

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем
Кафедра комп'ютерної інженерії

СТВОРЕННЯ ОНЛАЙН СИСТЕМИ ВИВЕДЕННЯ ДАНИХ
СКАНУВАЛЬНОГО ТУНЕЛЬНОГО МІКРОСКОПУ

Кваліфікаційна робота бакалавра
студента напряму підготовки

123 «Комп'ютерна інженерія»

ВЕЛИКИХ ОЛЕКСІЯ

_____ (підпис)

Науковий керівник,

Доктор фізико-математичних наук,

АНДРІЙ ГОРЯЧКО

_____ (підпис)

Рецензент

_____ (підпис)

До захисту допускаю

Завідувач кафедри

Протокол засідання кафедри від

к.ф.-м.н., доцент

“ ___ ” _____ 2022р. № _____

ЮРІЙ БОЙКО

КИЇВ 2022

РЕФЕРАТ

Кваліфікаційна робота містить 29с., 20 рис., 15 джерел.

Ключові слова: сканувальний тунельний мікроскоп, СТМ, тунелювання, топографія матеріалу.

Мета роботи:

1. Розглянути дані з відкритих джерел щодо досліджень СТМ.
2. Зібрати відповідний набір даних для програми, яка буде виводити ці дані у відповідному масштабі.
3. Розробити код, який буде виводити ці дані за відповідними налаштуваннями, які можна буде використовувати для подальшого аналізу

Інструменти розроблення: мова програмування Python, зокрема інструменти Jarvis-Tools та його бібліотеки, інтерактивне середовище розробки Google Colab, бібліотеки nglview та ase.

Результати роботи: Виведено дані, які використовувалися для роботи з СТМ у форматі 2D моделей та 3D модель атомної структури матеріалу.

Зміст

Вступ	4
Розділ 1. Сканувальна тунельна мікроскопія. Принципи роботи. Типи вимірювань.....	5
1.1 Що таке сканувальна тунельна мікроскопія?	5
1.2 Як працює СТМ?	6
1.3 Яке використання СТМ у дослідженнях	8
1.4 Принципи сканувальної тунельної мікроскопії	9
1.5 Налаштування пристрою та підготовка зразків.....	11
1.6 Типи вимірювань за допомогою СТМ.....	13
Розділ 2. Розробка коду, для використання даних, зібраних СТМ.....	15
2.1 Види топографій матеріалів, зібраних СТМ	16
2.2 Розробка програми для більш детального розгляду матеріалу	21
Висновки	23
Перелік посилань	24

Вступ

В наш час сканувальна тунельна мікроскопія досить часто використовується у різних дослідженнях структури електропровідної поверхні в атомному масштабі. Сканувальна тунельна мікроскопія здійснила революцію у нанотехнологіях та продовжує відігравати важливу роль у різних дисциплінах

Сканувальна тунельна мікроскопія використовує тунельний ефект для своєї роботи. У типовому процесі роботи СТМ вістря сканує поверхню зразка у вигляді x-y, прилад записує положення вістря x-y, вимірює тунельний струм і контролює висоту вістря за допомогою схеми зворотного зв'язку.

Є два режими роботи СТМ:

- Режим постійної висоти
- Режим постійного струму

Вимірюючи зміни інтенсивності тунельного струму як функції положення і напруги зміщення, дослідники можуть побудувати зображення електронної щільності станів поверхні зразка, дефектів, прикордонних молекулярних орбіталей.

Розділ 1. Сканувальна тунельна мікроскопія. Принципи роботи. Типи вимірювань.

1.1. Що таке сканувальна тунельна мікроскопія

Сканувальна тунельна мікроскопія, або СТМ, — це техніка отримання зображень, яка використовується для отримання зображень надвисокої роздільної здатності в атомному масштабі без використання світлових або електронних променів. СТМ був винайдений у 1981 році двома вченими ІВМ, а саме Гердом Біннігом і Генріхом Рорером. Через п'ять років винахід приніс їм Нобелівську премію з фізики.

СТМ була першою технікою, розробленою в ширшому класі сканувальної зондової мікроскопії (СЗМ). У той час це дозволило дослідникам охопити значно більше деталей, ніж будь-яка попередня мікроскопія, аж до атомів і міжатомних відстаней. Ця надвисока роздільна здатність дозволила дослідникам точно відображати тривимірну топографію та електронну щільність станів провідних матеріалів і навіть маніпулювати окремими атомами на поверхні цих матеріалів. Впродовж наступних десятиліть СТМ здійснила революцію в області нанотехнологій і продовжує відігравати важливу роль у фундаментальних та промислових дослідженнях різних дисциплін.

Наприклад, сканувальний тунельний мікроскоп зображує високоорієнтований піролітичний графіт до структури атомної решітки.

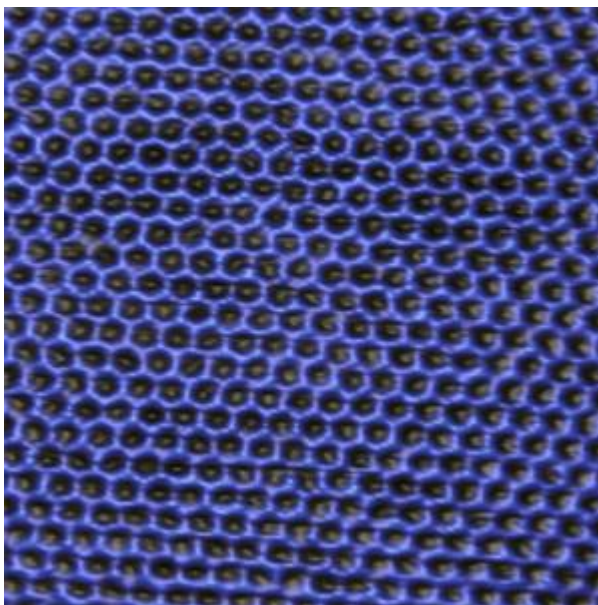


Рисунок 1.1. Зображення високоорієнтованого піролітичного графіту, отримане за допомогою СТМ.

