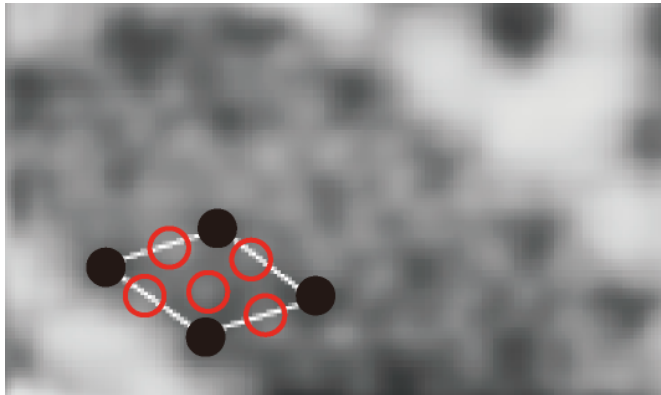
| | 空間分解能 | 元素識別能力 | 局所的な構造の検出 |
|--------------------|---------------------------|--------|-----------------------|
| 透過型電子顕微鏡 (TEM) | ◎ | ○ | △ 電子ビームの方向の 平均像 |
| (3次元)アトムプローブ法 (AP) | △ サブナノメートルの分解能に 留まる | ◎ | ○ |
| 走査プローブ顕微鏡 | ○～◎ | △ | ◎ |

STM(走査トンネル顕微鏡)によるLPSO合金の観察例

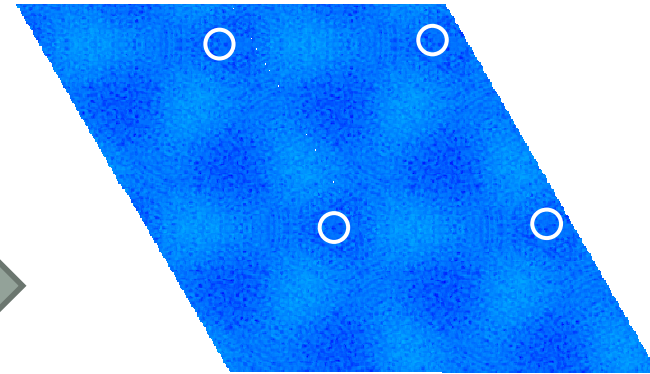
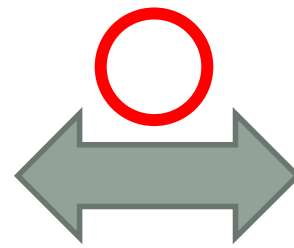


STM観察によって初めて明らかになった

シミュレータの必要性

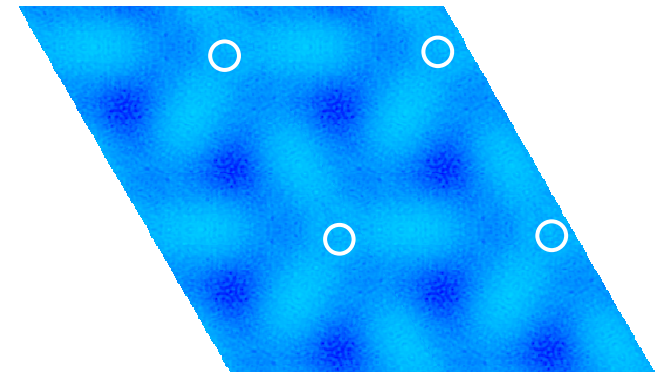
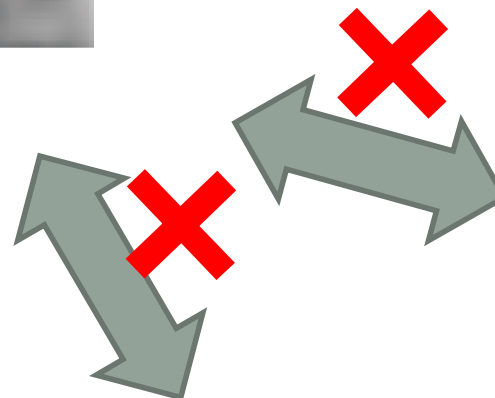


