

第一原理計算を用いた遷移金属合金における磁氣的性質の研究

理学研究科物理学専攻 伊東直洋

本研究では、合金における高効率な材料探索手法の開拓を目指した。合金は、元素ドーパ量を変化させることで伝導特性や磁性といった物理量の制御が可能である。従来の合金の計算手法としては、元素置換されたサイトを自己無撞着に定められた平均的なポテンシャルで置き換える CPA (Coherent Potential Approximation) 法と高度な第一原理的電子状態計算手法である KKR (Korringa-Kohn-Rostoker) 法を組み合わせ使用することが一般的であった。しかしながら、KKR 法には汎用コードがほとんど存在しないだけでなく、計算コストが高いために複雑な結晶系への適用は不可能である。電子状態計算手法に依存せず、計算負荷の少ない手法を開発するため、本研究では、CPA 法を、波動関数から直接定めることができる Wannier 表式へと発展させることを目指した。この Wannier-CPA 法を開発するにあたり、私は従来の KKR-CPA 法の計算手法を徹底的に調査した。相対論的効果を含めて KKR-CPA 法を開発している研究グループは世界的にみてもごくわずかであり、日本で学ぶことは不可能である。そのため、私は SPR-KKR コードの開発者であるミュンヘン大学の Ebert 教授のもとに半年間留学した。留学期間中、コロナ禍の影響で 4 ヶ月間の大学閉鎖になったこともあり、Ebert 教授の自宅にて KKR 法のアルゴリズムからコーディングに至る一連の手法について毎日徹底的に Ebert 教授本人から個人指導を受ける機会に恵まれた。この経験をもとに、エネルギー積分手法等 KKR-CPA 法特有の計算手法を取り込みつつ、ポテンシャル計算手法は KKR 法の散乱経路演算子を使った表記から Wannier 関数で計算可能な手法に改良、さらに Wannier 関数では直接定めることのできないオンサイト・ポテンシャルの設定方法を考案し、計算効率の高い Wannier-CPA 法の開発に成功した [1]。従来の KKR 法と比較して 1/10 程度にまで計算時間の短縮を達成しただけなく、得られた物理量も KKR 法のものを非常によく再現した [図 1 参照]。本研究は、合金における電気伝導といった輸送係数計算への応用・展開にも直接つながる結果である。将来的には今後 2、3 年以内に物理界ではまだ確立していない実際の材料での不純物系の輸送係数計算が可能で独自の計算コードを完成させ、合金を含めた材料探索の分野を開拓していきたい。

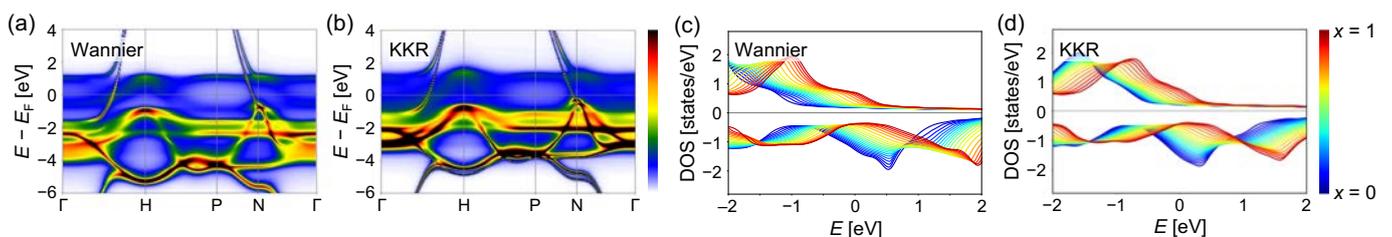


図 1. $\text{Fe}_{0.40}\text{Cu}_{0.60}$ 合金における (a) Wannier 表式および (b) KKR 法で計算された Bloch スペクトル関数。また、 $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}$ 合金における (c) Wannier 表式および (d) KKR 法で計算された状態密度。赤線が純粋な Fe 元素、青線が純粋な Co 元素の状態密度を表し、合金に関してはその Fe と Co の占有率に応じて中間色でプロットしている。Bloch スペクトル関数および状態密度は Wannier 表式と KKR 法両者の計算で非常によく一致している。

[1] N. Ito, T. Nomoto, K. Kobayashi, S. Mankovsky, K. Nomura, R. Arita, H. Ebert, and T. Koretsune, Phys. Rev. B in press (2022).