



分類 ナノシミュレーション

キーワード 第一原理計算、STM

開発者 山崎隆浩、加藤弘一、宇田 毅、大野隆央

作成年月 2004年3月

コード名 PHASE

使用言語 Fortran90

#### ◇第一原理擬ポテンシャルバンド計算プログラム (PHASE) の機能拡大 I : STM への応用

プログラムソース、使用説明書、および基本的な計算結果などの資料とともに、「フリーソフトウェア」として昨年度公開したプログラム (PHASE) は、擬ポテンシャルと平面波展開による標準的第一原理バンド計算プログラムである。PHASE は原子の座標と原子種を入力として、全エネルギー、原子に働く力、また、各エネルギー準位についての波動関数を出力する。

STM ではチップ先端と表面の間を流れるトンネル電流の解析により、表面構造に関する情報を得ている。したがって、チップ-試料間に印加されたバイアス電圧に対応するエネルギー幅の中に存在する準位の波動関数があれば STM 像を作成することができる。原理的には従来の PHASE の出力だけで STM の解析は可能であるが、通常の測定条件下での STM チップは表面より $\sim 0.5\text{nm}$ 以上離れているため、鮮明な STM 像が得られないという欠点があった。そこで、表面から $\sim 0.1\text{nm}$ 以下の距離での波動関数を初期値とし、表面に平行な面では平面波による展開、表面に垂直な方向では実空間メッシュ上での直接差分法を採用し、各準位の波動関数を解きなおすことにより、表面より $\sim 0.5\text{nm}$ 以上離れた地点まで鮮明な STM 像を得ることができる。

#### ◇プログラムの特徴

PHASE は Fortran90 を使ってモジュール化され、mpi により並列化されており、次のような特徴を持つ。とくに、項番(4)、(5)は機能拡張した STM 解析部分の特徴である。

- (1) 計算対象となる物理系の構造と計算順序に対応した、演算やデータ構造 (モジュール構造) の階層化。これにより機能の追加などの作業を分担して行うことがより容易になる。
- (2) 入力データ、計算内容に応じた配列の動的な確保。ひとつの実行ファイルであらゆる計算対象に対応することができる (つまり計算対象毎にコンパイルする必要がない)。

- (3) 波動関数に関する並列化軸をk点とバンド（エネルギー固有値）と二重に持っており、使用できる計算機の数と適合するように、k点とバンドの分割を計算の実行時に割り振ることができる。
- (4) 表面に平行な平面では平面波展開を、表面に垂直な方向では実空間メッシュ上での差分法を採用することにより、波動関数の精度向上を実現した。
- (5) チップが表面より~0.5nm程度離れていても滑らかなSTMが得られる。

本ソフトウェアは文部科学省ITプログラム「戦略的ソフトウェアの開発」プロジェクトのもとで開発された。本プロジェクトのWEBページ (<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>) より2004年6月に公開を予定している。

◇計算例

試料に-1Vのバイアス電圧が印加された場合における酸化されたSi(001)表面のSTM像。上段：原子構造と等電子密度面。灰白色の球はSi原子、灰色球はO原子。下段：STM像。高い方のダイマー原子は明るく見えるが、酸素原子は最も突出している原子でも明るく見えない。

