

## 強相関係の光励起状態における理論的研究

(金沢大理) ○杉山喜一郎. 山口智也. 坂本功. 長尾秀実. 西川清

## 【序】

銅酸化物超伝導体が発見されて以来[1]、多くの科学者によって超伝導に関する理論的、実験的研究がなされ、強相関係が注目されてきた。発見された酸化物には  $\text{La}_{2-x}(\text{Ba},\text{Sr})_x\text{CuO}_{4-y}$  などの p 型構造[2]と、 $(\text{Nd},\text{Pr},\text{Sm})_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$  や  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  (Y-123 系) などの n 型構造[3]のものが挙げられる。このような背景の中で 1990 年にロシアの Kudinov 等は Y-123 系について照射または外場誘起超伝導の実験報告を行い、超伝導発現と転移温度の上昇を確認した[4,5]。この内容は照射により  $\text{CuO}_2$  平面にホールが生じることにより超伝導を誘発させるというものである。このような準安定状態遷移機構には三機構あると考えられ (A) 照射による電子移動による準安定状態の生成、(B) 照射による  $\text{CuO}$  鎖中の酸素構造再配列による準安定状態の生成、(C) 電子移動と構造再配列の両方による機構、が挙げられる。

(A) は照射により  $\text{CuO}_2$  平面から  $\text{CuO}$  鎖に電子が移動することにより相転移が起きるとい機構である。この (A) の機構はトランジスタモデルにより解析され Kudinov の実験結果との一致が報告されている[6]。また (B) の機構ではレーザー照射によって  $\text{CuO}$  鎖の酸素構造再配列が起こり、その結果  $\text{CuO}_2$  平面から  $\text{CuO}$  鎖への電子移動によって超伝導が誘起するという機構である。そして (C) の機構では、この (A) の機構と (B) の機構の組み合わせることによって遷移されるという機構である。

ペロブスカイトの結晶構造を示す Y-123 系では 90K で正方晶から斜方晶へ相転移を引き起こす。また酸素ドーブ量  $X=0\sim 0.4$  のときに低温状態で反強磁性を示し、 $X=0.4\sim 1.0$  の低温状態で超伝導を示す。超伝導転移温度は  $X=1.0$  で  $T_c=90\text{K}$  の最高温度を示す。本研究ではこの Y-123 系の酸化物などにおける  $\text{CuO}$  鎖上の照射による酸素イオンの再配列機構についての量子化学的研究を行う。

本研究では図 1 に示す 4 つのモデルを考える。Y-123 系の  $\text{CuO}$  鎖中の酸素イオン欠陥標準格子モデルを(a)とする。照射後に(b)、(c)、(d)の 3 モデルが可能である。(b)では酸素の再配列なしで  $\text{CuO}_2$  平面から電子移動した場合、(c)では酸素の再配列のみ、(d)は酸素の再配列と  $\text{CuO}_2$  平面からの電子移動した場合に相当する。

量子化学計算は Gaussian98 パッケージを用い、基底関数は 6-31G、UHF を用いた結果を表に示す。

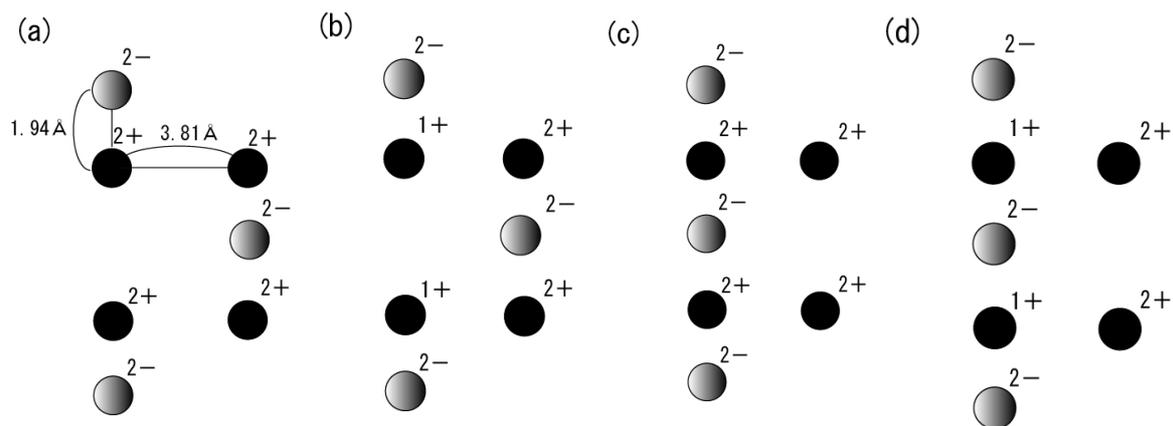


図 1 : CuO 鎖モデル(a)酸素イオン欠陥モデル (b)電子移動イオン欠陥モデル (c)酸素再配列モデル (d)電子移動酸素再配列モデル (●● は酸素イオン、銅イオンを示す)

表:各モデルにおける全エネルギー(eV)			
(a)	(b)	(c)	(d)
-6778.06	-6778.45	-6778.01	-6778.59

以下の結果より(d)の電子移動酸素再配列モデルがもっともエネルギー準位が低く、安定した状態であることがわかった。次に (b) の電子移動イオン欠陥モデルが安定となった。これらの結果から、光照射により酸素再配列後に電子移動する機構が有利と考えられる。現モデルでは格子ひずみなどを考慮していない。またより高度な手法を用いた計算が必要である。詳細は当日報告する。

#### References

- [1]J.G. Bednorz and K.A. Muller, Z. Phys.**64**, 189 (1986).
- [2]M. W. Shafer, T. Penney, and B. L. Olson, Phys. Rev. B **36**,4047(1987).
- [3]H.Takagi, S.Uchida, and Y.Tokura, Phys. Rev. Lett.**62**,1197(1989).
- [4]V.I.Kudinov, I.L.Chaplygin, A.I.Kirilyuk, and N.M.Kreines, Phys. Rev. B **47**, 9017(1993).
- [5]V.I. Kudinov, A.I. Kirilyuk, N.M. Kreines, Phys. Lett. A **151**, 358.(1990).
- [6]H.Nagao, M.Mitani, M.Nishino, Y.Shigeta, Y.Yoshioka, K.Yamaguchi, Int.J.Quantum Chem, 75,549(1999).