

## 5d電子系イリジウム酸化物における 新奇的な絶縁体と超伝導

渡部 洋 (理化学研究所創発物性科学研究センター)

白川知功 (理化学研究所)

柚木清司 (理化学研究所創発物性科学研究センター, 計算科学研究機構)

固体中の電子は原子核、結晶格子、自身以外の周囲の電子など多くの相手と相互作用をしながら運動し、各物質に特有な性質を産み出している。これらの相互作用の一つである「スピン軌道相互作用」は相対論的な効果を起源とし、量子力学初期の段階から知られているが、近年その重要性に大きな注目が集まっている。スピン軌道相互作用がもたらす効果は枚挙に暇が無く、エネルギーバンド構造の変化や磁気異方性をもたらすことはもちろん、トポロジカル絶縁体、(交換相互作用の異方性に起因する)量子スピン液体、マルチフェロイクスといった新しい概念さえも産み出すことが分かってきた。特に近年の大型シンクロトロンを用いたX線散乱の実験技術の向上によってスピンと軌道の結合の詳細が明らかになりつつあり、基礎・応用の両面から注目を集めている。スピン軌道相互作用が無視出来ない場合は、軌道角運動量 $L$ とスピン角運動量 $S$ がもはや良い量子数では無くなり、両者を合成した全角運動量が良い量子数となる。通常、全角運動量は $J=L+S$ と表されるが、本稿で紹介する5d電子系イリジウム酸化物では $J_{\text{eff}}=-L+S$ を良い量子数とする特異な状態が実現しており、新たな強相関電子系の舞台として注目を集めている。

本稿では5d電子系イリジウム酸化物の例として層状ペロブスカイト型構造を持つ $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ を取り上げ、これまでの研究の現状について紹介する。この物質は特殊な磁気構造を持つ絶縁体であるが、従来のモッ

ト絶縁体の描像では説明出来ず、その電子状態の解明は長年の問題となっていた。我々はこの問題に対し、複数の計算手法を用いて $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ をモデル化した3軌道ハバード模型を解析した。その結果、この物質は $J_{\text{eff}}=-L+S$ を良い量子数とし、クーロン相互作用とスピン軌道相互作用が協力的に働くことで実現する特異な絶縁体であることを示した。また、電子間のクーロン相互作用が電子の運動エネルギーに比べて小さい系を弱相関系、大きい系を強相関系と呼ぶが、 $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ はちょうど両者が入れ替わる「中相関系」とも言うべき領域に位置していることを示唆する結果が得られた。これは5d電子の強い遍歴性に起因するものであり、実験・理論ともにアプローチが難しい領域であるが、それ故に金属・絶縁体転移のメカニズムを深く理解するための格好の場を提供しているとも言える。また、キャリアをドーピングすることでスピンと軌道が結合して出来た「擬スピン」がペアを組んだ超伝導が発現する可能性を示し、新たな超伝導体の候補と成り得ることを提案した。

$\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ が最初に合成されたのは1950年代であるが、その面白さが理解されてきたのは実に今世紀に入ってからである。これは、様々な実験技術の向上と多軌道電子系に対する理論解析の手法の進展によるところが大きい。まさに「故(ふる)きを温(たず)ねて新しきを知る」の好例であろう。今後も「故くて新しい」スピン軌道相互作用に対する研究の進展が期待される。

### —Keywords—

#### スピン軌道相互作用：

電子のスピン角運動量と軌道角運動量の間働く相互作用のこと。電子が原子核の周りを回転運動する際の、電子の位置に作られる磁場と電子の磁気モーメントの間の磁氣的相互作用として理解できる。スピン軌道相互作用が無視できるほど小さい場合には、結晶場による軌道角運動量の消失のため、磁気モーメントはスピン角運動量による寄与が支配的である。一方、スピン軌道相互作用が大きい場合には軌道角運動量が復活し、様々な物理量に顔を出すようになる。 $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ においては、磁気モーメントに対する軌道角運動量の寄与がスピン角運動量の5倍にも達するという報告がされている。

#### 5d電子系物質：

伝導を担う最外殻の電子が5d軌道を占有している物質系のこと。Ir, Os酸化物などが代表例であり、スピン軌道相互作用が重要な役割を果たす系として近年さかんに研究が行われている。また、典型的な強相関電子系である3d電子系に比べて遍歴性が強く(電子が動き回りやすい)、クーロン相互作用との競合の様相も異なるため、新たな電子相関の舞台として期待されている。