

令和元年5月31日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K05191

研究課題名(和文) 変分理論による重い電子状態と磁気秩序状態の競合の研究

研究課題名(英文) Variational theory for the competition between the heavy fermion state and magnetically ordered states

研究代表者

久保 勝規 (KUBO, Katsunori)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 原子力科学研究所 先端基礎研究センター・研究副主幹

研究者番号：50391272

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：変分モンテカルロ法を周期アンダーソン模型の強磁性状態、反強磁性状態に適用した。そして、どちらの磁性相内でもリフシツツ転移が起こるが、これはf電子の遍歴-局在転移として理解できることが分かった。また、変分波動関数を改良し、これまで用いられてきたものよりエネルギーが大幅に改善されることを見出した。その結果、常磁性状態の領域が広がり、結果として常磁性領域内で有効質量が大きくなることが分かった。また、非クラマース二重項系の多極子相互作用を調べ、格子構造に大きく依存することがわかった。非クラマース二重項については超伝導も調べ、軌道の異方性に起因したd波超伝導状態が実現することが分かった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

重い電子系の典型的なモデルとして研究されてきた周期アンダーソンモデルは、常磁性状態を仮定すれば確かに重い電子状態が得られるが、磁気秩序状態まで考慮すると有効質量が大きくなる前に磁気秩序を起こしてしまう、重い電子状態が記述できないのではないかと懸念が持たれていた。しかし、本研究によって波動関数を改良することによって、常磁性状態の安定性が増すことがわかり、周期アンダーソンモデルを重い電子系を記述するモデルとして用いる正当性が示された。これは重い電子系の理論分野における学術的意義は大きい。

研究成果の概要(英文)：We have applied a variational Monte Carlo method to the ferromagnetic and antiferromagnetic states of the periodic Anderson model. We have found that the Lifshitz transitions, which can occur in both magnetic phases, can be regarded as localized-itinerant transitions of f electrons. We have also revised the variational wavefunction and succeeded in lowering energy. Then, the region of the normal phase extends, and, as a result, the effective mass in the normal phase can become large. For the non-Kramers doublet systems, we investigated multipole interactions and found that these interactions depend strongly on the lattice structure. For the non-Kramers doublet systems, we have also studied the superconductivity, and found d-wave superconductivity originating from the orbital anisotropy.

研究分野：物性理論

キーワード：重い電子系 リフシツツ転移 変分モンテカルロ法 非クラマース二重項 超伝導 四極子秩序

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

重い電子系と呼ばれる f 電子系の物質群では、その特徴的なエネルギースケールが小さいため、磁場や圧力などの外部からの摂動によって、基底状態を磁気秩序状態から無秩序状態に変えることが出来る場合がある。この相転移点は量子臨界点と呼ばれ、その近傍（量子臨界領域）での揺らぎによって引き起こされる異方的超伝導や異常な物理量の振る舞いの解明は一つの大きな研究分野になっている。その中でも物理量の温度依存性などは、現象論的には守谷らのスピン揺らぎの理論などによって、おおむね説明することができている。

一方、f 電子系の微視的な理論としては、周期的アンダーソンモデルやその有効モデルが調べられてきた。特に Rice-Ueda のグッツヴィラー近似法による研究や動的平均場近似による研究などによって、周期的アンダーソンモデルは、重い電子状態を記述する典型的なモデルと考えられている。

しかし、これらの研究では常磁性状態を仮定して重い電子状態を得ており、磁気秩序まで考慮した時に重い電子状態が実現するかどうかは自明ではない。Rice-Ueda も当初から指摘していたが、実際このモデルは磁気秩序を起こしやすく、重い電子状態を実現するために f 電子のエネルギー準位を深くして行くと、重い電子状態になる前に磁気秩序を起こしてしまう。Rice-Ueda は常磁性の重い電子状態を実現するためには、スピン自由度だけでなく f 電子の軌道縮退を取り入れることが重要であると提案している。

しかし、実際に重い電子状態になっている Ce や Yb の化合物では、通常結晶場基底状態はクラマース二重項になっており、結晶場分裂が非常に小さくない限り、f 電子のクラマース縮退を記述する擬スピンの自由度のみから重い電子状態が実現していると考えるのが自然である。つまり、現実の物質での重い電子状態やその量子臨界領域での電子状態を理解するためには、クラマース二重項だけから、安定な常磁性の重い電子状態を記述する微視的な理論を構築する必要があった。

2. 研究の目的

本研究ではクラマース二重項（擬スピんで記述できるので、以下では単にスピンと呼ぶ）のみを持つ周期的アンダーソンモデルで、常磁性の重い電子状態を記述できる理論を構築することを目的とした。

