

研究責任者名 Name	小嶋 健児	所属機関 Affiliation	高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所
受理番号 Proposal No.	T12/13-02	研究課題名 Program title	第一原理計算を用いた結晶中のミュオン位置計算シミュレーション

研究を終了しましたので、下記の通り報告します。

成果の概要

Abstract

(和文)

本トライアル課題は、物質中のミュオンスピン緩和を用いた物性実験 (μ SR) の実験結果の解釈に避けて通れない、ミュオンの結晶中の位置に関する情報を、密度汎関数法を用いた第一原理計算で予測し、J-PARCを始めとする大型加速器を用いたミュオン実験の解釈に寄与することを最終目的としている。本年度は、ハートレーポテンシャル (密度汎関数法で求めた電子密度からのクーロンポテンシャル和) という最も基本的な計算値を用いて、ビーム実験的にミュオンサイトが判明している銅酸化物 (Sr_2CuO_3 , La_2CuO_4 や $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$) の計算を行い、測定結果と比較するとともに、これまで研究代表者が行って来た、マーデルングポテンシャル (点電荷からのクーロンポテンシャル和) の半経験的な計算と比べることにより、第一原理計算の予測結果の妥当性と必要なCPU時間量の実測を行った。その結果、ハートレーポテンシャルは必要なCPU時間が少ない割に、測定結果の大まかな傾向は正しく予測することが明らかになった。本トライアル課題を踏まえて、平成25-26年度の本申請を行い、研究を継続している。

(英文)

This trial project is aimed to predict the muon site in a crystal structure, which is the information inevitable in understanding muon spin relaxation (μ SR) performed at large accelerator facilities, such as J-PARC. We employed density functional theory (DFT) which has been casually used in ab-initio calculations. This year, we performed Hartree potential calculation (Coulomb sum from the electron density calculated by DFT) and compared with beam experimental results of cuprates (Sr_2CuO_3 , La_2CuO_4 and $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$) in which muon site is experimentally known. The ab-initio calculation is also compared with Marderung potential (Coulomb sum from point charges) performed since 1990s. The trial project has indicated that Hartree potential calculation requires only a small amount of CPU time, but enough to reproduce the rough trend of the measurement. With the successful result of this trial project, a continuation the research project has been approved as 13/14-09.

研究成果を公開しているホームページアドレス

not yet available.

研究成果の 公表	口頭研究発表 件数	査読つきの 学術論文数	プロシーディング 論文数	その他 (投稿中を含む)
	1	0	0	0

成果の公表リスト（それぞれの枠に番号をつけて記入願います。）

口頭研究発表 Presentations at scientific meetings concerning the program		
1. 2.		
査読付きの学術論文(雑誌名等には 巻、頁、発表年を記載) (* 不足する場合には追加願います。 Refereed Journal Articles (name of journal, volume, page, year)		
1	著者名 Author	
	タイトル title	
	雑誌名 name of journal	
	URL	
2	著者名	
	タイトル	
	雑誌名等	
	URL	
3	著者名	
	タイトル	
	雑誌名等	
	URL	
プロシーディング論文(雑誌名等には 巻、頁、発表年を記載) (* 不足する場合には追加願います。 International Conference Proceedings (name of journal, volume, page, year)		
1.	著者名 Author	
	タイトル title	
	雑誌名等 name of journal	
	URL	
2.	著者名	
	タイトル	
	雑誌名等	
	URL	
3.	著者名	
	タイトル	
	雑誌名等	
	URL	
その他 (学位論文、紀要、投稿中の論文を含む) (URL を記載) Others (thesis for a degree, bulletin, papers to be published, etc.)		
1. URL: 2. URL:		
特記 (本研究に関係した、新聞記事・著作、受賞など) (過去に遡っても構いません。) Special Notes (newspaper article, literary works, awards, etc.)		
1. 2.		