

量子伝導特性解析ソフトウェア  
ASCOT 2014 (ver.4.40)  
ユーザマニュアル

## **COPYRIGHT of the program codes**

Copyright (C) of the developed version by the national projects FSIS, RSS21, and RISS has been managed by the Institute of Industrial Science (IIS), the University of Tokyo.

The Institute of Industrial Science (IIS) has a right to distribute the program set as a free software.

## **HISTORY**

Since 2002, this program set had been intensively developed as a part of the following national projects supported by the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) of Japan; "Frontier Simulation Software for Industrial Science (FSIS)" from 2002 to 2005, "Revolutionary Simulation Software (RSS21)" from 2006 to 2008. "Research and Development of Innovative Simulation Software (RISS)" from 2008 to 2013. These projects is lead by the Center for Research on Innovative Simulation Software (CISS), the Institute of Industrial Science (IIS), the University of Tokyo.

Since 2013, this program set has been further developed centering on PHASE System Consortium.

The activity of development of this program set has been supervised by Takahisa Ohno.

## **CONTACT ADDRESS**

PHASE System Consortium

E-mail: [phase\\_system@nims.go.jp](mailto:phase_system@nims.go.jp) URL <https://azuma.nims.go.jp>

\* When distributing the software "PHASE" duplications, the user must attach the full text in this file.

## 目次

1. はじめに.....	4
2. ASCOT の概要.....	5
2.1 ASCOT の計算理論 .....	5
2.1.1 非平衡グリーン関数法.....	5
2.2 ASCOT の計算手順 .....	9
2.3 擬原子軌道および擬ポテンシャル .....	10
2.4 タイトバインディングパラメータ .....	11
2.5 ASCOT の主な機能 .....	12
2.6 ASCOT のプログラム構成.....	13
2.7 ASCOT の動作環境 .....	14
2.8 ASCOT のインストール、実行 .....	14
3. 入力ファイル.....	15
3.1 平衡系の電子状態計算 .....	16
3.2 密度汎関数理論に基づいた伝導特性解析.....	22
3.3 タイトバインディング法を用いた炭素系の伝導特性解析 .....	28
4. 計算例.....	30
4.1 ベンゼンジチオール分子架橋系.....	30
4.1.1 Procedure 1-2.....	30
4.1.2 Procedure 1-1.....	32
4.1.3 Procedure 2 & 3.....	33
4.2 Au(111)表面に挟まれたベンゼンジチオール分子.....	36
4.2.1 Procedure 1-2.....	36
4.2.2 Procedure 1-1.....	37
4.2.3 Procedure 2 & 3.....	37
4.3 C <sub>60</sub> 内包カーボンナノチューブ .....	41
4.3.1 Procedure 3.....	41
5. 参考文献.....	45

## 1. はじめに

伝導特性計算プログラム ASCOT (Ab initio Simulation Code for quantum Transport)は、密度汎関数法(DFT)および非平衡グリーン関数法(NEGF)を用いた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ことができるプログラムである。またタイトバインディング法およびグリーン関数法を用い、炭素系の伝導特性を求めることも可能である。

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調べる。これに対して、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、解析すべきナノ構造体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および伝導特性を求めることができる。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う。このとき両電極については境界条件(開放系の境界条件)となっていて、電子状態は中央部分でのみ計算される。このため、散乱が起これと思われる範囲までの電極部分も中央のナノ構造体に組み込んだ拡張されたナノ構造部分(拡張分子)として扱う必要がある。求まったナノ構造部分の電子状態から、電極表面や結合状態も反映した伝導特性を求めることができる。

### 更新情報

ver. 4.4 (2013 年 3 月)	● スピン軌道相互作用計算の機能を追加。
ver. 4.2 (2011 年 6 月)	● 平衡系の電子状態計算におけるメモリの並列化(このバージョン以降、Scalapackライブラリーが必要となる)。 ● 電荷の更新対象として電荷密度を追加。
ver. 4.1 (2010 年 6 月)	● 力の計算の基本機能、および平衡系の電子状態計算の解析機能(バンド分散、状態密度、分子軌道の計算機能)を追加・整備
ver. 4.0 (2009 年 6 月)	● 複数の波数 $k$ を用いた伝導特性計算の機能を追加。(これに伴いデータファイルなどの仕様を変更。) ● 密度行列の更新に対して加速法を導入。 ● 平衡系の電子状態計算の並列化。
ver. 3.0 (2007 年 12 月)	● 密度汎関数理論および非平衡グリーン関数法を用いたプログラムの基本機能を追加。
ver. 1.0 (2005 年 6 月)	● タイトバインディングパラメータを用いたグリーン関数法による伝導特性の解析機能を公開。

文献[1]および文献[2]に ASCOT による結果を紹介している。実行結果を公表する場合は、タイトバインディング版を使用の際は文献[1]、密度汎関数法版を使用の際は文献[2]を、ソフトウェア名などとともに記載していただきたい。また、ASCOT を用いた成果は文献[1]および文献[2]の他、文献[3]-[11]に紹介されている。

## 2. ASCOT の概要

### 2.1 ASCOT の計算理論

ASCOT では、原子軌道による線形結合(LCAO)法に基づく密度汎関数理論(DFT)および非平衡グリーン関数(NEGF)法 [2,5,12]を適用することで伝導特性を求めることができる。

#### 2.1.1 非平衡グリーン関数法

ここでは、NEGF 法の理論をまとめておく。ただし、簡略化して、スピン分極の無い場合を示す。

図 2.1 に示される構造が対象となる架橋系である。このような系を次の 3 つの部分、すなわち(a) 左側半無限電極[レフト領域: 図 2.1 の左側の濃色で示された原子](b) 分子などの散乱体と左右電極の数層を含むナノ構造部分[散乱領域]、および(c) 右側半無限電極[ライト領域: 図 2.1 の右側の濃色で示された原子]に分割して考える。このとき、レフト領域とライト領域の間の相互作用はないものと仮定する。するとそれぞれのスピンに対してハミルトニアン $\mathcal{H}$ および重なり積分 $\mathcal{S}$ は

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} H_L & H_{LS} & 0(1) \\ H_{SL} & H_S & H_{SR}(2) \\ 0 & H_{RS} & H_R(3) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} S_L & S_{LS} & 0(5) \\ S_{SL} & S_S & S_{SR}(6) \\ 0 & S_{RS} & S_R(7) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

と書くことができる。ここで、レフト領域とライト領域は結晶の電子状態と一致するものと仮定する。すなわちハミルトニアンの成分 $H_{L/R}$ 、 $H_{SL/SR}$ および $H_{LS/RS}$ は周期境界条件のもとで計算される。 $H_S$ は、下に示す電極の状態によって決められる境界条件の下で反復計算を実行した上で求まる。

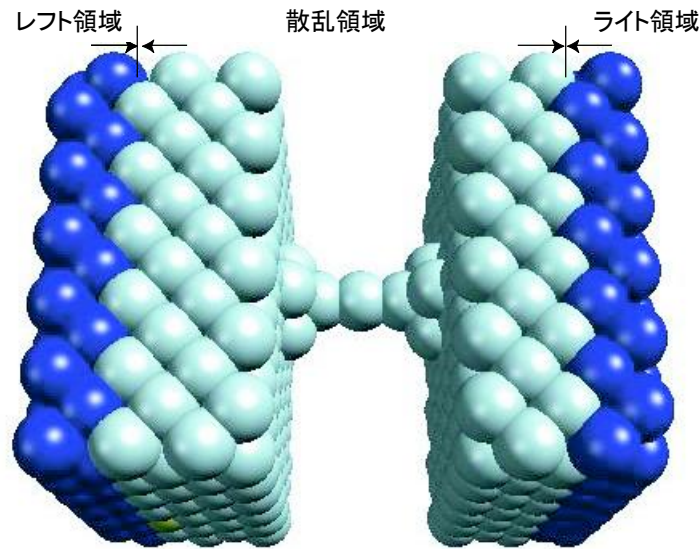


図 2.1 対象となる架橋系の例(Al 原子細線架橋系の構造)。薄色の原子は散乱領域として扱われる原子、濃色の原子がレフト領域、ライト領域として扱われる原子を表す。

散乱領域の遅延グリーン関数は

$$G_S^r(\varepsilon) = [\varepsilon^+ S_S - H_S - \Sigma_L^r(\varepsilon) - \Sigma_R^r(\varepsilon)]^{-1}, \quad (3)$$

$$\Sigma_L^r(\varepsilon) = (\varepsilon^+ S_{SL} - H_{SL}) G_L^r(\varepsilon) (\varepsilon^+ S_{LS} - H_{LS}), \quad (4)$$

$$\Sigma_R^r(\varepsilon) = (\varepsilon^+ S_{SR} - H_{SR}) G_R^r(\varepsilon) (\varepsilon^+ S_{RS} - H_{RS}), \quad (5)$$

と求められる。ただし、 $G_{L/R}(z) = (zS_{L/R} - H_{L/R})^{-1}$ はレフト・ライト領域の表面グリーン関数である[ $z$ は任意の複素変数]。  $G_S^r(\varepsilon)$ を求めるのに必要な散乱領域に隣接した原子に対する表面グリーン関数は、漸化式を解くことによって求めることができる [13,14]。

散乱領域の密度行列 $\rho_{S,ij}$ は、 $G_{S,ij}^<(\varepsilon)$ を散乱領域のレスサーグリーン関数とすると、

$$\rho_{S,ij} = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon G_{S,ij}^<(\varepsilon), \quad (6)$$

と求められる。平衡系では、 $\mu = \varepsilon_F$ をケミカルポテンシャル、そして $f(\varepsilon - \mu)$ をフェルミ分布関数とすると、 $G_{S,ij}^<(\varepsilon) \propto f(\varepsilon - \mu)$ であり、 $\varepsilon < \mu$ では $G_{S,ij}^<(\varepsilon)/2\pi i = -\Im G_{S,ij}^r(\varepsilon)/\pi$ であるので、密度行列 $\rho_{S,ij}$ は

$$\rho_{S,ij} = -\frac{1}{\pi} \Im \left[ \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon G_{S,ij}^r(\varepsilon) \right], \quad (7)$$

によって計算することができる。式(7)の $\varepsilon$ に関する積分は複素平面の上半面の適切な積分経路を使って求められる。その積分経路のひとつをエラー! 参照元が見つかりません。  $[E_{\min} \rightarrow E_{\min} + i\delta \rightarrow \mu + i\delta \rightarrow \mu]$ に示す。ただし、 $E_{\min}$ は価電子の取り得る最小のエネルギーよりも小さな値であるとし、 $\delta$ は適当な正の値であるとする。非平衡系の場合、密度行列 $\rho_{S,ij}$ は

$$\rho_{S,ij} = -\Im \left[ \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^E d\varepsilon G_{S,ij}^r(\varepsilon) + \frac{1}{2\pi i} \int_E^{\infty} d\varepsilon G_{S,ij}^<(\varepsilon) \right], \quad (8)$$

$$\begin{aligned} G_S^<(\varepsilon) &= G_S^r(\varepsilon) \Sigma_S^<(\varepsilon) G_S^a(\varepsilon) \\ &\approx -G_S^r(\varepsilon) [\{\Sigma_L^r(\varepsilon) - \Sigma_L^a(\varepsilon)\} f(\varepsilon - \mu_L) - \{\Sigma_R^r(\varepsilon) - \Sigma_R^a(\varepsilon)\} f(\varepsilon - \mu_R)] G_S^a(\varepsilon), \end{aligned} \quad (9)$$

により求まる。ただし、 $G^a(\varepsilon) = G(\varepsilon^-)$ は先進グリーン関数、 $\Sigma_{L/R}^a(\varepsilon)$ は先進自己エネルギーを表し、

$E < \min(\mu_L, \mu_R)$  [ $\mu_{L/R}$ は左/右の電極のケミカルポテンシャルを表す]である。式(8)の第一項目は式(7)と同様に計算される。式(8)の計算で用いられる積分経路を図 2.3 に示す。

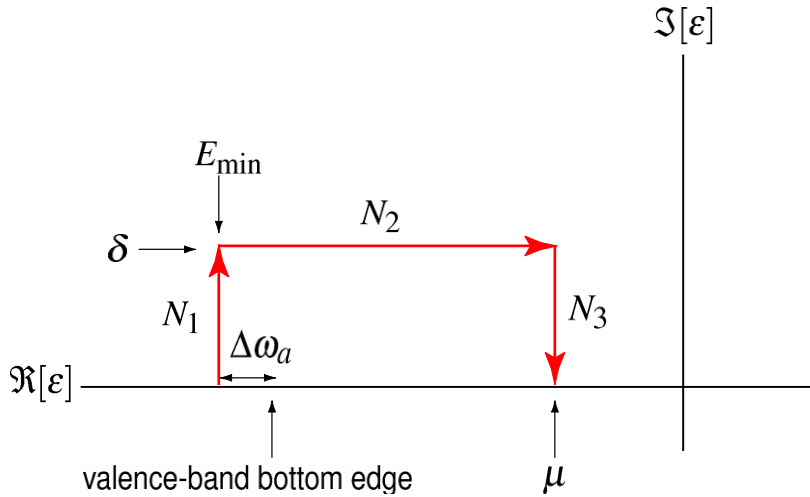


図 2.2 密度行列 $\rho_{S,ij}$ を計算する際の積分経路

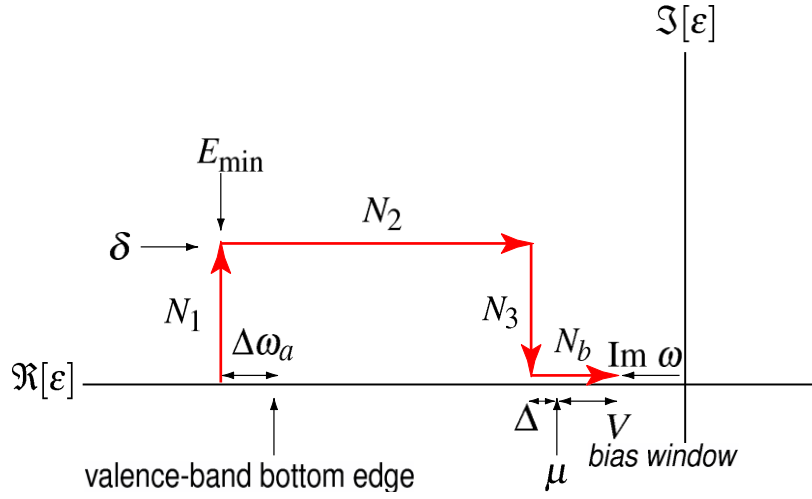


図 2.3 バイアス下における密度行列 $\rho_{S,ij}$ を計算する際の積分経路

電荷密度は、密度行列 $\rho_{S,ij}$ より、

$$\rho(\mathbf{r}) = 2 \sum_{ij} \phi_i(\mathbf{r}) \rho_{S,ij} \phi_j^*(\mathbf{r}), \quad (10)$$

