

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2008 年度～2010 年度

課題番号：20540347

研究課題名（和文） 非調和フォノンによる重い電子系の形成と超伝導の発現

研究課題名（英文） Heavy electron states and superconductivity due to anharmonic phonons

研究代表者

上田 和夫 (UEDA KAZUO)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号：70114395

研究成果の概要（和文）：

非調和振動子が電子系と相互作用した場合のフォノンのスペクトルの温度変化を明らかにし、電子系と非調和振動子がともに一次元格子を形成している場合の相図を決定した。さらに、磁性イオンが伝導電子系の中で振動している系における近藤効果について、そのモデルを構築し基底状態相図を求めると同時に、相境界で 2 チャンネル近藤効果が起こることを明らかにした。

研究成果の概要（英文）：

The spectral weight of an anharmonic oscillator coupled with conduction electrons is obtained. The ground-state phase diagram of the one dimensional Holstein model of anharmonic oscillators is determined by quantum Monte Carlo simulations. Kondo effect of magnetic ions vibrating in metals is investigated by using the numerical renormalization group method. We find two-channel Kondo effect at the border of the two different fixed points with different parities.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	1,800,000	540,000	2,340,000
2009 年度	800,000	240,000	1,040,000
2010 年度	800,000	240,000	1,040,000
総計	3,400,000	1,020,000	4,420,000

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：物性理論、強相関電子系、低温物性、磁性、近藤効果、非調和フォノン

1. 研究開始当初の背景

正四面体を単位として、それらの頂点を共有するようにつなげていくと三次元空間を覆うことができる。この構造はパイロクロア格子と通称されている。パイロクロア格子を持つ物質群としては AB_2O_4 の組成をもつスピネル化合物、 $A_2B_2O_7$ で表されるパイロクロア化合物が良く知られている。パイロクロ

ア格子の特徴は幾何学的フラストレーションにあり、そのためこの格子上のスピン、あるいはもっと一般には電子状態には低エネルギー領域に多数の状態が集積し擬似縮退をする。このこととともなうエントロピーを解消するプロセスで、多彩な量子揺らぎが成長することが期待される。

パイロクロア格子を内包する構造を持つ物質群において生じる量子揺らぎを媒介として超伝導が実現されるのではないかと、この期待のもとに超伝導体探索が活発に展開されている。歴史をさか上れば、スピネル化合物の LiTi_2O_4 が $T_c=13.7\text{ K}$ の超伝導であることは古くから知られていた。パイロクロア化合物に関しては、 $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ が超伝導であることが、いくつかのグループによってほぼ同時に発見された。その転移温度は 1.0 K と低く、超伝導特性も通常のものである。

広井氏達のグループは、パイロクロア化合物と同じ空間群に属するが異なる組成・構造を持つ β -パイロクロア化合物 AOs_2O_6 ($A=\text{Cs, Rb, K}$) が超伝導を示すことを発見した [1]。

この系における超伝導は基本的には BCS 型の超伝導と思われるが、その T_c は $3.3, 6.3, 9.6\text{ K}$ と高い。最高の T_c をもつ $\text{KO}_2\text{Os}_2\text{O}_6$ ではさまざまな物理量に以下に述べるような特異な振舞いが見られ、その特徴を理解することは興味深い問題である。

β -パイロクロア化合物の構造上の特徴として、アルカリイオンが Os-O のネットワークの作る籠の中にあることが挙げられる。アルカリイオンの半径は籠の大きさに比べて小さく、その振動は非調和性が強くなっていると考えられる。こうした振動モードは、赤ん坊をあやすガラガラ連想から、ラットリングモードと呼ばれている。バンド計算によれば T_c のもっとも高い $\text{KO}_2\text{Os}_2\text{O}_6$ でラットリングモードの非調和性はもっとも強く、 Rb, Cs とイオン半径が大きくなるにつれ非調和性は弱くなっている。

