

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 5月 9日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：2008～2011

課題番号：20340084

研究課題名（和文） f 電子系の高次多極子転移と乱れの効果

研究課題名（英文） Higher-multipole transitions and disorder effects in f-electron systems

研究代表者

倉本 義夫 (KURAMOTO YOSHIO)

東北大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号：70111250

研究成果の概要（和文）：

本研究では、Ce 化合物が該当するクラマース状態を持つ通常の近藤格子モデルと、Pr や U 化合物が該当する非クラマース単重項-3 重項近藤格子の秩序状態を理論的に研究した。連続時間モンテカルロ法を活用して、(1) Ce 系に La をドーピングした際に生ずるフェルミ面のサイズと電子寿命の変化、(2) 近藤効果と結晶場効果の競合による PrFe<sub>4</sub>P<sub>12</sub> のスカラー秩序の微視的機構、(3) 2 チャンネル近藤格子における遍歴八極子秩序、などを解明した。

研究成果の概要（英文）：

This study dealt with ordered states of both the Kondo lattice for Ce based heavy-electron systems, and non-Kramers Kondo lattice models for Pr and U based systems. Using the continuous-time Monte Carlo method, we have clarified the followings: (1) Characteristic change of the Fermi surface and lifetime of electrons upon La doping in Ce-based systems; (2) Microscopic origin of the scalar order in PrFe<sub>4</sub>P<sub>12</sub> with competing Kondo crystalline electric field effects; (3) Possible itinerant octupole order in the two-channel non-Kramers Kondo lattice.

交付決定額

(金額単位：円)

|         | 直接経費      | 間接経費      | 合計        |
|---------|-----------|-----------|-----------|
| 2008 年度 | 1,400,000 | 420,000   | 1,820,000 |
| 2009 年度 | 2,400,000 | 720,000   | 3,120,000 |
| 2010 年度 | 1,500,000 | 450,000   | 1,950,000 |
| 2011 年度 | 1,300,000 | 390,000   | 1,690,000 |
| 年度      |           |           |           |
| 総計      | 6,600,000 | 1,980,000 | 8,580,000 |

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性 II

キーワード：多極子，八極子，近藤効果，量子モンテカルロ，スカラー秩序，結晶場

## 1. 研究開始当初の背景

我々は、本研究の前に Ce<sub>1-x</sub>La<sub>x</sub>B<sub>6</sub>において磁気八極子が交替的に整列している可能性を指摘し、帯磁率などの熱力学的結果ならびに 2005 年の共鳴 X 線散乱の実験結果を説明した。さらに PrFe<sub>4</sub>P<sub>12</sub> の秩序パラメータが、点群のスカラーとして振舞う十六極と

六十四極が混ざった高次多極子であることを提唱した。スカラー秩序モデルは当時信じられていた四極子秩序モデルでは説明困難であった磁場中の中性子散乱および NMR の実験結果を自然に説明した。

スカラー秩序状態では、f 電子の局在的な性格が強くなり、結晶場励起に類する状態が

中性子散乱で観測されている。ところが、数%の La を添加するだけで非弾性散乱のピークは消失し、準弾性散乱に変質する。これとスカラー秩序の抑制は対応しているが、微視的な機構は不明であった。さらに 1980 年代より研究されている URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> の秩序変数は依然として不明である。

## 2. 研究の目的

八極子以上の高次多極子が現実の系 (Ce<sub>1-x</sub>LaxB<sub>6</sub>, PrFe<sub>4</sub>P<sub>12</sub>, PrRu<sub>4</sub>P<sub>12</sub>, SmRu<sub>4</sub>P<sub>12</sub>, NpO<sub>2</sub> など) で秩序化することは、最近の様々な実験とその理論的解釈から疑いのないものになっている。しかし、その結果現れる物性については未知の点が多い。多極子転移にともない、弱い遍歴・局在転移が起こり、秩序状態で巨大磁気熱電効果などの独特な物性を示す場合がある。また、ある系 (例えば Pr<sub>1-x</sub>LaxFe<sub>4</sub>P<sub>12</sub>) は乱れに非常に敏感で、わずかな不純物 (この場合は La) で多極子転移が抑制されるのに対して、別の系 (例えば Ce<sub>1-x</sub>LaxB<sub>6</sub>) では鈍感である。本研究では、固体中電子の高次多極子転移をもたらす特徴的な物性を理論的側面から明らかにする。

