

第一原理伝道計算によるピーポッドの輸送特性評価**Transport characterization of peapod based on first-principles calculation**阪大工¹, °岩瀬 滋¹, 小野 倫也¹Osaka Univ.¹, °Shigeru Iwase¹, Tomoya Ono¹E-mail: iwase@cp.prec.eng.osaka-u.ac.jp

ピーポッドとは、フラーレンがカーボンナノチューブに内包された構造を持つ新規炭素系材料であり、ナノチューブのカイラリティや半径、フラーレンの大きさなどに依存して、半導体から金属まで多様な電子状態を取ることが理論計算と実験の両面から明らかにされてきた[1,2]。しかし、これまでのピーポッドの電気伝導特性に関する研究はタイトバインディング近似に基づく、いくつかの報告例[2,3]があるのみで、第一原理計算による伝導特性の詳細な議論はされていなかった。その理由としては、ピーポッドのモデルサイズが大きいことから既存の計算手法では扱うことが困難であったためである。そこで今回、Shifted COCG 法[4]と呼ばれる数値解法を、伝導計算手法に応用することで、計算時間の大幅な高速化を図ることに成功した。本発表では、今回新たに開発した手法を用いて金属に C60 フラーレンを内包したピーポッドの第一原理輸送特性計算を行ったので、その結果を報告する。

- [1] Hornbaker *et al.*, Science **295**, 5556 (2002)
- [2] A. Rochefort, Phys. Rev. B **67**, 115401 (2003)
- [3] H. Kondo *et al.*, Phys. Rev. B **71**, 115413 (2005)
- [4] R. Takayama *et al.*, Phys. Rev. B **73**, 165108 (2006)