



分類	ナノシミュレーション
キーワード	伝導計算
開発者	近藤 恒、奈良 純、伊藤 信、大野隆央
作成年月	2005年6月
コード名	ASCOT
作成言語	Fortran90

◇伝導特性計算プログラム ASCOT

伝導特性計算プログラム ASCOT (Ab initio Simulation COde for quantum Transport) は非平衡グリーン関数法に基づいてナノ構造の量子伝導特性の解析を効率的に精度良く行うプログラムである。ASCOT は、ソースプログラム、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公開予定である。

一般的な電子状態計算では境界条件として周期系や孤立系を考え、その平衡状態での諸性質を解析する。しかし伝導現象はそのような平衡状態計算では扱えない。本プログラムでは境界条件として解析すべきナノ構造の両側に半無限の電極を考えて、そこから入射した電子の散乱状態を非平衡グリーン関数法を用い計算することによって伝導特性の解析をする。実際の計算に際しては半無限電極の効果を、表面グリーン関数を用いた自己エネルギーとして記述し、ナノ構造部分のグリーン関数へ繰り込むことによって電子状態の計算を行っている。このように両電極部分と中央のナノ構造部分と指定して伝導特性計算を行う。このとき両電極については境界条件となっていて、散乱状態は中央部分でのみ計算される。よって散乱が起こるとされる範囲まで電極部分も中央のナノ構造部分に組み込んで拡張されたナノ構造部（拡張分子）として扱い、電極表面や結合状態も反映した伝導特性解析が可能である。

◇プログラムの概要

- (1) 系としてはカーボン系の計算が可能である。FLAPW によって求めたダイヤモンドやグラファイトのバンド構造をよく再現する定量的タイトバインディングモデルを用いている。このタイトバインディングモデルはカーボンナノチューブ中にフラーレン分子 (C_{60}) を内包した系 ($C_{60}@ (10, 10)$) のバンド構造を再現するように拡張されている。また、GSP 型のタイトバインディングモデルを用いた計算も可能である。

(2) 透過率入射エネルギー範囲を指定するとその範囲のトランスミッションが得られる。これによりフェルミレベルだけでなく他のエネルギーについてもその伝導特性を得ることが可能である。同時にナノ構造部分の状態密度も得られる。

◇計算例

カーボンナノチューブ中にフラーレン分子 (C_{60}) を内包した系 ($C_{60}@ (10, 10)$) の伝導特性の解析例を紹介する。このようなフラーレン内包カーボンナノチューブは実験的に発見されていて、その物性に非常に興味を持たれている系である。まずは周期的に分布する場合について紹介する (図1)。(a)は構造、(b)はトランスミッション (左) 及びバンド構造 (右) である。フェルミレベルは点線で表している。バンドの枚数と透過率が一致していることがわかる。これは周期系の一般的性質であり、伝導計算がうまくいっていることを示す。次に、中央の2つのフラーレン分子が結合し (5, 5)- ガプセルになったときの結果を示す (図2)。(a)は構造、(b)はトランスミッションである。この系で得られたトランスミッションは最大で2となり、(5, 5)- ガプセルのレベル (矢印) が存在するエネルギー近傍で約1に減少している。

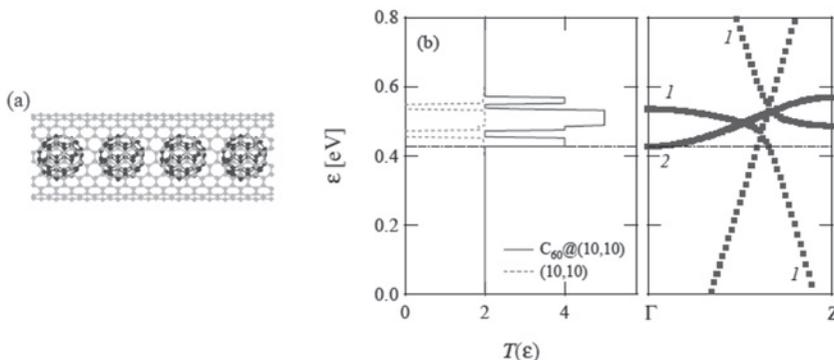


図1 (a)周期的に C_{60} を内包したカーボンナノチューブの原子構造。(b)トランスミッション (左) 及びバンド構造 (右)。

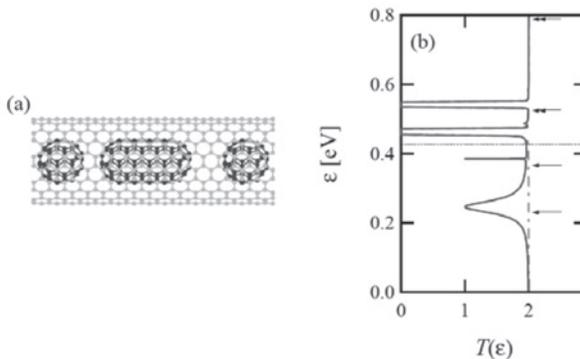


図2 (a) C_{60} と (5, 5)- ガプセルを内包したカーボンナノチューブの原子構造。(b)トランスミッション。