$\text{KO}_2\text{Os}_2\text{O}_6$ の電気抵抗の温度依存性は極めて特徴的で、上に凸の温度依存性を示す。これに対して Rb, Cs 化合物では T_c の温度依存性になっている。比熱には大きな質量増強の効果が見られ、 T_c での比熱の飛びも大きく、低エネルギーのインシュタインモードの存在が示唆されている。さらに核磁気緩和率の測定によれば、 K サイトの緩和は核四重極モーメントが K イオンの振動にともなう電場勾配の揺らぎと結合することによって起こっている。その $1/T_1T$ の温度変化も異常で $12\text{-}14\text{ K}$ でピークを示し、高温で減少している [2]。

ラットリングモードの特徴を理解するために、我々は局所的な非調和フォノンが電子系と結合しているモデルを考え、4 次の非調和項を自己無撞着な調和近似で扱った [3]。この取り扱いでは、実効的なフォノンの周波数が温度依存性を持つことになる。その結果、

2 フォノンラマン過程により $1/T_1T$ は、非調和性が強い場合にはピークを示し、高温で一定値をとることが明らかになった。また電気抵抗も低温で T_c の温度依存性を示したのち、高温側で \sqrt{T} の温度依存性を示す。これらは調和フォノンとは定性的に違った結果であり、 β -パイロクロア超伝導体の特異な性質を理解しようとする当研究課題の端緒となった。

参考文献

- [1] Review として、Z. Hiroi et al: *Phys. Rev. B* **76** (2007) 014523.
- [2] M. Yoshida et al: *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 197002.
- [3] T. Dahm and K. Ueda: *Phys. Rev. Lett.* **99** (2007) 187003.

2. 研究の目的

β -パイロクロア超伝導 AOs_2O_6 ($A=\text{Cs, Rb, K}$) ではラットリングモードと呼ばれる非調和フォノンがその特異な物性と超伝導に重要な寄与をしていると期待されている。非調和フォノンを自己無撞着な調和近似を越えた取り扱いをすることにより、非調和フォノンと電子系の強結合理論を構築し特異な物性と超伝導特性の解明を目指す。

3. 研究の方法

- (1) 電子系と相互作用をする
非調和フォノンのスペクトル

局在した振動子が非調和性を含む一般的なポテンシャル中を運動し、その振動子が伝導電子系と結合しているモデルを考察した。電子格子相互作用については2次摂動で扱った。摂動論を非調和性を含む一般的な場合も含めるように定式化し、新たなダイヤグラムの方法を考案しスペクトル関数を求めた。

- (2) 一次元非調和ホルシュタインモデルの
基底状態相図

電子系に対して一次元の格子モデルを考え、各サイトでインシュタイン振動子と結合している一次元ホルシュタインモデルを考察した。電子がバンドの半分まで詰まっている場合については負符号問題が回避できるので、量子モンテカルロシミュレーションを用いて調べ基底状態相図を求めた。

(3) 振動する磁性イオンの近藤効果

β -パイロクロアでラットリングしているイオンは非磁性イオンであるが、一般には磁性イオンを籠の中に入れることも可能である。実際、充填型スクッテルダイトと呼ばれる物質群では 12 個のニクトゲンで作られる二十面体の籠に内包されているイオンは希土類イオンである。磁性イオンの振動と電子系との相互作用を調べるために、拡張されたアンダーソンモデルを新たに構築した。局在軌道に対するクーロン相互作用が強い場合は磁性イオンに対応し、相互作用が弱い場合は非磁性イオンに対応している。後者の場合は強結合電子フォノン系の近藤効果として知られているモデルに伝導電子のスピン自由度を考慮した場合になっている。このモデルに対してウィルソンが開発した数値繰り込み群を用いて磁化率、分極関数、エントロピーの温度変化を調べた。さらに、振動子が非調和性を持つ場合について調べた。

4. 研究成果

(1) 電子系と相互作用をする非調和フォノンのスペクトル

我々の開発した摂動論は、非調和性のある場合にも、各遷移エネルギーごとにエネルギーシフト型の寄与と、ダンピング型の寄与に分離することが可能であることを示し、スペクトル関数を求めた。非調和性が強い場合は各エネルギーごとの遷移が分離しそのスペクトル重みが温度変化をするのに対し、非調和性が弱い場合には実効的振動数が温度変化をするという調和近似の描像が有効であることを明らかにした。
[雑誌論文⑥]