STM像

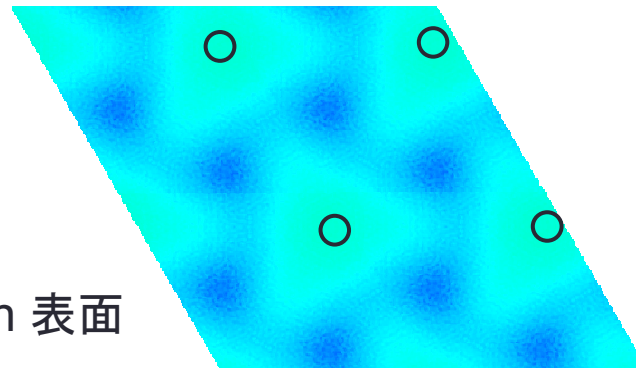


Mg 2層表面

従来のシミュレーションは非常に時間がかかる



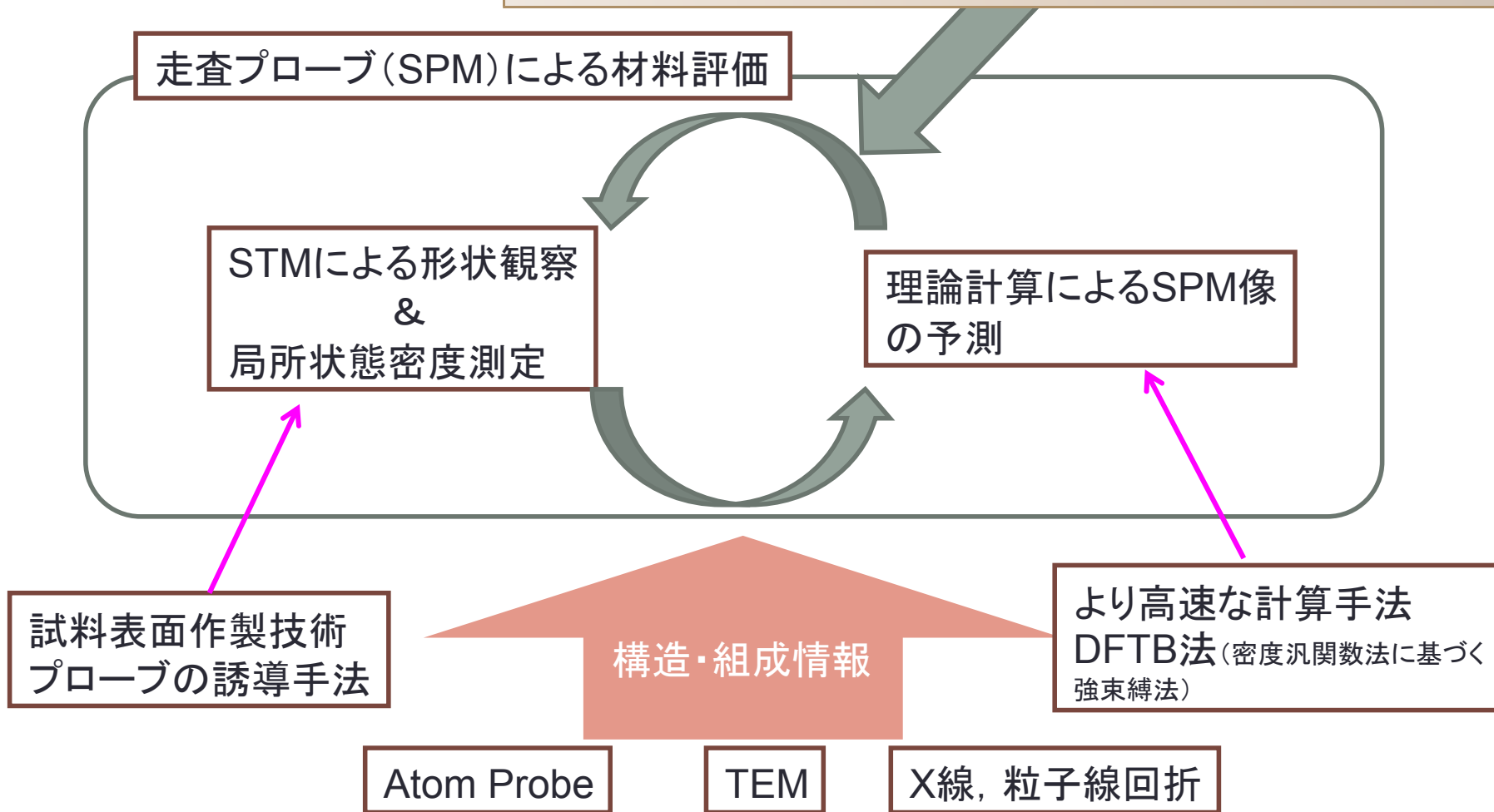
Mg 1層表面



Outer Y-Zn 表面