3. 研究の方法

本課題に対しては、変分理論を用いることが有効であると考えた。なぜなら、膨大な数値計算を必要としない手法でありながら、相関効果を取り入れ（少なくとも磁気秩序を無視した場合には）重い電子状態を適切に記述できる有力な手法だからである。

また、周期的アンダーソンモデルは f 準位など複数のパラメーターを含むこと、更に、本研究では磁気秩序状態についても調べるため、多くのパラメーターセットについて計算を行う必要がある。そのためにも比較的計算コストの少ない変分的な計算手法は有効であると考えた。変分モンテカルロ法などの変分理論によって、スピン自由度のみをもつ周期的アンダーソンモデルで、常磁性の重い電子状態が安定に存在する条件を調べ、その電子状態を明らかにする。また、変分理論としては、変分波動関数のどのような特徴が重い電子状態の実現に重要になっているかを明らかにする。

4. 研究成果

(1) 磁性相でのリフシツツ転移

変分モンテカルロ法のプログラムを強磁性状態、反強磁性状態も含めたグッツヴィラー波動関数に対して開発した。そして、正方格子上のモデルについて、電子数や f 電子の準位などを変化させて、基底状態の変化を調べた。計算の結果、周期アンダーソンモデルのハーフフィールド（サイトあたりの電子数が 2）の近傍では反強磁性状態が、ハーフフィールドから離れると強磁性状態が現れることがわかった。更にどちらの磁性相内でもフェルミ面の形状の変化するリフシツツ転移が起こることが分かった。これらのリフシツツ転移は、これまでどちらかの磁性相を仮定した理論研究は行われてきたが、本研究ではこれらを同一の枠組みで取り扱うことに成功した。

そして、相転移点でのフェルミ面の形状だけでなく、エネルギーの利得や有効質量の変化なども詳細に調べた。例えば、運動量分布関数の値は f 電子の寄与が、フェルミ波数で大きく変わる相とあまり変わらない相が実現していることを見出した。フェルミ波数で大きく変わるのはフェルミ面に f 電子が大きく寄与していることを示しており、f 電子は遍歴的であるといえる。反対にフェルミ波数であまり変わらない、つまり分布の運動量依存性が弱いということは実空間でよく局在していることを示している。つまりこれらの相の間で f 電子の遍歴性・局在性が異なることが分かった。他の物理量の変化についても同様に f 電子の遍歴性・局在性の変化として理解できることが分かった。このような f 電子の遍歴性・局在性の変化は強磁性秩序状態・反強磁性秩序状態のどちらでも起こり、磁性相内のリフシツツ転移はどちらの場合でも f 電子の遍歴-局在転移として理解できることが分かった。

(2) 変分波動関数の改良

重い電子系を記述する典型的なモデルの一つである周期アンダーソンモデルに対して、変分波動関数を改良し、これまで用いられてきたものよりエネルギーが大幅に改善されることを見出した。変分パラメーターとしては、f 電子のオンサイトでの二重占有の重みを調整するものだけでなく、伝導電子を含めたオンサイトの様々な配置に対する重みを調整する変分パラメーターを導入した。改良された波動関数では揺らぎがより取り入れられるために、磁気秩序状態への転移が抑制され常磁性状態の領域が広がり、結果として常磁性領域内で有効質量が大きくなることが分かった。また、本研究で提案した波動関数は比較的簡単なものであるにもかかわらず、エネルギーが大幅に改善されている。これは、周期アンダーソンモデルに対する変分波動関数の改良について1つの指針を与えるものになると考えられる。

(3) 非クラマース二重項系の多極子相互作用

結晶場基底状態が非磁性の二重項（非クラマース二重項）になっている系の多極子相互作用を調べた。多極子の物理については、高次の多極子を持つのに十分大きな自由度を持つ四重項が主に調べられてきた。ただし、大きな自由度というものは高次の多極子を持つための十分条件ではあるが必要条件ではない。もし、結晶場基底状態が一重項ではなく、かつ双極子モーメントを持たない場合には、必然的にその自由度は高次の多極子モーメントで記述される。実際、非クラマース二重項は双極子モーメントを持たず、四極子と八極子の自由度を持つ。

非クラマース二重項を記述する簡単なモデルを提案し、摂動論を用いて多極子相互作用を導いた。多極子モーメントは軌道の異方性に起因して本質的に異方的であり、その相互作用は格子構造に大きく依存する。実際、導かれた多極子相互作用は、単純立方格子では四極子相互作用、体心立方格子では八極子相互作用、面心立方格子では四極子と八極子の両方の相互作用であった。また、この様な格子構造と多極子相互作用との対応は、四重項系の場合とも共通する点があることも分かった。

