

## P-19 圓谷 貴夫

物質・材料研究機構 若手国際研究センター (ICYS)  
理化学研究所 加藤分子物性研究室  
e-mail: TSUMURAYA.Takao@nims.go.jp

2009年 広島大学 大学院 先端物質科学研究科 博士課程 修了  
2009年 ノースウェスタン大学 (アメリカ) ポスドク研究員  
2011年 理研 特別研究員  
2015年 物質・材料研究機構 ICYS 研究員



### ハイブリッド汎関数法による分子性導体の磁性と電子状態

第一原理計算において、密度汎関数理論(DFT)の枠組みで一般的に用いられている局所密度近似(LDA)や一般化密度勾配近似(GGA)に基づく計算をMott絶縁体や電荷秩序相といった強相関絶縁体物質に対して実行すると、電子を過剰に非局在化させる傾向があるため、実験結果に反して金属的なバンド構造が得られてしまうことが多い。これはLDAやGGAにおける自己相互作用の問題として知られており、分子性導体においては解決されていない。本研究では、分子性導体 $\beta'$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>ICl<sub>2</sub>のMott絶縁体相および(TMTTF)<sub>2</sub>X系の電荷秩序相に対し、まずスピン分極を考慮したGGAによる計算を行うことによって反強磁性状態の安定性を見る。その上で、DFTにハートレーフォック法の厳密な交換項を取り入れるハイブリッド汎関数法 (HSE06)に基づく第一原理計算手法を用いて磁性と電子状態を調べた結果を報告する。