

量子論的SPM像シミュレータの使い方 本日の目次

1. STM像の高速計算シミュレーションの実演

シミュレータに同梱されているチュートリアル95～98ページの計算事例(サンプルプロジェクトのDFTB¥stm_hsi)を実演用に手直した後、実際に計算を行います。

今回手直しするパラメータ

- 走査範囲の広さ： $15 \text{ \AA} \times 15 \text{ \AA} \rightarrow 10 \text{ \AA} \times 10 \text{ \AA}$ (Setupタブ、ScanAreaタグのwとd)
- ピクセル数： $60 \times 60 \rightarrow 20 \times 20$ (DFTBタブ、NdivタグのXとY)
- 電位： $-1.0 \text{ V} \rightarrow -0.5 \text{ V}$ (DFTBタブ、tip_bias_voltageタグのminimumとmaximum)

結果の像はResult Viewのリストからcurrent.csvを選択することでご覧になれます。
弊社デモ用ノートPC(Intel Core i7 1.20 GHz)の場合、約50秒で計算が完了いたします。

2. (時間があれば)KPFM像シミュレーションの紹介

不純物(窒素原子)を含むシリコン薄膜の接触電位差像シミュレーションの結果をご紹介します。
(シミュレータに同梱されているサンプルプロジェクトのDFTB¥kpfm_n4のご紹介となります。)

本シミュレータをご利用するにあたって、特にご注意いただきたい点

試料表面を新たに設置した際には、系の周期性を指定する並進ベクトルのパラメータ(DFTBタブ、translational_vectorタグ内の9つ)を適切な値に変更してください。試料表面の原子配置データを弊社の「試料モデリングツール」を利用して作成される場合には、GUIのテキスト出力部にその値が出力されます。

その他のパラメータにつきましても、リファレンスマニュアルを参考に、適切な値を入力するようにお願いします。

お詫び

STS計算につきましては、皆様からのお問い合わせに基づいて調査しました結果、計算方法の再検討を行う必要があることが分かりました。チュートリアルに書かれた計算手順にてSTSの計算を行うことは可能ですが、計算結果の妥当性につきましてはご注意ください。