と計算される。ここで、 $\phi_i(\mathbf{r})$ は $i$ 番目の原子の原子軌道を表し、係数2はスピン自由度による。散乱領域のハートリーポテンシャル $V_H(\mathbf{r})$ はポアソン方程式： $\nabla^2 V_H(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r})$ を解くことによって与えられる。その際、レフト・ライト領域のハートリーポテンシャル $V_{H,L/R}(\mathbf{r})$ が境界条件となる。そして、運動エネルギー項、擬ポテンシャルの非局所項および $V_{\text{hxcl}}(\mathbf{r}) = V_H(\mathbf{r}) + V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) + V_{\text{loc}}(\mathbf{r})$  [ $V_{\text{xc}}(\mathbf{r})$ は交換相関ポテンシャル、 $V_{\text{loc}}(\mathbf{r})$ は擬ポテンシャルの局所項を表す]からハミルトニアン $H_S$ が求まる。以上の手順による反復計算は密度行列 $\rho_S$ が自己無撞着に決定されるまで繰り返す。

以上の結果を用いて、レフト領域から流れ込む電流値 $I$ は

$$I = 2 \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon T(\varepsilon) [f(\varepsilon - \mu_R) - f(\varepsilon - \mu_L)], \quad (11)$$

と求まる。ただし、

$$T(\varepsilon) = \text{Tr}[\Gamma_L(\varepsilon) G_S^r(\varepsilon) \Gamma_R(\varepsilon) G_S^a(\varepsilon)], \quad (12)$$

$$\Gamma_L(\varepsilon) = i[\Sigma_L^r(\varepsilon) - \Sigma_L^a(\varepsilon)], \quad (13)$$

$$\Gamma_R(\varepsilon) = i[\Sigma_R^r(\varepsilon) - \Sigma_R^a(\varepsilon)], \quad (14)$$

である。 $T(\varepsilon)$ が対象とした架橋系のトランスミッションである。

上記の非平衡グリーン関数を用いた反復計算の概略を、一般の周期系に対する計算と対比させて図 2.4 に示す。

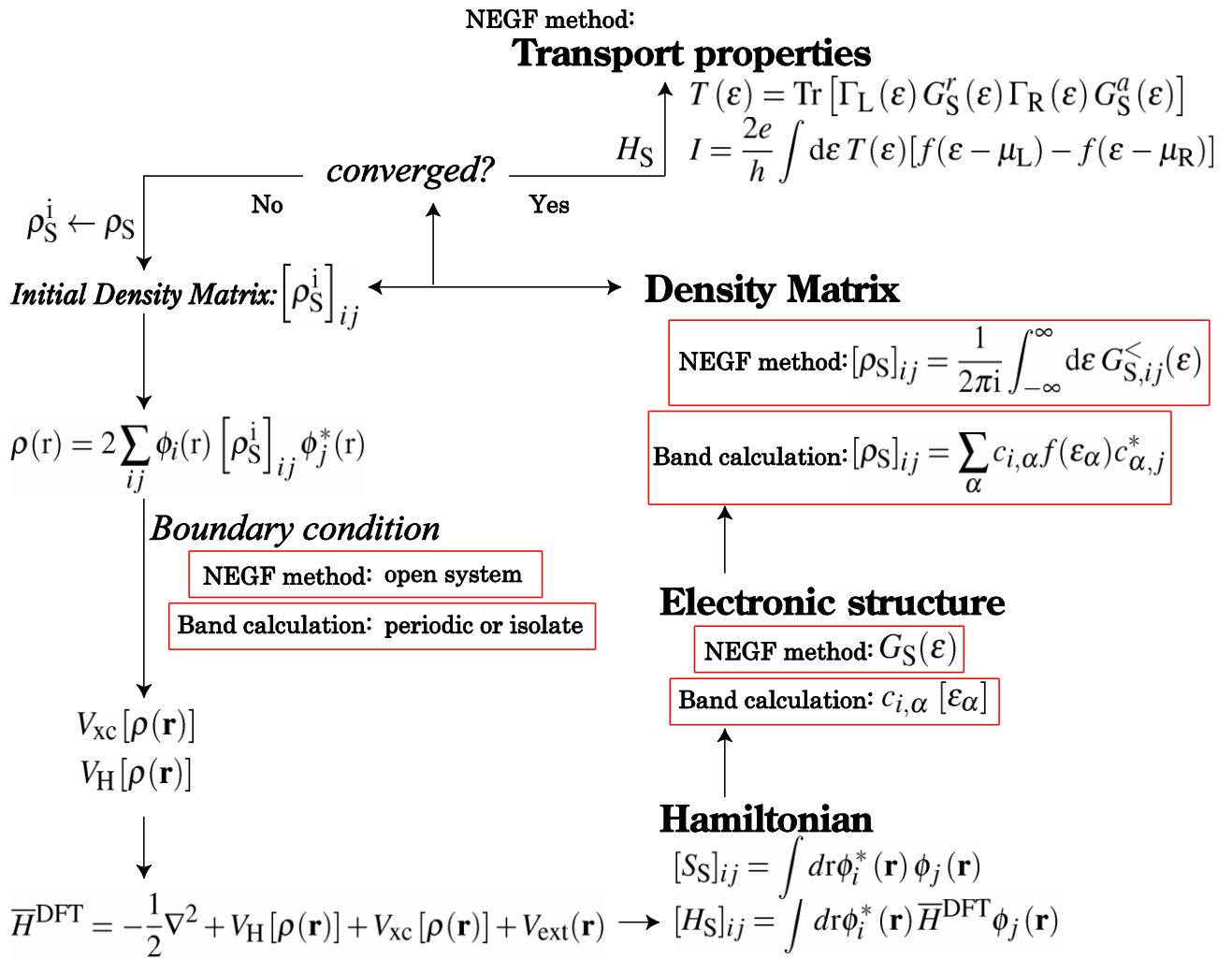


図 2.4 反復計算の概略



## 2.2 ASCOT の計算手順

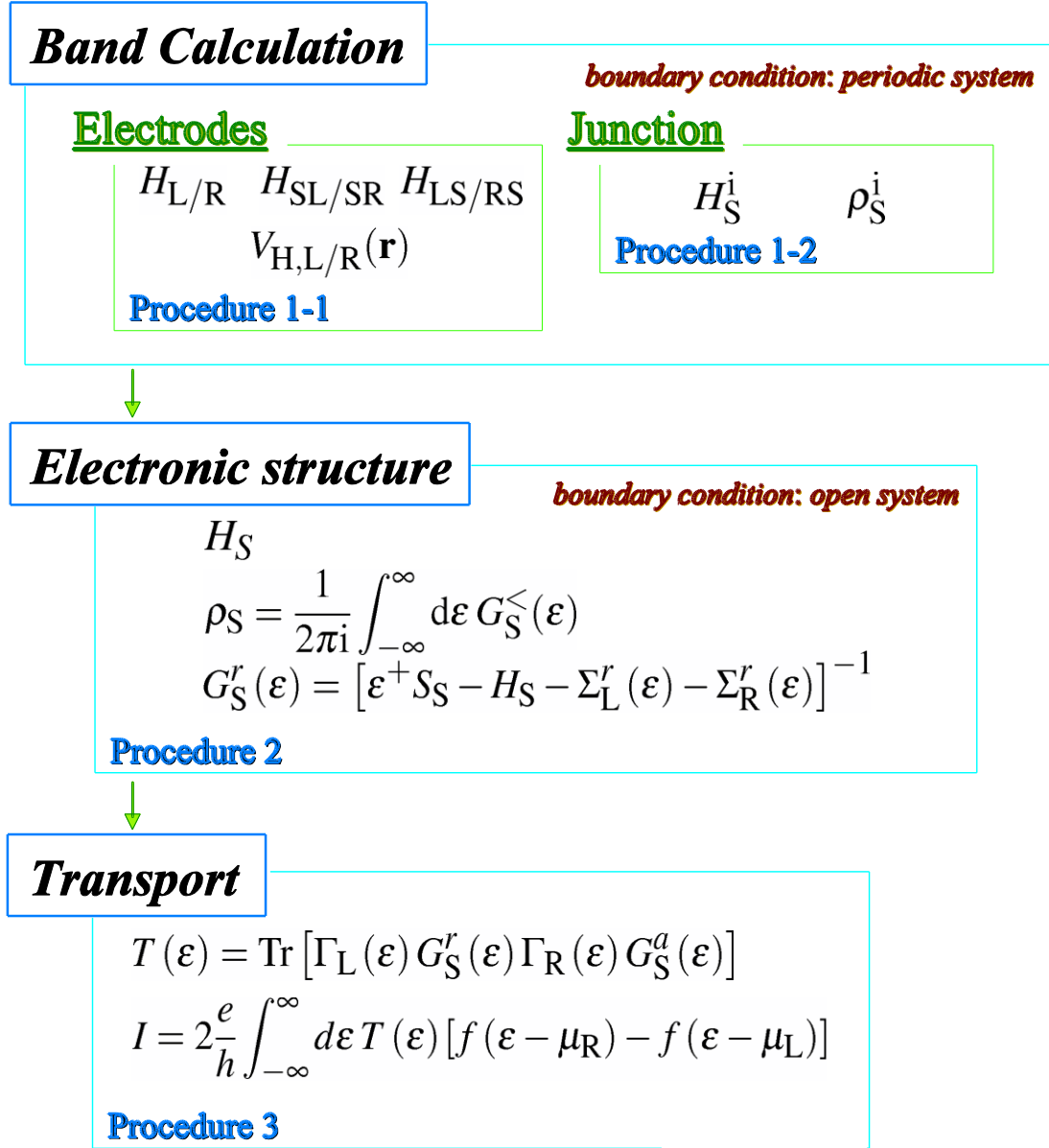


図 2.5 計算手順

ここでは ASCOT の計算手順を簡単に紹介する。図 2.5 にその計算手順を示す。第 4 章に NEGF 法の理論を紹介したが、散乱領域の電子状態および系の伝導特性を求めるためにはレフト・ライト領域の電子状態を求める必要がある[図 2.5 の Procedure 1-1]。つまり、まず  $H_{L/R}$ 、 $H_{SL/SR}$ 、 $H_{LS/RS}$  およびポアソン方程式を解く際の境界

条件となるレフト・ライト領域のハートリーポテンシャル  $V_{H,L/R}(\mathbf{r})$  を決定する。同時に、散乱領域を周期的に取り扱い、その電子状態を求める[図 5 の Procedure 1-2]。ここで求めた密度行列または電荷密度を反復計算の初期値  $\rho_S^i[\rho(\mathbf{r})]$  とする。これらの計算では一般の周期系に対する電子状態計算[通常バンド計算]が行われる。以上の結果を基に散乱領域の電子状態を求める[図 2.5 の Procedure 2]。ここでは開放系の境界条件のもとで反復計算が実行され、対象となっている半無限の電極を持つ系の散乱領域の電子状態  $H_S$  および  $\rho_S$  など]が求まる。以上の手順はタイトバインディング法を用いた炭素系の伝導特性解析を行う際は省略できる。求められた  $H_S$  などから、

式(12)に従ってトランスミッションが、そしてバイアス下では式(11)に従って電流値が求められる。

密度汎関数理論に基づいた計算の実行には、計算実行体と入力ファイルの他、各元素の擬原子軌道(PAO)基底関数データファイルと擬ポテンシャルデータファイルが必要となる。

## 2.3 擬原子軌道および擬ポテンシャル

ASCOT の計算には、CIAO[16]を用いて計算された擬原子軌道 $\phi_i(\mathbf{r})$ が必要である[CIAO Ver. 2.16 では非対応]。この擬原子軌道 $\phi_i(\mathbf{r})$ は文献[15]において提案された方法に基づいて計算される。Al 原子の例を図 2.6(a)に示す。図 2.6(b)に示すように指定されたカットオフ半径 $r_c$ のところに非常に高いポテンシャルを設定し[このため孤立原子の電子状態があるカットオフ半径 $r_c$ の外にはしみ出さない]、電子の状態を解いて、その固有状態に対する波動関数を擬原子軌道としている[15]。