Зроблено на повітрі за допомогою сканувального зондового мікроскопа Asylum Research Cypher S, що демонструє здатність розрізняти структуру атомної ґратки. (точність сканування 5 нм)

1.2. Як працює СТМ

СТМ є рідкісним прикладом використання квантомеханічного процесу (тунелювання електронів) у практичному застосуванні. Термін «тунелювання» відноситься до ситуації, коли електрони долають бар'єр, який спочатку здається непроникним — як кидання м'яча об стіну. Фізика, яка описує цю взаємодію між м'ячем і стіною, називається «класичною парадигмою», і м'яч ніколи не пройде тунель крізь стіну. Навпаки, електрони мають хвилеподібний характер, який робить їх «нечіткою» хмарою, тому вони можуть фактично існувати по обидві сторони бар'єру одночасно і, отже, мати ненульову ймовірність переміщення через бар'єр, навіть якщо енергія бар'єру вища за повну енергію електрона.

СТМ працює, скануючи гострий провідний зонд дуже близько до поверхні провідного зразка, змушуючи електрони долати проміжок між ними. Коли вістря знаходиться досить близько від поверхні (зазвичай на відстані <1 нм),

нечітка електронна хмара першого атома наконечника і поверхні починає перекриватися. Застосування напруги зміщення між вістря і поверхнею в цій конфігурації створює струм, оскільки електрони рухаються в тунель через потенціальний бар'єр від наконечника до поверхні через перекриваючу електронну хмару. Цей тунельний струм дуже чутливий до зазору між кінчиком зонда і поверхнею і змінюється експоненціально залежно від відстані вістря-зразок. Коли вістря сканує рядок за рядком поверхню зразка, інтенсивність тунельного струму відображає електронну щільність станів зразка.

СТМ працює у двох різних режимах: режим постійної висоти та режим постійного струму. Режим постійної висоти зазвичай використовується, коли поверхня зразка дуже гладка. У цьому режимі вістря зонда залишається на заданій висоті, поки він швидко сканує зразок. Вимірюючи зміни інтенсивності тунельного струму як функції положення і напруги зміщення, дослідники можуть побудувати зображення електронної щільності станів поверхні зразка, дефектів, прикордонних молекулярних орбіталей тощо.

Більш вживаний режим відомий як режим постійного струму. У цьому режимі тунельний струм підтримується постійним за допомогою системи зворотного зв'язку, яка регулює відстань між вістря і поверхнею. Тобто, якщо тунельний струм перевищує цільове значення, система управління зворотним зв'язком збільшить відстань між наконечником і зразком; якщо тунельний струм менший за цільове значення струму, система управління зворотнім зв'язком наблизить вістря до поверхні зразка. Отриманий тривимірний профіль відстані як функція положення може допомогти дослідникам виміряти широкий спектр характеристик, включаючи шорсткість поверхні, дефекти, а також розмір і конформацію молекул на поверхні.

СТМ може працювати в широкому діапазоні умов навколишнього середовища. Часто СТМ класифікуються як СТМ навколишнього середовища

та СТМ з надвисоким вакуумом. Навколишні СТМ зазвичай працюють у повітрі або інших газах при температурі, близькій до кімнатної. Завдяки спеціалізованим ізолюваним вістря, СТМ можна також експлуатувати в рідинах.

СТМ за надвисоким вакуумом відрізняються, тим, що вони працюють у дуже високому вакуумі. Це часто робиться у вузькоспеціалізованих системах, де зразок вирощується або витравлюється, а потім зображується на місці. Це дозволяє їм працювати в дуже широкому діапазоні температур, від майже нуля Кельвіна до понад 1000°C.

1.3. Яке використання СТМ в дослідженнях

З моменту свого відкриття СТМ був відповідальним за великі прориви в нанотехнологіях і дозволив проводити нові дослідження в різних дисциплінах, включаючи науку про напівпровідники, електрохімію, хімію поверхней тощо.

Спочатку СТМ використовувався для характеристики топології різних металів і окреслення атомної структури їх поверхонь. Вперше дослідники змогли розпізнати властивості матеріалів в атомному масштабі, включаючи шорсткість поверхні, дефекти та механізми реакції поверхні. Досліджуючи атомні решітки матеріалів, дослідники могли б почати розуміти властивості, що мають відношення до виготовлення електронних компонентів, включаючи провідність, розподіл прикордонних молекулярних орбіталей та їх енергії, а також залежності реакції від орієнтації кристалічних граней, і це лише деякі з них.

Протягом багатьох років СТМ почали використовувати для різноманітних застосувань за межами атомного зображення. Його використовували для збирання та керування окремими атомами на поверхні. Це відкрило нові перспективи для нанотехнологій, включаючи створення наноструктур, таких як квантові загони та молекулярні перемикачі. Контакти

на нанопристроях також можна сконструювати за допомогою СТМ шляхом нанесення металів (наприклад, золота, срібла або вольфраму) за певним шаблоном. Дослідники також використовували СТМ для індукування хімічних реакцій і вивчення подальших механізмів реакцій на молекулярному рівні.

Навколишні СТМ зазвичай використовуються для дослідження структури самозібраних молекул на поверхнях, оскільки вони часто можуть розділяти окремі молекули і навіть субмолекулярну структуру.

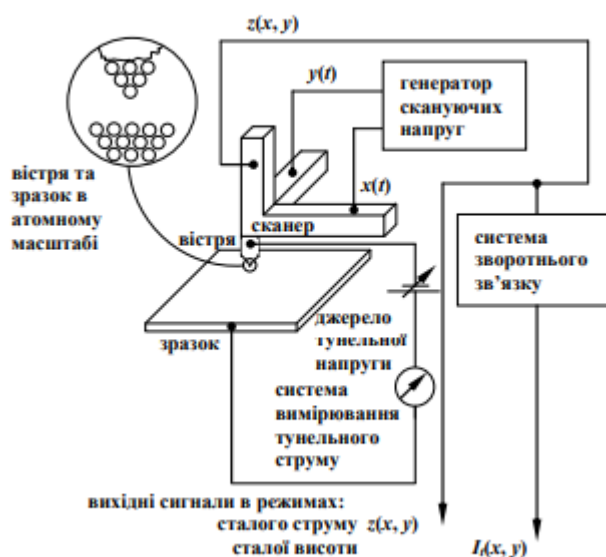


Рисунок 1.3. Схематичне зображення експерименту з використанням СТМ

1.4. Принципи сканувальної тунельної мікроскопії

Ключовим фізичним принципом СТМ є тунельний ефект. З точки зору їх хвильової природи, електрони в поверхневих атомах насправді не так міцно зв'язані з нуклонами, як електрони в атомах маси. Точніше, електронна густина не дорівнює нулю в просторі поза поверхнею, хоча вона буде зменшуватися експоненціально зі збільшенням відстані між електроном і поверхнею. Отже, коли металеве вістря наближається до провідної поверхні на дуже невеликій відстані, зазвичай всього на кілька Å , їх перспективні

