

【第 20 回 物質科学・学術融合セミナー】

相対論的第一原理計算の手法開発とその応用

物質における相対論効果は、重い元素を含む物質の場合だけでなく、比較的軽い元素からなる物質の場合でも興味深い現象を引き起こす。構成元素として重い元素を含む物質の一例である硫化ウランでは、強いスピン軌道相互作用によって軌道磁性が生じることが知られている。また、鉄やコバルトを用いた強磁性薄膜においては、その磁気異方性が学術的な興味からだけでなくスピントロニクスへの応用の観点からも精力的に研究が行われている。これらの他にも、磁気光学効果、磁気円二色性、光吸収などの光学的現象において相対論効果は重要な役割を果たしている。

本講演では、まず、密度汎関数理論に基づく第一原理計算の手法として当研究室で開発してきた Relativistic Full-Potential LCAO 法についての概要を述べる。次に、その応用例としてウランモノカルコゲナイド UX ($X=S, Se, Te$)の軌道磁性[1]、 $MgO/TM/Au$ ($TM=Fe, Co$)強磁性薄膜の磁気異方性[2]、ダブルペロブスカイト半導体の電子状態と光学的性質[3]などの研究について紹介する。講演では、簡単な系についての計算のデモンストレーションも行う予定である。

[1] S. Suzuki and H. Ohta, J. Phys. Soc. Jpn. 79, 074703 (2010).

[2] S. Suzuki et al., J. Phys. Soc. Jpn. 82, 124715 (2013).

[3] S. Suzuki and M. Tsuyama, Opt. Mater. 119, 111323 (2021).