

GW 近似とその拡張に基づく固体の電子状態計算

Two generalizations of the GW approximation: formalisms and applications

佐久間怜¹・菅原健人¹・田中友理¹・F. Aryasetiawan²

R. Sakuma, K. Sugawara, Y. Tanaka, and F. Aryasetiawan

¹千葉大大学院融合科学研究科

Graduate School of Advanced Integration Science, Chiba University
Chiba 263-8522, Japan

²Department of Physics, Division Mathematical Physics, Lund University
Sölvegatan 14A 223 62 Lund, Sweden

L. Hedin によって提案された GW 近似[1]は、近年計算機とアルゴリズムの発達によりその適用範囲が大規模な系にまで広がっている。この近似は局所密度近似の問題点であるバンドギャップの過小評価を改善するという practical な利点の他に、第一原理から多体問題を取り扱う出発点としても重要である。我々のグループではこの近似に基づいた方法論開発および具体的物質への適用を行ってきた。今回は、最近の研究結果から以下の 2 つのトピックについて発表する予定である。

(1) スピン軌道相互作用が重要な系に対する GW 近似の適用

GW 近似は元来スピンに依存しない相互作用に対する近似法として導かれているが、近年電子のスピン自由度や相対論効果であるスピン軌道相互作用が本質的に重要となる現象が注目を集めている。これらの系をコンシステントに取り扱うための手法として一般化された GW 近似が提案された[2,3]。今回はその方法と物質への応用例について紹介する。

(2) 局在性の強い軌道 に対する GW 近似の適用

通常のGW近似(G_0W_0 近似)の問題点の一つとして、3d,4 f軌道のような局在性の強いバンドの記述が不十分であるという点がある。この原因として、通常のGW近似では誘電関数がRPAを用いて計算されるために自己遮蔽効果がキャンセルされていないという点が近年指摘された[4]。我々はこの(本来高次の効果である)補正を考慮した簡便なGWスキームを現在開発中である。このベンチマークテストとして、sp半導体のsemicore状態の計算結果について、短く発表する。

本計算はユーリッヒ研究所理論グループによって開発された Full-Potential LAPW コード[5]を用いている。

[1] L. Hedin, Phys. Rev. **139**, A796 (1965).

[2] F. Aryasetiawan and S. Biermann, Phys. Rev. Lett. **100**, 116402 (2008).

[3] R. Sakuma, C. Friedrich, T. Miyake, S. Blügel, and F. Aryasetiawan, Phys. Rev. B **84**, 085144 (2011).

[4] F. Aryasetiawan, R. Sakuma, and K. Karlsson, Phys. Rev. B **85**, 035106 (2012).

[5] www.flapw.de.