また、これらの研究を通して、非クラマース二重項系の多極子状態を記述するためには、2 軌道モデルでは不十分で3 軌道以上のモデルが必要であることが明らかになった。

(4) 非クラマース二重項系の超伝導

非クラマース二重項を記述する3 軌道モデルの超伝導を調べた。手法としては乱雑位相近似を用いた。その結果、軌道の異方性に起因した d 波の異方的超伝導状態が実現することが分かった。この超伝導状態では結晶の対称性が立方晶から低下して、四極子モーメントが誘起されると期待される。結晶場基底状態が非クラマース二重項であるプラセオジウム化合物 $\text{PrT}_2\text{X}_{20}$ (T = Ir, Rh, X = Zn; T = Ti, V, X = Al) では、超伝導は多くの場合、四極子秩序相内で実現しており、本研究で得られた超伝導状態はそれらの実験結果と整合している。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 7 件)

- ① [K. Kubo](#), "Superconductivity in a multi-orbital model for the Γ_3 crystalline electric field state" *AIP Adv.* **8**, 101313 (2018). 査読有
DOI: 10.1063/1.5042276
- ② [K. Kubo](#), "Anisotropic Superconductivity Emerging from the Orbital Degrees of Freedom in a Γ_3 Non-Kramers Doublet System" *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 073701 (2018). 査読有
DOI: 10.7566/JPSJ.87.073701
- ③ [K. Kubo](#) and T. Hotta, "Multipole interactions of Γ_3 non-Kramers doublet systems on cubic lattices" *J. Phys.: Conf. Ser.* **969**, 012096 (2018). 査読有
DOI: 10.1088/1742-6596/969/1/012096
- ④ [K. Kubo](#) and T. Hotta, "Influence of lattice structure on multipole interactions in Γ_3 non-Kramers doublet systems" *Phys. Rev. B* **95**, 054425 (2017). 査読有
DOI: 10.1103/PhysRevB.95.054425
- ⑤ [K. Kubo](#) and H. Onishi, "Variational Wavefunction for the Periodic Anderson Model with Onsite Correlation Factors" *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 013701 (2017). 査読有
DOI: 10.7566/JPSJ.86.013701
- ⑥ [K. Kubo](#), "Itinerant-Localized Transitions in Magnetic Phases of the Periodic Anderson Model" *Phys. Procedia* **75**, 214-220 (2015). 査読有
DOI: 10.1016/j.phpro.2015.12.027

- ⑦ K. Kubo, "Lifshitz Transitions in Magnetic Phases of the Periodic Anderson Model" J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 094702 (2015). 査読有
DOI: 10.7566/JPSJ.84.094702

[学会発表] (計 9 件)

- ① K. Kubo, "Superconductivity in a Multiorbital Model for the Γ_3 Crystalline Electric Field State" International Conference on Magnetism (ICM2018) (San Francisco, USA, 17 Jul. 2018).
- ② K. Kubo, "Superconductivity in an f2 System with the Γ_3 Crystalline Electric Field Ground State" The 21st International Conference on Solid Compounds of Transition Elements (SCTE '18) (Vienna, Austria, 28 Mar. 2018).
- ③ K. Kubo and T. Hotta, "Multipole interactions of Γ_3 non-Kramers doublet systems on cubic lattices" Physics of Uranium based Unconventional Superconductors (satellite workshop of J-Physics 2017) (Tokai, Japan, 29 Sep. 2017).
- ④ K. Kubo and T. Hotta, "Multipole interactions of Γ_3 non-Kramers doublet systems on cubic lattices" 28th International Conference on Low Temperature Physics (LT28) (Gothenburg, Sweden, 10 Aug. 2017).
- ⑤ 久保勝規、堀田貴嗣、「非クラマース二重項系の多極子相互作用」日本物理学会 第 72 回 年次大会 (大阪大学、2017 年 3 月 19 日)。
- ⑥ **(招待講演)** 久保勝規、「周期アンダーソンモデルの磁性相におけるリフシツツ転移」TMU シンポジウム「U 系および BiS2 系の物理の最近の発展」(首都大学東京、2016 年 11 月 28 日)。
- ⑦ 久保勝規、大西弘明、「周期アンダーソンモデルに対する変分波動関数の改良」日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016 年 9 月 16 日)。
- ⑧ 久保勝規、「周期アンダーソンモデルの磁性相におけるリフシツツ転移」第 15 回 琉球物性研究会 (琉球大学、2015 年 11 月 28 日)。
- ⑨ K. Kubo, "Itinerant-Localized Transitions in Magnetic Phases of the Periodic Anderson Model" International Conference on Magnetism (ICM2015) (Barcelona, Spain, 7 Jul. 2015).

[その他]

ホームページ等

<https://asrc.jaea.go.jp/soshiki/gr/MatPhysHeavyElements/PersonalPages/kubo/publication.html>