

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

理研における所属研究室名: 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

物質が示す多様な物性は、物質中の電子が本来持つ自由度が、まわりの原子や電子との相互作用によって獲得する自由度の多様性によるものであると言える。第一原理計算は現代の物質研究において欠かせない理論ツールとなっているが、強相関電子系と呼ばれる一部の物質群に対しては電子状態の予測精度が著しく落ちることが知られている。近年、これらの強相関電子系物質に対する計算手法が大きな発展を遂げており、第一原理計算による研究によって遷移金属や希土類化合物の電子状態の理解も進んでいる。

希土類・アクチナイド化合物中の f 電子系の多極子秩序相など、 f 軌道の軌道自由度が顕在化する系の第一原理計算手法は利用者による LDA+U 法を応用した研究などが進められてきたが、動的相関などを考慮した計算手法は未だ確立されておらず、第一原理計算に動的相関を取り込む手法として知られる LDA+DMFT 法に基づく計算手法の確立が必要である。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、 f 電子系の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計算手法の開発と応用」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、これらの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

強相関電子系の計算には、強いクーロン相互作用を考慮した基本近似を超えた計算手法を用いる必要があり、これらを大きな軌道自由度を考慮して実施するには、大規模な計算資源が必要になる。利用者は本設備をこのような第一原理計算手法である LDA+DMFT 法の開発と、それに伴うテスト計算を実施するためのプラットフォームとして利用している。さらに、プログラムの完成後は、開発プログラムを適用して様々な強相関

電子系物質の電子状態計算を実施するためのプラットフォームとして利用する予定である。

3. 今後の計画・展望

これまでに、LDA+DMFT 法の枠組みにおいて、自己エネルギーと電子密度を全て自己無撞着に決定する、完全に自己無撞着な LDA+DMFT 法を開発し、計算機クラスター上でのテスト計算なども行ってきた。今後、この並列化プログラムを理研のスーパーコンピュータシステムに移行し、Ce 系や Yb 系などの f 電子系化合物の系統的な電子状態研究に適用していく予定である。

4. 利用がなかった場合の理由

2019年度は、完全に自己無撞着な LDA+DMFT 法のプログラムの開発などに取り組み大きな進展を得ているが、テスト計算などに終始し、本設備における系統的な物質研究の実施には至らなかった。