

論文の内容の要旨

論文題目：

Theoretical analyses of Ru oxides on the basis of a conserving approximation

(保存近似に基づく Ru 酸化物の理論解析)

氏名：荒川 直也

強相関電子系 (SCES) では、遍歴する電子が強い電子間相互作用を感じることに由来する多体効果のために、1 電子描像から大きく外れたふるまいを示すことがある。特に、磁気秩序などの量子臨界点 (QCP) 近傍では、そのずれが顕著になり、輸送係数の異常な温度依存性などが観測される。

軌道自由度を無視した SCES に関する輸送現象の理論研究がこれまで行われてきたが、精力的な実験により軌道自由度が本質的な役割を果たす SCES の QCP 近傍でも異常な輸送現象が観測され、軌道自由度を考慮した SCES の輸送現象に関する理論研究の必要性が高まってきた。軌道自由度が本質的な役割を果たす SCES の例として、本論文の対象である、擬 2 次元 t_{2g} 電子系の Ru 酸化物が挙げられる。つまり、Ru 酸化物では 1 次元性の強い dxz/dyz 軌道と 2 次元性の強い d_{xy} 軌道が重要な役割を果たす。

しかし、QCP 近傍の輸送現象を議論する上で重要な役割を果たすことが軌道自由度を無視した研究により知られている、(1) 電子間相互作用による電子の自己エネルギー補正の波数依存性、(2) 電子間相互作用による電子正孔型 4 点バーテクス関数 (VF) の温度依存性、の 2 点を考慮した多軌道系の理論は存在しない。ここで、電子の自己エネルギーはバンド速度と準粒子 (QP) のダンピングの変化をもたらし、電子正孔間の多重散乱を記述する電子正孔型 4 点 VF は、増強したある特定の波数のゆらぎの強い温度依存性により、そのゆらぎで強く散乱される電子の電流の角度の特徴的な温度依存性をもたらす。特に、(1) が電気抵抗に強く影響し、その非フェルミ液体 (nFL) 的な温度依存性をもたらすこと、(2) が弱磁場極限の通常ホール係数に強く影響し、その Curie-Weiss (CW) 的な温度依存性をもたらすことが軌道自由度を無視した理論研究により知られている。

そこで、本論文では、QCP 近傍の多軌道 SCES の輸送現象における (1) と (2) の役割の解明および多軌道系特有の新奇な輸送特性の創出を目指し、Ru 酸化物の輸送係数の理論解析を行った。より具体的には、微視的なフェルミ液体 (FL) 論に基づいて多軌道系の縦および横伝導度の定式化を行い、それらを用いて、ゆらぎ交換 (FLEX) 近似と真木-Thompson (MT) 型の電流のバーテクス補正 (CVC) を考慮した手法を使って、 Sr_2RuO_4 のモデルである、2 次元正方格子上の t_{2g} 軌道ハバードモデルの面内の

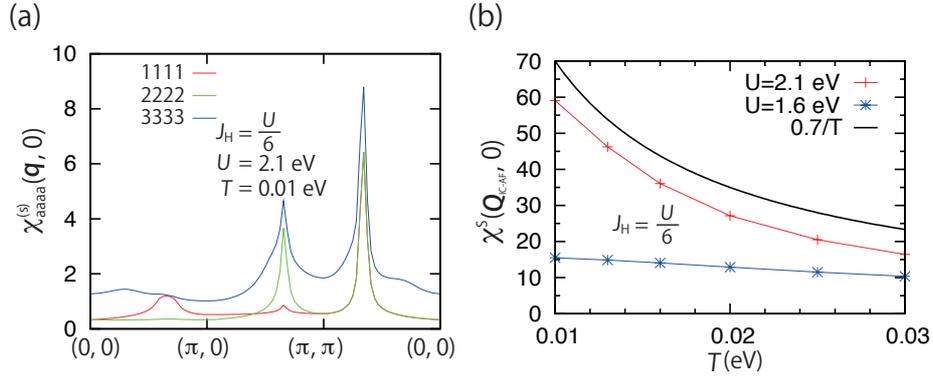


図 1. FLEX 近似で求めた、 Sr_2RuO_4 の (a) 帯磁率のスピンの波数依存性と (b) スピン帯磁率の温度依存性。

電気抵抗と弱磁場極限の通常ホール係数を数値計算により調べた。ただし、FLEX 近似が保存則を満たす近似（保存近似と呼ばれる）の一種であり、伝導度の定式化で QP の寿命（つまり、QP のダンピングの逆数）の最も特異的な寄与のみを考慮したので、用いた手法は、QCP 近傍の金属相の低温の輸送現象を調べるのに適した理論である。また、CVC は電子正孔型 4 点 VF による電流の補正である。