また、擬ポテンシャル[17,18]も CIAO[16]を用いて求められる[図 2.7]。

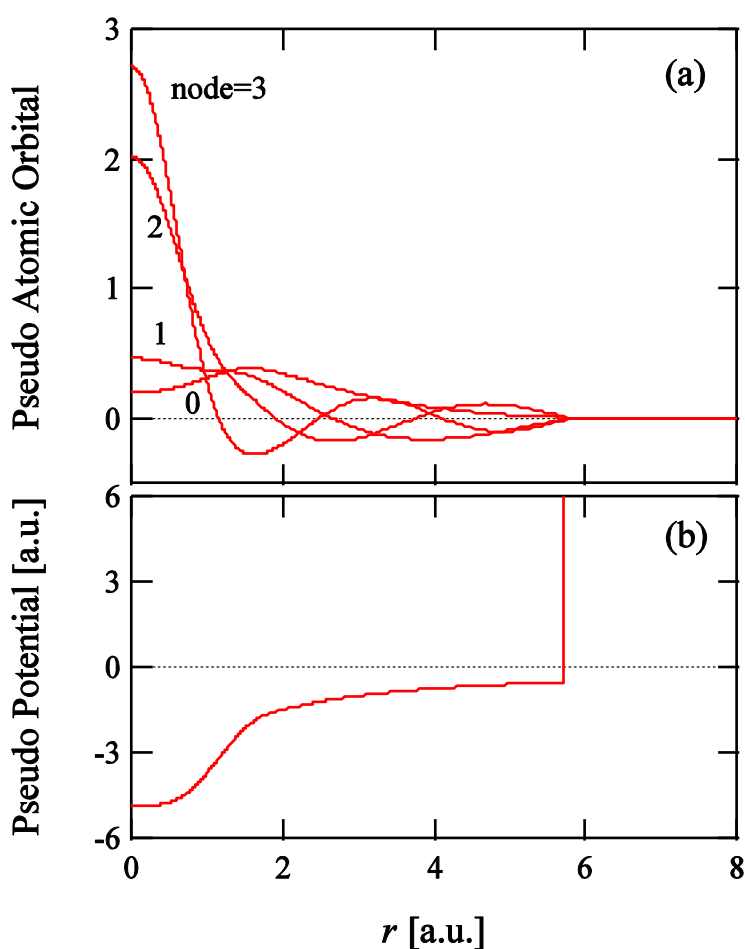


図 2.6 (a)カットオフ半径 $r_c = 6.0$  a. u.のAl 原子の擬原子軌道 $\phi_i(r)$  (s軌道)。 (b)擬原子軌道 $\phi_i(r)$ を求める際に用いた擬ポテンシャルの局所成分

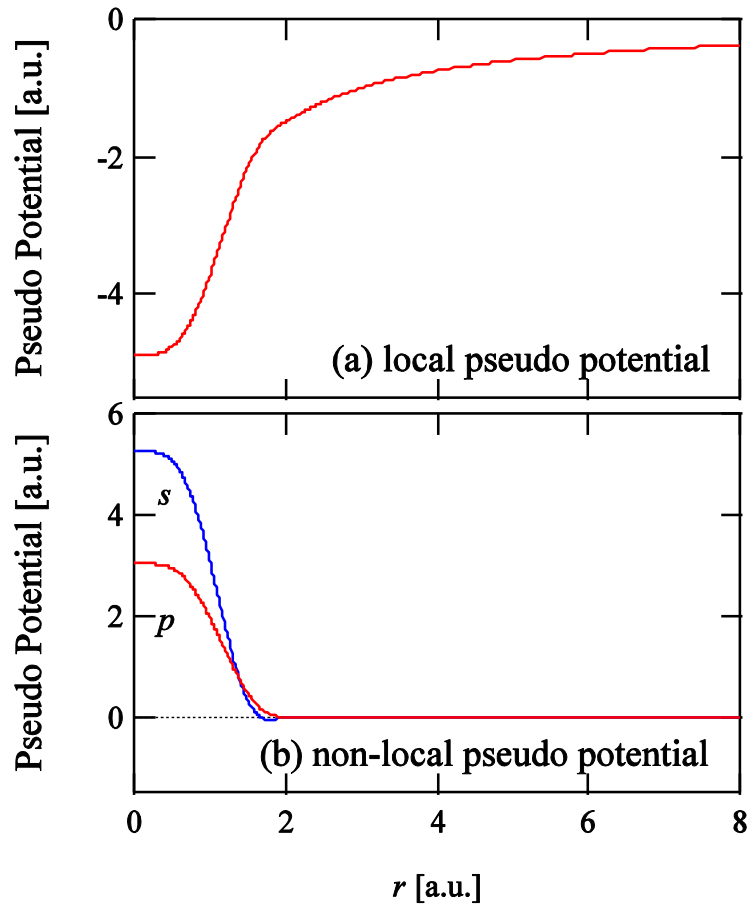


図 2.7 Al 原子の擬ポテンシャルの(a)局所成分と(b)非局所成分の動径成分

## 2.4 タイトバインディングパラメータ

ASCOT は、炭素系のパラメータとして文献[19] [20]で提案されたタイトバインディングパラメータと文献[21]で提案されたものにも対応している。

文献[19]で提案されたパラメータは DFT に基づいて求められたダイヤモンドおよびグラファイトのバンド構造を再現するように決定されている。さらに、文献[20]においてフラーレン内包カーボンナノチューブのバンド構造を再現するよう拡張されている。フラーレン内包カーボンナノチューブを計算する際、便宜的に、ナノチューブを形成する炭素原子を C と表記し、内包された炭素原子を C1 と表記することにする[3 節を参照]。

詳細は文献[19]・[21]を参照していただきたい。

## 2.5 ASCOT の主な機能

ASCOT の主な機能を表 2.1 に示す。

表 2.1 ASCOT の主な機能

系	機能		備考
電子状態計算 平衡系、孤立系	計算理論	密度汎関数法 原子軌道による線形結合 (LCAO) 法	
	交換相関項	LDAPW91, LDAPZ82, GGAPBE	
	スピン分極	スピン分極 スピン軌道相互作用	
	SCF 計算	Charge Mixing ・SD 法、CG 法、GDIIS 法	
	構造最適化	構造最適化計算	
	後処理	バンド分散計算 状態密度計算 分子軌道計算	Gaussian, Tetrahedron
電子状態計算 量子伝導特性計算 開放系	計算理論	非平衡グリーン関数 (NEGF) 法 原子軌道による線形結合 (LCAO) 法 タイトバインディング法	現実的 TB モデル、GSP
	SCF 計算	ハートリーポテンシャルの計算 ・フーリエ変換、グリーン関数 密度行列、電荷密度の更新 ・Simple, Pulay, Anderson	
	量子伝導特性	トランスミッション バイアス下での電流値	

## 2.6 ASCOT のプログラム構成

ASCOT のプログラム構成を以下に示す。

ascot/doc	ユーザーマニュアル格納ディレクトリー
/src	ソースファイル格納ディレクトリー
/bin	計算実行体格納ディレクトリー
/data	データファイル格納ディレクトリー
/samples	サンプルデータ格納ディレクトリー
/work	作業用ディレクトリー

ソースファイル格納ディレクトリー"src"にはソースファイルが格納されている。ascot をコンパイル、インストールすると、計算実行体 ascot\_v430"が計算実行体格納ディレクトリー"bin"にコピーされる。

データファイル格納ディレクトリー"data"には計算実行時に必要な擬原子軌道・擬ポテンシャルおよびタイトバインディングパラメータのデータファイルがある。擬原子軌道・擬ポテンシャルデータファイルのリストを表 1 に示す。これらは CIAO[16]により作成された。その際交換相関汎関数として LDA-PW91 [22]を用いた。擬原子

軌道の条件[カットオフ半径およびファイルに格納されている $s$ 、 $p$ 、 $d$ 軌道の軌道の数 $m_x$  ( $x = s, p, d$ )]も表 1 も

示されている。計算に使用する際、擬原子軌道の数を超えて指定することはできない[詳細は 1 節および 1 節参照]。また、文献[19] [20]に対するタイトバインディングパラメータのデータファイルは "rtbh\_c\_parameter.in"であり、文献 rf:gsp に対するそれは "gsp\_c\_parameter.in"である。

サンプルデータ格納ディレクトリー"samples"には例題として入力ファイルとその結果[トランスミッションのデータなど]が収められている。

表 2.2 擬原子軌道・擬ポテンシャルデータファイル名およびカットオフ半径 $r_c$ とファイルに格納されてい

る $s$ 、 $p$ 、 $d$ 軌道の軌道の数 $m_x$  ( $x = s, p, d$ )

	擬原子軌道					擬ポテンシャル	
	ファイル名	$r_c$ [a.u.]	$m_s$	$m_p$	$m_d$	ファイル名	
H	h40_ldapw91.pao2	4.0	5	5	5	h_ldapw91.gncpp2	
C	c40_ldapw91.pao2	4.0	5	5	5	c_ldapw91.gncpp2	
N	n40_ldapw91.pao2	4.0	5	5	5	n_ldapw91.gncpp2	
O	o40_ldapw91.pao2	4.0	5	5	5	o_ldapw91.gncpp2	
	o55_ldapw91.pao2	5.5	5	5	5	—	
Al	al60_ldapw91.pao2	6.0	5	5	5	al_ldapw91.gncpp2	
Si	si60_ldapw91.pao2	6.0	5	5	5	si_ldapw91.gncpp2	
S	s55_ldapw91.pao2	5.5	5	5	5	s_ldapw91.gncpp2	
Cu	cu60_ldapw91.pao2	6.0	5	5	5	cu_ldapw91.gncpp2	
Se	se60_ldapw91.pao2	6.0	3	3	3	se_ldapw91.gncpp2	
Ag	ag60_ldapw91.pao2	6.0	5	5	5	ag_ldapw91.gncpp2	
Te	te65_ldapw91.pao2	6.5	3	3	3	te_ldapw91.gncpp2	
Au	au60_ldapw91.pao2	6.0	5	5	5	au_ldapw91.gncpp2	
Pt	pt60_ldapw91.pao2	6.0	3	3	3	pt_ldapw91.gncpp2	

## 2.7 ASCOT の動作環境

ASCOT は Linux マシン、UNIX マシンにおいてコンパイルおよび実行されることを想定している。

コンパイラ

Fortran コンパイラ	Intel Compiler GCC (gfortran)	
---------------	----------------------------------	--

必要なライブラリ

MPI ライブラリ	openmpi mpich	
行列計算ライブラリ	LAPACK, ScaLAPACK	
FFT ライブラリ	fftw	

## 2.8 ASCOT のインストール、実行

ソースファイル格納ディレクトリーsrc にはソースファイルが格納されている。 このディレクトリーで、  
"make.in"および make.in.ARCH を使用環境にあわせて編集する。

make.in ファイルでは、計算機・コンパイル環境を記述した make.in.ARCH ファイルを指定 (include) する。

```
include make.in.linux.intel  
#include make.in.linux.gfortran
```

make.in.ARCH ファイルでは、Fortran のコンパイラ・コマンド、ライブラリ等を記述する。

		備考
FC	Fortran90 コンパイラのコマンド	mpif90
FFLAGS	Fortran90 コンパイラのオプション	-O3
LFLAGS	Fortran90 コンパイラのリンクオプション	-O3
SCALAPACK_LIB LAPACK_LIB	ScaLAPACK, LAPACK のライブラリ	
FFT_LIB	FFTW のライブラリ	

Linux、Intel Compiler、Intel MKL、FFTW を用いた環境での make.in.ARCH (make.in.linux.intel)の記述例

```
FC = mpif90  
FFLAGS = -O3 -traceback  
LFLAGS = -O3  
  
SCALAPACK_LIB =  
LAPACK_LIB = -L/opt/intel/Compiler/11.1/075/mkl/lib/32 -lmkl_scalapack_core -lmkl_blacs_openmpi -lm  
kl_intel -lmkl_sequential -lmkl_core  
  
FFT_LIB = -L/usr/local/fftw/lib -lfftw3  
  
LIBS = $(SCALAPACK_LIB) $(LAPACK_LIB) $(FFT_LIB)
```

src ディレクトリーにおいて、以下の make コマンドを実行すると、"makefile"内の計算実行体名の変更を行わない  
限り、計算実行体 äscot"が作成され、計算実行体 äscot"を計算実行体格納ディレクトリー"bin"にコピーする。

```
% make  
% make install
```

### 3. 入力ファイル

計算を行う際に必要な入力ファイルについて説明する。

各パラメータは役割ごとに分類され、それらは"**keyword**{...}**keyword**"によってまとめられて指定される。例えば、

```
general{  
    dft__negf    = negf          #(dft | negf)  
    ...  
}general
```

のように項目"**keyword**= general"内でいくつかのパラメータが設定される。各パラメータは上記の例"dft\_\_negf = negf"のように、"変数名"、"等号記号"、"値"の 3 つの要素を並べて指定される。このとき、各要素は空白で区切られている必要がある。"#"より右側は注釈となる。

以下で ASCOT の入力ファイルの例とパラメータについての説明を示す。ここでは便宜的に複数のファイルに分けているが、すべてを一つのファイルに指定することも可能である。

