

## 論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 14046 号
------	---------------

氏 名 萬條 太駿

### 論 文 題 目

放射光X線を用いた $\text{FeV}_2\text{O}_4$ の軌道自由度に関する研究  
(Research of orbital degrees of freedom in  $\text{FeV}_2\text{O}_4$  using  
synchrotron radiation X-rays)

### 論文審査担当者

主査	名古屋大学	工学研究科	教授	澤 博
委員	名古屋大学	工学研究科	准教授	片山 尚幸
委員	名古屋大学	工学研究科	准教授	岡本 佳比古
委員	名古屋大学	工学研究科	教授	張 紹良
委員	東北大学	理学研究科	教授	若林 裕助

## 論文審査の結果の要旨

萬條太駿君の提出の論文「放射光X線を用いた $\text{FeV}_2\text{O}_4$ の軌道自由度に関する研究」は、放射光X線を用いて、電子軌道状態の理解とその取扱いに関する新たな知見を与えた。各章の概要は以下の通りである。

第1章では、研究の背景を述べている。まず、本論文で注目する軌道自由度の歴史や物性とのかかわりを説明している。次に、最近取り組まれている電子軌道の直接観測手法を紹介している。そして本論文で重要な役割を果たしたコア差フーリエ合成(CDFS)法を説明している。

第2章では、電子軌道の一般的な取り扱いを説明している。まず電子軌道の教科書的な取り扱いを説明し、そこから段階的に配位多面体内の3d軌道の基本的な取り扱いまでを説明している。次に、現実の物質内における歪んだ配位多面体の場合における、3d軌道状態のモデル計算手法を2つ紹介している。典型的な軌道秩序を示す $\text{YTiO}_3$ を例に2つのモデル計算手法の有効性を検証している。その結果、結晶性の物質における電子の受ける結晶場を正しく求めることの重要性を明らかにしている。

第3章では、本論文の研究対象物質である $\text{FeV}_2\text{O}_4$ の基礎物性や先行研究を紹介している。この系の二つの遷移金属であるFeとVがイオン化して3d軌道は部分的な占有状態になっているが、電子相関によって電子が局在化した絶縁体である。しかし、FeとVの両方が軌道自由度を有し、これらが協奏することで逐次構造相転移と磁気転移を示すことが知られている。CDFS法の空間分解能や精度について解明するために、この系の各相における軌道状態とその電子占有状態を決定することが本研究の目的である。

第4章では、本論文で利用した実験手法を説明している。

第5章では、 $\text{FeV}_2\text{O}_4$ の高温立方晶相の電子状態に関する研究結果を説明している。この相のVサイトの電子軌道状態はサイトの対称性が高く歪が小さいため、第3章で紹介したモデル計算では一意に決まらない。そこで、CDFS法を利用して実験的に軌道状態の決定に取り組んでいる。CDFS法で観測された価電子密度分布の異方性から、Vにサイトでは2重縮退上に1電子が存在し、軌道自由度を持つ電子軌道状態であることを明らかにしている。また、Feサイトでも同様の軌道状態であることも明らかにしており、2サイトが軌道自由度を有していることを明らかにしている。また、この結果から2重縮退上の電子は時間・空間的に揺らいでいることが示唆されたため、非弾性X線散乱と組み合わせることで、そのダイナミクスを調査している。その結果、縮退軌道上の電子は縮退した軌道を揺らいで占有していることを明らかにしている。これは軌道自由度の理解に対する新たな知見である。

第6章では、Feの軌道縮退のみが解消される高温正方晶相でCDFS法の結果について述べている。相転移で形成されるドメインの問題に取り組み、手法開発から取り組んでいる。ドメインを含めたCDFS法を完成し、観測された価電子密度分布の異方性の変化からFeの軌道縮退が解消されていることを明らかにしている。長年にわたる懸案事項であったドメイン問題に対して新たな指針を示している。

第7章では、 $\text{FeV}_2\text{O}_4$ の基底状態である最低温正方晶相でCDFS法を行っている。FeとVの両方の軌道縮退が解消されていることを確認している。また、VサイトではCDFS法で観測された価電子密度分布の異方性が、単純な電子相関だけでは説明できないことに注目し、第一原理計算とタイアップを行い、磁気的な効果が存在することを明らかにしている。CDFS法の結果の取扱いに対して、有用な指針を示している。

第8章では、 $\text{FeV}_2\text{O}_4$ の高温相から最低温相にかけて非弾性散乱実験を行っている。軌道秩序にかかわる相転移の温度でソフトニングの振る舞いがみられ、電子軌道とフォノンに深いかかわりがあることを示している。

第9章では、研究の総括を述べている。

以上のように本論文では放射光X線を用いた電子軌道の取扱いに対して複数の先進的な知見を与えている。本論文での実験方法並びに得られた結果は、今後の基礎的な軌道物理学の発展に非常に重要であり、将来の工学の発展に寄与するところが大きいと判断できる。よって、本論文の提出者である萬條太駿君は博士(工学)の学位を受けるに十分な資格があると判断した。