

課題名 (タイトル) :

強相関電子系格子模型の電子状態の研究

利用者氏名 : 柚木清司

所属 : 和光研究所 基幹研究所 柚木計算物性物理研究室

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

遷移金属酸化物を中心とする物質群は、強相関電子物質と呼ばれる。電子間相互作用が強い強相関物質は新奇な量子状態、新しい機能の宝庫である。本研究は、強相関物質の様々な量子多体模型の性質を数値シミュレーションを用いて明らかにすることが目的である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度は、磁性イオン (遷移金属イオン) を含まない単純酸化物において、磁性出現の可能性を、密度汎関数法をもとにした第一原理電子状態計算を用いて調べた。

3. 結果

単純酸化物の例として、 $\text{HfO}_2$  を取り上げ、その表面での磁性出現の可能性を調べた。36種類の異なった表面に対するシミュレーションの結果、酸素終結した表面でのみ強磁性が出現することを突き止めた。

4. まとめ

我々の結果は、磁性イオンを含まない単純酸化物の磁性出現の可能性を、数値シミュレーションにより示したものである。磁性イオンを含まない磁性出現のひとつのメカニズムを提案したというたいへん意味のある結果である。

5. 今後の計画・展望

この結果の普遍性を調べるため、その他の単純遷移金属酸化物に対するシミュレーションを行う。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用

した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、

継続して利用する際に行う具体的な内容

異なった単純酸化物表面の電子状態シミュレーションを行う。また、ヘテロ構造酸化物における界面電子状態シミュレーションも行う予定である。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

利用者がたいへん多く、待ち時間が計算時間より長かった。

8. 利用研究成果が無かった場合の理由

なし。

平成 22 年度 RICC 利用研究成果リスト

**【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】**

H. Watanabe, T. Shirakawa, S. Yunoki “Microscopic Study of a Spin-Orbit-Induced Mott Insulator in Ir Oxides” (Physical Review Letters 105, 216410, 2010).

**【国際会議などの予稿集、proceeding】**

T. Shirakawa, H. Wanatabe, S. Yunoki, “Variational cluster approximation study of Mott transition with strong spin-orbit coupling” (to be published, Journal of Physics.: Conference Series 2011).

**【国際会議、学会などでの口頭発表】**

S.Yunoki “Microscopic study of spin-orbit-induced Mott insulator in Ir oxides” (Opening Symposium of QS2C Theory Forum, Wako, Japan, 2010/9).

**【その他】**

Q. Zhang, G. Chen, X. G. Gong, S. Yunoki, “Surface Ferromagnetism in HfO<sub>2</sub> Induced by Excess Oxygen Atoms” (日本物理学会 2010 年秋季大会)