



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	2009年6月
コード名	ASCOT ver. 4.0
使用言語	Fortran90

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

ASCOT は、ナノ構造体の量子伝導特性を効率的に精度良く求めるためのプログラムである。使用説明書、計算例などとともにフリーソフトウェアとして公開予定である。

本プログラムでは、ナノ構造体の両側に半無限の電極がある系の伝導特性を、非平衡グリーン関数法を適用し、電極から入射した電子の散乱状態を計算することによって求めることが出来る。実際の計算では表面グリーン関数を用いた自己エネルギーとして半無限電極の効果を記述し、ナノ構造体を含む部分のグリーン関数へ繰り込むことによって電子状態及び伝導特性の計算を行う。このとき両電極の電子状態は境界条件となり、散乱状態はナノ構造部分でのみ計算される。

従来版 ASCOT では波数 k として Γ 点のみを用いた計算が実行出来たが、最新版 [ver. 4.0] では複数の k 点を用いて計算出来るようプログラムを拡張した。この拡張によって、例えば酸化物薄膜などが電極に挟まれた系の伝導特性を精度よく計算することが可能となる。また、電子状態を求める反復計算における密度行列の更新に対して加速法を導入するなどの高速化を行った。

◇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（電流－電圧曲線など）を求めることが出来る。
- (2) 指定した入射エネルギーの範囲のトランスミッション及びナノ構造部分の状態密度が得られる。
- (3) 定量的タイトバインディングモデルに基づいたグリーン関数法によって、カーボンナノチューブおよび(10, 10)-カーボンナノチューブ中にフラレン分子(C_{60})を内包した系 $C_{60}@$ (10, 10) など、カーボン系のトランスミッションおよび状態密度が得られる。

◇計算例

ナノスケールのデバイスの可能性に関連して単分子によるナノ構造体の示す物性が注目を集めており、その伝導特性に関する研究が活発に行われている。本稿では、ASCOT の計算例としてビフェニルジチオール分子が Au(111) 表面に挟まれた系 [図 1 (a)] の伝導特性を紹介する。この系の伝導特性はビフェニルジチオール分子のフェニル環の間の二面角 Ψ が変化することによって大きく変化することが示唆されており、この二面角 Ψ 依存性を利用した応用の可能性が議論されている。

まず、安定構造 ($\Psi = 147.5^\circ$) に対する電流 I -電圧 V 曲線を図 1 (b) に、 $V = 0$ [V] におけるトランスミッション $T(\epsilon)$ を図 1 (b) 挿入図に示す。電流値 I はそれぞれの電圧値 V 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。得られた電流値 I は約 -1.5 [V] \sim 1.5 [V] でほぼ線形に振る舞い、 ± 1.5 [V] 近傍で飽和している。図 1 (b) では、波数 k として Γ 点のみを用いた計算結果と 3×3 -メッシュ点を用いた結果との比較を行っている。

次に、伝導特性の二面角 Ψ 依存性について述べる。図 1 (c) に $\Psi = 180^\circ$ 、 147.5° と 90° の I - V 曲線を示す。挿入図に示すフェルミエネルギーにおけるトランスミッションの関係の通り、 $\Psi = 180^\circ$ の場合は大きな電流値が得られ、 $\Psi = 90^\circ$ に近づくにつれて小さくなる。これは二面角 Ψ が変化することによってフェニル環上の π 軌道間の相互作用の大きさが変化しているためである [フェニル環が平行の場合 ($\Psi = 180^\circ$) は相互作用が大きく、垂直の場合 ($\Psi = 90^\circ$) は小さい]。このようにビフェニルジチオール分子を架橋した系の伝導特性は、フェニル環の間の二面角 Ψ に強く依存する。

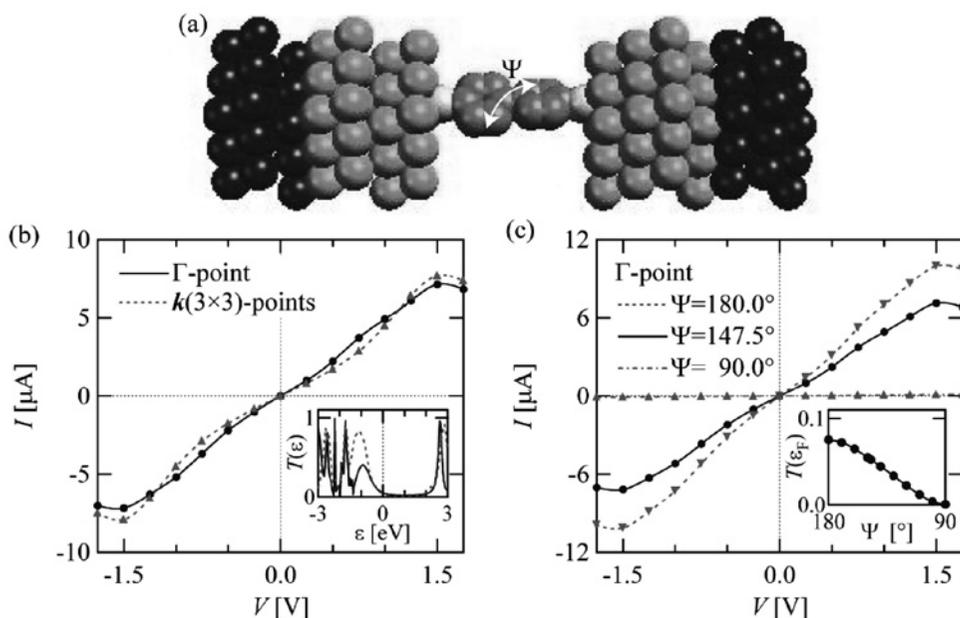


図 1 : (a) ビフェニルジチオール分子が Au(111) 表面に挟まれた架橋系の原子構造。(b) 安定構造 $\Psi = 147.5^\circ$ に対する I - V 曲線及び $V = 0$ [V] におけるトランスミッション (挿入図)。(c) I - V 曲線の二面角 Ψ 依存性。挿入図にはフェルミエネルギー ϵ_F におけるトランスミッションの二面角 Ψ 依存性を示す。