

有機化合物に対する第一原理 GW 計算

Ab initio GW calculations for organic compounds: The case of $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$

中村和磨

Kazuma Nakamura

九州工業大学大学院基礎科学研究系 量子物理学部門

Quantum Physics Section, Kyushu Institute of Technology, 1-1 Sensui-cho, Tobata,
Kitakyushu, Fukuoka, 804-8550

有機化合物などの大規模系に対処できる大規模並列仕様第一原理 RPA & GW 計算プログラムの開発を行った[1]。近年、角度分解光電子分光技術の進展に伴い、有機化合物の低エネルギー電子構造の詳細が測定可能となっている[2]。実験スペクトルは、低エネルギー素励起に起因する自己エネルギー補正を含む準粒子スペクトルであるが、密度汎関数バンド計算は、静的近似に基づくので、動的効果を考慮できていない。ここでは動的効果を考慮した第一原理 GW 計算コードの開発を行い、擬一次元系有機化合物 $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ に適用した。

この物質では、フェルミ面を形成する「低エネルギーバンド」は、他の「高エネルギーバンド」から孤立状況にあり、低エネルギーバンドに由来する興味深い物性がある。実験的にも、低エネルギー領域 (1eV 以下) において、プラズモン励起 (集団電荷励起) が存在することが知られている[3,4]。作成コードを用いて、 $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ の反射率を計算したところ、電場偏光を a 軸に取った場合のプラズマ周波数は 1 eV、ab 面内であつ a 軸に垂直な場合は 0.2 eV であり、実験を再現することが分かった [1]。この低エネルギープラズモン励起の電子構造への効果を GW 計算コードを用いて調べたところ、(i) 占有/非占有バンドの約 0.5 eV 下/上に、プラズモン励起に由来する新たな状態が出現すること、(ii) X-M 線に沿った電子占有領域において特に大きな電子散乱が生じていること、が分かった。結果の考察、温度効果、遷移金属化合物との比較について議論する。

本研究は、酒井志郎氏、有田亮太郎氏、黒木和彦氏との共同研究である。

[1] K. Nakamura, S. Sakai, R. Arita, and K. Kuroki, arXiv:1306.0354

[2] T. Kiss, A. Chainani, H. M. Yamamoto, T. Miyazaki, T. Akimoto, T. Shimojima, K. Ishizaka, S. Watanabe, C.-T. Chen, A. Fukaya, R. Kato and S. Shin, Nature communications, DOI:10.1038/ncomms2079 (2012).

[3] C. S. Jacobsen, D. B. Tanner, and K. Bechgaard, Phys. Rev. Lett. **46** 1142 (1981).

[4] Martin Dressel, ISRN Condensed Matter Physics, **2012** 732973 (2012).