

Table of Contents

如何在发表论文时正确引用QuantumATK软件	1
引用ATK-DFT□ATK-SE方法	1
引用ATK-Classical方法	1
如何引用VNL	1
其他相关的文献	1

如何在发表论文时正确引用QuantumATK软件

引用ATK-DFT/ATK-SE方法

文章中报道的来自QuantumATK软件的研究结果都应该正确地引用QuantumATK软件和相关的描述方法的文章，主要是以下引用：

- Atomistix ToolKit version XXX, QuantumWise A/S (www.quantumwise.com).
- M. Brandbyge, J.-L. Mozos, P. Ordejón, J. Taylor, and K. Stokbro, *Phys. Rev. B* **65**, 165401 (2002) [\[DOI\]](#)

其中XXX应该用该研究计算时采用的版本号替换。

如果计算中使用了半经验的 extended Hückel model则文章里还应该引用以下文献：

- K. Stokbro, D. E. Petersen, S. Smidstrup, A. Blom, M. Ipsen and K. Kaasbjerg, *Phys. Rev. B* **82**, 075420 (2010) [\[DOI\]](#)

如果计算中使用了DFTB/Slater-Koster方法，则应正确引用不同参数的来源文献，详细情况请参考 [QuantumATK官方手册相关章节](#)

引用ATK-Classical方法

如果在研究中使用了ATK-Classical方法，则应该在引用软件的一般版本和有关的文章：

- Atomistix ToolKit version XXXX.X, Synopsys QuantumWise (www.quantumwise.com)
- M. Griebel, S. Knapek and G. Zumbusch, “Numerical Simulation in Molecular Dynamics”, Springer (2007)
- M. Griebel and J. Hamaekers, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **193**, 1773-1788 (2004) [\[DOI\]](#)

如果在计算中使用了某种特定的经验势函数模型，则应添加相应的文献，详情请参考 [手册](#)

如何引用VNL

如果您在研究中使用了Virtual NanoLab则应当正确引用VNL的软件版本：

- Virtual NanoLab version XXXX.X, Synopsys QuantumWise (www.quantumwise.com)

其他相关的文献

在2005年以前QuantumATK的原名为TranSIESTA-C该程序包使用了学术版的TranSIESTA和部分的McDCal使用的DFT方法则为与SIESTA一致的数值轨道基组。

TranSIESTA/McDCal/SIESTA的有关文章

- Mads Brandbyge, José-Luis Mozos, Pablo Ordejón, Jeremy Taylor, and Kurt Stokbro, Density-functional method for nonequilibrium electron transport, *Phys. Rev. B* **65**, 165401 (2002).
- Kurt Stokbro, Jeremy Taylor, Mads Brandbyge, and Pablo Ordejón, TranSIESTA: A Spice for Molecular Electronics, *Ann NY Acad Sci* **1006**, 212-226 (2003).
- José M Soler, Emilio Artacho, Julian D Gale, Alberto García, Javier Junquera, Pablo Ordejón, and Daniel Sánchez-Portal, The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation, *J. Phys. Condens. Matter* **14**, 2745-2779 (2002).
- Jeremy Taylor, Hong Guo, and Jian Wang, Ab initio modeling of quantum transport properties of molecular electronic devices, *Phys. Rev. B* **63**, 245407 (2001).

综述文章

- Ann E Mattsson, Peter A Schultz, Michael P Desjarlais, Thomas R Mattsson, and Kevin Leung, Designing meaningful density functional theory calculations, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **13**, R1 (2005).
- K. Stokbro, J. Taylor, M. Brandbyge, and H. Guo, Ab-initio Non-Equilibrium Green's Function Formalism for Calculating Electron Transport in Molecular Devices, *Lecture Notes in Physics* **680**, 117-151 (2005).
- Max Koentopp, Connie Chang, Kieron Burke, and Roberto Car, Density functional calculations of nanoscale conductance, *Journal of Physics: Condensed Matter* **20**, 083203 (2008).

书籍

- D. Sholl and J. A. Steckel, *Density Functional Theory. A Practical Introduction*, Wiley (2011).
- S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge (1997).
- S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge (2005).

From: <https://www.fermitech.com.cn/wiki/> - 费米维基

Permanent link: <https://www.fermitech.com.cn/wiki/doku.php?id=atk:%E5%A6%82%E4%BD%95%E5%9C%A8%E5%8F%91%E8%A1%A8%E8%AE%BA%E6%96%87%E6%97%B6%E6%AD%A3%E7%A1%AE%E5%BC%95%E7%94%A8%AE%8%BD%AF%E4%BB%B6>

Last update: 2018/03/20 18:24