

$\text{La}_2\text{Co}_{1.7}$ の状態密度のピークは、Co-chain の存在のためと考えられる。不規則性の影響は定量的には大きくない。反強磁性の出現する理由も議論する。

18. モット・ハバード型絶縁体に導入された正孔に関する 理論的研究

宮崎基弘

酸化物高温超伝導体には、 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ などがある。これらの物質には、Cu が O をはさんで 2 次元正方格子を作った CuO_2 面が共通に存在し電流はその面方向に流れやすい。また、これらの物質は同位体効果をほとんど示さないなどのことから、従来の超伝導の基礎理論である BCS 理論の枠組みからはずれている可能性が指摘されている。

またこれらの物質で $x=0$, $\delta=0$ では反強磁性絶縁体であり、モット・ハバード型絶縁体と考えられる。このような現象について、2 次元 CuO_2 面で、正孔が導入される前は量子ゆらぎの大きい反強磁性状態が基底状態であり、正孔が導入されると、RVB (共鳴価電子結合) 状態が安定になり超伝導が出現する、という理論的予測がある。しかし、電子のスピン間の交換相互作用を無視した範囲内での正孔の運動エネルギーの計算からは、RVB 状態が安定になることはない結論されていた。

本研究の目的は、このように正孔が導入されて超伝導が出現する付近の領域で、RVB 状態の安定性を調べることである。そのためまず絶縁体の状態で RVB 状態のエネルギーを求めた。すると、RVB 状態のエネルギーは基底状態に比較的近くなった。次に正孔の運動エネルギーをスピン間の交換相互作用を考慮して計算した。すると RVB 状態が安定になる領域があり、スピン間の交換相互作用が重要であることがわかった。これらの結果より、モット・ハバード型絶縁体に正孔を導入すると RVB 状態が安定になることが明らかになった。