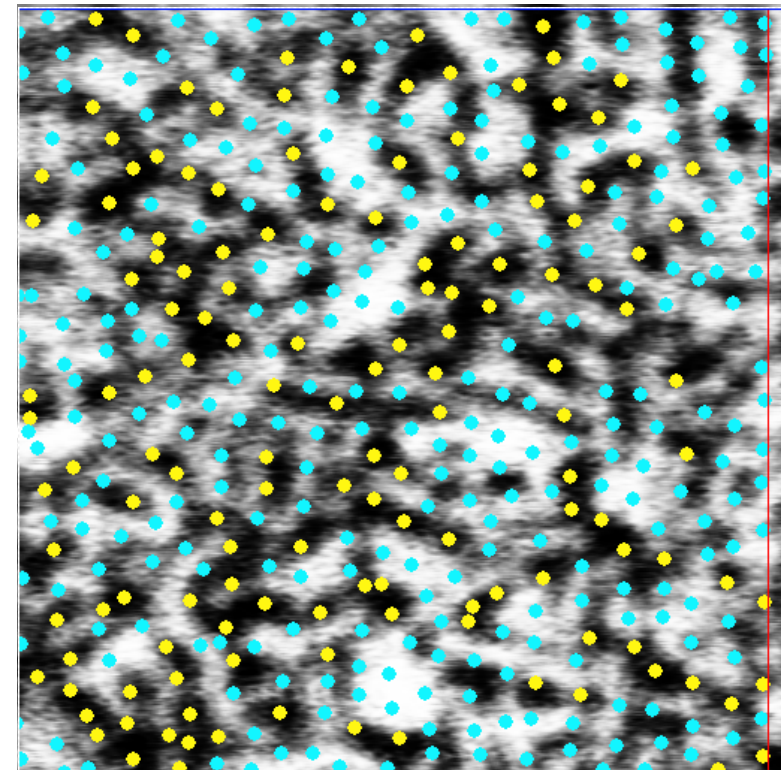
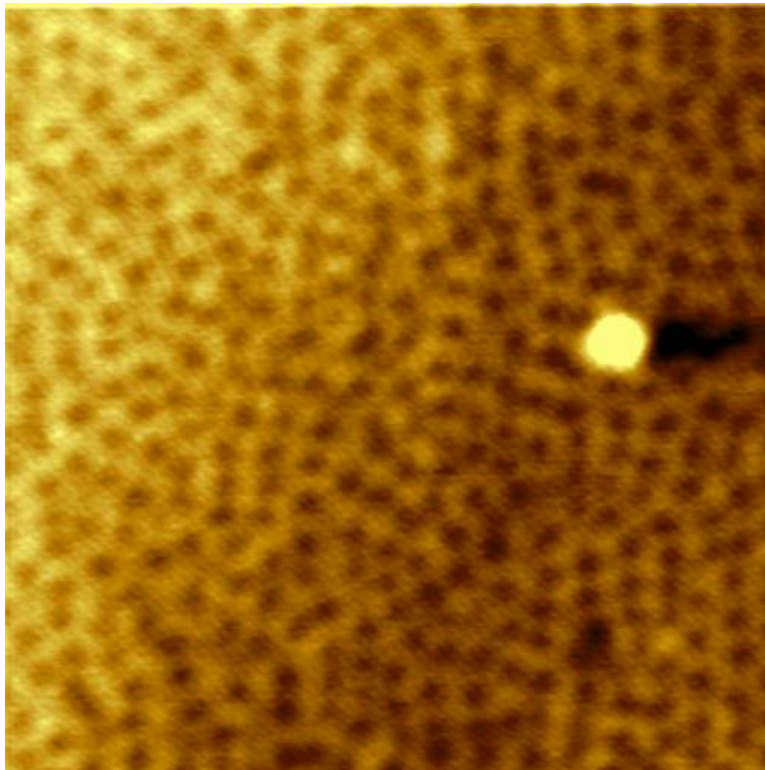
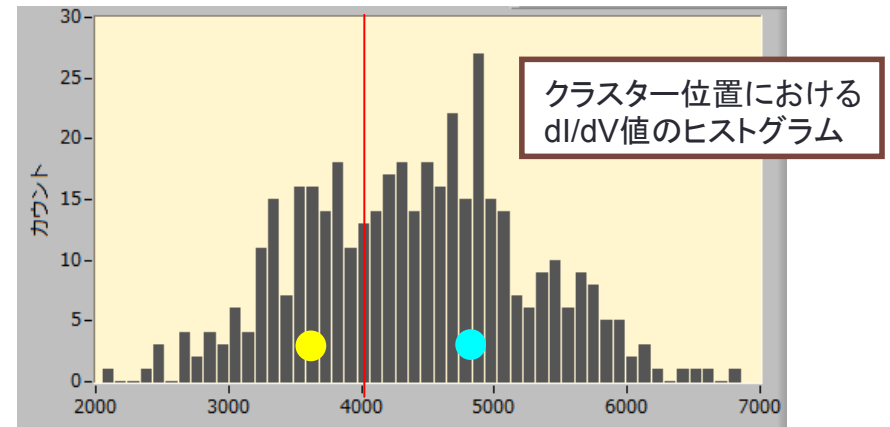
走査プローブによる材料・構造評価

