

# Abstract

本研究では、多軌道系におけるクラスター形成について包括的な理解を得る目的で、電子のホッピングに結合するパイエルス的な格子歪みの自由度を取り入れた多軌道ハバードモデルの基底状態について調べた。特に、 $\text{LiVO}_2$  における三量体化、 $\text{SrV}_x\text{Ga}_{12-x}\text{O}_{19}$  における三量体化及び  $\text{AlV}_2\text{O}_4$  における七量体形成に注目し、 $\text{LiVO}_2$  に対応する三角格子、 $\text{SrV}_x\text{Ga}_{12-x}\text{O}_{19}$  に対応する  $\langle 111 \rangle$  パイロクロアスラブ格子、 $\text{AlV}_2\text{O}_4$  に対応するパイロクロア格子それぞれについてハートリーフォック近似により計算を行った。その結果、まずクーロン相互作用  $U$  及び三方晶歪み  $D$  が共に有限の領域で、 $\text{LiVO}_2$  に対応する三量体相が得られた。また格子歪みとの結合  $\alpha$  を考える事で、 $\langle 111 \rangle$  パイロクロアスラブ格子において  $\text{SrV}_x\text{Ga}_{12-x}\text{O}_{19}$  に対応する三量体化、パイロクロア格子において  $\text{AlV}_2\text{O}_4$  に対応する七量体化が起こるという結果を得た。この結果をもとにクラスター化した状態に対しその起源を探り以下のような結果を得た。 $\text{LiVO}_2$  において、三量体化の要因はハミルトニアン各项の期待値の比較からクーロン相互作用による軌道局在であるといえる。但し何故三量体を形成するのかは不明であり、クラスターの形には三方晶歪みによる軌道分裂が関わっていると考えられる。 $\text{SrV}_x\text{Ga}_{12-x}\text{O}_{19}$  及び  $\text{AlV}_2\text{O}_4$  の場合には、格子歪みとのパイエルス的な結合がある場合に、結合性軌道に入る事によるエネルギーの利得によってクラスターが形成されることがわかった。また、 $\text{SrV}_x\text{Ga}_{12-x}\text{O}_{19}$  と  $\text{SrCr}_x\text{Ga}_{12-x}\text{O}_{19}$ 、 $\text{AlV}_2\text{O}_4$  と  $\text{LiV}_2\text{O}_4$  の比較により、クラスター形成で作られる結合性軌道にちょうど入る電子数の場合にクラスター形成が安定化されることが分かった。