

Nd₂CuO₄における 3d/4f 局在電子軌道の超交換相互作用の理論的評価

(B)玉垣侑也²⁾, 草部浩一^{1,2)}, (D)寺西慎伍²⁾, 西口和孝³⁾

¹⁾School of Engineering Science, Osaka University,

²⁾Graduate School of Engineering Science, Osaka University,

³⁾Graduate School of Science, Technology, and Innovation, Kobe University

E-mail: tamagaki@artemis-mp.jp

電子ドーピング系の層状銅酸化物には、興味深い物質依存性が複数知られている。¹⁾ ここでは、その母物質の一つである Nd₂CuO₄ に着目し、特に Nd がもつ 4f 電子スピンと CuO₂ 面上の電子系との相互作用について、ワニエ軌道決定と有効磁気相互作用評価を併用した検討を行ったので報告する。

既に Nd のワニエ軌道と有効ハミルトニアン表現精度を左右する平均場近似の設定による 4f 軌道依存性について、前回に報告を行っていた。²⁾ その結果からは、LSDA 計算と LSDA+U 計算との間で 4f 軌道エネルギーが大きく異なること、4f 電子のスピン配置が LSDA では強く固定される傾向があることが分かっている。cRPA 計算からは、4f 電子準位には 7eV 程度の有効ハバード相互作用があると見積もられることも考慮して LSDA+U 計算に基づいたワニエ軌道決定と超交換相互作用の評価を進めることにした。

一つの Nd 面上にある 4f スピンが強磁性的に配置された状態を仮定して LSDA+U による第一原理的な有効電子モデルを決定した。7 種類の Nd 4f 軌道と Cu d_{x₂-y₂} の Wannier 関数を得た。このうち f_{xyz} 対称性を示す軌道を plot すると図 1 のように Nd の周囲にある酸素と混成を示す軌道が得られる。酸素のうち、CuO₂ 面上にある酸素との混成では、Cu-O-Cu 軸に垂直な方向を向いた p 軌道が現れている。このことから、d_{x₂-y₂} と f_{xyz} の間には強磁性的な超交換相互作用が働いていると結論した。同様にして d_{x₂-y₂} は全ての隣接する 4f 軌道との超交換相互作用で強磁性成分が支配的であると結論した。ワニエ軌道決定した d-f 間の直接交換相互作用も強磁性的になる。このことから、Nd の 4f スピンは CuO₂ 面上に現れる磁気秩序構造を強化する方向に働くとの示唆が得られた。

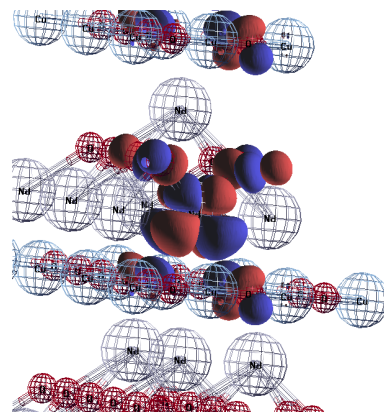


Fig. 1 The obtained f_{xyz} Wannier orbital of Nd₂CuO₄.

よって、Nd 系銅酸化物高温超伝導体では、Nd の f 軌道スピンが CuO₂ 面上に超伝導の発現に影響を及ぼしうる、と結論付けた。但し、4f 軌道を考慮した場合でも、CuO₂ 面の伝導性軌道と f 軌道間の電子トランスファーは重要になっておらず、CuO₂ 面上の超伝導機構に現れる物質依存性の解明を従来のホールドーピング系の議論³⁻⁵⁾ に倣って進めることができるものと考えることができる。

参考文献

- (1) N.P. Armitage, et al., Rev. Mod. Phys. 82, 2421 (2010). (2) 玉垣侑也, 他, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会 11p-S423-7. (3) S.W. Jang, et al., Sci. Rep. 6, 33397 (2016). (4) S. Teranishi, et al., J. Phys. Soc. Jpn. 87, 114701 (2018). (5) K. Nishiguchi, et al., Phys. Rev. B 98, 174508 (2018).