

マンガン酸化物における新しい磁気相

日本原子力研究所 先端基礎研究センター 堀田 貴嗣

マンガン酸化物における複雑な電荷・スピン・軌道秩序構造の様相は、最近の実験および理論研究によって急速に理解されるようになってきたが [1]、それと同時に、マンガン酸化物の相図は我々が想像するよりも遥かに豊富であることも明らかになってきた。たとえば、構造がよくわかっていると思われていた RMnO_3 (Rは希土類イオン) において、最近、新しい磁気構造が見つかった [2]。R=La の場合は、図 1(a) に示すような A-タイプと呼ばれる磁気構造であることは古くから知られているが、R=Ho の場合に、E-タイプと呼ばれる奇妙なスピン構造が見い出された。これは、図 1(b) に示すように、スピンのジグザグ状に強磁性的に配列し、そのジグザグ鎖が反強磁性的に結合したものである。

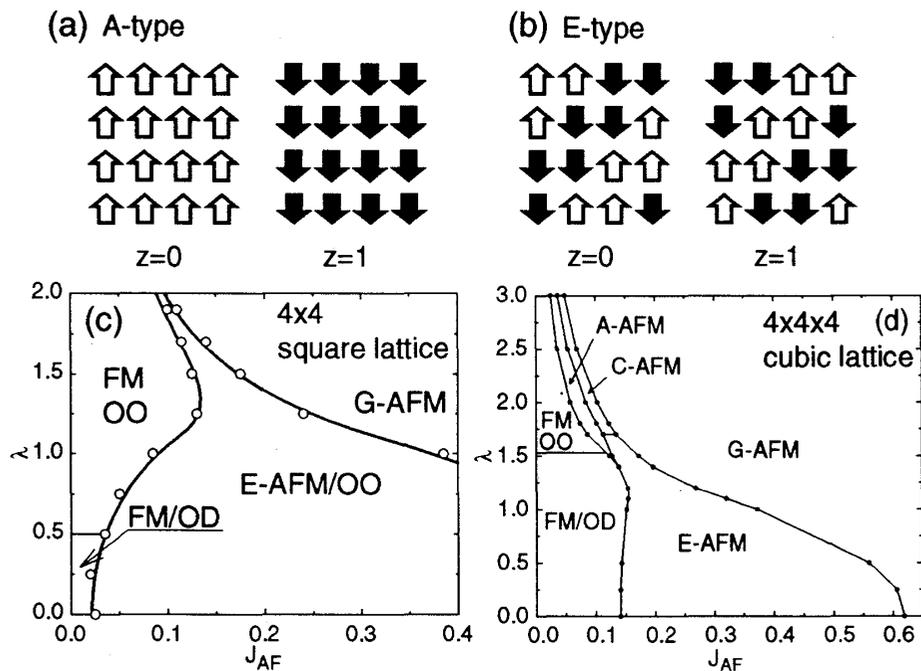


図 1: (a)A-タイプおよび (b)E-タイプ構造の模式図。(c)4x4 および (d)4x4x4 格子に対する相図。 λ は無次元化された電子・格子結合定数、 J_{AF} は局在 t_{2g} スピン間の反強磁性結合定数である。実線は平均場近似の結果をあらわす。(c)の○はモンテカルロシミュレーションによる数値計算結果である。

このような構造を明らかにするために、マンガン酸化物に対する一般的なハミルトニアンを解析した [3]。その結果を図 1(c) と (d) に示す。まず、2次元の 4x4 格子において、モンテカルロシミュレーションによる結果と、ヤーンテラー歪を平均場近似によって取り扱った結果を比較すると、相境界については概ね一致する結果が得られており、このことから、平均場近似が今の場合

には妥当であることがわかる。ここで特徴的なことは、E-タイプ構造が相図の広い範囲に現れていること、特に、 $\lambda=0$ でも出現していることである。1次元的な強磁性ジグザグ経路においてホッピングの方向が変わると、異なる軌道間の跳び移り積分の位相も変化し、ジグザグに応じた周期ポテンシャルが自然に現れ、それによって大きなバンドギャップが生じるために、図1(b)に示したようなE-タイプのジグザグ構造が安定化される。ちなみに、 $x=0.5$ においては、ジグザグの周期が長くなったCE-タイプと呼ばれる構造が安定になることが理解される [4]。

以上の結果が次元によるものではないことを調べるために、3次元の $4\times 4\times 4$ 格子においても計算を実行した。この場合は平均場近似しか実行していないが、2次元における比較から、その結果は信頼できると考えられる。図1(d)に示したように、3次元においてもやはり、相図の広い範囲でE-タイプ構造が現れることから、これは2次元の特殊性ではないことがわかる。また、3次元の場合は、現実的な強結合の値 $\lambda=1.5$ 付近でA-タイプとE-タイプの反強磁性相が隣接しているが、これは実験でみられるA-タイプ ($R=La$) からE-タイプ ($R=Ho$) への変化に対応すると考えられる。

さて、E-タイプ構造の出現以外にもう一つ特徴的なことがある。このE-タイプ相は、先に述べたように $\lambda=0$ でも絶縁体であるが、2次元においても3次元においても、強磁性金属相と隣接しているのである。 $x=0$ における強磁性金属相の存在については、運動量空間における詳しい計算によって、少数系の特殊性ではないことが確認されている [5]。これらの結果から、一つの面白い可能性を指摘することができる。すなわち、圧力を印加することによってE-タイプ反強磁性相から強磁性金属相に変化させることができれば、ホールをドーブしなくても、超巨大磁気抵抗現象が現れる可能性が考えられるのである。マンガン酸化物のもつ高いポテンシャルを考えれば、実際に実験によって観測されることが大いに期待される。

本研究は、Mohammad Moraghebi 氏、Adrian Feiguin 氏、Adriana Moreo 氏、柚木清司氏、Elbio Dagotto 氏との共同研究である。また、文部科学省科学研究費補助金・特定領域研究の援助を受けている。

参考文献

- [1] たとえば、E. Dagotto, T. Hotta, and A. Moreo, *Phys. Rep.* **344**, 1 (2001).
- [2] A. Muñoz *et al.*, *Inorg. Chem.* **40**, 1020 (2001); T. Kimura *et al.*, cond-mat/0211568.
- [3] T. Hotta *et al.*, cond-mat/0211049.
- [4] T. Hotta *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2477 (2000).
- [5] T. Hotta, preprint.