### 3.1 平衡系の電子状態計算

平衡系の電子状態計算[周期系および孤立系の境界条件の下での計算]を行う際の入力ファイルの例を以下に示す。パラメータの説明は表 3.1 に示す。

```

general{
  dft_negf = dft      #{dft | negf}
  system_name = junction # necessary
}general

accuracy{
  energy_cutoff      = 100.0 Ry          # default=150Ry
  temperature        = 500.0 K          # default=300K
  scf_convergence     = 1.e-6 hartree    # default=0.000001hartree
  scf_criterion_type = density          # {fermi|orbital|total|density}, default=fermi
  num_max_iteration  = 100              # default=100

  ksampling{
    method = mesh                      # {gamma|mesh}, default=gamma
    mesh{
      1 1 1 # nx ny nz
    }mesh
  }ksampling

  xctype = ldapw91                    # {ldapz81|ldapw91}, default=ldapw91
  element_data_path_pao = ".././../data/" # default="."
  element_data_path_vps = ".././../data/" # default="."

  num_element = 4
  element_list{
    Au "au60_ldapw91.pao2" "au_ldapw91.gncpp2" s2p1d1
    S  "s55_ldapw91.pao2"  "s_ldapw91.gncpp2"  s2p2d2
    C  "c40_ldapw91.pao2"  "c_ldapw91.gncpp2"  s2p2
    H  "h40_ldapw91.pao2"  "h_ldapw91.gncpp2"  s2p2
  }element_list

  calc_force = off
}accuracy

structure{
  spin_polarization = off # {on|off}, default=off
  spin_orbit_coupling = off # {on|off}, default=off
  unit_cell{
    unit = ang # {au|ang}
    vector{
      0.000000000000000 5.869910000000000 10.166990000000000
      0.000000000000000 11.739810000000000 0.000000000000000
      26.91954293108431 0.000000000000000 0.000000000000000
    }vector
  }unit_cell
  atom_list{
    num_atom = 40
    num_left_atom = 11
    num_right_atom = 11
    unit = ang # {au|ang}
    atoms{
      1 Au 0.000000000000000 1.467480000000000 2.541750000000000 5.50000 5.50000
      2 Au 0.000000000000000 2.934960000000000 5.083490000000000 5.50000 5.50000
      3 Au 0.000000000000000 4.402430000000000 2.541750000000000 5.50000 5.50000
      4 Au 2.396380000000000 1.467480000000000 0.847250000000000 5.50000 5.50000
      5 Au 2.396380000000000 2.934960000000000 3.388990000000000 5.50000 5.50000
      6 Au 2.396380000000000 4.402430000000000 0.847250000000000 5.50000 5.50000
      7 Au 2.396380000000000 4.402440000000000 5.930730000000000 5.50000 5.50000
      8 Au 2.396380000000000 1.467490000000000 5.930730000000000 5.50000 5.50000
      9 Au 4.792760000000000 1.467480000000000 4.236240000000000 5.50000 5.50000
      10 Au 4.792760000000000 2.934960000000000 1.694500000000000 5.50000 5.50000
      11 Au 4.792760000000000 4.402430000000000 4.236240000000000 5.50000 5.50000
      1 Au 7.189140000000000 1.467480000000000 2.541750000000000 5.50000 5.50000
      2 Au 7.189140000000000 2.934960000000000 5.083490000000000 5.50000 5.50000
      3 Au 7.189140000000000 4.402430000000000 2.541750000000000 5.50000 5.50000
      4 S 9.18299548024847 2.93495988846062 3.38975654380107 3.00000 3.00000
      5 C 10.95963958507695 2.93495988845724 3.39368730502919 2.00000 2.00000
      6 C 11.64960600108224 4.14118064210738 3.39146737287916 2.00000 2.00000
      7 C 11.64960600108237 1.72873913480768 3.39146737288114 2.00000 2.00000
    }atoms
  }atom_list
}structure

```



```

      8 C 13.02092241017248 4.14118064209453 3.38651247803053 2.00000 2.00000
      9 C 13.02092241017267 1.72873913482101 3.38651247803271 2.00000 2.00000
     10 H 11.10289648540533 0.77965812370857 3.39340713314200 0.50000 0.50000
     11 H 11.10289648540441 5.09026165320659 3.39340713314238 0.50000 0.50000
     12 H 13.56763192583338 0.77965812372957 3.38457271768971 0.50000 0.50000
     13 H 13.56763192583269 5.09026165318615 3.38457271769030 0.50000 0.50000
     14 C 13.71088882614472 2.93495988845818 3.38429254610896 2.00000 2.00000
     15 S 15.48753293108431 2.93495988845838 3.38822330844022 3.00000 3.00000
     16 Au 17.33402293108431 1.46748000000000 4.23624000000000 5.50000 5.50000
     17 Au 17.33402293108431 2.93496000000000 1.69450000000000 5.50000 5.50000
     18 Au 17.33402293108431 4.40243000000000 4.23624000000000 5.50000 5.50000
      1 Au 19.73040293108431 1.46748000000000 2.54175000000000 5.50000 5.50000
      2 Au 19.73040293108431 2.93496000000000 5.08349000000000 5.50000 5.50000
      3 Au 19.73040293108431 4.40243000000000 2.54175000000000 5.50000 5.50000
      4 Au 22.12678293108431 1.46748000000000 0.84725000000000 5.50000 5.50000
      5 Au 22.12678293108431 2.93496000000000 3.38899000000000 5.50000 5.50000
      6 Au 22.12678293108431 4.40243000000000 0.84725000000000 5.50000 5.50000
      7 Au 22.12678293108431 4.40244000000000 5.93073000000000 5.50000 5.50000
      8 Au 22.12678293108431 1.46749000000000 5.93073000000000 5.50000 5.50000
      9 Au 24.52316293108431 1.46748000000000 4.23624000000000 5.50000 5.50000
     10 Au 24.52316293108431 2.93496000000000 1.69450000000000 5.50000 5.50000
     11 Au 24.52316293108431 4.40243000000000 4.23624000000000 5.50000 5.50000
  }atoms
  }atom_list
}structure

charge_mixing{
  mixing_methods      = pulay      # {simple|pulay|anderson}, default=simple
  target              = density_matrix
  mixing_weight        = 0.10      # default=0.30
  mixing_weight_simple = 0.01      # default=0.30
  pulay_start          = 10        # default=4
  pulay_history        = 7         # default=4
}charge_mixing

atom_int{
  num_k              = 900        # default=900
  num_r              = 900        # default=900
  energy_cutoff      = 2500.0 Ry  # default=2500.0 Ry
}atom_int

file_in{
  matrices           = ""         # "filename", default=""
}file_in

file_out{
  save_at            = finalstep  # {finalstep|everystep|never}, default=never
  field_format       = cube       # {cube|dx}, default=cube
  density_scf        = off        # {on|off}, default=off
  matrices           = on         # {on|off}, default=off
  f_negf             = on         # {on|off}, default=off
}file_out

postprocessing{
  band{
    sw_band = off
    unit_cell{
      unit = ang
      vector{
        0.00000000000000 5.86991000000000 10.16699000000000
        0.00000000000000 11.73981000000000 0.00000000000000
        26.91954293108431 0.00000000000000 0.00000000000000
      }vector
    }unit_cell
    num_band_path = 1
    band_path{
      0.000 0.000 0.000 0.500 0.000 0.000 32
    }band_path
  }band
  dos{
    sw_dos = off
    method = gaussian
    gaussian_broadening = 0.1 eV
    e_range{
      501 -20.0 +20.0 eV
    }e_range
    ksampling{
      1 1 1
    }ksampling
  }dos
}

```

```

dos
mo{
    sw_mo = on
    m_bandnum = ho_lumo      # {band_num|ho_lumo}, default=ho_lumo
    band_range{
        -5  +5
    }band_range
    num_k_points = 1
    k_points{
        0.0  0.0  0.0
    }k_points
}mo
}postprocessing

```

表 3.1 平衡系の電子状態計算のための入力ファイルで使用するパラメータの説明

識別子			説明
general			計算の制御
	dft__negf		電極などの電子状態の計算を行う場合は "dft"
	system_name		名前
accuracy			計算の精度に関するパラメータ
	energy_cutoff		エネルギーカットオフ "値 (単位)" と指定。"単位" = a.u., eV, hartree, rydberg (def: rydberg)
	temperature		電子温度 "値 (単位)" と指定。"単位" = a.u., eV, K (def: K)
	scf_convergence		収束判定の基準値 "値 (単位)" と指定。"単位" = a.u., eV, hartree, rydberg (def: hartree)
	scf_criterion_type		収束判定の方法 density: 密度行列、または一電子あたりの電荷密度の変動 total: 一原子あたりの全エネルギー
	num_max_iteration		最大反復回数。 (def: 100)
	ksampling		波数 $k$ の指定
		method	指定方法 "gamma"( $\Gamma$ 点) "mesh"(後述の "mesh{...}mesh" でメッシュ数を指定)
		mesh	メッシュ数を ( $n_a$ $n_b$ $n_c$ ) と指定。 def: (1,1,1)
	xctype		交換相関汎関数の種類。 (def: ldapw91) ldapw91: LDA の PW91 型の交換相関汎関数 [22] ldapz81: LDA の PZ81 型の交換相関汎関数 [23]
	element_data_path_pao		擬原子軌道データファイルが格納されているディレクトリーへのパス
	element_data_path_vps		擬ポテンシャルデータファイルが格納されているディレクトリーへのパス
	element_type		ciao: ciao_ls:
	num_element		element_list で指定される元素の種類の数

	element_list		元素のデータファイルなどの指定 一行で元素ごとに "元素名 PAO_file VPS_file PAO_mode" と指定 PAO_file: 擬原子軌道データファイル名 VPS_file: 擬ポテンシャルデータファイル名 PAO_mode: 32p2d1"などと指定 [15]
	calc_force opt_switch		力の計算の実行 off/on/(opt) (opt: 構造最適化計算の実行)
	opt_method		cg: sd: diis/gdiis/pulay:
	opt_force_convergence force_convergence		構造最適化計算"calc_force = opt"における 収束判定の基準値 "値 (単位)"と指定。"単位" = a.u., hartree/bohr (def: 1.0e-3 hartree/bohr)
	opt_num_max_iteration		構造最適化計算"calc_force = opt"における 最大反復回数。 (def: 1)
	projection		on/off
structure			系の構造に関するパラメータ
	spin_polarization		スピン分極計算のスイッチ off/on
	spin_orbit_coupling		スピン軌道相互作用計算のスイッチ off/on
	unit_cell		
		unit	後述の単位胞の基本ベクトルの単位。 ang" (def) or au"
		vector	単位胞の基本ベクトル[上から順に、 <b>a</b> 、 <b>b</b> 、 <b>c</b> ]
	atom_list		結晶構造の指定
		num_atom	系に含まれる原子の総数
		num_left_atom	左電極とみなす原子の数
		num_right_atom	右電極とみなす原子の数
		unit	後述の原子の座標の単位。 ang" (def) or au"
		coordinate_system	internal cartesian
		extra_charge	
		atoms	原子ごとに一行でデータを指定 "番号 原子種 x座標 y座標 z座標 Q <sub>up</sub> Q <sub>dw</sub> (fixed/free)"と指定 Q <sub>up</sub> : Q <sub>dw</sub> は初期価電子分布の上下スピンの比率 fixed/free は構造最適化計算において原子座標の固定・非固定の指定
charge_mixing			密度行列または電荷密度の更新法に関するパラメータ
	mixing_methods		密度行列または電荷密度の更新法 simple: 計算された密度行列または電荷密度と現ステップの初期値との線形和 pulay/rmm-diis: pulay 法 [24] anderson: anderson 法 [25]

	target		ターゲット (def: density_matrix) density_matrix: 密度行列 density: 電荷密度
	mixing_weight		密度行列の更新の割合。(def: 0.3)
	mixing_weight_simple		simple 法で用いる密度行列の更新の割合。 (def: 0.3)
	pulay_start		pulay で使用するステップ数。(def: 4)
	pulay_history		pulay を開始するステップ数。(def: 4)
atom_int			重なり積分などの計算精度に関するパラメータ
	num_k		1次元積分の逆空間のメッシュ数
	num_r		1次元積分の実空間のメッシュ数
	energy_cutoff		1次元積分のカットオフ "値 (単位)"と指定。"単位" = a.u., eV, hartree, rydberg (def: rydberg)
file_in			継続計算のための入力ファイルに関するパラメータ
	matrices		継続計算用の密度行列などの行列要素ファイル 原子の番号"_"**は指定しない
file_out			計算結果の出力ファイルに関するパラメータ
	save_at		計算結果の保存のタイミング finalstep: SCF ループ終了後 (def) everystep: SCF ループの各ループ never: 出力なし
	matrices		ハミルトニアン, 密度行列などの行列要素の保存[継続計算およびNEGF計算で使用] off/on、原子の数だけファイルが作成される。
	f_negf		伝導計算のためのファイルの作成[NEGF計算で使用] off/on
	density_scf		電荷密度の保存 off/on
	density_val		孤立原子の電荷密度の保存 off/on
	density_pcc		部分内殻補正の保存 off/on
	potential_ext		外場ポテンシャルの保存 off/on
	potential_har		ハーत्रीポテンシャルの保存 off/on
	potential_exc		交換相関ポテンシャルの保存 off/on
	potential_tot		全ポテンシャルの保存 off/on
	gamma_matrix		ハミルトニアン行列の保存 off/on
	field_format		保存ファイル形式 cube: Gaussian CUBE 形式 dx:
postprocessing			バンド分散、状態密度、分子軌道の計算に

			関するパラメータ
	band		バンド分散計算に関する指定
		sw_band	バンド分散の計算を行うかのスイッチ
		num_show_band	示すバンドの数
		unit_cell	バンド分散の計算における単位胞の指定
		unit	後述の単位胞の基本ベクトルの単位。 "ang" (def) or au"
		vector	単位胞の基本ベクトル[上から順に、 <b><i>a</i></b> 、 <b><i>b</i></b> 、 <b><i>c</i></b> ]
		num_band_path	band_path{...}band_path で指定のバンドを計算する $k$ 点の経路の数
		band_path	バンド分散を計算する $k$ 点の経路と $k$ 点数 "始点の逆格子ベクトルに対する内部座標 終点の逆格子ベクトルに対する内部座標 $k$ 点数"と指定
	dos		状態密度計算に関する指定
		sw_dos	状態密度の計算を行うかのスイッチ
		method	状態密度の計算手法 gaussian tetrahedron
		gaussian_broadening	gaussian 法で用いる broadening 幅。 "値 (単位)"と指定 (def: 0.1 eV)
		e_range	状態密度の計算をするエネルギーの数と範囲を指定 "エネルギーの数 エネルギーの最小値 最大値 (単位)"と指定 (def: 101 -10 10 eV)。 "単位" = a.u., eV, hartree, rydberg
		ksampling	波数 $k$ の指定。 メッシュ数を ( $n_a$ $n_b$ $n_c$ ) と指定 無 指 定 の 場 合 は accuracy{ksampling{...}ksampling}accuracy の値
	mo		分子軌道計算に関する指定
		sw_mo	分子軌道の計算を行うかのスイッチ
		m_bandnum	保存する分子軌道のレベル番号の指定方法 band_num: レベル番号をレベルの底から数える ho_lumo: レベル番号をフェルミ準位を基準にして数える(def)
		band_range	保存する分子軌道のレベル番号の範囲を " $N_{\min}$ $N_{\max}$ " と指
		unit_cell	
		unit	分子軌道の計算で用いる後述の単位胞の基本ベクトルの単位 ang" (def) or au"
		vector	分子軌道の計算で用いる単位胞の基本ベクトル[上から順に、 <b><i>a</i></b> 、 <b><i>b</i></b> 、 <b><i>c</i></b> ]
		num_k_points	計算する分子軌道のサンプリング $k$ 点の数
		k_points	計算する分子軌道の各サンプリング $k$ 点の逆格子ベクトル $k_a$ $k_b$ $k_c$ と内部座標として指定

