

LSDA+U 法による NiS の電子構造

東理大理工

薄田 学, 浜田典昭

LSDA+U Study for Electronic Structures of NiS

Faculty of Science and Technology, Science Univ. of Tokyo, M.Usuda, N.Hamada

NiAs 型 NiS は高温では常磁性金属であるが、 $T=263\text{K}$ で反強磁性体に転移し同時に金属-絶縁体転移を起こす。反強磁性絶縁状態のときのバンドギャップは約 0.1eV 、Ni の局在磁気モーメントの値は約 $1.7 \mu_B$ である。光電子分光実験によると[1]、NiS のエネルギーギャップの起源は遷移金属 Ni3d-Ni3d 間の Mott-Hubbard 型ギャップではなく、S3p-Ni3d 間の電荷移動型ギャップだと考えられている。また電子相関が本質的に重要な役割を担っているといわれている。

局所スピン密度近似 (LSDA) にもとづくバンド計算を NiS に対して行くと、反強磁性絶縁状態の解をセルフ・コンシステントに求めることが出来ない[2]。実際、我々も同様の結果を得ている。そこで LSDA+U 法を用いてバンド計算を行い、反強磁性絶縁状態の解が得られるかどうかを調べた。その結果、Coulomb パラメーター U が 3.9eV のときにバンドギャップ約 0.15eV 、Ni の局在磁気モーメント約 $1.05(\mu_B/\text{Muffin-tin})$ の反強磁性絶縁相の解が得られた。また計算から得られた状態密度では、バンドギャップが S の p 状態と Ni の d 状態の間に存在し、NiS のバンドギャップの起源が電荷移動型であるという実験の主張を支持している。しかし、状態密度に原子のイオン化断面積等を考慮して光電子分光スペクトルをつくると、光電子分光実験のスペクトルとの一致はあまりよくないことが分かった。

発表では LSDA+U 法による NiS のバンド計算の結果を報告するとともに、実験との不一致等の問題点についても議論する。

[1] A.Fujimori, H.Namatame, M.Matoba and S.Anzai Phys.Rev.B42 (1990) 620

[2] A.Fujimori, K.Terakura, M.Taniguchi, S.Ogawa, S.Suga, M.Matoba and S.Anzai Phys.Rev.B37 (1988) 3109

