

第一原理計算を用いた結晶中のミュオン位置

計算シミュレーション(大型14/15-13)

KEK物構研 小嶋健児 他

- 目的
 - 物質中の μ^+ の位置と電子系への結合を計算し、J-PARC MLF他の加速器実験の結果と比べる。

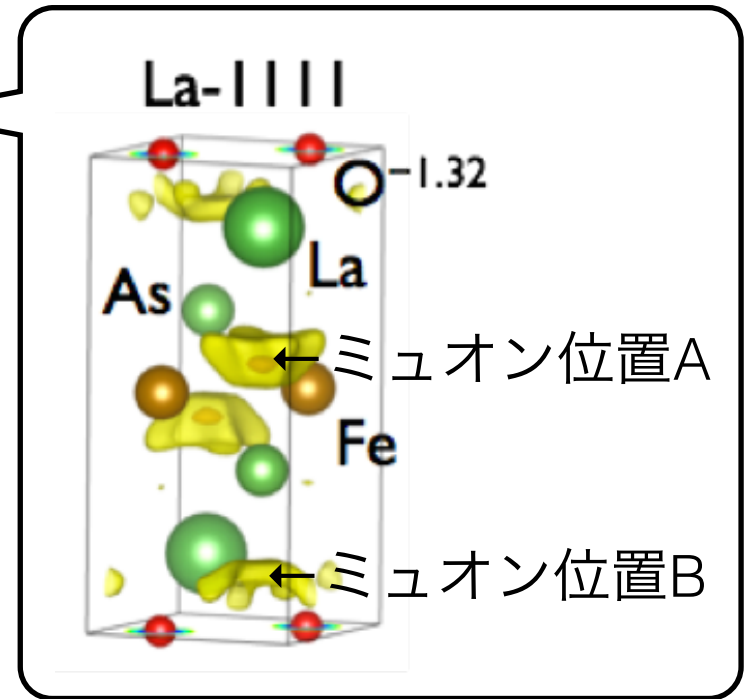
- 手段と結果

1. ハートレーポテンシャル(HP)計算 (CPUTime~5min)
2. 分子動力学(MD)計算 (CPUTime~1hour)
3. 格子上全エネルギー計算 (CPUTime~10min \times mesh)
4. **格子緩和付き** MD or 全エネルギー
5. μ^+ 自身の**量子力学**計算

難易度



- M. Hiraishi *et al.* *Nature Physics*, 10, 300 (2014).
- M. Miyazaki *et al.* *Phys. Rev. B* 91, 155113 (2015).
- I. Yamauchi *et al.* *Phys. Rev. B* 92, 064408 (2015).
- K. Shimomura *et al.* *Phys. Rev. B* 92, 075203 (2015).



- すべてハートレーポテンシャル計算
- 物質パラメータだけで計算可能で早い。
CPUTime<5min
- Bader 荷電解析が可能

まだ近似は荒いが、物質中のミュオン粒子の理論位置をビーム実験の解釈に使い始めた。