### 3.2 密度汎関数理論に基づいた伝導特性解析

伝導計算のメイン入力ファイルの例を以下に示す。パラメータの説明は表 3.2 に示す。

```
general{
  dft_negf      = negf      #{dft | negf}
  model_type    = scf_calc   #{rtb_h | gsp | input | scf_calc}
  calc_type     = trans      #{trans | iv | scf_only | off}
  output_G      = diagonal   #{diagonal | all}
  output_T      = diagonal   #{diagonal | tr | all}
}general

file{
  # tb_coordinate = coordinate.in
  # tb_parameter  = "../data/rtbh_c_parameter.in"
  # input_junc    = "../junction/junction.matrices.dat"
  # input_left    = "../electrode/electrode.matrices.dat"
  # input_right   = "../electrode/electrode.matrices.dat"
  scf_file        = condition_scf.in
  self_e_file     = none     #{'file name' | none}
}file

gra_energy{
  mesh_number     = 128
  start_energy    = -10.0000 # eV
  end_energy      = 0.0000   # eV
  im_energy       = 0.000001 # eV
}gra_energy

#iv_energy{
#  mesh_number    = 500
#  im_energy      = 0.1      # eV
#}iv_energy

surface_green_func{
  method          = 1        #{1|2}
  max_number      = 40
  criterion       = 0.00001
}surface_green_func

# band & DOS
electrode_left{
  s_band          = on        #{on | off}
  s_electrod_DOS  = on        #{on | off}
  k_point_mesh    = 32
}electrode_left

# band & DOS
electrode_right{
  s_band          = off       #{on | off}
  s_electrod_DOS  = off       #{on | off}
  k_point_mesh    = 32
}electrode_right
```

メイン入力ファイル内の"`file{scf_file}`"で指定されたファイルの例を以下に示す。パラメータの説明は表 3.3 に示す。

```
negf_scf_general{
  # calc_start    = f_DM      #{f_DM | f_density}
  read_self_file  = none      #{exist | none}

  calc_force      = off
}negf_scf_general

negf_scf_file{
  input_hs_junc   = "../junction/junction.matrices.dat"
  input_pr_junc   = "../junction/junction.vd.data"
  input_junc_cond = "../junction/junction.in.data"
#
  input_hs_left   = "../electrode/electrode.matrices.dat"
  input_pr_left   = "../electrode/electrode.vd.data"
```

```

#
input_hs_right = "../electrode/electrode.matrices.dat"
input_pr_right = "../electrode/electrode.vd.data"
#
outputt_hs_junc = "matrix/abred_matrices.dat"
output_pr_junc = scf.vd.data
#
self_e_file = "sel/sel_scf.in"
}negf_scf_file

negf_scf_accuracy{
  scf_convergence = 0.01
  num_max_iteration = 10000
#  ksampling = gamma
}negf_scf_accuracy

negf_scf_mixing{
  mixing_methods = pulay_dm          #{simple | pulay_dm | anderson_dm}
  mixing_dm_weight = 0.01
  mixing_dm_s_weight = 0.01
  pulay_mix_history = 7
  pulay_mix_start = 10
}negf_scf_mixing

negf_scf_energy_m1{
  min_energy_pos = 5.                # eV
  m_v_min_energy_pos = relative      #{real | relative}
  block_cond0{
    im_energy = 0.63                 # eV
    mesh_num_min = 5
    mesh_num_ima = 40
    mesh_num_ef = 15
    mesh_method_ef = linear          #{linear | log}
  }block_cond0
}negf_scf_energy_m1

#negf_scf_bias{
#  switch = off                      #{on | off}
#  v_left = 0.d0                     # [V]
#  v_right = 0.d0                    # [V]
#  cdm_mesh_num = 5
#  cdm_im_energy = 0.0001            # [eV]
#}negf_scf_bias

#negf_spin_rot{
#  switch_left = off
#  switch_right = off
#  boundary_g_num = 0
#  boundary_g_den = 1
#}negf_spin_rot

```

表 3.2 メイン入力ファイルで使用するパラメータの説明

タグ			説明
general			計算の制御
	dft_negf		伝導特性の解析を行う場合は"negf"
	model_type		ハミルトニアンとの与え方 scf_calc: SCF 計算 input: ASCOT による周期境界条件下での計算などで決定したハミルトニアン rtb_h: 現実的タイトバインディングモデル [19,20] gsp: GSP 型タイトバインディングモデル [21]
	calc_type		求める量の設定 trans: "gra_energy"で指定されたエネルギーでのトランスミッションを計算 iv: 電流値を計算 [バイアスの値は "file{scf_file}"で指定したファイル内で設定]

			scf_only: 開放系における電子状態のみを計算 off: 電極の電子状態計算のみを実行
	output_G		グリーン関数の出力レベル diagonal: 対角成分のみ all: 全成分
	output_T		トランスミッション行列の出力レベル diagonal: 対角成分のみ tr: トランスミッション行列の全成分 all: トランスミッション行列の全成分、 $\Gamma$ および遅延グリーン関数
	output_G&T		
	band_calc_type		固有値の計算方法 ["electrode_left/electrode_right{s_band}=on" の時に有効] general: 対称行列を用いない計算 symmetry: 対称行列を用いた計算
file			計算に用いるファイル名を指定
	scf_file		SCF 計算に必要な条件が書かれたファイル名 [このファイルを指定してもよい] "general{model_type}=scf_calc"の時に有効
	input_junc		外部で決定した中央部のハミルトニアンを収めたファイル名 "general{model_type}=input"の時に有効。原子の番号"_"**"は指定しない
	input_left		外部で決定した左電極のハミルトニアンを収めたファイル名 "general{model_type}=input"の時に有効。原子の番号"_"**"は指定しない
	input_right		外部で決定した右電極のハミルトニアンを収めたファイル名 "general{model_type}=input"の時に有効。原子の番号"_"**"は指定しない
	tb_cordinate		原子座標を設定しているファイル名 [このファイルを指定してもよい] "general{model_type}=rtb_h/gsp"の時に有効
	tb_parameter		タイトバインディング法のパラメータファイル "general{model_type}=rtb_h/gsp"の時に有効 def:   "../data/rtbh_c_parameter.in"   or "../data/gsp_c_parameter.in"
	self_e_file		
gra_energy			トランスミッションを計算するエネルギー範囲を指定
	mesh_number		分割数
	start_energy		始点のエネルギー値 (単位 eV)
	end_energy		終点のエネルギー値 (単位 eV)
	im_energy		虚部の値 (単位 eV)
iv_energy			file{scf_file}で指定されたバイアスの下での電流値を計算する際の条件



	mesh_number		積分のメッシュ数
	im_energy		虚部の値 (単位 eV)
gra_ksampling			トランスミッションを計算する波数 $k$ の指定
	point		メッシュ数を" $n_a$ $n_b$ "と指定。def: (1,1)。 "gamma"のときは $\Gamma$ 点で計算
surface_green_func			表面グリーン関数の計算条件
	method		計算方法の指定 1: 文献 rf:sgf1 の方法 2: 文献 rf:sgf2 の方法
	max_number		反復回数の最大値
	criterion		収束条件 (単位 1/eV)
electrode_left			左電極の電子状態計算
	s_band		伝導方向のバンド計算の実行 off/on
	s_electrod_DOS		状態密度計算の実行 off/on
	k_point_mesh		電子状態計算で用いる伝導方向の $k_z$ -点のメッシュ数
electrode_right			右電極の電子状態計算
	s_band		伝導方向のバンド計算の実行 off/on
	s_electrod_DOS		状態密度計算の実行 off/on
	k_point_mesh		電子状態計算で用いる伝導方向の $k_z$ -点のメッシュ数

表 3.3 メイン入力ファイル内で指定されたファイル"file{scf\_file}"で使用するパラメータの説明

negf_scf_general			SCF 計算の制御
	calc_start		計算の出発点となるデータ f_DM: "negf_scf_file{input_hs_junc}"に収められた密度行列 f_density: "negf_scf_file{input_pr_junc}"に収められた電荷密度
	read_self_file		電荷密度計算時の自己エネルギーが収められたファイルの有無 exist: "negf_scf_file{self_e_file}"で指定されたファイルが存在する場合 none: "negf_scf_file{self_e_file}"で指定されたファイルが作成される
	fft_type		フーリエ変換の計算方法 dft: 離散フーリエ変換 f_2_ft: 2成分高速フーリエ変換 fft: 高速フーリエ変換 ( $n=2, 3, 5, 7$ )
	method_charge_su m		電荷密度の計算の積分経路の指定 square: 図 2 参照
	poisson_method		ハートリーポテンシャルの計算方法 ft: フーリエ変換を用いた方法 gr: グリーン関数を用いた方法 [26]

	poisson_K_value		$K$ の値 ["poisson_method=gr"の時に有効。文献 rf:hirose 参照]
	calc_force		力の計算の実行 off/on
negf_scf_file			SCF 計算に用いるファイル名を指定
	input_hs_junc		中央部の密度行列およびハミルトニアン の初期値を収めたファイル名 原子の番号"_"**"は指定しない
	input_pr_junc		ポテンシャル、電荷密度の初期値を収めた ファイル名
	input_junc_cond		散乱領域の計算時に用いた計算条件を収めた ファイル名 散乱領域の計算時に作成される
	input_hs_left		左電極のハミルトニアンを収めたファイル名 原子の番号"_"**"は指定しない
	input_pr_left		左電極のポテンシャル [境界条件]、電荷密度を 収めたファイル名
	input_hs_right		右電極のハミルトニアンを収めたファイル名 原子の番号"_"**"は指定しない
	input_pr_right		右電極のポテンシャル [境界条件]、電荷密度を 収めたファイル名
	output_hs_junc		計算された密度行列およびハミルトニアンを 収めるファイル名 原子の番号"_"**"が付加されたファイルが原子 の数だけ作成される
	output_pr_junc		計算されたポテンシャル、電荷密度を収めるフ ァイル名
	self_e_file		電荷密度計算時の積分系路上の自己エネルギー を収めた/収めるファイル名
negf_scf_accuracy			SCF 計算の制御
	scf_convergence		収束判定の基準値 [密度行列、または一電子あ たりの電荷密度の残差により判定]
	num_max_iteratio n		反復回数の最大値
	ksampling		$k$ 点メッシュ数を" $n_a$ $n_b$ "と指定。"gamma"の ときは $\Gamma$ 点で計算 指定がない場合は電極の電子状態を計算した 際のメッシュ数を用いる
	sw_shift_chem		on/off
negf_scf_mixing			反復計算時の密度行列または電荷密度の更新 法の指定
	mixing_methods		密度行列または電荷密度の更新法 simple_dm: 計算された密度行列と現ステッ プの初期値との線形和 pulay_dm: pulay 法 (密度行列) [24] anderson_dm: anderson 法 (密度行列) [25] simple_density: 計算された電荷密度と現ス テップの初期値との線形和 pulay_density: pulay 法 (電荷密度) [24] anderson_density: anderson 法 (電荷密 度) [25]

	mixing_dm_weight		密度行列または電荷密度の更新の割合。(def: 0.1)
	mixing_dm_s_weight		simple 法で用いる密度行列または電荷密度の更新の割合。(def: 0.01)
	pulay_mix_start		pulay で使用するステップ数。(def: 4)
	pulay_mix_history		pulay を開始するステップ数。(def: 10)
negf_scf_energy_m1			"negf_scf_general{method_charge_sum}=square"の時の積分経路の指定、図 2。
	min_energy_pos		図 2 の $E_{\min}$ の設定 "m_v_min_energy_pos=relative"の時: バンド端からの相対値 $\Delta\omega_a$ を指定 "m_v_min_energy_pos=real"の時: $E_{\min}$ の値を指定
	m_v_min_energy_pos		"min_energy_pos"の値の意味 "relative": バンド端からの相対値 "real": 絶対値
	block_cond0		図 2 の経路の設定
		im_energy	積分経路の虚部。図 2 の $\delta$
		mesh_num_min	メッシュ数。図 2 の $N_1$
		mesh_num_ima	メッシュ数。図 2 の $N_2$
		mesh_num_ef	メッシュ数。図 2 の $N_3$
		mesh_method_ef	$\mu$ 上の経路の分割方法 linear: 線形メッシュで分割 log: 対数メッシュで分割
negf_scf_bias			バイアス指定 [0 V の計算の際は省略可]
	switch		on: $V(="v\_left"- "v\_right")$ における計算 off: 0 V の計算
	v_left		左電極にかけるバイアス値 (単位 V)
	v_right		右電極にかけるバイアス値 (単位 V)
	cdm_mesh_num		バイアスウィンドウ内の積分経路のエネルギーのメッシュ数
	cdm_im_energy		バイアスウィンドウ内の積分経路のエネルギーの虚部 (単位 eV) 。図 3 の $\text{Im } \omega$
	cdm_om_del_energy		実軸直上の積分経路の増加分 (単位 eV) 。図 3 の $\Delta$
negf_spin_rot			スピンの向きの初期条件 [省略可]
	switch_left		左電極側のスピンのマジョリティとマイノリティを逆転
	switch_right		右電極側のスピンのマジョリティとマイノリティを逆転
	boundary_g_num		反転の境界の割合を左から $\frac{B}{A}$ と与えた時の $B$ (整数)
	boundary_g_den		反転の境界の割合を左から $\frac{B}{A}$ と与えた時の $A$ (整数)

