

課題名 (タイトル) :

磁気物性のための量子化学理論

利用者氏名 : 吉澤輝高

所属 : 和光研究所 基幹研究所 次世代分子理論特別研究ユニット

---

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

現在、分子 1 つを最小の磁石として利用することにより、従来の磁気メモリの性能を劇的に向上させる次世代デバイスの開発を目標とする研究が盛んになされている。しかしながら、この開発には、分子の全電子スピンを的確に操作・制御する高度な合成技術が必要とされる。現状としては、極低温でのみ分子は磁石となり、少しでも高い温度で利用するためには、実験的アプローチによる分子設計だけでは不十分で、分子内の磁氣的相互作用を、分子中の固有原子ごとに解析できる計算法が必要であると我々は考える。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度は利用申請を致しましたが、実際には一度も使用しませんでした。

3. 結果

ありません。

4. まとめ

ありません。

5. 今後の計画・展望

ありません。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

8. 利用研究成果が無かった場合の理由

本年度は利用申請を致しましたが、実際には一度も使用しませんでした。