



Title	Electronic structure of doped perovskite manganites La <sub>1-x</sub> C <sub>x</sub> MnO <sub>3</sub> calculated by LDA and by optimized effective potential method in the KLI approximation
Author(s)	本田, 裕士
Citation	大阪大学, 2003, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/44076">https://hdl.handle.net/11094/44076</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href=" <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed</a> ">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名	ほん だ ひろ し 本 田 裕 士
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第 17514 号
学位授与年月日	平成15年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科物理学専攻
学位論文名	Electronic structure of doped perovskite manganites $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ calculated by LDA and by optimized effective potential method in the KLI approximation (LDA 及び KLI 近似を用いた OEP 法によるペロフスカイト型マンガナイト の電子状態研究)
論文審査委員	(主査) 教授 赤井 久純  (副査) 助教授 スレヴィン、キース 教授 斎藤 基彦 教授 河原崎修三 教授 鈴木 直

### 論文内容の要旨

ペロフスカイト型マンガナイトはその豊富な物性のために、古くから研究されている物質であるが、近年、巨大磁気抵抗効果や電荷整列などの興味深い現象が観測された事により、よりいっそうの注目を集め、盛んに研究されている物質である。

これらの物質は、母体物質に不純物を混入することによって得られるが、第一原理バンド計算の分野では、主として母体物質の基底状態研究に焦点が置かれており、不純物混入の依存性などは、ほとんど調べられていない。

そこで、ペロフスカイト型マンガナイトの一つである、 $La_{1-x}Ca_xMnO_3$  について、その Ca 混入量の依存性を、第一原理計算の手法を用いて行うこととした。

このような不純物の効果を評価するのには、CPA と呼ばれる一種の分子場近似が有効であり、それらをグリーン関数法によって評価することとした。

この研究により、Ca 混入によって得られる、磁気秩序の変遷を評価することに成功した。特に、混入量の多い領域で、反強磁性的磁気秩序の変化を詳しく見ることができ、また、混入量の小さい領域での、Jahn-Teller 格子歪みの効果について議論した。

一方、このような計算では、母体物質の基底状態が正しく評価できないことが明らかとなった。これは、他の第一原理計算の結果からも得られている結論であり、局所密度近似が持つ、致命的な欠陥の一つと考えられる。多くの研究者は、この欠点をパラメータを用いることで回避しているが、この方法は第一原理的な手法とは言えず、適切な手法であるとは言いたい。

そこで、このような局所密度近似の持つ欠陥を改良すべく、新たな第一原理計算の手法開発に取り組んだ。

局所密度近似を用いない第一原理計算の手法として有力な OEP 法は、密度汎関数理論から得られる、Kohn-Sham 方程式において、密度と有効ポテンシャルが一対一に対応することを用いた手法で、交換相関エネルギーの波動関数に関する汎関数形がわかれれば、系の評価ができる。交換エネルギーは波動関数の汎関数系として書かれているので、

非常に有力な手段である。ただし、OEP 法は数値的に計算が難しいので、KLI 近似と呼ばれる近似法を用い、計算を簡単にしている。

これにより、LDA の欠陥は改良されるが、その代わり適切な相関エネルギーを用いなければ、系を正しく評価することができないことが解った。

そこで、多体効果を摂動論的に扱う乱雑位相近似を、OEP 法に組み込むための計算方法の提案と、それに関する議論を行った。

### 論文審査の結果の要旨

$\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$  系ペロフスカイトは、近年、巨大磁気抵抗効果や電荷秩序相、協力的ヤンテラー効果、磁気構造などで大きな注目を浴び、実験的、理論的に研究が盛んに進められている。本田君は  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$  系ペロフスカイトの電子状態と磁性に関して第一原理計算に基づく研究を行なった。グリーン関数法とコヒーレントポテンシャル近似を用いて電子状態を計算することによって、母相である  $\text{LaMnO}_3$  の基底状態を除いて、実験的に得られている磁気相図をほぼ再現することに初めて成功した。さらに、 $\text{LaMnO}_3$  の基底状態を説明するためには、密度汎関数法の局所密度近似を超える必要があることを指摘し、局所密度近似を超える方法として最適化有効ポテンシャル法を用いることを提案した。厳密な交換エネルギーとコレ・サルベッティ型の相関エネルギーを用いた最適化有効ポテンシャルを構成して計算をすすめたが、その結果、コレ・サルベッティ型の相関エネルギーでは相関効果が十分取り入れられていないという結論を得た。この点を改良するために、RPA の範囲で金属的な遮蔽を最適化有効ポテンシャルに取り入れ、なおかつ、局所密度近似と同じ程度で高速に計算を実行するための理論を構築した。さらに、実際にそのような計算を実行するための計算機コードを作成し、試験的な計算によってその基本的な動作を確認した。この研究は博士（理学）の学位論文として十分価値があるものと認められる。