### 3.3 タイトバインディング法を用いた炭素系の伝導特性解析

メイン入力ファイル内の"file{tb\_coordinate}"で指定されたファイルの例を以下に示す。パラメータの説明は表 3.4 に示す。

```
tb_buffer_size{
  left_region      = 1
  junc_region      = 1
  right_region     = 1
}tb_buffer_size

tb_distance{
  between_l_c      = 0.00000          # Ang
  between_c_r      = 0.00000          # Ang
}tb_distance

tb_junc_region{
  unit_vector{
    13.58818      0.00000      0.00000
    0.00000      13.58818      0.00000
    0.00000      0.00000      4.26000
  }unit_vector
  coordinate_system = cartesian          # {cartesian|pucv}
  atom_number      = 3
  atom_list{
    1  C      0.000000      0.000000      0.000000
    2  C      0.000000      0.000000      1.420000
    3  C      0.000000      0.000000      2.840000
  }atom_list
}tb_junc_region

tb_left_region{
  unit_vector{
    13.58818      0.00000      0.00000
    0.00000      13.58818      0.00000
    0.00000      0.00000      4.26000
  }unit_vector
  coordinate_system = cartesian          # {cartesian|pucv}
  atom_number      = 3
  atom_list{
    1  C      0.000000      0.000000      0.000000
    2  C      0.000000      0.000000      1.420000
    3  C      0.000000      0.000000      2.840000
  }atom_list
}tb_left_region

tb_right_region{
  unit_vector{
    13.58818      0.00000      0.00000
    0.00000      13.58818      0.00000
    0.00000      0.00000      4.26000
  }unit_vector
  coordinate_system = cartesian          # {cartesian|pucv}
  atom_number      = 3
  atom_list{
    1  C      0.000000      0.000000      0.000000
    2  C      0.000000      0.000000      1.420000
    3  C      0.000000      0.000000      2.840000
  }atom_list
}tb_right_region
```

表 3.4 メイン入力ファイル内で指定されたファイル"file{tb\_coordinate}"で使用されるパラメータの説明

tb_buffer_size			各領域の単位胞を並べる個数
	left_region		レフト領域の個数

	junc_region		散乱領域の個数
	right_region		ライト領域の個数
tb_distance			各領域間の距離の指定 (単位 Å)
	between_l_c		レフト領域と散乱領域との間の距離
	between_c_r		ライト領域と散乱領域との間の距離
tb_junc_region			散乱領域の構造などの設定
	unit_vector		単位胞の基本ベクトルの設定 (単位 Å) 上から順に、 <b><i>a</i></b> 、 <b><i>b</i></b> 、 <b><i>c</i></b> 左から順に、 <i>x</i> 座標、 <i>y</i> 座標、 <i>z</i> 座標
	coordinate_system		座標系の指定 <b>cartesian</b> : <b>atom_list</b> "で指定される座標を実座標値で指定 <b>pucv</b> : 内部座標値で指定
	atom_number		セル内の原子数
	atom_list		原子座標の設定 <b>"coordinate_system=cartesian"</b> : 座標を実座標値で指定 (単位 Å) <b>"coordinate_system=pucv"</b> : 内部座標値[0 から 1 までの数値]で指定 左から順に、番号、原子種、 <i>x</i> 座標、 <i>y</i> 座標、 <i>z</i> 座標
tb_left_region tb_right_region			レフト/ライト領域の構造などの設定
	unit_vector		単位胞の基本ベクトルの設定 (単位 Å) 上から順に、 <b><i>a</i></b> 、 <b><i>b</i></b> 、 <b><i>c</i></b> 左から順に、 <i>x</i> 座標、 <i>y</i> 座標、 <i>z</i> 座標
	coordinate_system		座標系の指定 <b>cartesian</b> : <b>atom_list</b> "で指定される座標を実座標値で指定 <b>pucv</b> : 内部座標値で指定
	atom_number		セル内の原子数
	atom_list		原子座標の設定 <b>"coordinate_system=cartesian"</b> : 座標を実座標値で指定 (単位 Å) <b>"coordinate_system=pucv"</b> : 内部座標値(0 から 1 までの数値)で指定 左から順に、番号、原子種、 <i>x</i> 座標、 <i>y</i> 座標、 <i>z</i> 座標

## 4. 計算例

ここでいくつかの計算例を示す。計算実行体格納ディレクトリー"bin"に第8章に記した計算実行体 `ascot_v430` が、データファイル格納ディレクトリー"data"に擬原子軌道などのデータファイルがあるものとする。また、サンプルデータ格納ディレクトリー `samples` にあるディレクトリーをそのまま作業用ディレクトリー"work"にコピーして使用するものとする。

### 4.1 ベンゼンジチオール分子架橋系



図 4.1 ベンゼンジチオール分子架橋系の結晶構造。濃色の原子がレフト領域、ライト領域として扱われる Au 原子を表す

まず、図 4.1 に示す 1 次元 Au 細線の電極間にベンゼンジチオール分子 [ $\text{C}_6\text{H}_4\text{S}_2$ ] が架橋された系の伝導特性を求める。これはディレクトリー `samples/BDT_1d` にある例題である。このディレクトリーには 3 つのディレクトリー["trans"、"junction"、"electrode"]がある。ディレクトリー"junction"では図 2.5 の Procedure 1-2 の計算を、ディレクトリー"electrode"では図 2.5 の Procedure 1-1 の計算を行う。これらの計算の後に、ディレクトリー"trans"において図 2.5 の Procedure 2 および 3 の計算を行う。入力ファイル内のデータの説明は第 9 章にあるので、ここでは作成時の注意点と結果について述べることにする。

#### 4.1.1 Procedure 1-2

最初にディレクトリー"junction"における、散乱領域の周期境界条件下での電子状態計算[通常のパンド計算]について述べる。Procedure 2 の計算の初期値を求めるために実行される。

##### 入力ファイル

計算条件は"condition\_jun.in"で設定される。

周期系に対する電子状態計算を行うので

```
general{
    dft__negf    = dft
    ...
}general
```

と設定する。

`accuracy{...}accuracy`内の `element_data_path_pao` および `element_data_path_vps` でディレクトリー"data"の相対位置などを設定する。このディレクトリー"junction"の階層を変えて実行する場合は書き換える必要がある。

表 4.1 計算に用いられた擬原子軌道のカットオフ半径 $r_c$ と $s$ 、 $p$ および $d$ 軌道の軌道の数( $n_s$ 、 $n_p$ および $n_d$ )

	$r_c$ [a.u.]	$n_s$	$n_p$	$n_d$
Au	6.0	2	1	1
S	5.5	2	2	2
C	4.0	2	2	—
H	4.0	2	2	—

この計算で用いられる擬原子軌道の数などを表 12 に示す。これは次のような意味を持つ。 $r_c$ はカットオフ半径を表し、孤立 Au 原子の場合電子の波動関数は6.0 a.u.よりも外にしみ出していない。 $n_s$ は $s$ 軌道に対する軌道として節を持たないものと節を一つもつものの2つを用いることを意味する[図 6 参照]。 $n_p$ と $n_d$ も同様である。これを入力ファイルの `accuracy{element_list{...}element_list}accuracy`内の"*PAO\_mode*"に  $\beta(n_s)p(n_p)d(n_d)$ と指定する。例えば

```
accuracy{
  ...
  num_element      = 4
  element_list{
    Au "au60_ldapw91.pao2"      "au_ldapw91.gncpp2"      s2p1d1
    S  "s55_ldapw91.pao2"      "s_ldapw91.gncpp2"      s2p2d2
    C  "c40_ldapw91.pao2"      "c_ldapw91.gncpp2"      s2p2
    H  "h40_ldapw91.pao2"      "h_ldapw91.gncpp2"      s2p2
  }element_list
}accuracy
```

である。これらの値 $[n_s, n_p, n_d]$ を大きくとることによって精度よい計算を行うことができる。ただし、表 1 に示した $m_x$ の値を超えて指定することはできない。

`!structure{atom_list{...}atom_list}structure`内に散乱領域の原子構造を設定する。この例では散乱領域に 40 原子あり、その座標などを

```
structure{
  ...
  unit_cell{
    unit      = ang      # {au|ang}
    vector{
      0.000000000000000  5.869910000000000  10.166990000000000
      0.000000000000000  11.739810000000000  0.000000000000000
      26.91954293108431  0.000000000000000  0.000000000000000
    }vector
  }unit_cell
  atom_list{
    num_atom      = 40
    num_left_atom = 11
    num_right_atom = 11
    unit          = ang      # {au|ang}
    atoms{
      1 Au  0.000000000000000  1.467480000000000  2.541750000000000  5.50000  5.50000
      2 Au  0.000000000000000  2.934960000000000  5.083490000000000  5.50000  5.50000
      3 Au  0.000000000000000  4.402430000000000  2.541750000000000  5.50000  5.50000
      ...
      9 Au  24.52316293108431  1.467480000000000  4.236240000000000  5.50000  5.50000
      10 Au 24.52316293108431  2.934960000000000  1.694500000000000  5.50000  5.50000
      11 Au 24.52316293108431  4.402430000000000  4.236240000000000  5.50000  5.50000
    }atoms
  }atom_list
}structure
```

と指定する。伝導方向は $c$ 軸方向に設定される。これらの原子は $c$ 軸方向に順番に並んでいる[この例のように $x$ 座標は正で、小さい順番に並んでいる]必要がある。このうち左右の数個の原子は電極の構造を含む。この例では電

極の単位胞の数(11 個)の原子がそれにあたる。また、番号に意味は無い。  
最後に、後の伝導計算[Procedure 2 & 3]のために

```
file_out{
    ...
    matrices      = on          # {on|off}, default=off
    f_negf         = on          # {on|off}, default=off
}file_out
```

としておく。

## 計算の実行

この計算は、"% 計算実行体 入力ファイル名"と指定することで実行される。例えば

```
% mpirun -np 1 ../../bin/ascot_v430 condition_jun.in
```

とする。

計算の入力条件・途中経過・出力ファイルの一覧は"g.output\_0001"に出力される。計算の収束状況を見るためには、例えば

```
% grep "#d" g.output_0001
```

と入力した結果

```
...
#d####      32      0.000012200908      0.00000048833 ####d#
#d####      33      0.000009061715      0.00000216777 ####d#
#d####      34      0.000005615862      0.00000035124 ####d#
#d####      35      0.000001668331      0.00000002033 ####d#
#d####      36      0.000000823734      0.00000002296 ####d#
```

を見ればよい。最初の整数は反復回数、その後の数値が密度行列およびトータルエネルギーの残差値を表す。密度行列の残差値が、入力ファイルに指定した収束判定の基準値を満たすと反復計算のループの外に出る。

## 出力ファイル

出力ファイルの一覧は"g.output\_0001"に書かれている。入力ファイルに指定したものは"g.output\_0001"の最初に、それ以外のものは最後に書かれている。

作成された"junction.in.data"、"junction.matrices.dat\_\*\*\*"、"junction.vd.data"がこの後の伝導特性の計算に必要なデータファイルである。"junction.in.data"には原子座標など伝導計算に引き渡す入力データが格納されている。そして、"junction.matrices.dat\_\*\*\*" ["\*\*\*"は原子の番号]には、重なり積分、ハミルトニアン、運動エネルギーからの寄与、そして、計算されたハミルトニアンおよび密度行列が、"junction.vd.data"には散乱領域の計算されたポテンシャルおよび電荷密度が格納されている。

### 4.1.2 Procedure 1-1

次にディレクトリー"electrode"において、レフト・ライト領域の電子状態の計算を行う。この例では左右の電極が同じなので、以下の作業で同時に求めることができる。

## 入力ファイル

計算条件は"condition\_ele.in"で設定される。伝導計算のために Procedure 1-2 の入力条件と整合性をとらなければならない箇所がある。

βstructure{atom\_list{...}atom\_list}structure"内にレフト・ライト領域の原子構造を 3 倍の周期分を、例のように設定する。この例では原子数が 33 原子あり、その座標などを

```
structure{
    ...
    atom_list{
        num_atom      = 33
        num_left_atom  = 11
        num_right_atom = 11
        unit           = ang      # {au|ang}
        atoms{
```



```

1 Au 0.00000 1.46748 2.54175 5.50000 5.50000
2 Au 0.00000 2.93496 5.08349 5.50000 5.50000
3 Au 0.00000 4.40243 2.54175 5.50000 5.50000
...
9 Au 19.17104 1.46748 4.23624 5.50000 5.50000
10 Au 19.17104 2.93496 1.69450 5.50000 5.50000
11 Au 19.17104 4.40243 4.23624 5.50000 5.50000
}atoms
}atom_list
}structure

```

と指定する。この際、左側の原子 11 個はディレクトリー"junction"における計算で用いられた原子位置と一致している必要がある。同様に右側の原子 11 個も単位胞の端からの相対位置がディレクトリー"junction"における計算で用いられたものと一致していなければならない。

それから、エネルギーカットオフの値が一致していること、つまり

```

accuracy{
    energy_cutoff      = 100.0 Ry
    ...
}accuracy

```

という指定が一致していることが望ましい。この値によってポテンシャルなどを与える実空間上のメッシュ点が決定され、この点がそろっていることが望ましいためである。[メッシュ点の数が異なっている場合は、Procedure 2 の計算の際、補間したハートリーポテンシャルのデータを用いてポアソン方程式を解くことになる。]

## 計算の実行および出力ファイル

例えば、

```
% mpirun -np 1 ../../bin/ascot v430 condition ele.in
```

によって計算が実行される。計算の過程に関することは Procedure 1-2 と同じである。作成された"electrode.matrices.dat\_\*\*\*"、"electrode.vd.data"がこの後の計算に必要なデータファイルである。"electrode.matrices.dat\_\*\*\*" ["\*\*\*"は原子の番号]に、電極の重なり積分およびハミルトニアンなどが、"electrode.vd.data"には散乱領域のハートリーポテンシャルを求める際の境界条件が格納されている。また、電極のフェルミエネルギーは"energy.dat"に

```

Fermi energy
Ef =      -0.1749903467464314 [au];      -4.7617316585924092 [eV]
...