електронні хмари почнуть перекриватися і генерувати тунельний струм, якщо між ними подати невелику напругу

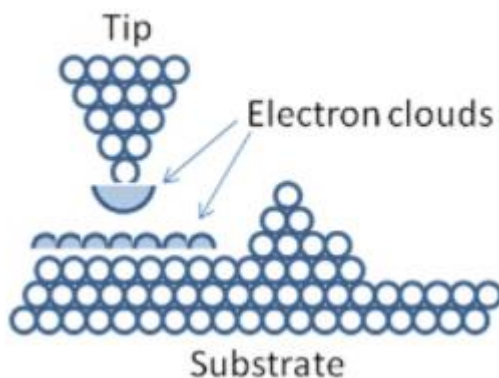


Рисунок 1.4.1 Принципова діаграма принципів СТМ, що показує взаємодію між наконечником і поверхнею

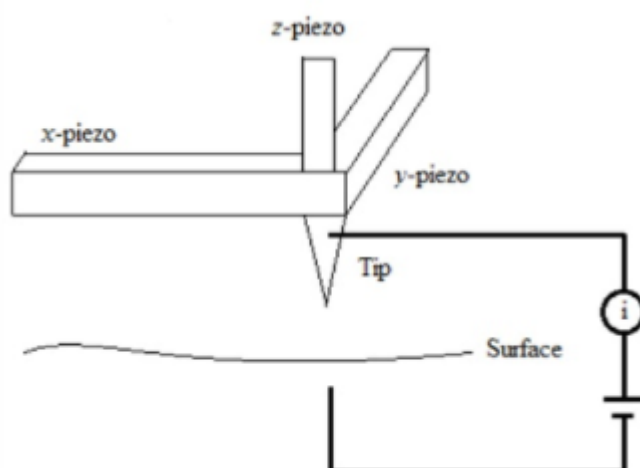


Рисунок 1.4.2.Схематичне зображення тунельного струму, що генерується наконечником і поверхнею, вимірюється та використовується як зворотний зв'язок для керування рухом вістря.

Коли ми розглядаємо поділ між вістрям і поверхнею як ідеальний одновимірний тунельний бар'єр, ймовірність тунелювання або тунельний струм I значною мірою залежатиме від s , відстані між наконечником і поверхнею, де m – маса електрона, e – заряд електрона, h – постійна Планка, ϕ – усереднена робота виходу наконечника та зразка, V – напруга зміщення.

$$I \propto e^{-2s \left[\frac{2m}{\hbar^2 \left(\langle \phi \rangle - \frac{e|V|}{2} \right)} \right]^{1/2}} \quad (1)$$

У типовому процесі роботи СТМ вістря сканує поверхню зразка у вигляді х-у, прилад записує положення вістря х-у, вимірює тунельний струм і контролює висоту вістря за допомогою схеми зворотного зв'язку. Рухи вістря в напрямках х, у і z контролюються п'єзокерамікою, яка може бути подовжена або вкорочена відповідно до напруги, що прикладається до неї.

1.5. Налаштування пристрою та підготовка зразків

У СТМ вістря покрите тонким шаром магнітного матеріалу. Атоми з частковими магнітними моментами, які вирівняні в тому ж напрямку, що й парціальний магнітний момент атома на самій вершині вістря СТМ, демонструють більшу величину тунельного струму через взаємодії між магнітними моментами. Аналогічно, атоми з частковими магнітними моментами, протилежними магнітному моменту атома на вершині вістря СТМ, демонструють зменшений тунельний струм. Комп'ютерна програма може потім перевести зміну тунельного струму на топографічну карту, показуючи щільність спіну на поверхні зразка.

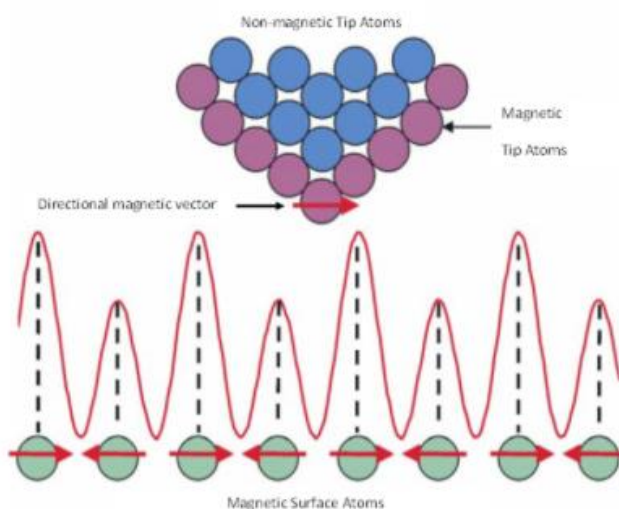


Рисунок 1.5.1 Схематична ілюстрація намагніченого наконечника СТМ

Чутливість до магнітних моментів значною мірою залежить від напрямку магнітного моменту вістря, яким можна керувати магнітними

властивостями матеріалу, який використовується у покритті зовнішнього шару вольфрамового СТМ зонда. Досліджено широкий спектр магнітних матеріалів як можливих покриттів, включаючи як ферромагнітні матеріали, такі як тонкий шар заліза або гадолінію, так і антиферромагнітні матеріали, такі як хром. Іншим методом, який використовувався для виготовлення магніточутливого вістря зонда, є опромінення напівпровідникового вістря високою енергією циркулярно поляризованого світла. Це опромінення викликає розщеплення електронів у валентній зоні і заселення зони провідності спін-поляризованими електронами. Ці спін-поляризовані електрони потім створюють часткові магнітні моменти, які, у свою чергу, впливають на тунельний струм, що створюється поверхнею зразка.

