2018 年度冬学期 第 7 回 駒場物性セミナー

強相関化合物における長距離秩序の理論予測にむけた 最近の進展

講師 大槻純也 氏 (岡山大学 異分野基礎科学研究所)

日時 2019 年 1 月 23 日(水) 午後 4 時 50 分 [いつもと曜日が異なります!](#)

場所 16 号館 827

動的平均場法 (DMFT) は、モット絶縁体や重い電子系化合物などの強相関物質の研究に広く用いられている近似計算法である。最近では、第一原理計算と組み合わせることで、化合物の詳細を考慮した多体電子状態計算も行えるようになってきている (DFT+DMFT 法)。

我々が取り組んでいるのは、DFT+DMFT 法による磁性や軌道秩序、多極子秩序などの相転移の再現と予測である。これを実現するには、軌道自由度や多体効果の扱いなど、解決すべき課題が多く残っている。最近我々は、DMFT 法における空間揺らぎを簡易的に評価する近似式を導出した[1]。この式は強相関極限で正しい結果に一致し、RKKY 相互作用などの良く知られた結果を再現する。したがって、DFT+DMFT 法による化合物のスピン・軌道・多極子揺らぎ計算を実現する、極めて有用な方法になると期待される。

講演では、この新しい近似式の詳細やアイデアを紹介し、RPA や RKKY 相互作用などの伝統的な近似法との関連について議論する。

[1] J. Otsuki, K. Yoshimi, H. Shinaoka, and Y. Nomura, arXiv:1812.10918

○物性セミナーのページ 「駒場物性セミナー」で検索!

物性セミナー世話人 : 加藤雄介 福島孝治 前田京剛 簗口友紀