実際の計算では、 Sr_2RuO_4 のモデルの QCP である、非整合な (IC) 反強磁性 (AF) の QCP 近傍 ($U=2.1\text{eV}$) の場合と離れている ($U=1.6\text{eV}$) 場合を考えた。ここで、IC AF QCP では、全ての t_{2g} 軌道が協力する、 $Q_{\text{IC-AF}} = (2\pi/3, 2\pi/3)$ の AF スピンゆらぎ (SF) が増強され [図 1. (a)]、CW 的な温度依存性を示す [図 1. (b)]。また、「軌道内クーロン相互作用が $U=1.6\text{eV}$ 」を QCP から離れている場合として選んだ理由は、この値が、全ての t_{2g} 軌道の $Q_{\text{IC-AF}}$ の AF SF のピークが一致する最小の U の値だからであり、この全ての軌道が協力する IC AF SF の輸送現象への影響を QCP 近傍とそうでない場合で議論する上で適していると考えたからである。

上述の解析により、以下で示す 6 つの主要な結果を得た。

(i) IC AF QCP から離れている場合の面内の電気抵抗が T^2 則 (FL 的な挙動) を示すのに対して、QCP 近傍では T に比例する温度依存性 (nFL 的な挙動) になること [図 2. (a), (b)]。ここで、この電気抵抗の温度のべきの変化は、MT 型 CVC の有無によらないため、QCP 近傍での QP のダンピングの特徴的な波数依存性に起因することがわかる。

(ii) 面内の電気抵抗に対する MT 型 CVC の影響が単にその値を増加させること [図 2. (a)]。これは、MT 型 CVC による電流の減少に起因している。

(iii) 面内の縦伝導度が主に dxz/dyz 軌道の寄与で、 dxy 軌道の寄与はかなり小さいこと [図 2. (c)]。これは、 dxz/dyz 軌道の QP のダンピングが dxy 軌道のそれよりも小さいこととバンド速度の波数依存性に起因する。ここで、定式化した縦伝導度は QP のダ

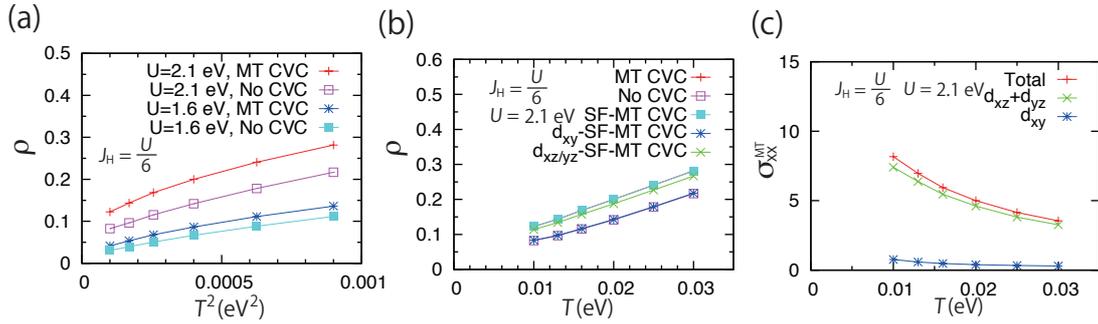


図 2. (a), (b) 面内の電気抵抗と (c) 縦伝導度の各軌道の成分。

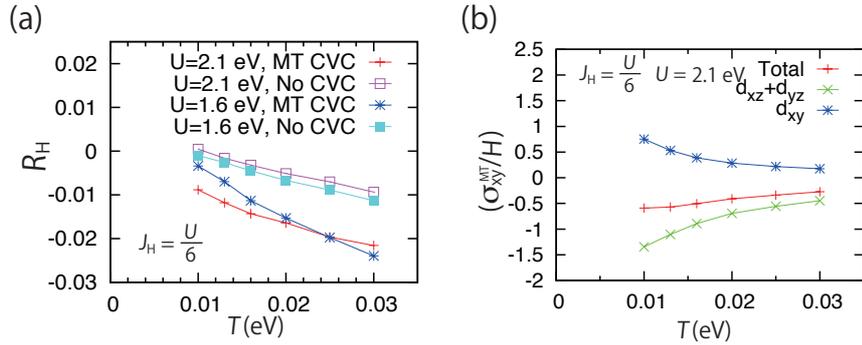


図 3. (a) 通常ホール係数と (b) 横伝導度の各軌道の成分。

ンピングの逆数に比例するので、**QP** のダンピングの小さい軌道の電子が伝導に主要な役割を果たす。

(iv) 電気抵抗の場合と対照的に、通常ホール係数は電子の自己エネルギーの影響をほとんど受けないこと [図 3. (a) 中の No CVC の $U=2.1, 1.6\text{eV}$ のデータを参照]。これは、定式化した通常ホール係数に対する自己エネルギーの依存性が分子と分母でほぼ相殺することに起因する。