СТМ використовувався для зображення зразків, таких як тонкі плівки та конструкції з наночастинок, а також для визначення магнітної топографії тонких металевих листів. Рисунок 1.5.2. являє собою традиційне зображення СТМ тонкого шару кобальту, яке показує топографію зразка. Рисунок 1.5.3. являє собою СТМ зображення того ж шару кобальту, яке показує магнітний домен зразка. Ці два рисунки надають корисну інформацію про точне розташування часткових магнітних моментів у зразку.

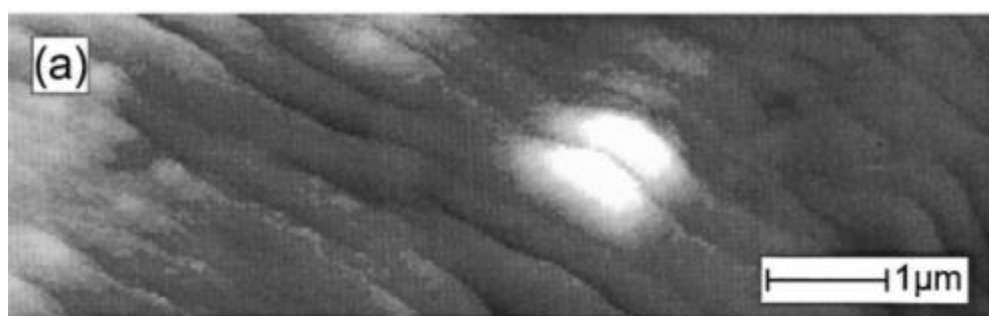


Рисунок 1.5.2. Тонкий шар $\text{Co}(0001)$ на зображенні СТМ, що показує топографію

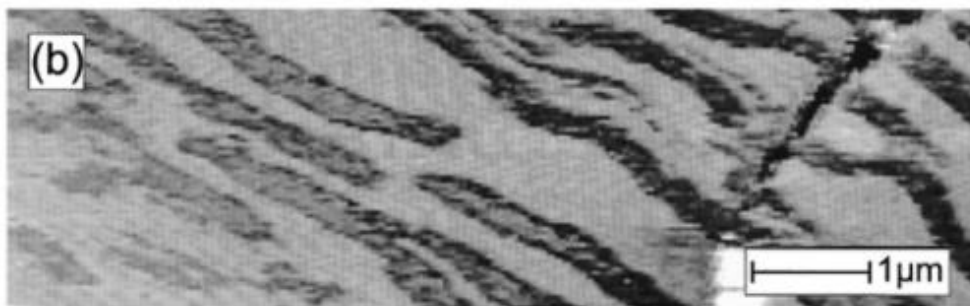


Рисунок 1.5.3. Зображення СТМ, що показує структуру магнітного домену.

1.6. Типи вимірювань за допомогою СТМ

1. Топограф

СТМ найчастіше використовується в топографічному режимі постійного струму. Оскільки наконечник розташовується по поверхні в площині xy при фіксованій напрузі зміщення V , петля зворотного зв'язку регулює положення вістря в напрямку z , щоб підтримувати вимірюваний струм на фіксованому заданому значенні. Траєкторія z вершини ефективно відображає контур поверхні, таким чином створюється топограф СТМ (Рисунок 1.6.1).

Однак, тунельний струм залежить від поділу зразка вістря, а також інтеграла густини станів від рівня Фермі до eV . Тому для зразка з однорідною DOS цей контур суто відповідає геометричним гофруванням поверхні. Однак більшість матеріалів демонструють просторово неоднорідну DOS, що означає, що топографи СТМ цих сполук представляють комбінацію ефектів, обумовлених геометричними гофрами та електронною щільністю станів

2. Спектр dI/dV

На додаток до отримання інформації про геометрію поверхні, СТМ може отримати електронну DOS з енергією до кількох електрон-вольт, як у зайнятому, так і в незайнятому стані зразка. Вимірювання здійснюється шляхом вимкнення петлі зворотного зв'язку (який фіксує відстань від вістря до зразка), зміни напруги зміщення V та вимірювання поточної реакції $I(V)$. Оскільки тунельний струм I пропорційний інтегралу щільності станів від

рівня Фермі до eV , використання чисельної похідної дає DOS зразка s при даній енергії eV :

$$\frac{dI}{dV} \propto \rho_s(eV) \quad (2)$$

З практичної точки зору використання чисельної похідної кривої I від V для отримання провідності dI/dV дає надзвичайно багато шумів. Щоб обійти цю проблему, dI/dV зазвичай вимірюють за допомогою техніки блокування підсилювача, де до V додається невелика модуляція напруги зміщення dV (зазвичай кілька мілівольт), а зміна тунельного струму dI вимірюється для отримання dI/dV .

3. 3D-карта «DOS» і карта dI/dV

Спектри dI/dV можна отримати на щільно розташованій піксельній сітці, що призводить до 3-вимірного набору даних, який часто називають «картою DOS» (Рисунок 1.6.1.). Вилучення одного «зрізу» (dI/dV map) при будь-якій бажаній енергії приблизно показує просторовий розподіл щільності станів. Приклад карти dI/dV можна побачити на рисунку 8 і показує магнітні вихори в легованому високотемпературному надпровіднику $BaFe_2As_2$ на основі Fe .

