東京理科大学大学院理学研究科物理学専攻

# 14. クラスターモデル計算による$La_2CuO_4$の電子状態

時松　修

酸化物高温超伝導体の母体となる$La_2CuO_4$結晶の電子状態を定性的に理解することは、超伝導のメカニズムを解明するのに重要である。この結晶の電子状態は光電子分光法(1)など種々の実験的手法で研究されている。また理論的にはバンド計算(2)がおこなわれているが、強い電子相関のため詳細な描像を知るには限界がある。そのためクラスターモデル(3)によって計算がおこなわれるようになった。

$La_2CuO_4$結晶は260℃より高温で正方晶、それより低温で斜方晶(4)である。斜方晶$La_2CuO_4$結晶について、最も簡単な$CuO_4$クラスターをとり、モデル計算をおこなった。まず$Cu^{2+}$および$O^{2-}$の周りに十分な数の点電荷を配置してクーロンポテンシャルを決定し、結晶の対称性を反映するようにそれを球面調和関数で展開した。波動関数としては$a_{1g}$および$b_{1g}$対称性をもつものを$Cu^{2+}$の3d軌道と、$O^{2-}$の2p軌道の線形結合とから選んだ。その結果得られる両者の波動関数の混成の割合は、いろいろな物理量にどのように影響されるかが定性的に理解できた。

(1) K.Okada and A.Kotani: J.Phys.Soc.Jpn. 58, 2578 (1989).
(2) L.F.Mattheiss: Phys.Rev.Lett. 58, 1028 (1987).
(3) M.Eto, R.Saito and H.Kamimura: Solid.State.Commun. 71, 425 (1989).
(4) J.M.Longo and P.M.Raccah: J.Solid.State.Chem. 6, 526 (1973).