このサイクルを早く回すことが不可欠



STS(局所状態密度測定)の結果

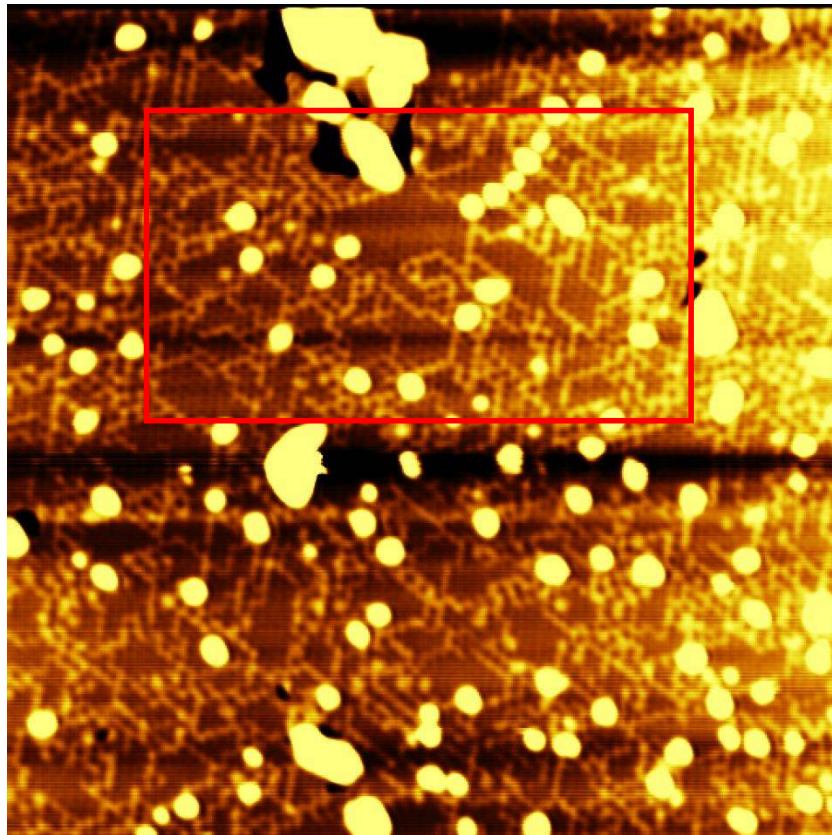
$V_s = 1.6 \text{ V}$, $I_t = 0.2 \text{ nA}$
Scan $30\text{nm} \times 30\text{nm}$
6-9 500°C 保持材