## 3. 研究の方法

我々の研究グループでは新しい数値計算の手法である連続時間量子モンテカルロ法 (CT-QMC) の有用さを早くから認識し、これを局在極限から計算できるように拡張した。CT-QMC は不純物近藤問題に対して負符号問題を起こさずに実行でき、任意の温度で計算可能である。したがって有効不純物問題の解法として最も優れたものである。CT-QMC と動的平均場理論を組み合わせ、近藤格子系の動力学と秩序状態への不安定性、さらに交替秩序のもとでの電子状態を導出することができる。

## 4. 研究成果

### \* 乱れのある Ce 系の近藤効果

Ce 化合物を想定した通常の近藤格子系に対して、La 置換の効果を CT-QMC と DMFT に加えて CPA を用いることにより研究を進めた。その結果、フェルミ面の大きさが不純物の濃度に対して特徴的に変化することを見出し、その機構を直観的に明らかにした。一般に近藤効果は、降温とともに電気抵抗が対数的に増大する現象である。ところが、物質によっては、電気抵抗が対数的に減少する場合があり、逆近藤効果と呼ばれている。この原因の理解は確立していない。我々は、ポテンシャル散乱と交換散乱の干渉効果により、伝導電子の散乱行列がエネルギーの関数として著しい非対称性を持つことを見出した。これにより、電気抵抗が減少する温度領域が生ずる。

### \* 偶数電子の結晶場状態を持つ一般化近藤格子の新しい秩序状態

CT-QMC と動的分子場理論 (DMFT) を組み合わせ、PrFe<sub>4</sub>P<sub>12</sub> のスカラー秩序の微視的理解を達成した。具体的には結晶場 1 重項と近藤 1 重項のサイトが交替的に整列したモデルを提案し、静的・動的物理量が実験結果と定性的に対応することを示した。上記の交替秩序の転移点以下で、急速に重い電子のエネルギーバンドが形成されることを見出した。これは、通常の近藤格子の重いバンド形成が電子秩序とは関係なく徐々に生じることと対照的である。

### \* 非クラマース結晶場状態を持つ 2 チャンネル近藤格子の複合秩序変数

非クラマース 2 重項を結晶場基底状態にもつ近藤格子を、CT-QMC と DMFT を組み合わせ、新しいタイプの秩序状態を見出した。モデルとして、伝導帯が非クラマース 2 重項に対応して軌道縮退しており、サイトあたり 1 個の伝導電子があるものとする。この場合、時間反転対称性は破れているが、磁気モーメントのない秩序が発生することを見出した。この秩序では、局在電子の擬スピン (軌道モーメント) と、伝導電子の擬スピンの内積が 2 つの軌道で異なる。これは遍歴八極子の秩序変数に対応する。この複合秩序は隠れた秩序の候補になる。さらに、この複合秩序は、伝導電子の軌道モーメントの奇振動数秩序に対応している。本結果は複合秩序と奇振動秩序の関係を具体的に示したものである。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 33 件)

(1) Shintaro Hoshino, Junya Otsuki, and Yoshio Kuramoto, Spin Density Wave Driven by Quadrupolar Kondo Effect in Two-Channel Kondo Lattice, Proc. Int. Conf. Heavy Electrons (ICHE2010), J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 80, 2011, SA135-1-SA135-3

(2) Yoshio Kuramoto, Shintaro Hoshino, and Junya Otsuki, Electronic Orders Induced by Kondo Effect in Non-Kramers f-Electron Systems, Proc. Int. Conf. Heavy Electrons (ICHE2010), J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 80, 2011, SA018-1-SA018-6

(3) Ai Yamakage, Kentaro Nomura, Ken-Ichiro Imura, and Yoshio Kuramoto, Disord

er-Induced Multiple Transition Involving Z2 Topological Insulator, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 80,2011, 053703-1-053703-5

(4) Shintaro Hoshino, Junya Otsuki, and Yoshio Kuramoto, Microscopic Mechanism for Staggered Scalar Order in PrFe4P12, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 80,2011, 033703-1-033703-4

