

強相関電子系物質における 有効オンサイトクーロン相互作用の新たなスケーリング法の提案

(三重大学) 名和憲嗣, 秋山亨・伊藤智徳・中村浩次,
(阪大産研) 小口多美夫, (ウイスコンシン大) Michael Weinert

拠点卓越学生研究員

Scaled effective on-site Coulomb interaction in the DFT+ U method for correlated materials

Kenji Nawa, Toru Akiyama, Tomonori Ito, Kohji Nakamura, Tamio Oguchi, Michael Weinert

NJRC Excellent Student Researcher

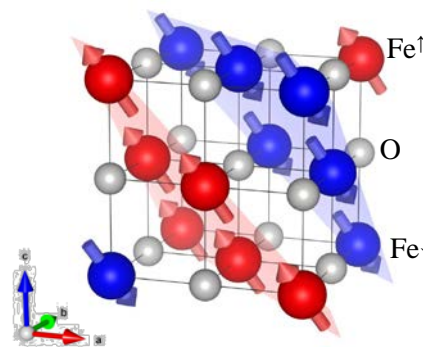


Figure1. Crystal structure of transition-metal monoxides (TMO), e.g. TM=Fe, with antiferromagnetic alignment along [111] direction.

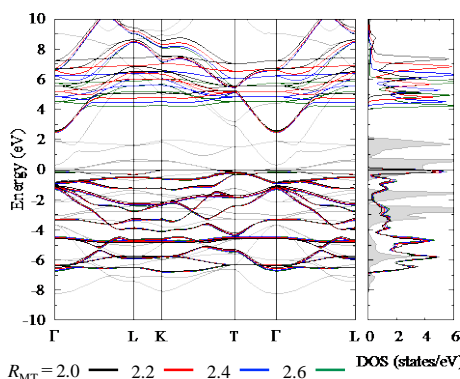


Figure2. GGA+ U band structure and partial 3d density of states for different MT sphere radii (a_B) using the calculated $U_{\text{eff}}(R_{\text{MT}})$ values.

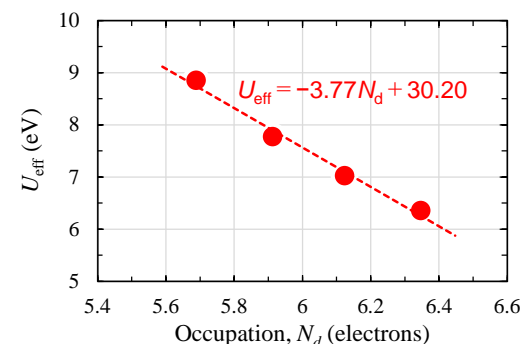


Figure3. Calculated U_{eff} values as a function of occupation numbers $N_d(R_{\text{MT}})$ for various sphere radii.

強相関電子系物質中の局在d軌道の有効オンサイトクーロン相互作用 U_{eff} を第一原理計算 (FLAPW法) から導出する手法を開発し、 U_{eff} 値が計算条件 (ここではマフィンティン半径, R_{MT}) に顕著に依存することを発見した。さらに、異なる手法においても同程度の基底状態の電子構造を得るための U_{eff} 値のスケーリング法を新たに提案した。

We derived effective on-site Coulomb interaction, U_{eff} , in the DFT+ U method for correlated materials and proposed guidelines to estimate suitably scaled U_{eff} values, which provides relatively small variations in physical properties, including the valence band structures although simple transferability of the U_{eff} among different calculation method is not allowed.