



Title	Group Theoretical Classification of Mean Field Solutions of the Degenerate Orbital Systems
Author(s)	真砂, 啓
Citation	大阪大学, 2001, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/42447
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名	まさ 真 砂 啓
博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	第 1 6 3 0 7 号
学 位 授 与 年 月 日	平 成 13 年 3 月 23 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 基礎工学研究科物理系専攻
学 位 論 文 名	Group Theoretical Classification of Mean Field Solutions of the Degenerate Orbital Systems (軌道縮退系の平均場解の群論的分類)
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 鈴木 直 (副査) 教 授 三宅 和正 教 授 北岡 良雄

論 文 内 容 の 要 旨

本論文では、まず最初に、3種の軌道縮退ハバードモデルにおける平均場解の群論的分類を行った。用いた手法は、平均場ハミルトニアン H の自発的対称性の破れに伴って現われる状態を、系の対称性を記述する群の既約表現から得られた不変部分群によって分類する方法である。また3種のモデルは、単純立方格子上の e_g 軌道、三角格子上の e_g および t_{2g} 軌道モデルであり、オーダーリングベクトルとしては Γ 点と R 点のベクトルを立方格子に、 Γ 点と K 点のベクトルを三角格子に対して仮定した。

立方格子と三角格子の両 e_g モデルに関しては、積型不変部分群から非磁性状態7種、軸性磁性状態8種、計15種の自発的対称性の破れた状態を得た。いわゆる強磁性状態、反強磁性状態、電荷密度波状態やスピン密度波状態の他に、様々な軌道秩序状態が可能であり、特に、軌道秩序状態は擬スピン $\tau = (\tau^x, \tau^y, \tau^z)$ で特徴づけられ、 τ^y 型秩序状態は8重極状態に、 τ^x または τ^z 型秩序状態は4重極状態に対応することを明らかにした。また、三角格子に対しては非積型不変部分群から6種の自発的対称性の破れた状態を導いた。これらの状態には、スピンの三角配列の他に、軌道の三角配列に相当する状態さらには軌道とスピンの両方の秩序が複雑に共存する状態が含まれる。

三角格子上の t_{2g} モデルに対しては、積型不変部分群から23個の状態(非磁性状態11、軸性磁性状態12)、非積型不変部分群から12個の状態を導いた。 e_g モデルの場合よりもさらに変化に富んだ状態が可能であり、特に新奇な状態の例としては、3個の異なる軌道のスピンの一つの原子内で三角配位を作る状態が挙げられる。

最後に、ペロブスカイト型マンガ酸化物に対応するより現実的な立方格子 e_g モデルを構築し、その平均場解の解析を群論的および数値的に行った。具体的には、4種のオーダーリングベクトル、 $Q_F = (0, 0, 0)$ 、 $Q_A = (0, 0, \pi)$ 、 $Q_C = (\pi, \pi, 0)$ 、 $Q_G = (\pi, \pi, \pi)$ を伴う軸性スピン状態と軌道秩序状態の組み合わせから得られる計16個の状態に対する不変部分群を求め、その対称性の条件から対応する平均場ハミルトニアン H の正準形を決定した。得られた平均場ハミルトニアンを数値的に解き、適当なパラメータセットを選ぶと、実験で観測されている $A \rightarrow F \rightarrow A \rightarrow C \rightarrow G$ のようなスピン秩序構造のホールドーピングに伴う連続的な変化が可能であることを明らかにした。

論文審査の結果の要旨

最近、ペロブスカイト型マンガナイトでスピンと電荷の自由度に加えて軌道の自由度を反映した多彩な秩序状態が発見され、軌道縮退系の物性は実験・理論の両面から強い興味を持たれている。

本論文では、まず最初に、軌道縮退系における秩序状態に関する一般的知見を得る目的で、ペロブスカイト型立方格子および三角格子上の軌道縮退ハバード系（主として二重縮退 e_g 型モデル）における平均場解の群論的分類を行った。理論的手法は系の対称性を記述する群の既約表現から得られた不変部分群によって分類する方法であり、オーダリングベクトルとしては Γ 点と R 点のベクトルを立方格子に、 Γ 点と K 点のベクトルを三角格子に対して仮定している。立方格子と三角格子の両モデルに対して、積型不変部分群から非磁性状態 7 種、軸性磁性状態 8 種、計 15 種の自発的対称性の破れた状態を得ている。多彩な電荷、スピン、軌道の秩序状態あるいはそれらの複合秩序状態が可能であり、特に、軌道秩序状態は擬スピン $\tau = (\tau^x, \tau^y, \tau^z)$ で特徴づけられ、 τ^y 型秩序状態は 8 重極状態に、 τ^x または τ^z 型秩序状態は 4 重極状態に対応することを明らかにした。また、三角格子に対しては非積型不変部分群から、スピンの三角配列の他に、軌道の三角配列に相当する状態さらには軌道とスピンの両方の秩序が複雑に共存する状態を含む系 6 種類の興味ある状態を導き出した。

最後に、ペロブスカイト型マンガナイトに対応するより現実的な立方格子 e_g モデルに対する数値解析を行い、適当なパラメータセットを選ぶと、実験で観測されているようなスピンに関する逐次相転移がホールドーピングに伴って起こり得ることを明らかにした。また、それぞれのスピン構造に対してどのような軌道秩序が伴っているかも明らかにして、今後の実験的研究に重要な示唆を与えている。

以上のように本研究は、ペロブスカイト型立方格子および三角格子上の軌道縮退系における平均場解を一般的に分類して特異な基底状態の可能性を示唆する結果を得ると同時に、現実の軌道縮退系であるマンガナイトにおける軌道・スピン状態に関して重要な知見を得ており、物性物理学の発展に寄与するところが多い。よって本論文は博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。