

氏 名 (本 籍)	く ぼ かつ のり 久 保 勝 規 (東 京 都)
学 位 の 種 類	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	博 甲 第 2844 号
学位授与年月日	平成 14 年 3 月 25 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当
審 査 研 究 科	物理学研究科
学 位 論 文 題 目	Study of the Effect of Orbital Degeneracy in Ferromagnetic Metallic Manganites (マンガン酸化物の強磁性金属相における軌道縮退の効果に関する研究)
主 査	筑波大学教授 理学博士 有 光 敏 彦
副 査	筑波大学助教授 理学博士 小野田 雅 重
副 査	筑波大学助教授 博士 (工学) 谷 口 伸 彦
副 査	名古屋大学教授 理学博士 平 島 大

### 論 文 の 内 容 の 要 旨

近年, d 電子系や f 電子系における電子の軌道自由度に関する研究が盛んに行われている。d 電子系の例としては  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  などの 3 次元ペロブスカイト型マンガン酸化物が挙げられる。この系は巨大磁気抵抗現象を示す系として知られているが, この系においても軌道自由度が重要な役割を果たしている。本論文の目的は, この系を対象として (1) 複素軌道秩序状態と呼ばれる特異な特異な秩序状態の実現可能性の理論的検討と (2) 軌道自由度の異方性に起因するフラストレーションがもたらす効果を明らかにすることである。 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  は, ある  $x$  の範囲で低温で強磁性金属状態に転移する。転移温度より十分低温ではスピン自由度は凍結している。しかし, 伝導電子は二重縮退した  $e_g$  軌道から生じているので強磁性相においても軌道自由度が残る。この軌道自由度はスピン演算子を用いて表される (擬スピン演算子)。擬スピン演算子を用いると,  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  の強磁性相は, 擬スピン空間で異方的なハバード模型を用いて表され, また, 軌道秩序は擬スピン秩序として表される。最近, 何人かの研究者によって, 擬スピンの擬スピン空間内で  $y$  方向にそろった秩序状態の可能性が指摘され, 実際, 平均場近似を用いた計算によってその秩序状態が実現することが示された。この秩序変数は本質的に複素数であることから複素軌道秩序状態と呼ばれる。実際には, 秩序変数の正体は d 電子の磁気的八重極モーメントである。八重極モーメントは実験的に検出することが困難な物理量であるが, 最近幾つかの f 電子系などでその重要性が認識されはじめている。平均場近似による研究では  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  において八重極モーメント秩序が実現するとされているが,  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  における電子相関効果は小さくはないので平均場近似が信頼できると思われえない。本論文の前半部では, 電子相関効果を取り入れた計算によって,  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  金属強磁性相における八重極モーメント秩序の可能性が検証される。

本論文で用いられた方法は自己無撞着 2 次摂動理論である。まず, 通常ハバード模型に対する結果からこの方法による転移温度の計算が, 少なくとも中間的な相関領域まで信頼できること, 従って,  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  において有効であることが主張されている。さらに異方的ハバード模型に対してこの理論を適用することによって, (1) 軌道秩序状態は相関効果によって強く抑制されること, (2) 特に, 八重極モーメント秩序状態は実現しないこと, (3) その他の秩序状態も  $x$  の極めて小さい領域に限られること, そして,  $x$  の極めて小さい領域では実際には  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  は反強磁性絶縁状態にあるので, 結局,  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  の強磁性金属状態においてはいかなる軌道秩序状態も実現するとは考えられないことが結論された。

後半部においては、軌道秩序状態が強く抑制される理由が考察される。そのために、 $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ を記述する異方的ハバード模型の強結合有効ハミルトニアン基底状態および低励起状態が研究される。異方的ハバード模型は軌道の異方性を反映して特異なフラストレーションを有する反強磁性的擬スピン模型にマップされる。平均場近似を適用すると擬スピン（軌道）秩序状態が得られるが、この状態からの擬スピン波励起を線形近似の範囲で求めると、分散が2次元的になり、しかも、長波長極限でギャップレスとなる。このことは、秩序状態が有限温度では不安定となることを意味する。しかし、スピン波の非線形効果（量子効果）を取り入れることによって、励起にギャップが生じ、その結果有限温度での秩序状態が安定化されることが明らかにされる。このように $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ を記述する模型における秩序状態が量子効果によってはじめて安定となるきわめて特異な秩序状態であることが、強い秩序抑制の理由であると結論される。

## 審 査 の 結 果 の 要 旨

軌道自由度が関与する物性の研究は近年の固体物理研究の大きな潮流のひとつであるが、本論文では、その中のテーマである八重極モーメント秩序に関して確たる結論を提示している。信頼すべき結論を得るためには相関効果を適切に考慮することが不可欠であるが、本論文ではその点がよく考慮されており、高く評価される。さらに、擬スピン模型を用いた考察においては、この擬スピン模型が、フラストレーション効果によって極めて特異な基底状態、低励起状態を有していることが明らかにされている。フラストレーションを有する量子スピン系の研究自体大きな研究分野のひとつであるが、本論文はその研究分野に対しても重要な貢献を与える研究である。よって、著者は博士（理学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。