

| | |
|-------|----------------|
| 分類 | ナノシミュレーション |
| キーワード | 量子伝導特性解析 |
| 開発者 | 近藤 恒、奈良 純、大野隆央 |
| 作成年月 | 2007年12月 |
| コード名 | ASCOT |
| 使用言語 | Fortran90 |

◇伝導特性計算プログラム ASCOT (Ab initio Simulation COde for quantum Transport)

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。使用説明書、計算例等とともに、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、非平衡グリーン関数法を用いて、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、そこから入射した電子の散乱状態を計算することによって伝導特性を求める。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を分けて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の電極部分も中央のナノ構造部分に組み込んだ拡張されたナノ構造体（拡張分子）として扱うことによって、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) 擬原子軌道・擬原子ポテンシャルを用いた密度汎関数理論に基づく非平衡グリーン関数法により、伝導特性（トランスミッション、 I - V 曲線等）を求めることが出来る。
- (2) 入射エネルギーの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エネルギー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

ベンゼン-(1,4)-ジチオール分子が Au(111) 表面に挟まれた系 [図 1 (a)] の伝導特性の解析例を紹介する。実験的には金電極に挟まれたベンゼン-(1,4)-ジチオール分子のコンダクタンスに対する測定の報告がされており、この系に対する理論的研究も多数報告されている。

トランスミッション $T(\epsilon)$ を図 1 (b) に示す。 $\epsilon \sim -1.3$ [eV] および 3.5 [eV] に幅の広いピークが得られる。これらのピークの位置は、同じく図 1 (b) に示されている分子軌道に射影した状態密度 (Projected Density of States : PDOS) によく対応している。PDOS のピーク幅や位置は電極・分子間の結合の強さに依存するので、この結果から分子軌道によって結合の強さが異なっていることがわかる。フェルミエネルギー ϵ_F では $T(\epsilon_F) \sim 0.4$ となっている。

図 1 (c) には、 I - V 曲線を示す。電流値はそれぞれのバイアスにおけるトランスミッションをバイアスウィンドウの範囲で積分することにより求まる。約 -1.5 [V] \sim 1.5 [V] ではほぼ線形な振る舞いが見られ、 ± 2.0 [V] 近傍で電流値は飽和している。

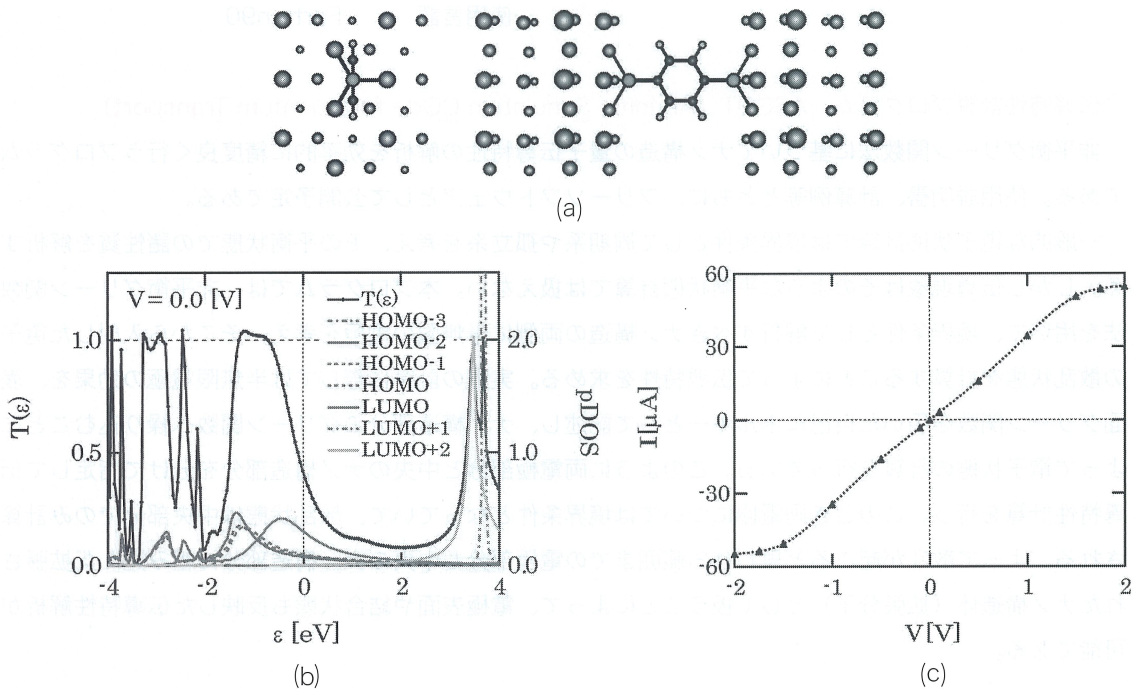


図 1 : (a)ベンゼン-(1,4)-ジチオール分子が Au(111) 表面に挟まれた系の模式的な原子構造。(b)トランスミッション $T(\epsilon)$ と孤立ベンゼン-(1,4)-ジチオール分子の分子軌道に射影した状態密度。フェルミエネルギーを 0 [eV] とした。(c) I - V 曲線。