STM像

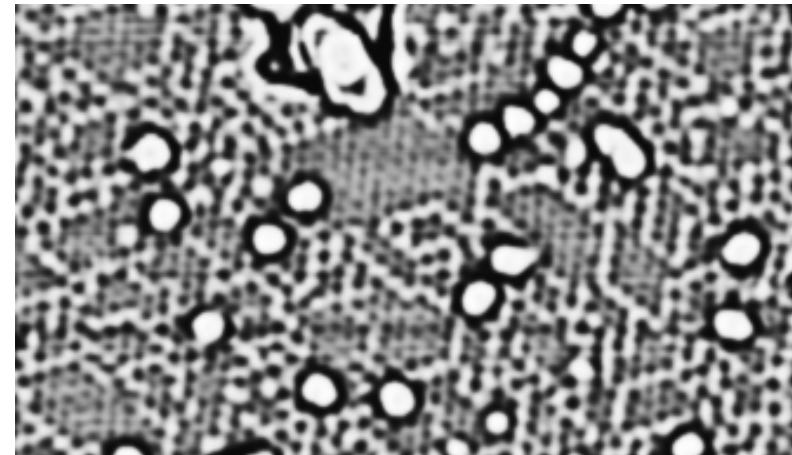
dI/dV map @+1.6V

クラスター配列のドメイン構造

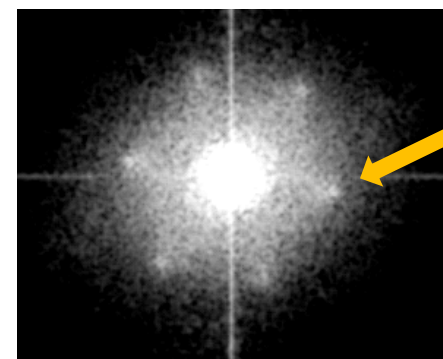


$V_s = +0.6V$, $I_t = 4nA$

ドメインのサイズ = 数nm ~ 10nm




赤枠内の微分表示



クラスター配列から
来る輝点

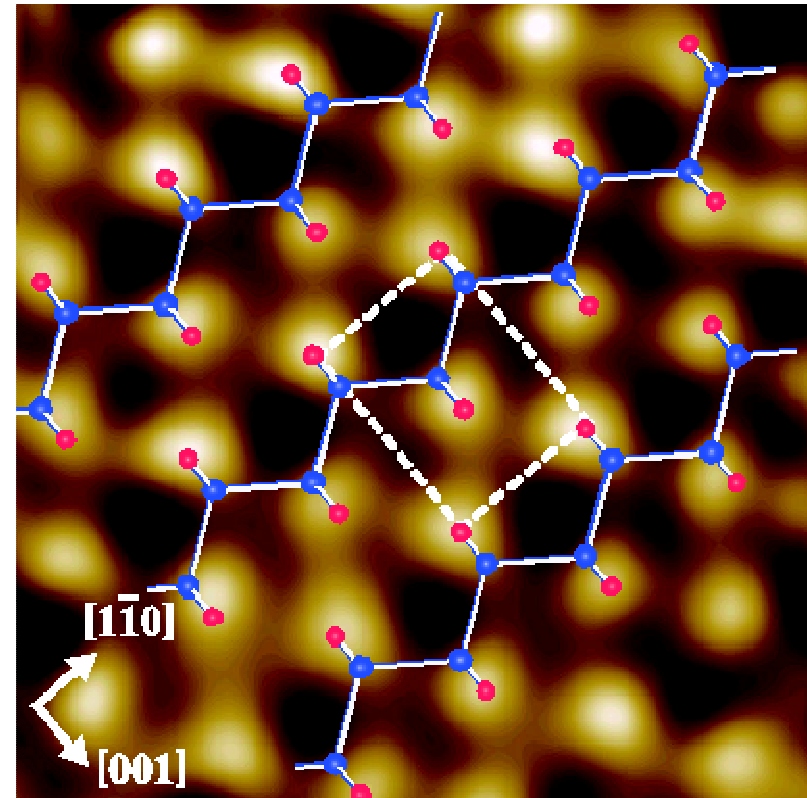
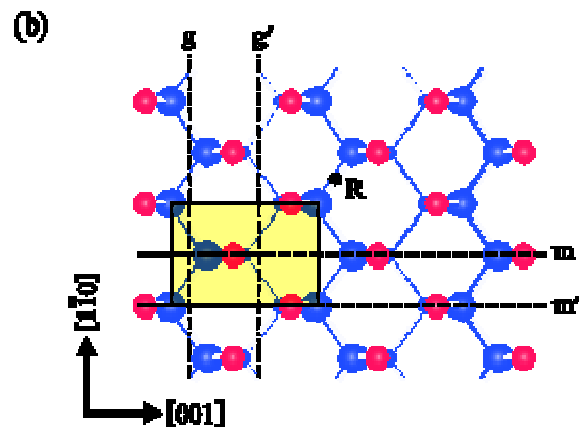
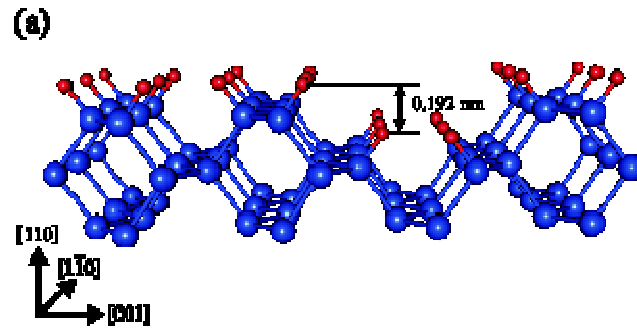
像全体のFFT



