

21世紀COEセミナー (兼 大貫研特別セミナー)

日時：平成19年3月12日(月) 15:00~16:30

場所：理学部H棟3F コミュニケーションスペース

LDA+U法による強相関f電子系の圧力・磁場下の電子構造計算 Energy band calculations based on LDA+U method for strongly correlated f electron systems under pressure and magnetic field

講師：鈴木 通人 (神戸大学)

密度汎関数理論に基づいた一電子近似である局所密度近似(LDA)による電子構造計算は、多くの物質のド・ハースファンアルフェン(dHvA)効果や光電子分光の実験を説明することがわかっている。その一方で、遍歴電子が強いクーロン斥力を持っている強相関d電子系やf電子系では、LDAが悪い近似になっていることが明らかになってきている。現在までに、LDAを超える計算手法の研究が数多く行われ、主に強相関d電子系化合物に対して大きな成果をあげているが、f電子系化合物に対する研究は非常に少ない。このことは、f電子系ではスピン-軌道相互作用の寄与を無視できないことや、磁気秩序状態の計算では、LDAのスピン分極系への拡張である局所スピン密度近似(LSDA)がf電子系の軌道モーメントの自由度を扱えないことに起因している。私達は、強相関d電子系化合物の電子構造計算で大きな成果を挙げているL(S)DA+U法と呼ばれる計算手法に対して、強相関f電子系を扱うための拡張を行ってきた。

本講演では、この計算手法の適用例として、反強磁性状態を基底状態に持つ重い電子系CeIn₃の圧力下の量子相転移によるフェルミ面の変化の研究と常磁性基底状態を持つ重い電子系CeRu₂Si₂のメタ磁性転移前後の電子構造の研究についての報告を行う。CeIn₃では、f準位をわずかに持ち上げて行ったLDA+U法の計算が圧力下のdHvA振動数の角度依存性を良く説明する。また、CeRu₂Si₂ではLDA+U法による計算結果が常磁性状態に対するLDAの計算結果を大きく改善することが明らかになり、LSDA+U法による計算はメタ磁性転移後のf電子の磁氣的局在状態を再現し、メタ磁性転移後のdHvA実験の結果と良い一致を示している。

連絡先 物理学専攻 摂待力生 (5371)