

課題名 (タイトル) :

第一原理計算による分子性物質の構造と電子状態に関する理論研究

利用者氏名 : 圓谷貴夫

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

分子特有の自由度を生かした多様な電子相の宝庫である分子性固体を舞台に, 分子内や分子間でみられる電荷不均一性 (電荷秩序) やそれに伴う格子の歪みにみられる物質依存性を密度汎関数理論(DFT) に基づく第一原理計算から明らかにすることにより, その分類と系統性から, 誘電性を発生させる電荷の偏りの原因を解明することを最終的な目的とする.

2. 具体的な利用内容, 計算方法

密度汎関数法に基づく第一原理計算手法を主たるアプローチとして, 電荷秩序を示す分子性導体の構造と電子状態を調べる. 一電子方程式は, 平面波基底に基づく, 擬ポテンシャル法を用いる.

3. 結果

今年度は HOKUSAI を利用しなかったため, 報告なし.

4. まとめ

今年度は HOKUSAI を利用しなかったため, 報告なし.

5. 今後の計画・展望

圧力下でディラック電子系となることが知られ, 実験, 理論の両面から活発な研究が行われている α -(BEDT-TTF)₂I₃ という物質は, 常圧下 (低温で) 異なる分子サイト間で電荷不均一状態を示すことが様々な実験手法で確認され, 強誘電体へ転移することが最近の実験で示されている. 今後, この系に対する電荷不均一性の解明にも取り組んでいく予定である.

来年度は, 密度汎関数法における交換相関項

にハートリーフォック法の交換項へ取り入れたハイブリッド汎関数法やオンサイトクーロンエネルギーU を付加する LDA+U 法の分子性の強相関電子系への拡張し, HOKUSAI の CUDA を利用して計算を行いたいと考えている.

6. 利用がなかった場合の理由

今年度は主に, 本務先である独立研究開発法人 物質・材料研究機構の材料数値シミュレータ SGI ICE X を利用したため, HOKUSAI の利用することがなかった.

平成 27 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

Takao Tsumuraya, Hitoshi Seo, Reizo Kato, and Tsuyoshi Miyazaki, “First-principles study of hydrogen-bonded molecular conductor κ -H₃(Cat-EDT-TTF/ST)₂”, Phys. Rev. B **92**, 035102 (2015).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

Takao Tsumuraya, Hitoshi Seo, Masahisa Tsuchiizu, Reizo Kato, Tsuyoshi Miyazaki: “First-principles study of molecular-based spin liquid materials: $X[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ and $\text{H}/\text{D}_3(\text{Cat-EDT-TTF/ST})_2$ ” International USMM & CMSI Workshop, Jan. 5-9th, 2016, University of Tokyo, Japan.