

LaVO₃における軌道自由度による一次元的な異方性

科技団 ERATO-SSS 求 幸年¹, 妹尾 仁嗣, Zhong Fang
 東京大学工学部, CERC 永長 直人

LaVO₃ の C タイプ反強磁性相における軌道秩序と軌道揺らぎに関する理論的研究を行なった。軌道自由度に対する有効模型を導出し、スピンと軌道の相関により強い一次元性が現れることを示した。この一次元的な閉じこめにより、格子歪みへの不安定性が増強され軌道揺らぎは抑えられる。このことから、実験に見られる振動子強度の一次元的異方性や磁気および軌道転移の臨界温度が互いに近接していることが統一的に理解できる。

1 序

遷移金属酸化物系の研究の急速な進展に伴い、強相関電子系における軌道自由度の重要性が盛んに議論されている [1]。そこでは磁性と軌道状態の拮抗や協調現象が系の電子状態を決める上で重要な役割を果たしている。 d あるいは f 電子軌道のもつ空間的な異方性は、三次元的な格子構造をもつ物質においても一次元あるいは二次元的な電子状態を発現させる。

本研究ではこうした軌道自由度をもつ強相関系として LaVO₃ を取り上げて議論する。この物質では三重に縮退した t_{2g} 軌道に d 電子が各 V 原子当たり 2 個入っており、スピンと軌道の自由度の両方が物性に重要な寄与を果たしていると考えられる。最近の実験結果 [2] によって明らかになった特徴的なこととして、磁気転移が軌道転移よりも高温で生じ、両者の転移温度は非常に近接していること、振動子強度の温度依存性に非常に強い一次元性が見られることが挙げられる。これらの物性における軌道自由度の役割を理解することが本研究の目的である。

2 模型と計算結果

軌道自由度のあるハバード模型の強相関極限として導かれる磁気軌道結合模型 [3] において、C タイプの反強磁性秩序および xy 軌道の一重占有を仮定した。これらは、転移温度の関係から磁性が軌道に比べて大きなエネルギースケールをもつことが示唆されることや、スピンの大きさが $S = 1$ であるため比較的量子性が効きにくいこと、以前の平均場近似や第一原理計算の結果 [4, 5] などから正当化されると考えている。残された yz, zx 軌道の自由度をスピン 1/2 の擬スピンの扱い [6] により得られた軌道自由度に対する有効模型は以下の特徴を示す。(i) 擬スピンの交換相互作用は c 軸方向は Heisenberg 型であるのに対して ab 面内は Ising 型である。(ii) 相互作用定

¹ E-mail: y-motome@aist.go.jp

数に大きな一次元的異方性があり、現実的なパラメタに対してその比は 17 程度に及ぶ。これらの特徴から軌道の量子性が重要視されていたが [6]、LDA+U の計算から見積もった現実的なヤーン・テラー (JT) 相互作用を取り入れた計算を行なった結果、軌道自由度における量子揺らぎは強く抑えられ、この物質の物性に重要な寄与をしていないことが分かった。また、擬一次元性に由来した格子歪みに対する強い不安定性が生じ、比較的高い温度から軌道秩序の不安定性が内在していることを示した。これらのことから、振動子強度の異方性および磁気・軌道転移温度の関係が統一的に理解されることが分かった。

3 議論

マンガン酸化物などの e_g 電子系に比べて t_{2g} 電子系においては JT 相互作用が弱いことが期待され、軌道自由度のシングレット形成といった量子効果が議論の対象となっていた [6]。ここでの結果は、第一原理計算から見積もった JT 相互作用は無視できるほど小さくはなく、軌道の量子揺らぎを強く抑制していることを示している。ここで考察した LaVO_3 では磁気構造に由来した軌道の一次元性が格子歪みへの不安定性を増強していたが、軌道転移が磁気転移より高温で生じるバナジウム酸化物系でも、JT 相互作用が本質的な役割を果たしていることが示唆されている。そこで非常に基本的で興味のある問題は、軌道自由度の量子効果が本質的に物性を支配している系があるかというものである。あるいは理論的には、軌道の量子揺らぎの効果がそれと拮抗する JT 相互作用や三次元性などに対して定量的にどの程度支配的かという問題が興味深い。今後こうした問題に実験・理論両面から取り組んでいくことが重要である。

謝辞

有益な議論をしていただいた十倉教授、宮坂博士、有馬助教授、Dr. G. Khaliullin、Prof. B. Keimer に感謝いたします。

参考文献

- [1] Y. Tokura and N. Nagaosa, *Science* **288** (2000), 462.
- [2] S. Miyasaka, T. Okuda, and Y. Tokura, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000), 5388; S. Miyasaka, Y. Okimoto and Y. Tokura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71** (2002), 2086.
- [3] K. I. Kugel and D. I. Khomskĭ, *Sov. Phys. Usp.* **25** (1982), 231.
- [4] T. Mizokawa and A. Fujimori, *Phys. Rev. B* **54** (1996), 5368.
- [5] H. Sawada *et al.*, *Phys. Rev. B* **53** (1996), 12742.
- [6] G. Khaliullin, P. Horsch, and A. M. Oleś, *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001), 3879; G. Khaliullin and S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000), 3950.