

課題名 (タイトル) :

強相関電子系の軌道秩序相の電子状態計算手法の開発

利用者氏名 : ○鈴木通人*

所属 : *創発物性科学研究センター 計算物質科学研究チーム

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

磁性や超伝導などの多様な物性は、物質の構成要素である電子の状態によって引き起こされることが知られている。近年、如何なる実験情報を用いることなく物質中の電子状態を先見的に予測する、第一原理計算と呼ばれる計算手法が飛躍的に発展しており、周期的な原子配列を持つ理想的な完全固体のみならず、表面や欠陥構造など多様な物質状態の研究において欠かせない研究ツールになっている。これまで第一原理計算手法は強相関電子系と呼ばれる、互いに強い相関を持つ電子系の記述精度に問題があったが、近年はこれら強相関電子系に対する計算手法も大きな発展を見せ、遷移金属や希土類化合物など、その適用範囲も広がりを見せている。

強相関電子系物質においては、d 電子や f 電子が強い強相関性の原因になっているが、これらの電子系は大きな軌道自由度を持っており、これらの軌道自由度がスピン軌道相互作用やクーロン相互作用を通して複雑に絡み合うことで、多様な物性を生み出している。現代の第一原理計算手法においても、このような複雑な電子状態を統一的に扱うことは難しく、理論的枠組みの発展だけでなく、大規模計算などを応用した複雑な電子状態の解析手法の発展が必要である。本研究プロジェクトでは、強相関電子系の複雑な秩序形成下における電子状態を高い精度で求める第一原理計算手法を進展させ、強相関電子系の大きな自由度に起因する複雑な電子状態に対して、大規模計算を用いた効率的な解析手法の開発を目指す。

2. 具体的な利用内容、計算方法

強相関電子系の軌道秩序相に対する第一原理計算手法開発のプラットフォームとして利用する。また、開発したプログラムを様々な物質の秩序相に適用し、強相関電子系の秩序相の電子状態に関

するデータを蓄積する。今年度は主に、軌道秩序相の第一原理計算プログラムの開発と、それに伴うテスト計算を実施した。

3. 結果

平成 27 年度の利用では、軌道秩序相の第一原理計算プログラム開発の一環として、軌道秩序相の秩序構造の解析プログラムの開発を終えている。また、比較的小規模な軌道秩序相を対象にテスト計算を実施し、これらの計算プログラムの結果の妥当性を確認している。

4. まとめ

本プロジェクトでは、強相関電子系物質の秩序形成と電子状態の関係を明らかにするため、強いスピン軌道相互作用と強いクーロン相互作用の元で発現する秩序状態の第一原理計算手法に基づくプログラム開発を実施している。今年度の計算機利用では、計算手法の基盤となる軌道秩序相の秩序構造の解析プログラムを開発し、テスト計算の実施を通して、計算手法の妥当性を確認している。

5. 今後の計画・展望

今後は今年度の利用で開発した軌道秩序相の解析プログラムを第一原理計算プログラムに組み込むことで、軌道秩序相の第一原理計算手法を進展させ、強相関電子系の軌道・多極子といった複雑な自由度の中で発現する強いクーロン相互作用を扱う第一原理計算コードを進める。特に、軌道秩序相の磁気的な対称性を指定し、その磁気対称性の中で最適な秩序構造を求める第一原理計算プログラムを進展させる。また、動的平均場理論と呼ばれる、揺らぎを扱う計算手法を秩序状態の第一原理計算の枠組みに適用し、強相関電子系の秩序揺らぎの効果を取り入れた第一原理計算プログラムの開発を進める。