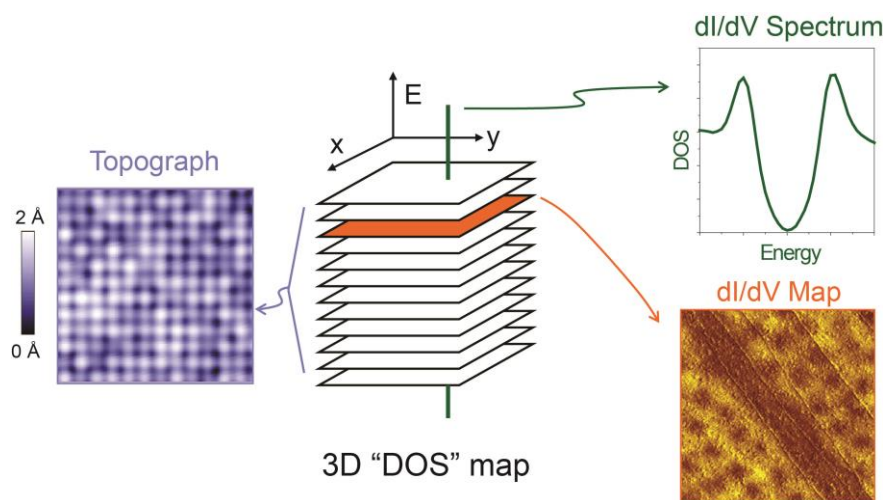


Рисунок 1.6.1. Схема тривимірних наборів даних, отриманих на піксельній сітці (3D карти «DOS») та основні типи вимірювань СТМ.

Розділ 2. Розробка коду, для використання даних, зібраних СТМ

Заплановано зробити код, який би зміг виводити дані, які вже були зібрані під час досліджень, які проводилися з СТМ.

Для цього було використано базу даних зображень, взятих з вільного доступу та інструмент Jarvis-Tools, як готову базу для використання функцій.

2.1. Вивід топографій матеріалів, зібраних СТМ

В першу чергу спробуємо подивитися на матеріал, з кодовою назвою JVASP-667, більш детальну інформацію якого представлено на рисунку 2.1.1.

Для перевірки результатів я користуюся вже готовим рішенням, зробленим за допомогою модуля JarvisSTM.

ID: JVASP-667	Functional: OptB88vdW	Primitive cell	Primitive cell	Conventional cell	Conventional cell
Chemical formula: C	Formation energy/atom (eV): 0.07035	a 2.46 Å	α : 90.0 °	a 2.46 Å	α : 90.0 °
Space-group:P6/mmm (191)	Relaxed energy/atom (eV):-7.95793	b 2.46 Å	β : 90.0 °	b 2.46 Å	β : 90.0 °
Crystal system:hexagonal	Point group:P6/mmm	c 30.8 Å	γ : 120.0 °	c 30.8 Å	γ : 120.0 °
Data source:JARVIS-DFT-VASP	Material type:SingleLayer	Density (gcm ⁻³):0.246	Volume (Å ³):161.985	nAtoms_prim:2	nAtoms_conv:2
SCF direct bandgap (eV):0.0	SCF indirect bandgap (eV):0.0	Magnetic moment (μ_B):0.0	Exfoliation energy (meV/atom):	Packing fraction:0.018	Number of species:1
Band direct gap (eV):0.0	Band indirect gap (eV):0.0	TBmBJ direct gap (eV):	TBmBJ indirect gap (eV):	HSE06 direct gap (eV):0.63	HSE06 indirect gap (eV):0.63
Voigt bulk mod. (GPa):	Voigt shear mod. (GPa):	Poisson ratio:	Anisotropy ratio:	Solar SLME (%):	Solar SQ (%):
Max. IR mode (cm ⁻¹):	Max. Raman mode (cm ⁻¹):	Min. IR mode (cm ⁻¹):	Min. FD phonon (cm ⁻¹):	Cut-off (eV):950	K-point length (Å):65

Рисунок 2.1.1. Детальна інформація матеріалу JVASP-667.

Програма, як і очікувалося знайшла та вивела нам структуру матеріалу у правильному масштабі з бази даних.

```
Obtaining raw io files 145k...
Reference: https://www.nature.com/articles/s41524-020-00440-1
Loading the zipfile...
Loading completed.
(-0.5, 1439.5, 959.5, -0.5)
```



Рисунок 2.1.2. Вивід програми для матеріалу JVASP-667.

Нижче представлено зображення, яке очікувалося:



Material: Bias type: Stm type: Min size: Zcut:

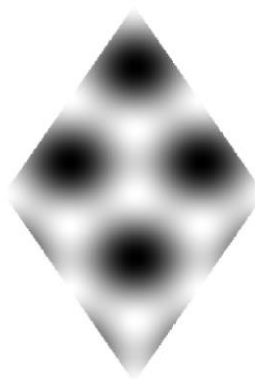


Рисунок 2.1.3. Очікуваний вивід JVASP-667.

Як бачимо, програма змогла коректно вивести зображення.

Далі було обрано матеріал під кодовою назвою JVASP-689. Детальна інформація нижче.

ID: JVASP-689	Functional: OptB88vdW	Primitive cell	Primitive cell	Conventional cell	Conventional cell
Chemical formula: ZrS2	Formation energy/atom (eV): -1.59705	a 3.68 Å	α : 90.0 °	a 3.68 Å	α : 90.0 °
Space-group: P-3m1 (164)	Relaxed energy/atom (eV): -5.17937	b 3.68 Å	β : 90.0 °	b 3.68 Å	β : 90.0 °
Crystal system: trigonal	Point group: -3m	c 30.61 Å	γ : 120.0 °	c 30.61 Å	γ : 120.0 °
Data source: JARVIS-DFT-VASP	Material type: SingleLayer	Density (gcm⁻³): 0.718	Volume (Å³): 359.405	nAtoms_prim: 3	nAtoms_conv: 3
SCF direct bandgap (eV): 1.684	SCF indirect bandgap (eV): 1.242	Magnetic moment (μ_B): 0.0	Exfoliation energy (meV/atom):	Packing fraction: 0.067	Number of species: 2
Band direct gap (eV): 1.43	Band indirect gap (eV): 1.15	TBmBJ direct gap (eV):	TBmBJ indirect gap (eV):	HSE06 direct gap (eV): 2.47	HSE06 indirect gap (eV): 1.96
Voigt bulk mod. (GPa):	Voigt shear mod. (GPa):	Poisson ratio:	Anisotropy ratio:	Solar SLME (%):	Solar SQ (%):
Max. IR mode (cm⁻¹):	Max. Raman mode (cm⁻¹):	Min. IR mode (cm⁻¹):	Min. FD phonon (cm⁻¹):	Cut-off (eV): 600	K-point length (Å): 30

Рисунок 2.1.4. Детальна інформація для матеріалу JVASP-689.

Для наочності було змінено масштаб.

