

Вычислительная схема для расчета электронных свойств сильнокоррелированных систем в полном орбитальном базисе

И.А. Некрасов, Д.Е. Кондаков, А.В. Кожевников, З.В. Пчелкина, В.И. Анисимов
Институт физики металлов УрО РАН, 620219 Екатеринбург, ул. С.Ковалевской 18, Россия

Д. Алэн, С.-К. Мо,
Randall Laboratory of Physics, University of Michigan, Ann Arbor, MI 48109 USA

Х.-Д. Ким,
Pohang Accelerator Laboratory, Pohang 790-784, Korea

П. Меткальф,
Department of Physics, Purdue University, West Lafayette, IN 47907 USA

С. Суга,
Division of Materials, Physics Graduate School of Engineering
Science Osaka University Toyonaka, Osaka 560-8531 Japan

А. Секияма,
Graduate School of Engineering Science, Osaka University Toyonaka, Osaka 560-8531 Japan

Г. Келлер, И. Леонов, Ш. Рен, Д. Фольхардт
Theoretical Physics III, Center for Electronic Correlations and Magnetism,
University of Augsburg, 86135 Augsburg, Germany

Вычисление физических свойств электронных систем при помощи контролируемых приближений является одной из самых важных задач современной физики твердого тела. В частности, в физике оксидов переходных металлов - исключительно важной группы материалов (к которым относятся и ВТСП), как с точки зрения фундаментальных исследований, так и технологических применений - необходим явный учет сильного эффективного кулоновского взаимодействия на узле между валентными электронами.

Как отмечалось ранее, для сильнокоррелированных материалов наибольшее значение имеют кулоновские корреляции между электронами на частично заполненных валентных d - или f -орбиталях. Для описания корреляционных взаимодействий (например в рамках методов динамической теории среднего поля (DMFT) [1] или LDA+U [2]) необходимо использовать некоторый атомоподобный центрированный на узлах базисный набор орбиталей. Если взаимодействующие электроны хорошо локализованы, как, например $4f$ -состояния редкоземельных ионов, то атомные (например, muffin-tin) орбитали являются хорошим базисом. Однако в задачах, связанных с переходом металл-изолятор, рассматриваемые коррелированные состояния становятся частично проводящими и существенно протяженными в пространстве. Ошибка, появляющаяся при использовании атомных орбиталей наиболее велика в случае материалов с сильными ковалентными эффектами (например, оксиды переходных металлов, где частично заполненные зоны формируются смешиванием d -орбитали металла и p -орбитали кислорода).

Таким образом, для явного описания корреляционных эффектов из первых принципов, необходимо иметь возможность построить некоторый малый базис, содержащий только физически интересные орбитали. При этом важными требованиями для выбора такого малого базиса является 1) воспроизведение выбранных зон в полном орбитальном базисе, 2) возможность вычислить параметры модельного гамильтониана в малом базисе и 3) возможность вернуться в полный орбитальный базис. Все указанные требования удовлетворяются для формализма

функций Ванье, предложенного в работах [3] и развитого в работе [4].

Формализм функций Ванье [4] был успешно применен для LDA+DMFT (приближение локальной электронной плотности в рамках теории функционала электронной плотности +динамическая теория среднего поля) расчетов [5] электронных свойств сильно коррелированных систем V_2O_3 и $SrVO_3$ [4], а также для определения модельных параметров t - J модели для La_2CuO_4 [6].

1. A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M.J., and M. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

2. V.I. Anisimov, F. Aryasetiawan, and A.I. Lichtenstein, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 767 (1997).

3. N. Marzari and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **56**, 12847 (1997); Wei Ku, H. Rosner, W.E. Pickett, and R.T. Scalettar, Phys. Rev. Lett. **89**, 167204 (2002).

4. V.I. Anisimov, D.E. Kondakov, A.V. Kozhevnikov, I.A. Nekrasov, Z.V. Pchelkina, J.W. Allen, S.-K. Mo, H.-D. Kim, P. Metcalf, S. Suga, A. Sekiyama, G. Keller, I. Leonov, X. Ren, D. Vollhardt, cond-mat/0407359.

5. I. K. Held, I. A. Nekrasov, G. Keller, V. Eyert, N. Blümer, A. K. McMahan, R. T. Scalettar, T. Pruschke, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, Psi-k Newsletter **56**, 65 (2003). psi-k.dl.ac.uk/newsletters/News_56/Highlight_56.pdf.

6. Pchelkina Z.V., Kondakov D.E., Leonov I.V., Anisimov V.EASTMAG-2004, Krasnojarsk, Russia, August 24-27, 2004 Abstract book p. 250.