

中国科学院—当日要闻

- 中国科学院召开传达十七届三中全会精神会议
- 第十届高交会开幕中国科学院展团亮点多
- 08诺奖解读
- 中科院与深圳市续签科技合作协议
- 以科学发展观指导科技创新  
以科技创新为科学发展观提供科技支撑
- 詹文龙陪同国家发改委副主任张晓强考察散裂中子源项目进展情况
- 白春礼会见澳大利亚昆士兰大学校长
- 第13届国际生物技术大会在大连召开
- 兰州化物所喜庆五十华诞
- 沈阳自动化所隆重纪念建所五十周年

当前位置: [首页](#) > [科研](#) > [科研动态](#) > [基础研究](#) >> [正文](#)

## 物理所利用Gutzwiller密度泛函理论研究 $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ 相图取得新进展

物理研究所

在第一性原理计算中电子之间的关联效应是个非常难处理的问题。对关联效应很弱的体系(金属K, Na等), 局域密度近似LDA能够得到很好的结果; 而对于关联效应很强的体系还没有很好的方法。为了解决上述难题, 中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室方忠研究员和戴希研究员把Gutzwiller变分方法和密度泛函理论DFT相结合, 并且在自己的程序包BSTATE中实现了这一方法。这种方法优于Tight Binding Gutzwiller方法(TB+Gutzwiller), 因为这里没有用到经验参数, 能够自如的从第一性原理出发处理电荷在多轨道间转移、自旋涨落和轨道涨落等问题。

$\text{Na}_x\text{CoO}_2$ 从发现以来一直是研究的热点。其中Co的3d电子中的 $t_{2g}$ 轨道劈裂为 $a_{1g}$ 和 $e_g$ , 这两个轨道上电子的占居数会随着Na的掺入量改变而变化, 同时出现丰富的相图。方忠研究员、戴希研究员和王广涛博士利用Gutzwiller DFT方法对 $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ 进行了系统的研究, 解决了这一体系中第一性原理计算(DFT)和角分辨光电子谱(ARPES)关于电子结构的争论。他们发现:  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  ( $0.0 < x < 1.0$ ) 的整个掺杂区域可分为三个: (1) 对于 $x > 0.6$ 的区域, 由于费米能级附近的范霍夫奇点引起的Stoner磁性金属态; (2) 在 $0.3 < x < 0.6$ 区域, 体系是弱关联效应的非磁性金属, 同时能带的空穴型费米面不存在, 能带的宽度大约是LDA结果的一半, 这点与ARPES结果非常吻合; (3) 在 $0.3 < x$ 区域, 能带的空穴型费米面开始出现, 关联效应迅速增强。在整个掺杂区域我们计算的准粒子性质和实验结果非常一致。

相关结果发表在 PHYSICAL REVIEW LETTERS 101 (2008) 066403。以上研究得到中国科学院、国家自然科学基金和科技部项目的支持。

[ 2008年10月15日 ]

[ 评论几句 ] [ 推荐给同事 ] [ 关闭窗口 ]