Obtaining raw io files 145k...
Reference: <https://www.nature.com/articles/s41524-020-00440-1>
Loading the zipfile...
Loading completed.
(-0.5, 1439.5, 959.5, -0.5)

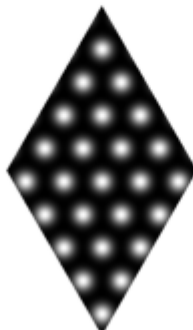



Рисунок 2.1.5. Вивід програми для матеріалу JVASP-689.

JARVIS  **STM**

Material: Bias type: Stm type: Min size: Zcut:
 Ext:

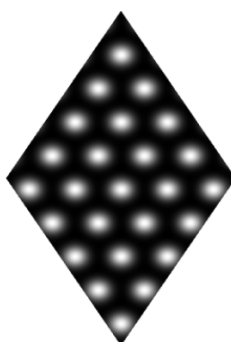


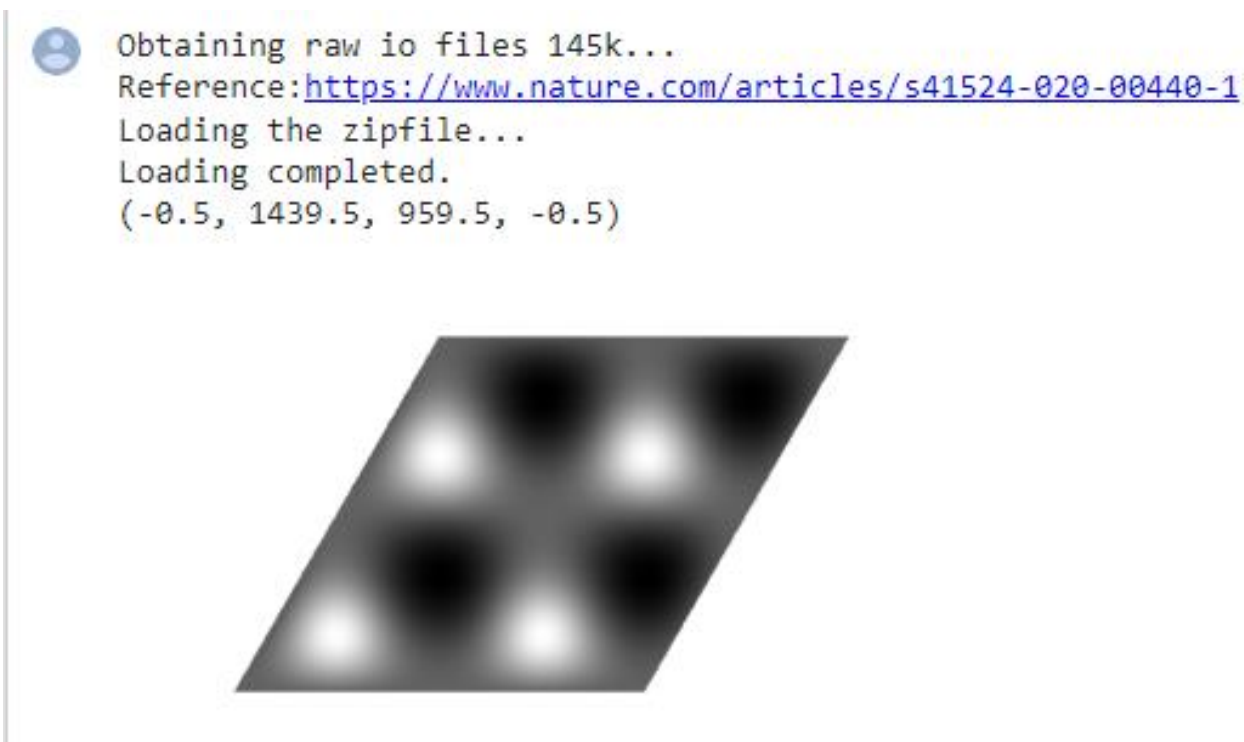
Рисунок 2.1.6. Очікуєий вивід програми для матеріалу JVASP-689.

В якості ще одного прикладу було обрано матеріал JVASP-13560. Нижче представлена летальна інформація щодо цього матеріалу.

ID: JVASP-13560	Functional: OptB88vdW	Primitive cell	Primitive cell	Conventional cell	Conventional cell
Chemical formula: ZrN	Formation energy/atom (eV): -0.62925	a 3.5 Å	α : 90.0 °	a 3.5 Å	α : 90.0 °
Space-group: P3m1 (156)	Relaxed energy/atom (eV): -6.93053	b 3.5 Å	β : 90.0 °	b 3.5 Å	β : 90.0 °
Crystal system: trigonal	Point group: 3m	c 25.58 Å	γ : 120.0 °	c 25.58 Å	γ : 120.0 °
Data source: JARVIS-DFT-VASP	Material type: SingleLayer	Density (gcm⁻³): 0.643	Volume (Å³): 271.598	nAtoms_prim: 2	nAtoms_conv: 2
SCF direct bandgap (eV): 0.0	SCF indirect bandgap (eV): 0	Magnetic moment (μ_B): 0.0	Exfoliation energy (meV/atom):	Packing fraction: 0.062	Number of species: 2
Band direct gap (eV): 0.0	Band indirect gap (eV): -1.4	TBmBJ direct gap (eV):	TBmBJ indirect gap (eV):	HSE06 direct gap (eV):	HSE06 indirect gap (eV):
Voigt bulk mod. (GPa):	Voigt shear mod. (GPa):	Poisson ratio:	Anisotropy ratio:	Solar SLME (%):	Solar SQ (%):
Max. IR mode (cm⁻¹):	Max. Raman mode (cm⁻¹):	Min. IR mode (cm⁻¹):	Min. FD phonon (cm⁻¹):	Cut-off (eV): 800	K-point length (Å): 65

Рисунок 2.1.7. Детальна інформація щодо матеріалу JVASP-13560.

```



```

Рисунок 2.1.8. Вивід програми для матеріалу JVASP-13560.



