

第一原理計算に基づく有効模型導出と高精度模型解析

— 鉄系超伝導体の磁性に対する強相関アプローチからの考察 —

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 中村 和磨¹

物質の低エネルギー物性の非経験的・定量的理解を目的として、これまで開発を進めてきた「第一原理有効模型導出法」[1-3]と「高精度模型解析」[4,5]の融合手法による鉄系超伝導体の物性解析を報告する。密度汎関数計算より得られる大域的バンド構造から、高エネルギーバンド自由度を「繰り込み群」的に消去して、フェルミ面近傍の少数低エネルギーバンド自由度からなる有効模型を非経験的に導出する[1,2]。鉄系超伝導体のように擬二次元性の強い物質では、バンド自由度のみならず、空間自由度についても同様の繰り込み作業を行い、純粹二次元模型を構築する[3]。得られた低次元・低エネルギー模型は電子相関効果を高精度に記述できる種々のソルバーを用いて解かれる[4,5]。一連の計算において経験パラメータおよび経験的仮定は一切排除されている。

本講演では、鉄系超伝導体 LaFeAsO に対する第一原理二次元有効模型[3]を多変数変分モンテカルロ法[4,5]を用いて解析した結果について発表する。以下のことが分かった：(i) 鉄系超伝導体の二次元有効模型は、短距離的な有効相互作用のみで記述でき、局所電子相関のバンド幅に対する比は中程度以上に大きい。(ii) 本手法は中性子散乱実験に基づく磁気秩序モーメント ($0.3\text{--}0.6\ \mu_B$) [6] を定量的に再現する。(iii) 鉄系超伝導体の一連の物質群の低エネルギー模型は、LaFeAsO における有効相互作用を一様にスケールすることによってほぼ再現でき、物質による多様性を第一原理有効模型は1パラメタの変化によって表わすことができる。(iv) 物質による磁気秩序モーメントの多様性 [LaFePO ($0\ \mu_B$)、LaFeAsO、BaFe₂As₂ ($0.9\ \mu_B$)、FeTe ($2.0\text{--}2.2\ \mu_B$)] は (iii) の有効相互作用の一様スケーリングによって第一原理的かつ定量的に再現され、物性の多様性を決める鍵が有効相互作用の違いにあることがわかる。

本研究は、三澤貴宏氏が中心となり、野原善郎氏、吉本芳英氏、三宅隆氏、有田亮太郎氏、今田正俊氏との共同研究によって行なわれたものである。

- [1] K. Nakamura, R. Arita, and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, (2008) 093711.
- [2] T. Miyake, K. Nakamura, R. Arita, and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, (2010) 044705.
- [3] K. Nakamura, Y. Nohara, Y. Yoshimoto, and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, (2010) 123708.
- [4] D. Tahara and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, (2008) 093703; **77**, (2008) 114701.
- [5] T. Misawa, K. Nakamura, and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, (2011) 023704.
- [6] C. de la Cruz *et al.*, Nature **453**, (2008) 899; N. Qureshi *et al.*, Phys. Rev. B **82**, (2010) 184521.

¹E-mail: kazuma@solis.t.u-tokyo.ac.jp