

## 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 : 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

磁性や超伝導など物質が示す多様な物性は、物質の構成要素である電子の集団的振る舞いによって引き起こされる。近年、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、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、d 電子、f 電子をもつ原子を構成要素に含む、互いに強く相関する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。

強相関電子系物質の中には複雑な秩序を形成するものが多数存在するが、複雑な自由度を正確に取り入れた高精度な強相関電子系の計算手法の研究は発展途上にある。磁気秩序形成下では異常ホール効果やスピンホール効果、ネルンスト効果、電気磁気効果など、様々な輸送現象の発現が知られており、これらの現象のメカニズムを解明することで、様々な応用研究への道が開けると考えられている。これらの輸送現象は、磁性状態を特徴付ける電子構造のトポロジーと密接に関わっていると考えられ、近年、輸送現象と電子構造トポロジーに関する研究が大々的に行われている。

利用者は新学術研究領域「J-Physics 多極子伝導系の物理」の班員として、複雑な秩序形成を対象とした第一原理計算手法の開発、および、基盤 B「重い電子系化合物に対する第一原理的理論アプローチの開発」における重い電子系の第一原理計算手法開発に携わっており、これら研究プロジェクトにおける開発・計算プラットフォームとして本設備を利用している。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

強相関電子系の複雑な秩序形成を扱うためには、電子の強相関性を扱うための高精度な計算手法だけでなく、強相関電子系の特徴の一つである、大きな軌道自由度を取り扱った計算が必要になり、それらを対象とした第一原理計算手法を行うには並列計算を活用した大規模な計算が必要になる。利用者は本設備をこれらの第一原理計算手法開発のプラットフォームとして利用し、今年度は特に、動的相関を取り入れた電子状態計算手法の開発と、それに伴うテスト計算を実施している。

## 3. 結果

平成 28 年度は、強相関電子系の第一原理計算プログラム開発の一環である、動的相関効果を取り入れた第一原理計算手法である、LDA+DMFT 法による第一原理計算の開発プラットフォームとして本設備を利用している。プログラムは現在開発途上であり、今年度は計算の核となる基盤部分の開発を終え、テスト計算を実施することでその妥当性を確認している。

## 4. まとめ

強相関電子系の第一原理計算手法は、秩序現象の物質設計に大きく貢献すると考えられ、利用者は特に、強相関電子系の秩序状態を対象とした第一原理計算手法開発のプラットフォームとして本設備を利用している。平成 28 年度は動的相関効果を取り入れた第一原理計算手法である LDA+DMFT 法の計算プログラム開発、及びそのテスト計算の実施を通して、計算の基盤部分の開発を終えている。

## 5. 今後の計画・展望

今後は、これまでに開発している動的平均場理論に基づく第一原理計算手法に基づく電子状態計算手法を完成させ、さらに、強相関電子系の複雑な秩序形成を取り入れた系へ拡張することで、秩序現象を利用した強相関電子系の物質設計の研究へと発展させていく予定である。