(5) Ken-Ichiro Imura, Shijun Mao, Ai Yamakage and Yoshio Kuramoto, Flat edge modes of graphene and of Z2 topological insulator, Nanoscale Research Letters, 査読有,6,2011, 358-1 - 358-6

(6) Shijun Mao, Ai Yamakage, and Yoshio Kuramoto, Tight-binding model for topological insulators: Analysis of helical surface modes over the whole Brillouin zone, Phys. Rev. B, 査読有,84,2011, 115413-1 - 115413-14

(7) A. Kiss, Y. Kuramoto, and S. Hoshino, Numerical study of Kondo impurity models with strong potential scattering: Reverse Kondo effect and antiresonance, Phys. Rev. B, 査読有,84,2011, 174402

(8) Shintaro Hoshino, Junya Otsuki, and Yoshio Kuramoto, Diagonal Composite Order in a Two-Channel Kondo Lattice, Phys. Rev. Letters, 査読有,107,2011, 247202

(9) S. Mao, Y. Kuramoto, Helical edge modes preserved across transitions from topological insulators with indirect gaps to insulators or semimetals, Phys. Rev. B, 査読有,83,2011, 085114-1-085114-8

(10) S Hoshino, J Otsuki and Y. Kuramoto, Staggered Order with Itinerant and Localized Singlets in Generalized Kondo Lattice, J. Phys.: Conf. Ser., 査読有,273,2011, 012034 - 012037

(11) A. Yamakage, K.-I. Imura, J. Cayssol and Y. Kuramoto, Interfacial charge and spin transport in Z2 topological insulators, Phys. Rev. B, 査読有,83,2011, 125401-1-125401-13

(12) J. Otsuki, H. Kusunose, and Y. Kuramoto, Effect of Disorder on Fermi Surf

ace in Heavy Electron Systems, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有,79,2010, 114709-1-114709-5

(13) S. Mao, Y. Kuramoto, K-I Imura, and A. Yamakage, Analytic Theory of Edge Modes in Topological Insulators, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有,79,2010, 124709-1-124709-9

(14) K.-I. Imura, A. Yamakage, S. Mao, A. Hotta, Y. Kuramoto, Zigzag edge modes in Z2 topological insulator: reentrance and completely flat spectrum, Phys. Rev. B, 査読有,82,2010, 085118-1-085118-18

(15) S. Hoshino, J. Otsuki, and Y. Kuramoto, Electronic Order with Staggered Kondo and Crystalline Electric Field Singlets, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有,79,2010, 074720-1 - 074720-10

(16) S. Hoshino, J. Otsuki, and Y. Kuramoto, Itinerant antiferromagnetism in infinite dimensional Kondo lattice, Phys. Rev. B, 査読有,81,2010, 113108-1-113108-4

(17) K.-I. Imura, Y. Kuramoto and K. Nomura, Anti-localization of graphene under substrate electric field, Eur. Phys. Lett., 査読有,89,2010, 17009-1-17009-5

(18) A. Yamakage, K.-I. Imura, J. Cayssol and Y. Kuramoto, Klein tunneling in graphene under substrate electric field, Physics Procedia, 査読有,3,2010, 1243-1248

(19) K.-I. Imura, Y. Kuramoto and K. Nomura, Weak localization properties of graphene with intrinsic and Rashba spin-orbit coupling, Physics Procedia, 査読有,3,2010, 1249-1254

(20) A. Kiss and Y. Kuramoto, Ordering and Crossover in a Pseudo-Sextet Localized Electron Model -Possible Scenario for SmRu4P12 Skutterudite-, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有,78,2009, 124702-1 - 124702-9

(21) S. Hoshino, J. Otsuki, and Y. Kuramoto, Continuous-Time Quantum Monte Carlo Approach to Singlet-Triplet Kondo Systems, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有,78,20

09, 074719-1 - 074719-9

(22) K.-I. Imura, Y. Kuramoto, and K. Nomura, Weak localization properties of the doped  $Z_2$  topological insulator, Phys. Rev. B, 査読有, 80, 2009, 085119-1 - 085119-15

(23) A. Yamakage, K.-I. Imura, J. Cayssol, Y. Kuramoto, Spin-orbit effects in a graphene bipolar pn junction, Eur. Phys. Lett., 査読有, 87, 2009, 47005 - 47010

