

## 遷移金属酸化物における異常金属相と軌道の自由度

東北大学大学院理学研究科 石原純夫

### 1. はじめに

軌道の自由度は電荷、スピンの自由度の加えて、強相関電子系における電子の第三の自由度として注目を集めており、特に遷移金属酸化物で生じる種々の特異な物理現象は、スピン - 電荷 - 軌道の3つの自由度が競争、協力を行うことで生じる複合物性であるとの認識が広くなされている。このような電子の内部自由度の相関現象に基づいた電子物性の研究は、近年、高温超伝導を示す銅酸化物や巨大磁気抵抗効果を示すマンガン酸化物等で精力的に行われている。本研究では、種々の散乱実験等の解析を通して軌道励起、揺らぎの性質とそれらが諸物性に及ぼす影響を理論的に明らかにすることを目的とした。

### 2. 研究経過

磁気秩序相における素励起としてスピン波（マグノン）が存在するように、軌道秩序相における集団励起として軌道波（オービトン）の存在が指摘され、最近ラマン散乱による観測されている。本年度は特にペロフスカイト型バナジウム酸化物 $R_{1-x}A_xVO_3$ （ここでRは3価の希土類金属イオン、Aは2価のアルカリ土類金属イオン）におけるホールの運動とオービトンとの相互作用、磁性との関連について解析した。

### 3. 研究成果

$R_{1-x}A_xVO_3$ ではRの種類により、C型反強磁性構造-G型軌道秩序構造と呼ばれるものと、G型反強磁性構造-C型軌道秩序構造の2種類を取り得ることが知られている。セルフコンシステント・ポルン近似と呼ばれる解析的手法を用いることで、両者においてドーパされたホール・キャリアの振る舞い、特に準粒子バンドの強度とバンド幅が著しく異なる事が示された。また後者の秩序構造はわずかなキャリア数で不安定となり、前者の秩序構造へと転移することが実験により観測されているが、これがスピン自由度と軌道自由度との強い相関に起因する事を明らかにした。以上の計算結果は、反強磁性秩序や $e_g$ 軌道秩序状態にドーパされたキャリアの運動と大きく異なる事を強調した。このようにいわゆる $t_{2g}$ 軌道自由度を有する強相関電子系の現状をまとめ、研究者の間で意見を交換するために「 $t_{2g}$ 軌道縮退系における新しい展開」と題する金研ワークショップを平成16年10月14日(木)から10月15日(金)の二日間に渡って開催した。ここでは特に「 $t_{2g}$ 軌道系における新規な軌道秩序、軌道励起、軌道液体状態」、「軌道状態を観測する新しい実験手法とその理論」、「金属絶縁体転移、超伝導における $t_{2g}$ 軌道自由度の役割」に焦点を当て、多くの研究発表と意見交換が行われた。

### 4. まとめ

今後種々の実験技術の進歩に伴い、軌道自由度の関与する素励起に関する研究が大きく発展するものと思われる。今後残された問題は(1) $t_{2g}$ 軌道の自由度を有するチタン酸化物、バナジウム酸化物における軌道波、特にその分散関係の観測とその理論の構築、(2)軌道自由度が種々の熱現象や輸送現象に及ぼす影響、特に熱電効果や熱伝導における役割を明らかにすることであると考えられる。

### 5. 発表（投稿）論文

- (1) Resonant Inelastic X-ray Scattering in Manganites with Perovskite Structure, S. Ishihara, H. Kondoh and S. Maekawa, *Physica B*, **345** 15-18 (2004).
- (2) Hole dynamics in spin and orbital ordered vanadium perovskites, S. Ishihara, *Phys. Rev. Lett.* (to be published)
- (3) Resonant inelastic x-ray scattering study of hole-doped manganites  $La_{1-x}Sr_xMnO_3$  ( $x=0.2$  and  $0.4$ ), K. Ishii, T. Inami, K. Ohwada, K. Kuzushita, J. Mizuki, Y. Murakami, S. Ishihara, Y. Endoh, S. Maekawa, K. Hirota, Y. Moritomo, *Phys. Rev. B* **70**, 224437 (2004).
- (4) Physics of Transition Metal Oxides, S. Maekawa, T. Tohyama, S. E. Barnes, S. Ishihara, W. Koshibae, and G. Khaliullin, Springer series in Solid State Science 144 (Springer-Verlag, 2004).