Submit

Material: Bias type: Stm type: Min size: Zcut:

Ext:

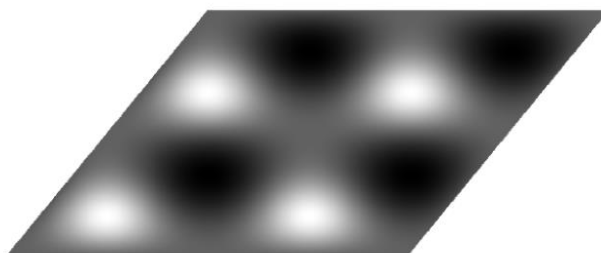


Рисунок 2.1.9. Очікуємий вивід для JVASP-13560

Отже, ми бачимо, що код програми працює коректно та всі приклади відображаються правильно та в очікуємому масштабі та форматі.

2.2. Розробка програми для більш детального розгляду матеріалу.

Для більш детального розгляду топографії матеріалу я також користувався Jarvis-Tools, пакетом nglview, та інструментом ase, який дозволить побачити атомну структуру матеріалу у вигляді 3D моделі.

Спочатку було побудовано 2D модель матеріалу JVASP-667 у повному вигляді.

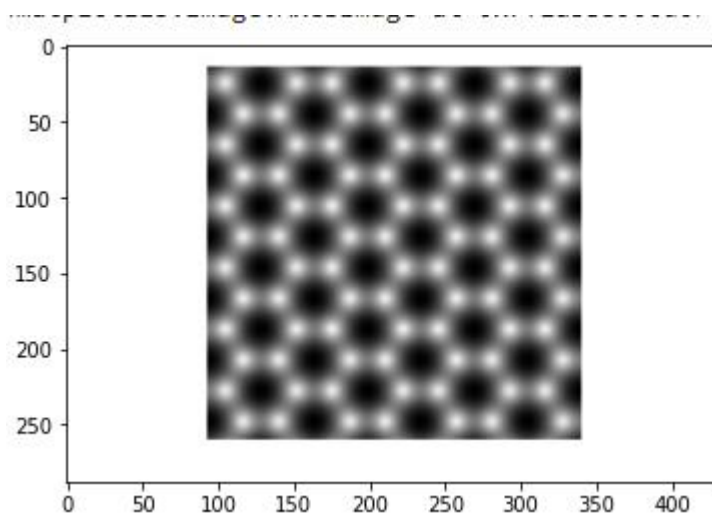


Рисунок 2.2.1. Дані з СТМ щодо матеріалу JVASP-667.

Потім було використано інструмент plotly.express для більш детального огляду матеріалу

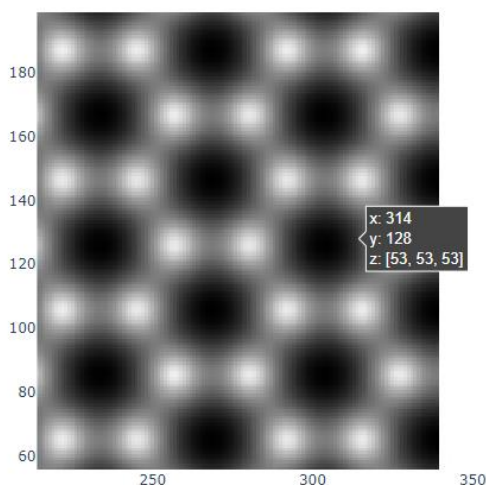


Рисунок 2.2.2. Більш детальний вид матеріалу.

Після цього за допомогою інструменту ase було змодельовано атомну структуру.

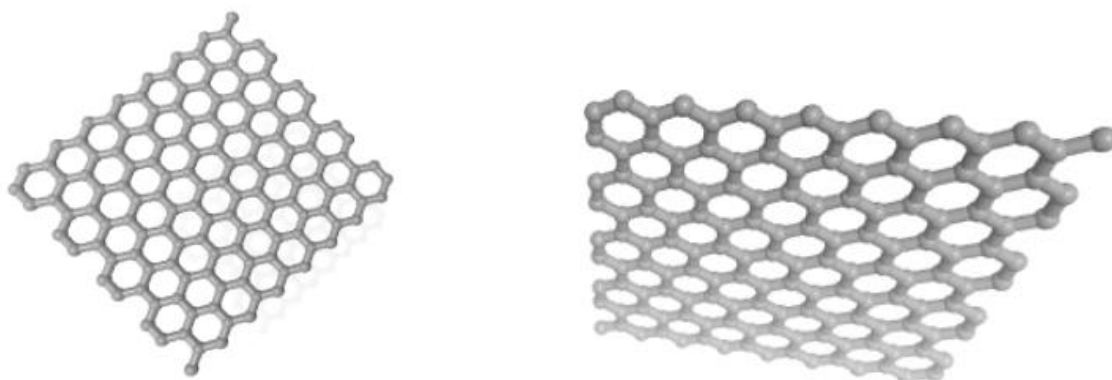


Рисунок 2.2.3. Атомна структура матеріалу.

Як ми бачимо, цю атомну сітку можна оглянути з різних сторін, а при наведенні курсору, буде показано який саме атом є у цій структурі.

Висновки

Було розглянуто основні принципи сканувальної тунельної мікроскопії, розглянуто де може використовуватися СТМ та фізичні явища, які використовує при своїй роботі прилад.

Оглянуто базу даних матеріалів, які вже використовувалися для роботи з СТМ.

Створено програми, які можуть виводити зображення вже проведених досліджень, на основі яких можна збирати дані щодо топографії матеріалу.

Написано програму, яка може виводити атомну структуру матеріалу для більш детального огляду.