(24) Y. Kuramoto, H. Kusunose, and A. Kiss, Multipole Orders and Fluctuations in Strongly Correlated Electron Systems, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 78, 2009, 072001-1 - 072001-33

(25) A. Yamakage and Y. Kuramoto, Temperature Dependent Phonon Spectra in Anharmonic Lattice with Cage-Like Structure, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 78, 2009, 064602-1 - 064602-9

(26) Junya Otsuki, The Kondo Lattice Model in Infinite Dimensions: II. Static Susceptibilities and Phase Diagram, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 78, 2009, 034719-1 - 034719-9

(27) Junya Otsuki, The Kondo Lattice Model in Infinite Dimensions: I. Formalism, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 78, 2009, 014702-1 - 014702-12

(28) J. Otsuki, Evolution of a Large Fermi Surface in the Kondo Lattice, Phys. Rev. Letters., 査読有, 102, 2009, 187-192

(29) Yoshio Kuramoto, Toward Identification of Order Parameters in Skutterudites - a Wonderland of Strong Correlation Physics-, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl., 査読有, A77, 2008, 187-192

(30) Annamaria Kiss, Consequence of Spatial Symmetry on  $^{31}\text{P}$  NMR Spectra in  $\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$  with Scalar Order, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl., 査読有, A77, 2008, 72-77

(31) Y. Kuramoto, Electronic Higher Multipoles in Solids, Prog. Theor. Phys. Suppl., 査読有, 176, 2008, 77-96

(32) Annamaria Kiss, Theory of Successive Magnetic Transitions with Tilting of Moments - Application to  $\text{NpFeGa}_5$ -, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 77, 2008, 124708-1 - 124708-11

(33) Kazuaki Iwasa, Magnetic Excitations in Heavy Electron State of Filled Skutterudite  $\text{PrxLa}_{1-x}\text{Fe}_4\text{P}_{12}$  ( $x=1.00$  and  $0.85$ ), J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 77, 2008, 063706-1 - 063706-4

[学会発表] (計 30 件)

(1) 星野晋太郎, 倉本義夫, f 電子希釈による近藤格子の磁気秩序誘起, 日本物理学会第67回年次大会, 2012年3月26日, 関西学院大学

(2) 倉本義夫, 奇周波数磁気秩序, 日本物理学会第67回年次大会, 2012年3月25日, 関西学院大学

(3) 増田俊平, 倉本義夫, ヘリカルな伝導の干渉効果, 日本物理学会2011年秋季大会, 2011年9月24日, 富山大

(4) 星野晋太郎, 大槻純也, 倉本義夫, 非クラマース二重項と伝導電子の強い相互作用によって誘起される八極子秩序, 日本物理学会2011年秋季大会, 2011年9月22日, 富山大

(5) 倉本義夫, おわりに一多極子研究の展望, 日本物理学会2011年秋季大会, 2011年9月22日, 富山大

(6) 山崎智史, 倉本義夫, 斥力相互作用モデルによるフラーレン系超伝導に対する理論, 2011年秋季大会, 2011年9月21日, 富山大

(7) Shijun Mao, Ai Yamakage, Yoshio Kuramoto, Helical surface modes in tight-binding model for  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , 日本物理学会 第66回年次大会, 2011年3月26日, 新潟

(8) 星野晋太郎, 大槻純也, 倉本義夫, 2チャンネル近藤格子の秩序化に伴う重い電子バンド形成, 日本物理学会 第66回年次大会, 2011年3月26日, 新潟

(9) 大槻純也, 星野晋太郎, 倉本義夫, SU(2) × SU(2) アンダーソン格子における秩序と基底状態, 日本物理学会 第 66 回年次大会, 2011 年 3 月 26 日, 新潟

(10) 山崎智史, 倉本義夫, 多軌道効果によるフラレン化合物の電子秩序と金属絶縁体転移, 日本物理学会 第 66 回年次大会, 2011 年 3 月 26 日, 新潟

(11) 山影相, 野村健太郎, 井村健一郎, 倉本義夫, 乱れた Z2 絶縁体・金属転移の臨界指数と相図, 日本物理学会 第 66 回年次大会, 2011 年 3 月 28 日, 新潟

