

第 1 章 研究の現状と今後の計画（概要）

金属物性論研究部門

部門担当教授 前川 禎通 (1997.4～)

【部門構成員】

教授：前川 禎通、 助教授：遠山 貴巳、 助手：高橋 三郎、小山 富男、小椎八重 航、
COE フェロー：森 道康、 研究支援者：筒井 健二、 産学官連携研究員：市村 雅彦、松枝 宏明、
その他（事務補佐員 3 名）

【研究成果】

当研究部門では遷移金属酸化物の電子物性の理論的研究を行っている。遷移金属酸化物は高温超伝導や金属絶縁体転移等の電子相関に基づく物性物理の多くの重要課題を持つとともに、応用上でも次世代のエレクトロニクス材料として注目される。

2004 年度では、Cu 酸化物 (**Ref.1, 2, 3**)、Mn 酸化物 (**Ref.5**) 及び Co 酸化物 (**Ref.4**) におけるモット絶縁体状態及びドーピングしたモット絶縁体の電子状態を理論的に研究した。

- (1) 一次元モット絶縁体における電子のスピン電荷分離の性質を明らかにし、それが強い非線型光学応答に導くことを示すと同時に、非線型光学素子材料開発の指針を示した。
- (2) これらの強相関電子系での電子の内部自由度（スピン・電荷・軌道）の相互作用、それぞれの秩序の競合及び素励起の性質とそれらの観測方法に注目した。そして、放射光を用いた観測理論を構築した。
- (3) 熱電変換材料及び新しく超伝導体として注目されている三角格子 Co 酸化物において電子の示す格子はカゴメ格子であることを明らかにした。これは軌道縮退が電子系に格子とは違った対称性を与えることを証明したものである。
- (4) 長年の懸案であった教科書「遷移金属酸化物の物理」を完成させ、Springer 社（ドイツ）より 2004 年 6 月に出版した。 (**Ref.1**)

1. Maekawa S., Tohyama T., Barnes S.E., Ishihara S., Koshibae W., Khaliullin G.
Physics of Transition Metal Oxides
Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 144 (2004), ISBN: 3-540-21293-0
2. Mori M., Tohyama T., Maekawa S., Riera J. A.
Friedel oscillations in a two-band Hubbard model for CuO chains.
Phys. Rev. B, 69 (2004), 014513
3. Onodera H., Tohyama T., Maekawa S.
Temperature and dimensionality dependencies of optical absorption spectra in Mott insulators.
Phys. Rev. B, 69 (2004), 245117
4. Khaliullin G., Koshibae W., Maekawa S.
Low Energy Electronic States and Triplet Pairing in Layered Cobaltate.
Phys. Rev. Lett., 93 (2004), 176401

5. Ishii K., Inami T., Ohwada K., Kuzushita K., Mizuki, J., Murakami Y., Ishihara S., Endoh Y., Maekawa S., Hirota K., Moritomo Y.
Resonant inelastic X-ray scattering study of the hole-doped manganites $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$
($x = 0.2, 0.4$).
Phys. Rev. B, 70 (2004), 224437

【研究計画】

多くの遷移金属酸化物は電子間のクローン相互作用が強い、いわゆる強相関電子系である。電子は個々のイオンに滞在する時間が長く、そのために電子の内部の自由度であるスピンと電荷の振る舞いに軌道状態の個性が顕著に反映され、各自由度の秩序状態がお互いに競合し様々な量子現象が現れる。同様なことは分子性の有機化合物や生体物質についても言える。そのため、スピン（磁性）や軌道（電子の空間的広がり）の小さな変化が電荷（電気伝導）の巨大な変化に跳ね返ってくる。また逆に電荷の小さな変化が磁性の巨大な変化を引き起こす。これらの量子現象は電子の多体効果によるところから、局所密度近似に基づく第一原理計算や平均場などの近似計算では、必ずしも捉えられない。

一方、系を記述する微視的モデルに対する近似を挟まない数値シミュレーションはその物性の本解明に威力を発揮する。当研究部内では長年にわたり開発してきた多体電子系における数値計算・シミュレーション法を用いて上記強相関物質の量子効果を解明し、次世代のエレクトロニクスのための材料開発のための指導原理を構築する。