



| | |
|--------------|---|
| Title | Electron Correlation Effects in Low Dimensional Periodic Systems |
| Author(s) | 西野, 友年 |
| Citation | 大阪大学, 1992, 博士論文 |
| Version Type | VoR |
| URL | https://doi.org/10.11501/3060110 |
| rights | |
| Note | |

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

| | |
|---------|--|
| 氏名 | 西野 友年 |
| 博士の専攻 | 博士(理学) |
| 分野の名稱 | 第10111号 |
| 学位記番号 | 平成4年3月25日 |
| 学位授与年月日 | 学位規則第4条第1項該当 |
| 学位授与の要件 | 理学研究科 物理学専攻 |
| 学位論文名 | Electron Correlation Effects in Low Dimensional Periodic Systems (低次元周期系での電子相関の効果) |
| 論文審査委員 | (主査) 教授 吉川 圭二 (副査) 教授 興地 斐男 教授 大坪 久夫 教授 斎藤 基彦 助教授 城 健男 助教授 阿久津泰弘 |

論文内容の要旨

高温超伝導体の電子状態を中心に、1又は2次元上に周期的に配列した遷移金属原子が作る系の電子状態に対する、電子間相互作用の影響を研究した。高温超伝導物質の電気伝導は、 CuO_2 平面と呼ばれる銅原子と酸素原子によって構成された2次元構造中を遍歴するホールによって担われている。同平面上の銅原子3d軌道内ではホール間に強いクローラン相互作用が働き、平面内でのホールの遍歴性と競合しているので、この価電子帯の電子状態をいわゆる1体近似で取り扱う事は成功していない。そこでまず著者は CuO_2 平面と同じ構造を持った有限系(Cu_4O_{12} クラスター)の多電子波動関数を、ランチヨス法による数値的対角化によって求め、 CuO_2 平面の各軌道でのホール密度及び軌道間のスピン相関を導出し、これらの物理量に電子相関/遍歴性が与える効果を調べた。数値計算に当たっては有限系の境界からの影響を減じる為に、可能な限り大きな周期的クラスターを用いた。その結果、 CuO_2 平面に付加されたホールの約10分の9までが、平面に沿った方向に伸びる原子軌道に存在し、残りはいわゆる頂点酸素に存在する事が分かった。また、頂点酸素とCuスピンの間には強磁性的結合が全く存在しない事も判明した。これは、従来の $\text{CuO}_{5(6)}$ クラスターにより行なわれてきた解析では得られなかった結果である。この結果に基づいて、次に CuO_2 平面に対する内殻および価電子帯X線励起スペクトルをリカージョン法による1電子グリーン関数の計算を通じて求め、(1)内殻XPSのスペクトルのピーク構造と、各ピークに対応する終状態のホール分布(2)内殻XPSのメインピークのホール濃度の変化に対する移動(3)価電子帯XPSスペクトルの分散-等について、 CuO_2 平面内の電子相関の影響を観察した。結果の詳細については、本文で述べる。最後に1粒子励起エネルギーのギャップが原子間クローラン相互作用の変化に対してどのように推移するかを、1次元d-p Model及び1次元Extended Hubbard Model

について計算した。前者については、原子間クーロン力は電荷移動エネルギーが有限の場合にはギャップを増幅するものの、電荷移動エネルギーが存在しない場合はギャップを作り出せない事が分かった。後者についてはギャップを有限サイズスケーリングにより定量的に推定したところ、Mott-Hubbard相とCharge Density Wave相の境界でギャップが数値的にはゼロになることが判明した。なお、以上の研究において行った数値計算の原理の詳細、計算法の改良及び数値計算により得られたデータの処理法についても、具体的に公表する。

論文審査の結果の要旨

高温超伝導銅酸化物は、銅原子の作る正方格子上で、各隣接銅原子間を結ぶ辺の中点に酸素原子が存在するCuO₂面の存在で特徴付けられる。西野君の研究は、高温超伝導銅酸化物等の銅化合物および関連した模型での電子状態について、周期境界条件付で有限個数の原子からなるクラスターについての大規模数値計算を可能にする事により、幾つかの新しい事実とその機構を発見解明したもので、今後の実験および理論研究に指針を与えるものである。その内容は、博士（理学）の学位論文として十分なものであると認める。