(12) Y. Kuramoto, Itinerant antiferromagnetism in Kondo lattice, Resonating Valence Bond Physics: Spin Liquids and Beyond, 2010 年 10 月 13 日, ハンガリー、ブダペスト

(13) Y. Kuramoto, A new type of electronic order involving Kondo singlets, Opening Symposium of QS2C Theory Forum, 2010 年 9 月 28 日, 埼玉

(14) 星野晋太郎, 大槻純也, 倉本義夫, 近藤・結晶場一重項交替秩序における磁気励起スペクトル, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 23 日, 大阪

(15) 大槻純也, 楠瀬博明, 倉本義夫, 重い電子系 Ce 化合物のフェルミ面に対する磁場と La 置換効果の理論, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 23 日, 大阪

(16) 山影相, 野村健太郎, 井村健一郎, 倉本義夫, トポロジカル絶縁体における局在の相図と臨界指数, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月 23 日, 大阪

(17) Y. Kuramoto, Electronic Orders Induced by Kondo Effect in Non-Kramers f-Electron Systems, International Conference on Heavy Electrons (ICHE2010), 2010 年 9 月 19 日, 東京

(18) Y. Kuramoto, Nature of antiferromagnetism in Kondo lattice, Japan-Germany Seminar on "New quantum states and phenomena in condensed matter", 2010 年 9 月 14 日, 広島

(19) 山影相, 井村健一郎, 野村健太郎, 倉本義夫, トポロジカル絶縁体の接合における乱れの効果, 日本物理学会 第 65 回年次

大会, 2010 年 3 月 23 日, 岡山

(20) 井村健一郎, 山影相, 堀田翔, 倉本義夫, 量子スピンホール系におけるバルク/エッジ対応, 日本物理学会 第 65 回年次大会, 2010 年 3 月 23 日, 岡山

(21) 星野晋太郎, 大槻純也, 倉本義夫, f2 系における近藤一重項と結晶場一重項の交替秩序, 日本物理学会 第 65 回年次大会, 2010 年 3 月 20 日, 岡山

(22) 倉本義夫, 物性理論・統計力学分野からの提言, 日本物理学会 第 65 回年次大会, 2010 年 3 月 20 日, 岡山

(23) 山影相, 井村健一郎, Jerome Cayssol, 倉本義夫, Z2 絶縁体の pn 接合における電荷とスピンの輸送, 日本物理学会 2009 年秋季大会, 2009 年 9 月 27 日, 熊本

(24) 井村健一郎, 倉本義夫, Z2 絶縁体の端状態とその robustness, 日本物理学会 2009 年秋季大会, 2009 年 9 月 27 日, 熊本

(25) 星野晋太郎, 大槻純也, 倉本義夫, 結晶場単重項・三重項系における近藤効果と結晶場効果の競合, 日本物理学会 2009 年秋季大会, 2009 年 9 月 25 日, 熊本

(26) 星野晋太郎, 連続時間 QMC 法による近藤格子の反強磁性秩序と量子臨界点, 日本物理学会 第 64 回年次大会, 2009 年 3 月 28 日, 立教大学

(27) 井村健一郎, ドープされた Z2 トポロジカル絶縁体におけるクライン・トンネリングとアンドレーエフ反射, 日本物理学会 第 64 回年次大会, 2009 年 3 月 27 日, 立教大学

(28) 大槻純也, 連続時間 QMC 法による近藤格子模型の一粒子励起と大きなフェルミ面形成, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 22 日, 岩手大学

(29) 井村健一郎, トポロジカル絶縁体における秩序変数, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 22 日, 岩手大学

(30) 倉本義夫, スクッテルタイトの多極子秩序, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008 年 9 月 20 日, 岩手大学

〔図書〕(計2件)

(1) 倉本義夫, 朝倉書店, 量子多体物理学, 2009, 179

(2) Y. Kuramoto and Y. Kato, Cambridge University Press, Dynamics of One-Dimensional Quantum Systems: Inverse-Square Interaction Models, 2009, 488

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~qmbt/index.html>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

倉本 義夫 (KURAMOTO YOSHIO)

東北大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号 : 70111250

### (2) 研究分担者

( )

研究者番号 :

### (3) 連携研究者

( )

研究者番号 :