Перелік посилань

1. Binnig, G., & Rohrer, H. (1983). Scanning tunneling microscopy. *Surface Science*, 126(1-3), 236–244.
2. Chen, Julian. (1994). *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy: Second Edition*. American Journal of Physics
3. M. H. Hecht, L. D. Bell, W. J. Kaiser, and F. J. Grunthaner, *Appl. Phys. Lett.*, 1989, 55, 780.
4. Debian [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу:
<https://www.debian.org/doc/>
5. Adlink [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу:
https://www.adlinktech.com/Products/Data_Acquisition/AnalogOutput/PCI-6208_6216_Series?lang=en
6. Debian packages [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу:
<https://packages.debian.org/bullseye/libcomedi0>
7. А.М. Горячко, С.П. Кулик, О.В. Прокопенко (2011). Основи скануючої зондової мікроскопії та спектроскопії, 50-65
8. [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу:
<https://www.nature.com/articles/s41524-020-00440-1>
9. [Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу:
<https://warwick.ac.uk/fac/sci/physics/current/postgraduate/regs/mpagswarwick/ex5/techniques/electronic/microscopy/>
- 10.[Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу:
<https://capricorn.bc.edu/wp/zeljkoiclub/research/scanning-tunneling-microscopy-stm/>
- 11.[Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу: <https://jarvis-materials-design.github.io/dbdocs/>
- 12.[Електронний ресурс] – Режим доступу до ресурсу:
<https://pythonlang.dev/repo/usnistgov-jarvis/>

13. [Электронный ресурс] – Режим доступа до ресурсу: <https://jarvis-tools.readthedocs.io/en/master/publications.html>
14. [Электронный ресурс] – Режим доступа до ресурсу: <http://nglviewer.org/nglview/latest/index.html>
15. [Электронный ресурс] – Режим доступа до ресурсу: <https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>

Додатки

Додаток А

Код реалізації виводу прорахованого зображення поверхні матеріалів JVASP-667, JVASP-689 та JVASP-13560

Cell 1:

```

from jarvis.db.figshare import data
import os, requests, io, tempfile, zipfile
from jarvis.analysis.stm.tersoff_hamann import TersoffHamannSTM
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

fls = data("raw_files")

def make_stm_from_pchg(
    jid="JVASP-667", bias="Negative", filename="stm_image.png", min_size=5
):
    for i in fls["STM"]:
        zip_name = jid + "_" + bias + ".zip"
        if i["name"] == zip_name:
            zip_file_url = i["download_url"]
            r = requests.get(zip_file_url)
            z = zipfile.ZipFile(io.BytesIO(r.content))
            pchg = z.read("PARCHG").decode("utf-8")
            fd, path = tempfile.mkstemp()
            with os.fdopen(fd, "w") as tmp:
                tmp.write(pchg)
            TH_STM = TersoffHamannSTM(
                chg_name=path, min_size=min_size, zcut=None
            )
            t_height = TH_STM.constant_height(filename=filename)

make_stm_from_pchg()
plt.imshow(plt.imread("stm_image.png"))
plt.axis('off')

```

Cell 2:

```

from jarvis.db.figshare import data
import os, requests, io, tempfile, zipfile
from jarvis.analysis.stm.tersoff_hamann import TersoffHamannSTM
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

```

```

fls = data("raw_files")

def make_stm_from_pchg(
    jid="JVASP-689", bias="Negative", filename="stm_image.png",min_size=20
):
    for i in fls["STM"]:
        zip_name = jid + "_" + bias + ".zip"
        if i["name"] == zip_name:
            zip_file_url = i["download_url"]
            r = requests.get(zip_file_url)
            z = zipfile.ZipFile(io.BytesIO(r.content))
            pchg = z.read("PARCHG").decode("utf-8")
            fd, path = tempfile.mkstemp()
            with os.fdopen(fd, "w") as tmp:
                tmp.write(pchg)
            TH_STM = TersoffHamannSTM(
                chg_name=path, min_size=min_size, zcut=None
            )
            t_height = TH_STM.constant_height(filename=filename)

make_stm_from_pchg()
plt.imshow(plt.imread("stm_image.png"))
plt.axis('off')

```

Cell 3:

```

from jarvis.db.figshare import data
import os, requests, io, tempfile, zipfile
from jarvis.analysis.stm.tersoff_hamann import TersoffHamannSTM
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

fls = data("raw_files")

def make_stm_from_pchg(
    jid="JVASP-13560", bias="Negative", filename="stm_image.png",min_size=10
):
    for i in fls["STM"]:
        zip_name = jid + "_" + bias + ".zip"
        if i["name"] == zip_name:
            zip_file_url = i["download_url"]
            r = requests.get(zip_file_url)
            z = zipfile.ZipFile(io.BytesIO(r.content))
            pchg = z.read("PARCHG").decode("utf-8")
            fd, path = tempfile.mkstemp()
            with os.fdopen(fd, "w") as tmp:
                tmp.write(pchg)
            TH_STM = TersoffHamannSTM(

```

```

        chg_name=path, min_size=min_size, zcut=None
    )
    t_height = TH_STM.constant_height(filename=filename)

```

```

make_stm_from_pchg()
plt.imshow(plt.imread("stm_image.png"))
plt.axis('off')

```

Додаток Б

Реалізація коду щодо більш детального вивчення топографії матеріалу за допомогою nglview

Cell 1:

```

from jarvis.core.atoms import crop_square
import matplotlib.pyplot as plt
import os, glob
from jarvis.analysis.stem.convolution_aprx import STEMConv
from jarvis.db.figshare import data, get_jid_data
import matplotlib.pyplot as plt
from jarvis.core.atoms import Atoms, ase_to_atoms, get_supercell_dims
from jarvis.core.lattice import get_2d_lattice
from sklearn.model_selection import train_test_split
from collections import defaultdict
%matplotlib inline
#plt.switch_backend("agg")

dft_2d = data("dft_2d")
jid = 'JVASP-667'
for i in dft_2d:
    if i['jid']==jid:
        a = Atoms.from_dict(i["atoms"])
        jid = i["jid"]
        dims = get_supercell_dims(atoms=a, enforce_c_size=50)
        s = a.make_supercell_matrix(dims)
        c = crop_square(s, csize=20)
        p = STEMConv(atoms=c, output_size=[200, 200]).simulate_surface()
        plt.imshow(p[50:150, 50:150], interpolation="gaussian", cmap="gray")
        plt.tight_layout()
        plt.axis("off")
        filename = jid + ".jpg"
        plt.savefig(filename)
        plt.close()
        break

```

Cell 2:

```

plt.imshow(plt.imread('JVASP-667.jpg'))

```

Cell 3:

```
import plotly.express as px
import numpy as np
img=plt.imread('JVASP-667.jpg')
fig = px.imshow(img)
fig.show()
```

Cell 4:

```
import plotly.express as px
import numpy as np
img=plt.imread('JVASP-667.jpg')
fig = px.imshow(img)
fig.show()
```