(v) dxz/dyz 軌道と dxy 軌道の横伝導度の符号が逆であるため、このモデルの通常ホール係数の値が 0 近くの値を取ることを [図 3. (b)]。これは、使ったモデルのバンド構造と各軌道の電子の占有数の詳細のためである。

(vi) MT 型 CVC による電流の角度が曲がることにより、**QCP** 近傍と離れた場合のどちらでも通常ホール係数が負に増大し、その増大は **QCP** から離れた場合では低温で抑制されること。ここで、負の増大は、多軌道系特有の、 dxz/dyz 軌道と dxy 軌道の $Q_{\text{IC-AF}}$ の軌道非対角 SF に由来する MT 型 CVC による dxz/dyz 軌道の電流の角度の変化 [図 4. (b)] に由来する。また、**QCP** から離れた場合の低温での振る舞いは、上述の負の増大が、 dxy 軌道の $Q_{\text{IC-AF}} = (\pi, 2\pi/3)$ の SF に由来する MT 型 CVC による dxy 軌道の電流の角度の変化 [図 4. (a)] に由来する正の増大との相殺のためである。

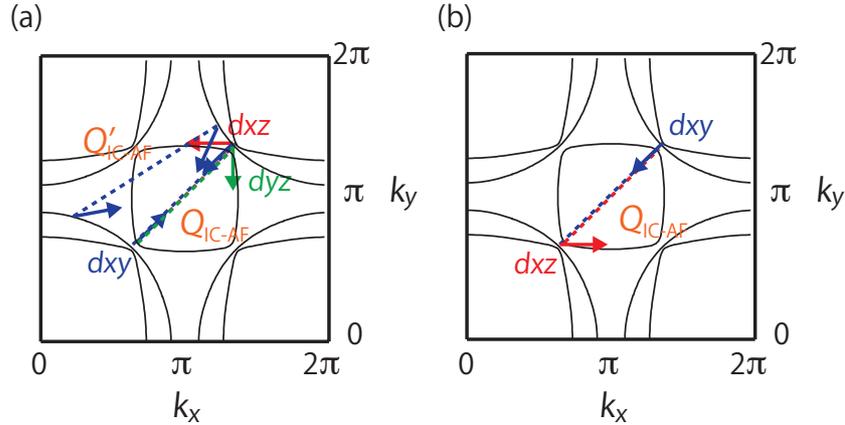


図 4. フェルミ面上の (a)dxy 軌道と (b)dxz 軌道の電流が MT 型 CVC により受ける影響の模式図。

ここで、(i)、(ii)、(iv) は軌道自由度を無視した理論研究と定性的に同じ結果で、それ以外は軌道自由度に由来した性質である。

そして、以上の結果から、以下の 2 つの結論を導いた。

一つ目は、 Sr_2RuO_4 の QP ダンピングと同様の軌道依存性は他の Ru 酸化物でも実現するので、Ru 酸化物の面内の電気抵抗は主に dxz/dyz 軌道の電子によること。多軌道系特有の大切な点は、この伝導に主要な役割を果たす電子の軌道と磁気ゆらぎに主要な役割を果たす電子の軌道（今の場合は dxy 軌道）が異なる点である。この相違は、磁気ゆらぎの増大が QP ダンピングの増大を導くことと、伝導は QP ダンピングが小さい軌道の電子が主要になることに由来する。つまり、Ru 酸化物の電気抵抗の結果は dxy 軌道の磁気ゆらぎではなく、 dxz/dyz 軌道の磁気ゆらぎの情報を与えることが分かる。

もう一つは、軌道自由度を無視した場合と異なり、AF QCP 近傍であっても、符号が逆である MT 型 CVC の寄与のために、通常ホール係数が CW 的な強い温度依存性を示さない場合があること。しかし、各軌道の電子の占有数や QP ダンピングの各軌道の相対比を変えれば、上述の相殺を緩和することが期待でき、その場合には通常ホール係数が特徴的な温度依存性を示すと考えている。この点の検証は将来の課題の一つである。

まとめると、本論文は Ru 酸化物の輸送現象の理解を深めるだけでなく、多軌道 SCES の輸送現象の分野の新たな潮流の第一歩になると期待している。特に、複数の隣接したフェルミ面をもち、軌道の次元性の特徴が異なる、Ru 酸化物と同様の状況が実現する多軌道 SCES では、各軌道が協力的な役割を果たす、軌道非対角 SF に由来する MT 型 CVC による電流の補正と同様の機構がその系の輸送現象を議論する上で重要になると考えているので、その普遍性と多様性についても今後の課題の一つである。