

改良テトラヘドロン-Brillouin 領域積分法による
金属中のフォノンの第一原理計算

First-principles calculation of phonons in metallic systems
with an improved tetrahedron method for the Brillouin-zone integration

河村光晶^A、合田義弘^A、常行真司^{A,B}
Mitsuaki Kawamura^A, Yoshihiro Gohda^A, and Shinji Tsuneyuki^{A,B}

東京大学理学系研究科物理学専攻^A
東京大学物性研究所^B

Department of Physics, The University of Tokyo, Hongo Tokyo^A
Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo, Kashiwa^B

金属中のフォノンは、電子との相互作用によってある種の超伝導体では主要な役割を演じる。このようなフォノンの第一原理計算においては、特に Fermi 面近傍の占有率が急激に変化する領域にある電子からの寄与をいかに数値的に正確に取り扱うかと言うことが重要である。しかし、古くから用いられているブロードニング法—占有率をゆっくり変化する関数に置き換える手法—による計算では、置き換えた関数のなめらかさによって計算結果が大きく変わる事がある。

我々はこの問題に対してテトラヘドロン法—Brillouin 領域を四面体で分割し、その四面体内で占有率の飛びを解析的に取り扱う手法—を適用することで解決を図った。また、テトラヘドロン法の欠点—Fermi 面近傍で軌道エネルギーが凸関数である場合、 k 点数に対する収束が悪くなる。これは四面体内部で軌道エネルギーを線形補間することに起因する—を解決するために、高次多項式補間と最小二乗フィットを用いた改良テトラヘドロン法を考案した[1]。この手法をニホウ化マグネシウムおよび高圧下のリチウムのフォノン計算に適用した結果、 k 点数に対する収束性が大きく改善された。本発表ではこの手法の詳細と、計算結果について述べる。

[1] M. Kawamura, Y. Gohda, and S. Tsuneyuki 査読中