```

と与えられている。

### 4.1.3 Procedure 2 & 3

ディレクトリー"trans"における、半無限電極につながった散乱領域の電子状態と対象としている系の伝導特性の求め方を述べる。

## 入力ファイル

計算の基本的な条件は"condition.in"で設定される。

開放系における電子状態の計算と伝導特性を求めるので

```

general{
    dft_negf      = negf
    ...
}general

```

と設定する。

散乱領域の密度行列の初期値やレフト・ライト領域のハミルトニアンなどが収められているファイルの指定は、"condition.in"内の

```

file{
    scf_file      = condition_scf.in
    ...
}file

```

で指定されるファイル"condition\_scf.in"内で、

```

negf_scf_file{
  input_hs_junc   = "../junction/junction.matrices.dat"
  ...
  input_hs_left   = "../electrode/electrode.matrices.dat"
  ...
  input_hs_right  = "../electrode/electrode.matrices.dat"
  ...
}negf_scf_file

```

と行う。Procedure 1 で作成されたファイルには原子の番号"\_"\*\*"が付加されているが、それを書く必要はない。またこのディレクトリー"trans"はディレクトリー"junction"と並列におかれていなければならない。これは擬原子軌道などのデータファイルを Procedure 1-2 で指定された通りのものを用いるためである。もし階層を変えるのであれば、

```

negf_scf_file{
  ...
  input_junc_cond = "../junction/junction.in.data"
  ...
}negf_scf_file

```

で指定される"../junction/junction.in.data"内の擬原子軌道などのデータファイルを指定している箇所を書き変える必要がある。

## 計算の実行

この計算は、これまでと同様に"% 計算実行体 入力ファイル名"と指定することで実行される。例えば

```
% mpirun -np 1 ../../bin/ascot v430 condition.in
```

とする。

計算の入力条件・途中経過・出力ファイルの一覧は"g.output\_0001"に出力される。計算の収束状況を見るためには、例えば

```
% grep "#d" g.output_0001
```

と入力した結果

```

...
#dm###      23      0.0005105944768583      0.638341      ###dm#
#dm###      24      0.0003940050841831      0.638254      ###dm#
#dm###      25      0.0001952377310782      0.612721      ###dm#
#dm###      26      0.0001918906191853      0.612667      ###dm#
#dm###      27      0.0000208416680254      0.336218      ###dm#

```

を見ればよい。これらの数値は反復回数、密度行列の収束残差値、最大残差値を与える成分の値を表す。密度行列の残差値が、入力ファイルに指定した収束判定の基準値を満たすと反復計算のループの外に出る。

## 出力ファイル

出力ファイルの一覧は"g.output\_0001"に書かれている。入力ファイルに指定したものは"g.output\_0001"の最初に、それ以外のものは最後に書かれている。

トランスミッションの結果は"trans.dat"に

```

+ total
+++++
-0.996093750000000D+01      0.742404561265822D+00
-0.988281250000000D+01      0.848537146781550D+00
-0.980468750000000D+01      0.350765387893932D+00
-0.972656250000000D+01      0.248598711469367D-01
-0.964843750000000D+01      0.213371342648196D+00
...

```

というように出力されている。第一列は電子の入射エネルギー(単位: eV)、第二列にはそのエネルギーに対するトランスミッションの値である。この結果は図 4.2 の通りである。

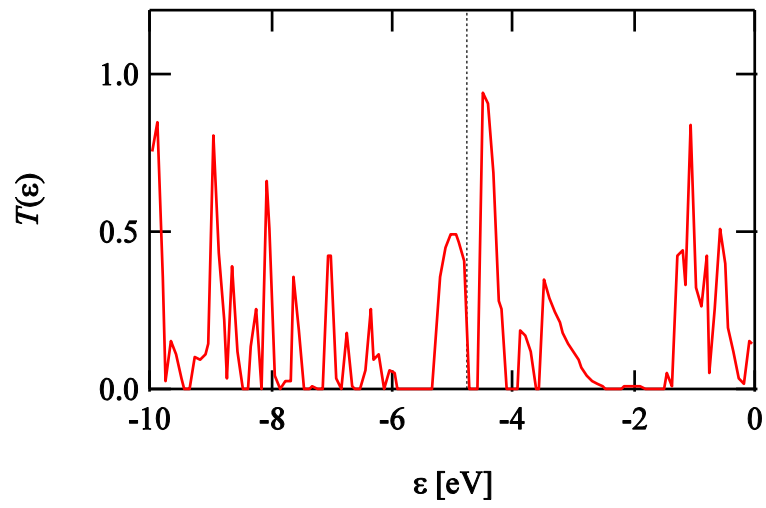


図 4.2 ベンゼンジチオール分子架橋系のトランスミッション。点線は電極のフェルミエネルギーを表す

## 4.2 Au(111)表面に挟まれたベンゼンジチオール分子

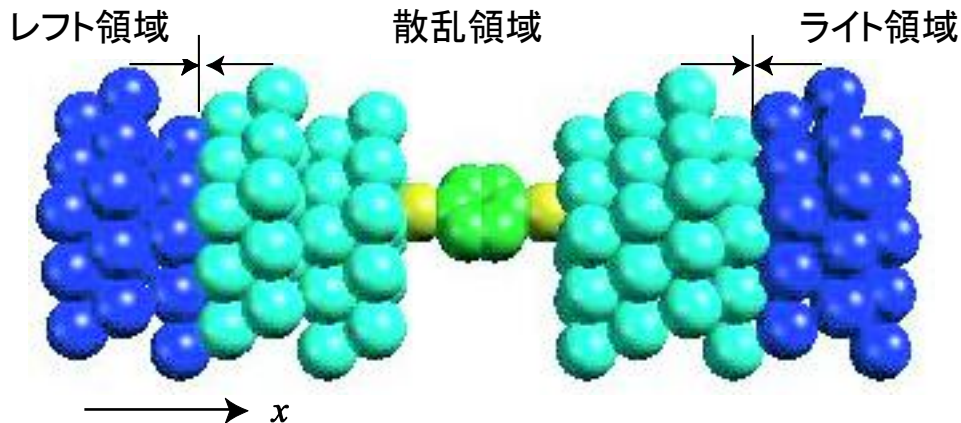


図 4.3 Au(111)表面に挟まれたベンゼンジチオール分子架橋系の結晶構造。濃色の原子がレフト領域、ライト領域として扱われる Au 原子を表す

ここでは、図 4.3 に示す Au(111)表面間にベンゼンジチオール分子[C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>S<sub>2</sub>]が架橋された系の伝導特性を求める。ここでは、複数波数 $k$ を用いた、ディレクトリー`Bamples/BDT_k`にある例題について述べる。このディレクトリーには 3 つのディレクトリー["trans", "junction", "electrode"]がある。前節の例題と同様、ディレクトリー "junction"では図 5 の Procedure 1-2 の計算を、ディレクトリー "electrode"では図 5 の Procedure 1-1 の計算を行う。これらの計算の後に、ディレクトリー "trans"において図 5 の Procedure 2 および 3 の計算を行う。

### 4.2.1 Procedure 1-2

最初にディレクトリー "junction"における、散乱領域の周期境界条件下での電子状態計算[通常のパンド計算]について述べる。

#### 入力ファイル

計算の条件は"condition\_jun.in"で設定される。

前節と異なる点は、波数 $k$ のメッシュ数を与える

```
accuracy{
    ...
    ksampling{
        method = mesh # {gamma|mesh}, default=gamma
        mesh{
            3 3 1      # na nb nc
        }mesh
    }ksampling
    ...
}accuracy
```

と設定されていることである。伝導方向は $c$ 軸方向に設定されているので、その方向は"1"としている。

#### 計算の実行

この計算は、前節同様、"% 計算実行体 入力ファイル名"と指定することで実行される。例えば

```
% mpirun -np 1 ../../bin/ascot v430 condition_jun.in
```

とする。

計算の収束状況を見るためには、例えば

```
% grep "#d" g.output 0001
```

と入力した結果

...				
#d####	36	0.000002688432	0.000000168040	####d#
#d####	37	0.000001437434	0.000000005136	####d#
#d####	38	0.000001382855	0.000000024391	####d#
#d####	39	0.000001296308	0.000000068078	####d#
#d####	40	0.000000259689	0.000000028380	####d#

を見ればよい。最初の整数は反復回数、その後の数値が密度行列およびトータルエネルギーの残差値を表す。密度行列の残差値が、入力ファイルに指定した収束判定の基準値を満たすと反復計算のループの外に出る。

## 出力ファイル

出力ファイルは前節に示した $\Gamma$ 点計算のものと同一である。入力ファイルに指定したものは"output\_0001"の最初に、それ以外のは最後に書かれている。

作成された"junction.in.data"、"junction.matrices.dat\_\*\*\*"、"junction.vd.data"がこの後の伝導特性の計算に必要なデータファイルである。"junction.in.data"には原子座標など伝導計算に引き渡す入力データが格納されている。そして、"junction.matrices.dat\_\*\*\*" ["\*\*\*"は原子の番号]には、重なり積分、ハミルトニアン、運動エネルギーからの寄与、そして、計算されたハミルトニアンおよび密度行列が、"junction.vd.data"には散乱領域の計算されたポテンシャルおよび電荷密度が格納されている。

## 4.2.2 Procedure 1-1

次にディレクトリー"electrode"において、レフト・ライト領域の電子状態の計算について述べる。

## 入力ファイル

計算の条件は"condition\_ele.in"で設定される。

Procedure 1-2 と同様、波数 $k$ のメッシュ数は

accuracy{
...
ksampling{
method = mesh # {gamma mesh}, default=gamma
mesh{
3 3 1 # na nb nc
}mesh
}ksampling
...
}accuracy

と設定する。伝導方向は $c$ 軸方向に設定されているので、その方向は"1"としている。この波数 $k$ のメッシュ数が次の伝導計算 Procedure 2 における $k$ 点のデフォルトになる。

## 計算の実行および出力ファイル

例えば、

% mpirun -np 1 ../../bin/ascot_v430 condition_ele.in
--

によって計算が実行される。作成された"electrode.matrices.dat\_\*\*\*"、"electrode.vd.data"がこの後の計算に必要なデータファイルである。"electrode.matrices.dat\_\*\*\*" ["\*\*\*"は原子の番号]には、電極の重なり積分およびハミルトニアンなどが、"electrode.vd.data"には散乱領域のハートリーポテンシャルを求める際の境界条件が格納されている。電極のフェルミエネルギーは"energy.dat"に

Fermi energy
Ef = -0.1430852447404745 [au]; -3.8935492867240398 [eV]
...

と与えられている。

## 4.2.3 Procedure 2 & 3

ディレクトリー"trans"における、半無限電極につながった散乱領域の電子状態と対象としている系の伝導特性の求め方を述べる。この際、電子状態計算と伝導特性[トランスミッションや $I$ - $V$ 曲線]を求める計算とで、波数 $k$ のメ

ッシュ数を指定する箇所が異なるので注意していただきたい。

## 入力ファイル

計算の基本的な条件は"condition.in"で設定される。

開放系における電子状態の計算で用いる波数 $k$ のメッシュ数は、"condition.in"内の

```
file{
  scf_file          = condition_scf.in
  ...
}file
```

で指定されるファイル"condition\_scf.in"内で、

```
negf_scf_accuracy{
  ...
  ksampling = 3 3
}negf_scf_accuracy
```

のように設定する。この値が設定されていない場合は、電極の電子状態を計算した際[Procedure 1-1]に用いたメッシュ数が用いられる。サンプルファイルでは

```
negf_scf_accuracy{
  ...
  # ksampling = 3 3
}negf_scf_accuracy
```

のようにコメントされているので、Procedure 1-1 で用いた $3 \times 3$ のメッシュ点が用いられる。

伝導特性[トランスミッションや $I$ - $V$ 曲線]を求める計算で用いる波数 $k$ のメッシュ数は、"condition.in"において

```
gra_ksampling{
  point          = 3 3
}gra_ksampling
```

と設定する。この値が設定されていない場合は、 $\Gamma$ 点のみの計算が実行される。

## 計算の実行

この計算は、これまでと同様に"% 計算実行体 入力ファイル名"と指定することで実行される。例えば

```
% mpirun -np 1 ../../bin/ascot v430 condition.in
```

とする。

計算の入力条件・途中経過・出力ファイルの一覧は"g.output\_0001"に出力される。計算の収束状況を見るためには、例えば

```
% grep "#d" g.output 0001
```

と入力した結果

```
...
#dm###      23      0.0001053656805630      0.000067      ###dm#
#dm###      24      0.0001061999441284      0.000052      ###dm#
#dm###      25      0.0001204941350017      0.693480      ###dm#
#dm###      26      0.0001075972855032      0.271337      ###dm#
#dm###      27      0.0000991976345677      0.271339      ###dm#
```

を見ればよい。密度行列の残差値が入力ファイルに指定した収束判定の基準値を満たすと反復計算のループの外に出る。

## 出力ファイル

出力ファイルの一覧は"g.output\_0001"に書かれている。入力ファイルに指定したものは"g.output\_0001"の最初に、それ以外のものは最後に書かれている。

トランスミッションの結果は"trans.dat"に

```
+ total
+++++
-0.996093750000000D+01      0.324635168487201D+00
-0.988281250000000D+01      0.244005640071237D+00
-0.980468750000000D+01      0.202001574112709D+00
-0.972656250000000D+01      0.740818564491298D+00
-0.964843750000000D+01      0.209203391489906D+00
```



