

準粒子自己無撞着 GW 計算の GPU 実装: 磁性形状記憶合金 Ni_2MnGa 変調マルテンサイト相への応用

GPU implementation of quasiparticle self-consistent GW calculations: Application to the modulated martensite phase of magnetic shape memory alloy Ni_2MnGa

金沢大自然¹, 鳥取大工², ^o小幡 正雄¹, 勝田 匠¹, 小谷 岳生², 小田 竜樹¹

Kanazawa Univ.¹, Tottori Univ.², ^oMasao Obata¹, Takumi Katsuta¹, Takao Kotani², Tatsuki Oda¹

E-mail: obata@cphys.s.kanazawa-u.ac.jp

Ni_2MnGa 合金はマルテンサイト変態を示す強磁性ホイスラー合金である。高温相である $L2_1$ 構造から、 $L1_0$ 構造のマルテンサイト相へマルテンサイト変態する際に原子スケールで(110)に垂直な方向に剪断した長周期構造(変調マルテンサイト相)が出現する。変調マルテンサイト相は巨大磁場誘起歪み(MFIS)が発生し、外部磁場誘起アクチュエータへの材料応用が期待されている。変調マルテンサイト相には、その周期により 10M(5 周期)構造や 14M(7 周期)構造があるが、このような変調マルテンサイト構造の電子状態や、その安定性機構は十分には理解されておらず、その理由の一つに通常の電子状態計算に使用される一般化勾配近似(GGA)では、Mn の電子局在効果が十分に考慮できないことがある[1]。そこで我々は、電子相関効果を高精度に取り入れられる第一原理計算手法である準粒子自己無撞着 GW (QSGW)法を用いて Ni_2MnGa の電子状態を調査した。高温相では QSGW による電子状態から 10M 構造に対応する 5 周期のフェルミ面ネスティングベクトルが存在するが、GGA で得られるネスティングベクトルは 2.5 周期に対応した[2,3]。

一方で 10M や 14M 構造の QSGW 計算は、その計算コストの高さにより、これまで実施が困難であった。そこで、QSGW 計算の主要部分の GPU 実装を QSGW 計算コード ecalj[4]に行った結果、1GPU ノード(4GPU)で 40CPU ノード程度の計算が可能となった。GPU を用いることで、10M および 14M 構造における QSGW 計算を実施したところ、GGA 計算ではフェルミ準位が状態密度の山の頂上近傍に表れるが、一方、QSGW 計算ではフェルミ準位近傍で、状態密度が小さくなる谷構造を形成した。このような谷構造は変調構造が電子状態を安定化させることを示唆し、GGA 計算では低温での安定構造とされる 10M 構造が準安定構造となることと整合する[1,5]。本講演では、QSGW 計算の GPU 実装方法及び得られた変調マルテンサイト構造の電子状態について紹介する。

参考文献

- [1] M. Zelený, P. Sedláč, O. Heczko, H. Seiner, P. Veřtát, M. Obata, T. Kotani, T. Oda, and L. Straka, *Mater. Design* **209**, 109917 (2021)
- [2] M. Obata, T. Kotani, T. Oda, *Phys. Rev. Matt.* **7**, 024413 (2023)
- [3] M. Obata, L. Straka, O. Heczko, T. Kotani, T. Oda, submitted to Proceedings of CCP2023
- [4] <https://github.com/tkotani/ecalj>
- [5] R. Majumder, M. Obata, C. Pardede, J. Lustinec, L. Kalvoda, T. Oda, accepted to Proceedings of CCP2023