

課題名 (タイトル) :

## 遷移金属化合物ヘテロ構造・超格子構造の理論的研究

利用者氏名 : ○榊原 寛史

所属 : 柚木計算物理研究室

## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

Ir, Os, Pt 等の  $5d$  遷移金属の酸化物中の電子では有効な合成角運動量がよい量子数になる。例えばペロブスカイト構造を持つ層状酸化物  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  では、スピン軌道相互作用により生まれた有効角運動量  $J_{\text{eff}} = 1/2$  状態の電子数が half-filled 状態になることで金属絶縁体転移が起こる[1]。つまり、スピン軌道相互作用の結合定数  $\lambda$ 、バンド幅  $W$ 、及び電子間相互作用  $U$  らが同程度の働きをすることが  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  の絶縁体転移の必要条件になっている。一方、3次元的に繋がったペロブスカイト構造を持つ酸化物  $\text{BaOsO}_3$  では半金属的な電気抵抗が観測されている。バンド幅  $W \sim 4td$  ( $t$ =最近接サイトへのホッピング、 $d$ =次元数)であるから、3次元性の結果としてバンド幅が  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  に比べ広くなり、( $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  に比べ電子数一つ少ないという違いもあるにせよ) そのことが半金属性に大きく関与していると推察される。そこで本研究では、 $\text{BaOsO}_3$  を人工的に擬 2 次元系へ作り変えることでバンド幅の効果を相対的に小さくした新物質の電子状態を数値計算により調べ、 $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  で起こっているような  $\lambda$ 、 $W$ 、 $U$  らの効果の競合が起こるかどうかを調べた。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

$\text{BaOsO}_3$  と絶縁体  $\text{BaTiO}_3$  との超格子構造体である仮想物質  $\text{BaOsO}_3/\text{BaTiO}_3$  を考案し、第一原理バンド計算を実行することで電子のバンド構造を求めた。第一原理バンド計算を実行するために wien2k, vasp 等の package をインストールし、計算に用いた。比較のため  $\text{BaOsO}_3$  に対しても同様の計算を行った。計算結果を元に、最局在ワニエ軌道を構築し、それぞれの結晶構造に対応する強束縛模型を導出した。導出した模型において電子間相互作用の強さをパラメータとして設定、変化させながら、平均場近似を適用し、秩序パラメータをセルフコンシステントに収束させることで、

基底状態における秩序状態の安定性を数値的に評価・比較した。平均場近似による秩序変数の決定において、電子数を始めとした物理量の期待値の計算には線形テトラヘドロン法を用いて高精度に計算した。

## 3. 結果

$\text{BaOsO}_3$  については第一原理バンド計算の結果からも金属的な電気抵抗を示す結果が得られ、理論計算結果と実験観測結果の間で整合性が取れている。また、超格子構造体  $\text{BaOsO}_3/\text{BaTiO}_3$  について、平均場近似を適用した計算から、電子間相互作用が弱い領域では通常の金属状態、十分強い領域ではバンド絶縁体、中間の領域でエキシトニックな秩序が安定に成り得ることがわかった。

## 4. まとめ

平均場近似を超格子構造体  $\text{BaOsO}_3/\text{BaTiO}_3$  について適用しその基底状態を計算することで、 $\lambda$ 、 $W$ 、 $U$  からの寄与が同程度の場合におけるエキシトニック秩序の発達を示唆する結果が得られた。

## 5. 今後の計画・展望

平均場近似で得られる結果は電子間相互作用の効果を議論する手法の中では最も単純で結果の解釈がしやすく、計算コストも軽いというメリットがある。ただし、得られる結果は定性的には実験結果と一致する場合が多いものの、その定量性等は議論することができない。そこで今後の目標として、今回導出した強束縛模型に対して変分モンテカルロ法を適用することにより、電子相関の効果を高精度に評価し、平均場近似による計算結果との比較を行う。また、 $\lambda$ 、 $W$ 、 $U$  の協力が実現しうる他の物質も理論的に探索・提案する。

[1]H. Watanabe *et al.*, Phys. Rev. Lett, **105**, 216410(2010)

平成 26 年度 RICC 利用研究成果リスト

**【国際会議、学会などでの口頭発表】**

榊原寛史、白川知巧、柚木清司

“ペロブスカイト構造を持つ Os 酸化物超格子構造体の電子状態 (ポスター発表) ”、日本物理学会、中京大学、名古屋、2014 年 9 月

榊原寛史、白川知巧、柚木清司、

“ペロブスカイト型 Os 酸化物薄膜超格子で実現しうるスピン軌道相互作用が引き起こすエキゾチックな秩序の可能性 (ポスター発表) ”、基研研究会「多自由度電子状態と電子相関が生み出す新規超伝導の物理」京都大学基礎物理学研究所、京都、2014 年 10 月