

# 強相関電子系の熱電応答に関する理論的研究

仙台電波工業高等専門学校 小椎八重 航

## 1. はじめに

早稲田大学の寺崎らは、良導体であるコバルト酸化物  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  に、巨大な熱電応答を発見した。コバルト酸化物が示す磁性と伝導の「異常」は、熱起電力だけに限らない。 $\text{Na}_{0.68}\text{CoO}_2$  の系のホール係数  $R_H$  は、室温以上の温度領域では正で線形の温度依存性を示し、500K 付近では古典的な伝導理論の値の実に8倍近い巨大な値に達する。本研究では、高温極限の理論を出発点として、層状コバルト酸化物の電気と磁気そして熱の交差効果を理論的に調べた。計算方法としては、Brinkmann-Rice そして小栗-前川らが発展させてきた、いわゆる retraceable-path method を拡張したものをを用いた。

## 2. 研究経過

第一段階として、コバルト酸化物  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  の伝導を担う  $\text{CoO}_2$  層の有効ハミルトニアンを調べた。 $\text{CoO}_2$  層では、Co の  $t_{2g}$  軌道と酸素の  $2p$  軌道の  $\pi$  結合を通じた飛び移り積分が籠目格子を形成する。ホール効果やネルンスト効果など、伝導の磁場応答を与えるのは、格子上の「閉じた経路」を運動する電子である。「閉じた経路」が三角形を描くとき、高温の極限でホール係数 ( $R_H$ ) に線形の温度依存性が導かれる。三角格子の上には、三角形の「閉じた経路」だけでなく、ひし形や台形の「閉じた経路」を含んでおり、これらは  $R_H$  の線形の温度依存性を壊す。籠目格子は、ひし形や台形の「閉じた経路」を含まない。この幾何学的な特徴が、コバルト酸化物の熱磁気応答に、特徴的な温度依存性を導く鍵を与えていることが明らかとなっていった。

## 3. 研究成果

研究の結果、コバルト酸化物のホール係数  $R_H$  とネルンスト効果の係数の間に、密接な関係があることが明らかとなった。すなわち、高温側で  $R_H$  が正であり線形の温度依存性を示すときには、ネルンスト効果の係数が正であり温度に逆比例することが予想される。実験的な検証が期待される。すでに実験で観測されている  $R_H$  の高温での正の符号については、次のように理解できることが明らかとなった。 $\text{CoO}_2$  層では、Co の  $t_{2g}$  軌道と酸素の  $2p$  軌道の  $\pi$  結合を通じた飛び移り積分が電子の飛び移りに対して正の値をとる。 $\text{CoO}_2$  層で伝導の磁場応答を与える、電子の「閉じた経路」の基本的な図形が三角形である。このとき、 $R_H$  の符号はキャリアーの符号ではなく、飛び移り積分の符号を直接反映するのである。

## 4. まとめ

本研究では、コバルト酸化物  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  を取り上げ、熱起電力、ホール係数、ネルンスト効果の係数といった輸送係数を理論的に調べ、その巨大応答や温度依存性そして符号の物の理を、スピンと軌道の自由度が掌握しているさまを明らかにした。

## 5. 発表 (投稿) 論文

- "Hall effect in  $\text{CoO}_2$  layers with a hexagonal structure"  
W. Koshibae, A. Oguri and S. Maekawa  
Phys. Rev. B 75, 205115 (2007).
- "Magnetic correlations of the Hubbard model on frustrated lattices"  
N. Bulut, W. Koshibae and S. Maekawa  
J. Mag. Mag. Mat. 310, 511-513 (2007).
- "Theoretical study of the electronic structure in  $\beta$ -pyrochlore oxides "  
W. Koshibae, H. Murata and S. Maekawa  
J. Mag. Mag. Mat. 310, 1005-1007 (2007).