

半導体中のエキシトン状態と酸化物中の強相関電子状態のシミュレーション

大阪大学 基礎工学研究科 草部 浩一

目的 エキシトン状態や酸化物中の強相関電子状態を、有効相互作用をもつ強結合モデルを組み合わせて表現する多配置参照密度汎関数理論(MRDFT)での有効相互作用の評価方法を開発し、実施例を与える。

内容 絶縁性有機結晶と銅酸化物での有効相互作用決定のための、基礎データを与えた。

結果 準粒子励起間の遮蔽相互作用もMRDFTで定義できることを確認した。 Nd_2CuO_4 でのf電子でも多重項ごとのワニエ状態の広がりにより大きく U_f の値が変わる。

利用した計算機	VCC
ノード時間	350時間
使用メモリ	10GB
ベクトル化率	95%
並列化	16並列