スミッションの値である。

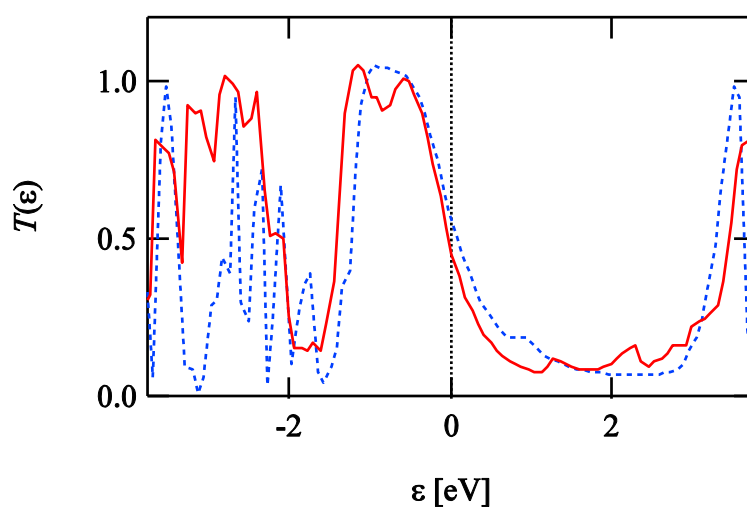


図 4.4 Au(111)表面に挟まれたベンゼンジチオール分子架橋系のトランスミッション。 実線(破線)は波数として $3 \times 3$ のメッシュ点( $\Gamma$ 点のみ)を指定したときの計算結果である。 電極のフェルミエネルギーを 0 [eV]としている。



### 4.3 C<sub>60</sub> 内包カーボンナノチューブ

図 4.5 に示す C<sub>60</sub> 内包カーボンナノチューブの伝導特性を求める。これはディレクトリ `samples/C_NT` にある例題である。文献 `rf:okada,rf:hamada` で提案されたタイトバインディングパラメータを用いて計算する。タイトバインディングパラメータを用いた計算では Procedure 1 および Procedure 2 は省略される。

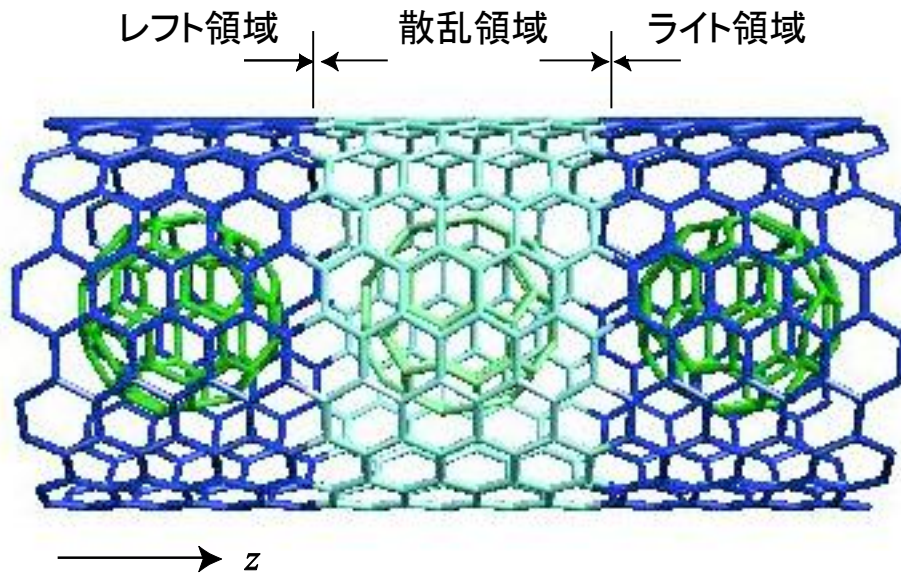


図 4.5 C<sub>60</sub> 内包カーボンナノチューブの結晶構造。濃色の原子がレフト領域、ライト領域として扱われる C 原子を表す

この系に対する結果の詳細は文献 `rf:kko` にある。

#### 4.3.1 Procedure 3

##### 入力ファイル

基本的な条件は `"condition.in"` で設定される。

文献 `rf:okada,rf:hamada` で提案されたタイトバインディングパラメータを用いて伝導特性を求めるので

```
general{
    dft__negf    = negf
    model_type   = rtb_h
    ...
}general
```

と設定する。この計算では必ずパラメータのデータファイル `"rtbh_c_parameter.in"` を用いる。このデータファイルは

```
file{
    ...
    tb_parameter    = "../data/rtbh_c_parameter.in"
    ...
}file
```

と指定される。ファイルの指定が行わなければデフォルトとして `"../data/rtbh_c_parameter.in"` が設定されるので、この例の通りのディレクトリーの階層で計算を実行する時は省略が可能である。

結晶構造は

```
file{
    tb_coordinate    = coordinate.in
    ...
}
```

```
}file
```

で指定されるファイル"coordinate.in"内で、図 12 に示す領域に分けて設定される。例えば

```
tb_junc_region{
    ...
    atom_list{
        ...
        158  C    3.397610    5.883531    7.383733
        159  C    2.099490    6.461566    7.383733
        160  C    1.413208    6.645490    8.614355
        161  C1   1.174050    0.381472    7.628316
        162  C1   0.725603   -0.998707   7.628316
        163  C1  -0.725603   -0.998707   7.628316
        ...
    }atom_list
}tb_junc_region
...
tb_left_region{
    ...
}tb_left_region
...
tb_right_region{
    ...
}tb_right_region
```

である。原子の記号として"C"と表記されたものはナノチューブの C 原子を、"C1"と表記されたものは内包された C<sub>60</sub>の C 原子を表す。伝導方向はc軸方向に設定されている。

### 計算の実行

この計算は、これまでと同様に"% 計算実行体 入力ファイル名"と指定することで実行される。例えば

```
% mpirun -np 1 ../../bin/ascot_v430 condition.in
```

とする。計算の入力条件・途中経過・出力ファイルの一覧は"g.output\_0001"に出力される。

### 出力ファイル

出力ファイルの一覧は"g.output\_0001"に書かれている。入力ファイルに指定したものは"g.output\_0001"の最初に、それ以外のものは最後に書かれている。

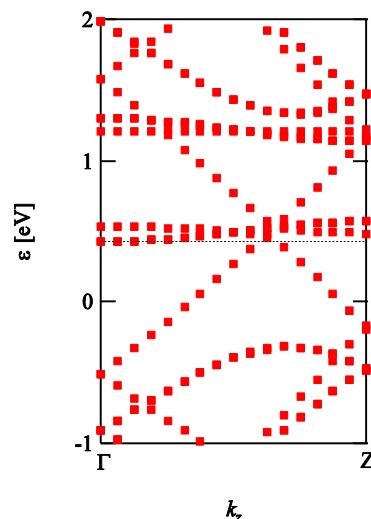


図 4.6 C<sub>60</sub>内包カーボンナノチューブのバンド図。点線は電極のフェルミエネルギーを表す。

ライト領域のバンド構造の結果は"ev\_r.dat"に

```
* cp_r= 0.427803882215954
*****
```

```

+ n_k= 1
++++
0 -20.2256546776683
0 -19.7252029661439
0 -19.7252026564596
0 -19.7130313711383
0 -19.4511039643908
...

```

というように出力されている。最初の"cp\_r"はライト領域のフェルミエネルギー(単位: eV)が出力されている。そして第一列は $k_z$ を表す番号、第二列にはそれに対するエネルギーレベル(単位: eV)である。その結果は図 13 の通りである。レフト領域のバンド構造は"ev\_l.dat"に同様に格納される。

トランスミッションの結果は"trans.dat"に

```

+ total
++++
0.500000000000000D-02 0.199997818598244D+01
0.150000000000000D-01 0.199997819758577D+01
0.250000000000000D-01 0.199997820836009D+01
0.350000000000000D-01 0.199997821829504D+01
0.450000000000000D-01 0.199997822737113D+01
...

```

というように出力されている。第一列は電子の入射エネルギー(単位: eV)、第二列にはそのエネルギーに対するトランスミッションの値である。その結果は図 4.7 の通りである。

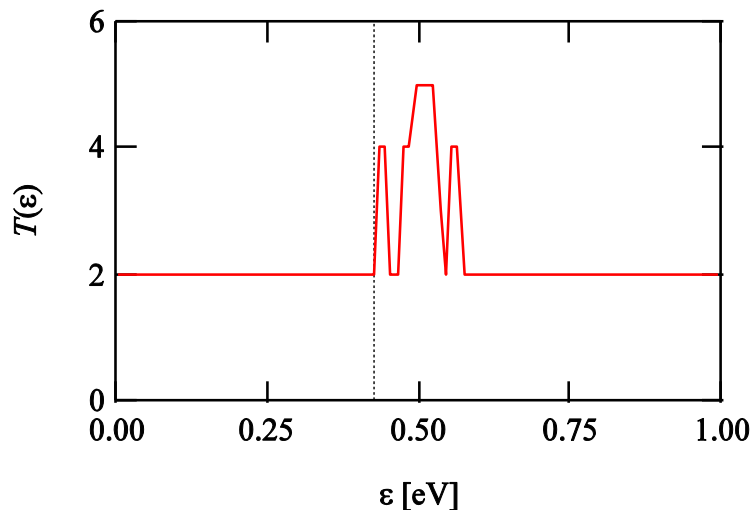


図 4.7 C<sub>60</sub>内包カーボンナノチューブのトランスミッション。点線は電極のフェルミエネルギーを表す

"cordinate.in"に指定した全炭素原子に対する状態密度は"em\_gf.dat"に

```

+ total
++++
0.500000000000000D-02 0.131510676799347D-02
0.150000000000000D-01 0.131440719788078D-02
0.250000000000000D-01 0.131375763484580D-02
0.350000000000000D-01 0.131315870490883D-02
0.450000000000000D-01 0.131261158030395D-02
...

```

というように出力されている。第一列は電子の入射エネルギー(単位: eV)、第二列にはそのエネルギーに対する状態密度(単位: 1/eV)の値である。その結果は図 4.8 の通りである。

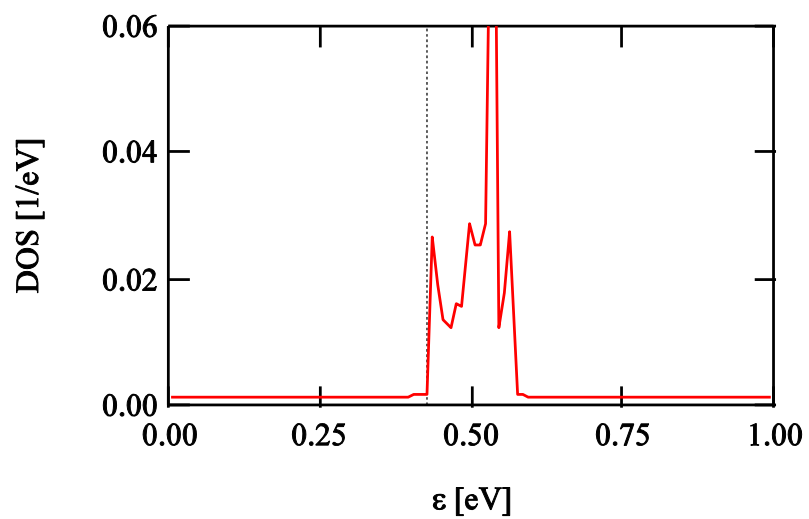


図 4.8  $C_{60}$  内包カーボンナノチューブの状態密度。点線は電極のフェルミエネルギーを表す。

## 5. 参考文献

- [1] H. Kondo, H. Kino and T. Ohno: Phys. Rev. B (2005) 115413.
- [2] H. Kondo, J. Nara, H. Kino and T. Ohno: Jpn. J. Appl. Phys. (2008) 4792.
- [3] H. Kondo, H. Kino and T. Ohno: Thin Solid Films **465** (2004) 342.
- [4] W.T. Geng, H. Kondo, J. Nara, and T. Ohno: Phys. Rev. B (2005) 125421.
- [5] H. Kondo, H. Kino, J. Nara, T. Ozaki and T. Ohno: Phys. Rev. B (2006) 235323.
- [6] H. Kondo, J. Nara, H. Kino and T. Ohno: J. Chem. Phys. (2008) 064701.
- [7] W.T. Geng, M. Oda, J. Nara, H. Kondo, and T. Ohno: J. Phys. Chem. B 112, 2795 (2008).
- [8] H. Kondo, H. Kino, J. Nara and T. Ohno: Appl. Surf. Sci. (2008) 7985.
- [9] H. Kondo, J. Nara, H. Kino and T. Ohno: J. Phys.: Condens. Matter , 064220 (2009).
- [10] H. Kondo, J. Nara and T. Ohno: Phys. Rev. B (2010) 085318.
- [11] H. Kondo, J. Nara and T. Ohno: J. Phys. Chem. C (2011) 6886.
- [12] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge Univ. Press, 1995.
- [13] M. P. López Sancho, J. M. López Sancho, and J. Rubio: J. Phys. F (1984) 1205.
- [14] M. P. López Sancho, J. M. López Sancho, and J. Rubio: J. Phys. F (1985) 951.
- [15] T. Ozaki: Phys. Rev. B (2003) 155108.
- [16] The pseudo atomic orbitals are generated using the CIAO code, which is developed within the RSS21 project supported by MEXT of the Japanese government. See the website <http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/en/index.html>.
- [17] N. Troullier and J. L. Martins: Phys. Rev. B (1991) 1993.
- [18] L. Kleinman and D. M. Bylander: Phys. Rev. Lett. (1982) 1425.
- [19] S. Okada and S. Saito: J. Phys. Soc. Jpn. (1995) 2100.
- [20] N. Hamada, M. Yamaji, S. Okada, S. Saito: Proc. of International Symposium on Nanonetwork Materials: Fullerenes, Nanotubes, and Related Systems, eds., S. Saito, T. Ando, Y. Iwasa, K. Kikuchi, M. Kobayashi, and Y. Saito, pp. 201, January 2001, Kamakura (American Institute of Physics, New York, 2001).
- [21] C. H. Xu, C. Z. Wang, C. T. Chan, and K. M. Ho: J. Phys.: Condens. Matter. (1989) 6047.
- [22] J. P. Perdew and Y. Wang: Phys. Rev. B (1992) 13244.
- [23] J. P. Perdew and A. Zunger: Phys. Rev. B (1981) 5048. [プレースホルダ 1]
- [24] G. Kresse and J. Furthmüller: Phys. Rev. B (1996) 11169.
- [25] D. G. Anderson, J. Assoc. Computing Machinery, (1965) 547.
- [26] K. Hirose and M. Tsukada: Phys. Rev. B (1995) 5278.