

## 2成分相対論形式による電子状態計算

### Electronic structure calculation with 2-component relativistic form

石橋章司、小杉太一、品岡寛、大西宏昌、三宅隆、寺倉清之

Shoji Ishibashi,<sup>1,3</sup> Taichi Kosugi,<sup>1</sup> Hiroshi Shinaoka,<sup>1,3</sup> Hiromasa Ohnishi,<sup>1,3</sup>  
Takashi Miyake<sup>1,3</sup> and Kiyoyuki Terakura<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>産業技術総合研究所ナノシステム研究部門、

<sup>2</sup>北陸先端科学技術大学院大学先端融合領域研究院、<sup>3</sup>JST-CREST

<sup>1</sup>Nanosystem Research Institute, AIST, Tsukuba, Ibaraki 305-8568,

<sup>2</sup>Research Center for Integrated Science, JAIST, Nomi, Ishikawa 923-1292,

<sup>3</sup>JST-CREST, Kawaguchi, Saitama 332-0012

スピン軌道相互作用は、電子のスピンと軌道角運動量の相互作用であり、普遍的に存在するものであるが、原子番号の小さい元素からなる固体では、その効果が微弱であることが多く、通常の電子状態計算では無視される。しかし、系が重元素を含む場合、その効果は、しばしば顕在化する。また、スピン軌道相互作用は、磁気異方性、ラシュバ分裂、ノンコリニア磁性（の一部）、マルチフェロイクス、スピンホール効果、トポロジカル絶縁体、トンネル磁気抵抗効果など、物質科学における様々な重要な現象の起源となっている。したがって、対象とする物質あるいは現象によっては、電子状態計算において、スピン軌道相互作用を取り扱う必要性・必然性が生じる。スピン軌道相互作用、および、ノンコリニア磁性（スピン軌道相互作用が関わらないものも含めて）は、相対論的な Kohn-Sham 方程式により取り扱うことが可能となる。

我々は、これまで平面波基底と PAW 法に基づく第一原理材料シミュレータ QMAS (Quantum Materials Simulator) [1] の開発・整備を進めてきたが、近年、2成分相対論形式による電子状態計算機能の導入に注力している。何とか実用レベルに達したその計算機能を用いて、Au(111)表面のラシュバ分裂[2]、5d パイロクロア酸化物  $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$  の磁気構造[3]、 $\text{CaMnO}_3$  の磁気構造とその電子ドーピング依存性[4]などの研究を行なった。また、現在、2成分相対論形式での最局在ワニエ軌道関連計算機能の導入に取り組んでおり、完成に近づいている。これらの QMAS の整備状況と適用研究の概要について、報告する。

QMAS の開発・整備には、木野日織博士 (NIMS)、田中真悟博士 (産総研)、香山正憲博士 (産総研) のご協力を頂いております。尾崎泰助先生、小口多美夫先生には、様々な有益な情報をご提供頂きました。感謝申し上げます。

[1] <http://qmas.jp>.

[2] T. Kosugi, T. Miyake, and S. Ishibashi, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 074713 (2011).

[3] H. Shinaoka, T. Miyake and S. Ishibashi, arXiv:1111.6347

[4] H. Ohnishi, T. Kosugi, T. Miyake, S. Ishibashi and K. Terakura, submitted to Phys. Rev. B.