STM images
H:Si(110)-(1 × 1)
Pt/Si(111)-(7 × 7)

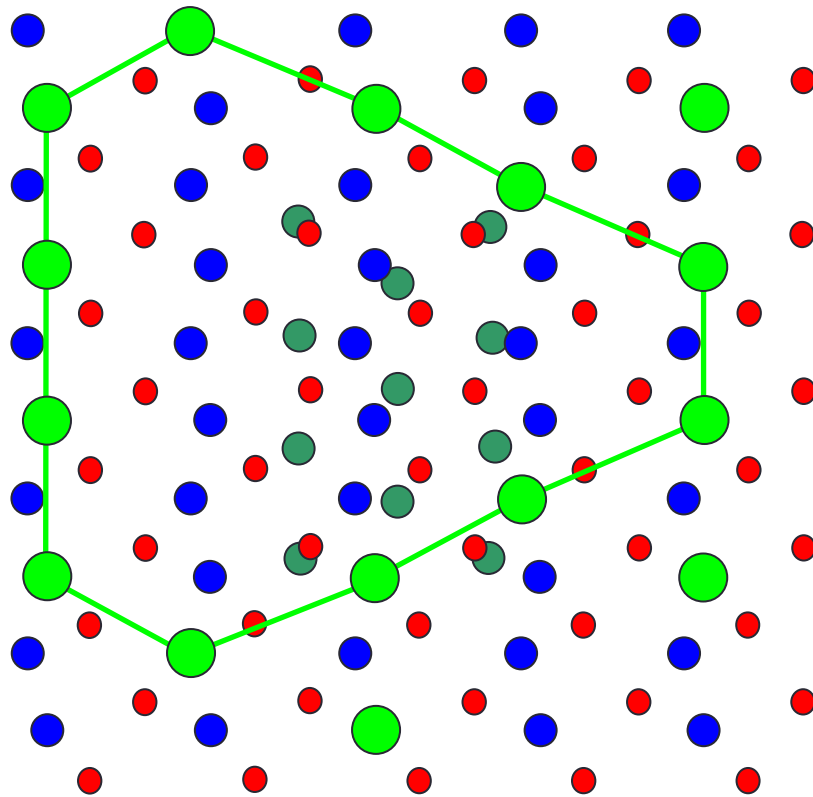
東北大学 大学院理学研究科
須藤彰三

H:Si(110)-(1 × 1)



赤丸: H原子
青丸: Si原子

Pt/Si(111)-(7 × 7)



● Si (substrate)

● Pt (PtSi)

● Si (PtSi)

● atom of reconstruction

