

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。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ト汎関数法を用いる。

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

フェルミ準位近傍のバンド構造を再現するような最局在ワニエ関数を構築し、それに対してオンサイトクーロンエネルギー U を導入する LDA/GGA+ U 法を開発し、強相関系分子性物質へ適用する。

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 および九州大学 情報基盤センターの計算機を利用したため、HOKUSAI の利用することがなかった。