

Theoretical Study of Novel Magnetism and Electronic States in Spin-Charge-Orbital Coupled Systems

その他のタイトル	スピン・電荷・軌道結合系における新奇な磁性と電子状態の理論的研究
学位授与年月日	2014-09-26
URL	http://doi.org/10.15083/00007801

審査の結果の要旨

論文提出者氏名：速水 賢

固体中を運動する電子におけるスピン・電荷・軌道の自由度の絡み合いは、種々の興味深い性質をもたらす起源として、凝縮系物理学における基本的で重要な問題である。こうした複合自由度の物理は、その基礎物理学的な側面だけでなく、新しい電子デバイスへの応用の観点も含めて広い視点から精力的な研究が進められている。そうした研究から、複数の自由度が絡んだ新奇な電子秩序や、トポロジカルホール効果やスピホール効果といった非従来型の輸送現象、巨大磁気抵抗効果や電気磁気効果といった外場への新奇な応答といった新しい概念や現象が次々と見出されている。本論文では、こうした複合自由度の絡み合いを通じて現れる新しい磁性や電子状態のさらなる開拓を目的として、種々の基本的なモデルに対して相補的・多角的な理論手法を用いた研究を行った。それらを通じて、主にスピン軌道相互作用、スピン電荷結合、格子構造の幾何学的フラストレーションがもたらす新しい秩序状態と、それによる新奇な輸送現象や電気磁気効果を明らかにした。

本論文は英文によって執筆されており、以下の9章と8つの付録からなる。以下に各章の概要を述べる。

第1章では、電子のもつスピン・電荷・軌道自由度と、それらの絡み合いがもたらす興味深い現象に関する従来の研究をいくつか紹介し、本研究の研究動機を述べている。

第2章から第8章にわたって、本研究を通じて得られた結果が順序立ててまとめられている。第2章では、金属中で発現するトロイダル秩序に関して調べた結果を論じている。まずは、格子構造の局所的な空間反転対称性の破れを反映した反対称スピン軌道相互作用を含む有効モデルを導出し、トロイダル秩序のもとで現れるバンド構造の特徴的な変調や、異方的な磁気伝導現象、および2つの異なるタイプの電気磁気効果が発現することを明らかにした。さらに、ゼロ磁場で現れる新しいタイプの内因的なホール効果を理論的に予言した。また、候補物質のひとつである UNi_4B を念頭においたモデルに対する解析も行い、トロイダル秩序相が安定に現れることを明らかにした。

第3章では、重い電子系を念頭において、反対称スピン軌道相互作用がもたらす多極子秩序を論じている。反対称混成効果を含んだ周期的アンダーソンモデルから出発して、反対称交換相互作用をもった拡張近藤格子モデルを導出した。そのモデルに対して、基底状態における変分計算、焼きなまし法、および有限温度のモンテカルロ計算を相補的に用いることで、トロイダルと磁気四極子を含んだ多極子秩序が現れることを明らかにした。また、それが電気磁気効果を引き起こすことも示した。

第4章では、局所的な反転対称性の破れた系において、自発的な電子秩序が引き起こす

新しい現象に関する結果を示している。単層遷移金属カルコゲナイドを模した2軌道モデルに対して、空間反転対称性を破るスピン・電荷・軌道秩序に対する対称性の観点からの解析が示され、その分類と電気磁気効果の発現との関係を解明した。このモデルに対する平均場近似計算から、2種類の電気磁気効果を示すスピン軌道複合秩序が安定に現れることを見出した。また、単層遷移金属カルコゲナイドを念頭においた3軌道モデルへの拡張も行い、スピン軌道複合秩序相が広いパラメータ範囲で安定に存在することを示した。

第5章では、第2章で言及された UNi_4B に現れるような部分無秩序状態に関する研究結果を論じている。三角格子上の周期的アンダーソン模型に対する平均場近似により、部分無秩序相の磁氣的異方性・外部磁場・電子フィリングに対する安定性を詳細に調べ上げた。また、動的平均場近似による解析も行い、量子揺らぎに対して部分無秩序相が安定に残ることも明らかにした。

第6章では、非共線・非共面な磁気構造を示す多重 Q 磁気秩序の起源が論じられている。近藤格子模型を例にとり、スピンと電荷の相互作用に関する高次摂動を慎重に吟味することにより、フェルミ面の(d-2)次元的な差し渡しによって多重 Q 秩序が誘起される新しい安定化機構を見出した (d は系の空間次元)。これは、磁気不安定性において重要となるフェルミ面のネスティングとは異なる効果である。

第7章では、第6章で調べた多重 Q 秩序の典型的な例として、3次元立方格子上の非共面な3重 Q 磁気秩序に関する結果を論じている。まずは3重 Q 秩序のもとでは、特定の電子フィリングにおいて3次元ディラック電子が現れることを見出した。さらに、外部磁場のもとではワイル電子対が、別の摂動のもとではいわゆる AIII トポロジカル絶縁体が現れることも明らかにした。変分計算・平均場近似・モンテカルロ計算により、この3重 Q 秩序が安定に現れることを示した。また、表面状態についても調べ、射影されたディラック点をつなぐようなフェルミアーク様の特徴的な電子状態が現れることも示した。

第8章では、電荷秩序と多重 Q 磁気秩序の関連を論じている。前章の3次元立方格子上のモデルに関するさらなる解析により、3重 Q 秩序を伴った電荷秩序状態を見出した。ここでは、電荷秩序のもとで発現する有効的な幾何学的フラストレーションが重要な役割を果たしていることを論じている。

第9章では、本研究によって得られた成果についての総括と今後の展望が示されている。

以上をまとめると、本論文では、固体中の電子に対する種々の基本的なモデルに対して、スピン・電荷・軌道自由度の絡み合いを様々な計算手法を用いて相補的に調べ上げることにより、新奇な磁性や電子状態、非従来型の輸送現象、電気磁気効果などを理論的に明らかにした。本研究の結果は、それらの新規な現象の起源や発現条件を明らかにした点で、基礎物理学的な側面だけでなく将来のエレクトロニクスへの応用上も重要な研究成果といえる。今回得られた成果のいくつかは、物性科学・物理工学の発展に大きく寄与すると期待される。以上より、本論文審査委員会において審査員全員一致で、本論文が博士(工学)の学位論文として合格であると判定された。