Nd_2CuO_4における3d/4f局在電子軌道の第一原理有効ハミルトニアンの理論的評価

Theoretical determination of a first-principles effective Hamiltonian of Nd_2CuO_4

(B)玉垣侑也 [1)], 草部浩一 [1,2)],(D)寺西慎伍 [2)], (P) 西口和孝 [3)]

(B)Yuya Tamagaki [1)], Koichi Kusakabe [1,2)],(D)Shingo Teranishi[2)], (P) Kazutaka Nishiguchi[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

層状銅酸化物には、CuO_2 構造の強相関電子状態に起因する磁性と超伝導に興味が持たれてきた。が、バッファ層の電子状態の理解が、多様な応用を目指す際にも、高温超伝導の機構解明にも重要である。そこで電子ドープ系を与えると同時に NdO 構造に起因する 4f 電子磁性が発生する Nd_2CuO_4 に着目する。

第一原理的な有効電子模型を Nd_2CuO_4(Fig.1)に対して決定すると Nd の f 準位の平均場軌道エネルギーが有効ポテンシャルの作成方法に強く依存する。そこで、(1) LDA 法、(2) LSDA 法、(3) LDA+U 法を適応し複数の第一原理有効強結合模型を導いた。(3) の LDA+U 計算では、Hubbard U 項を Nd の f 軌道に設定し、Cu 上の電子相関は強結合模型を決定した後に明示的に考慮するスピン揺らぎ理論の強結合模型決定方法 [1-3)] に準拠した。

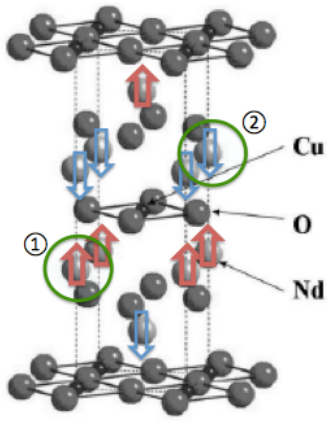

Fig.1 The crystal structure of Nd_2CuO_4

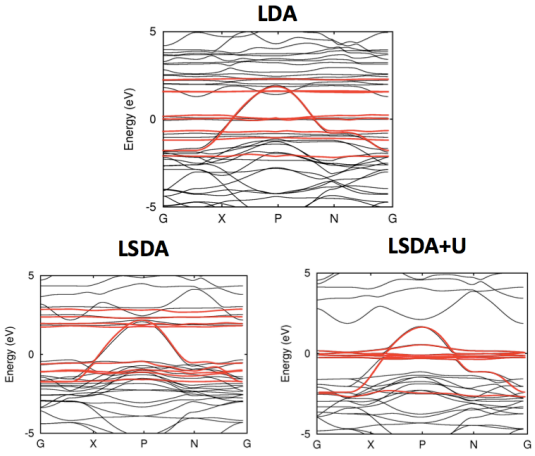

Fig. 2 Band structures of Nd_2CuO_4 by several simulatio methods

3 つの方法でそれぞれ Cu の $d_{x^2-y^2}$ と d_{z^2} 軌道のワニエ関数を、Nd の f 軌道と同時に決定した。結果を Fig.2 に示す。

(1) LDA 法：

2 本の f 軌道がフェルミエネルギー付近に存在する。

(2) LSDA 法：

f 軌道のエネルギーがスピン分裂し、f 軌道はフェルミエネルギー付近から離れている。

(3) LSDA+U 法の場合：

f 軌道はすべてフェルミエネルギー付近に存在している。

さらに、次の点を結論した。i) LSDA 法の結果は Nd 上の局所磁化を与えるが、配位子場効果にも影響され f 軌道におけるエネルギー分裂が起こる。ii) LSDA+U 法のフェルミエネルギー付近に存在する f 軌道は Cu の $d_{x^2-y^2}$ 軌道との相互作用が強いことを示唆する。iii) 軌道決定方法の選択の時点で、異なった Nd の f 軌道の物理的な性質が見られた。従って、強相関超伝導を表現する Hubbard モデルの磁気多体解は、f スピン系の磁気状態の決定を同時にかつ自己無撞着に行う必要がある、と考えることができる。

参考文献(1) S.W. Jang, *et al.*, Sci. Rep. **6**, 33397 (2016). (2) K. Nishiguchi, et al., Phys. Rev. B **98**, 174508 (2018). (3) S. Teranishi, et al., J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 114701 (2018).

© 2019年 応用物理学会