

課題名 (タイトル) :

## 第一原理計算による分子性導体の高圧下電子状態

利用者氏名 : ○藤山 茂樹、上田 康平

所属 : 加藤分子物性研究室

**1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係**

固体物質の電子状態の理解の一手法である第一原理計算は、近年パッケージが整備され、実験研究者にも手の届くものとなっている。特に、分子性導体においては、計算結果としてはき出される電子のエネルギー分散関係が、実験で観測される巨視的物性をよく説明すると受け入れられている。

これまでの研究は主として、合成や測定の実験研究者による実験がある程度進捗した後に第一原理計算による計算が行われ、実験をサポートしてきた。第一原理計算が当該研究分野を主導しているとは言いがたく、実際に試料合成や分光学的測定に従事している研究者が時に応じて第一原理計算を活用することで、より効率的な研究を遂行できる可能性がある。

本課題では、計算科学を専門とする研究者が関心を持たないような物質や、分光学的パラメータについて、第一原理パッケージを用いた計算を行い、物質設計の指針を得ることを目的とする。

**2. 具体的な利用内容、計算方法**

第一原理計算パッケージとして PWscf を用い、ウルトラソフト擬ポテンシャルを用いた電子状態計算を行った。電子のエネルギー分散関数を計算するのみならず、得られた電子状態密度を用いた後工程として原子核と電子の間にはたらく超微細結合定数の見積もりを行った。

計算リソースとしては MPC を用い、多くの計算は 4<sup>8</sup> ノードを占有することで実行した。

**3. 結果**

試料合成の研究途上でサブフェイズとして得られた、BMP(ブチルメチルピペリジウ

ム)Pt(dmit)<sub>2</sub>の電子分散を計算した。その結果、フェルミ準位近傍で電子のエネルギー分散が逆格子空間の波数に対して直線的に立ち上がる、ディラクの分散が見出された。

**4. まとめ**

ディラクの分散は近年新しい電子輸送やそれを応用したデバイスの研究が精力的になされており、関連した新物質の開発が待たれている。今回サブフェイズとして偶然に得られた試料でも同様の電子分散が得られたことで、新奇機能物質の開発が加速される可能性がある。

**5. 今後の計画・展望**

今回計算した物質は 5d 遷移金属である Pt を含む。一般に Pt 元素は強いスピン軌道相互作用を有し、計算ではこの効果を露わに取り入れた。今後の物性研究の展開のために、スピン軌道相互作用を無視した場合との比較などの詳細な検討が必要である。

また、今回見出された物質の分光学的測定に資するさまざまな物理量の計算を併せて行い、関連する物性研究を展開していく。