(2) 一次元非調和ホルシュタインモデルの基底状態相図

量子モンテカルロ法で、一様な金属状態と 2 量体化した絶縁状態の相境界を決定し、各状態での相関関数を求めた。この金属相は、スピン励起にギャップがあるルーサー・エメリー相になっていることを明らかにした。
[雑誌論文⑤]

(3) 振動する磁性イオンの近藤効果

アンダーソンモデルを振動する磁性イオンに拡張すると、局在軌道と伝導電子系との混成に、フォノンの出し入れを伴う新たなチャンネルが必然的に開くことになる。イオン

の振動は奇パリティを持つので、局在軌道とはパリティの違う伝導電子系のチャンネルが新たな活性チャンネルとなる。なるべく問題を単純にするために、局在軌道としては s 軌道を考えて、従来型の混成は伝導電子の s 部分波と混じるが、フォノンを媒介とする混成は p 部分波との間に生じる。イオンの振動を一方向に限って単純化すれば、2 チャンネルの伝導電子系を考えることになる。

局在軌道の電子間相互作用とフォノンを媒介とする混成の強さに応じて、高温では磁気モーメントないし電気双極子モーメントが形成される。低温になるにつれて、磁気および電気双極子モーメントが遮蔽されるプロセスがこの場合の近藤効果である。基底状態は磁気シングレットでかつパリティシングレットであるが、基底状態のパリティは偶の場合と奇の場合がある。

フォノンを媒介とする電子格子相互作用が比較的小さい場合は、基底状態のパリティは偶である。これは一つの相を形成し、電子間相互作用の弱いところから強いところまで、局所フェルミ液体の固定点によって特徴づけられる。一方、フォノンを媒介とした混成項が強い場合の基底状態は奇パリティで特徴づけられる。従って基底状態相図にパリティの違いによる相境界があることが分かったが、その線上で一般に 2 チャンネル近藤効果が起きることを明らかにした。この結果は 2 チャンネル近藤効果を現実の物質で実現する一つの指針を与えると考えられる。
[雑誌論文②、③、④]

数値繰り込み群を用いたイオンが非調和振動をする場合についても研究を展開し、比較的小さな電子格子相互作用の場合でも 2 チャンネル近藤効果が起きる可能性のあることを見出した。
[雑誌論文①]

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 6 件)

- ① S. Yashiki and K. Ueda:
J. Phys. Soc. Jpn **80** (2011) 084717-1-6.
Effect of Anharmonicity on the Kondo Phenomena of a Magnetic Ion Vibrating in a Confinement Potential
査読有

- ② S. Yashiki, S. Kirino, K. Hattori, and K. Ueda:
J. Phys. Soc. Jpn **80** (2011) 064701-1-14
Kondo Effect of a Magnetic Ion Vibrating in a Harmonic Potential
査読有
- ③ S. Yashiki, S. Kirino, and K. Ueda:
J. Phys. Soc. Jpn **80** (2011) SA130-1-3.
Kondo Effect of a Vibrating Magnetic Ion
査読有
- ④ S. Yashiki, S. Kirino, and K. Ueda:
J. Phys. Soc. Jpn **79** (2010) 093707-1-4.
Kondo Effect of a Vibrating Magnetic Impurity
査読有
- ⑤ J. Zhao and K. Ueda:
J. Phys. Soc. Jpn **79** (2010) 074602-1-5.
Anharmonicity in One-Dimensional Electron-Phonon System
査読有
- ⑥ M. Takechi and K. Ueda: J. Phys. Soc. Jpn **78** (2009) 024604-1-8.
Green's Function of Fully Anharmonic Lattice Vibration
査読有

[学会発表] (計 7 件)

- ① 上田和夫、2010 年 9 月 24 日、
日本物理学会秋季大会、大阪府立大学
ラットリングと電子系の相互作用
- ② 屋敷賢、桐野俊輔、上田和夫、
2010 年 9 月 23 日
日本物理学会秋季大会、大阪府立大学
振動する磁性不純物における近藤効果と
Yu-Anderson 模型
- ③ 上田和夫、2010 年 9 月 14 日、
11th Japanese-German Symposium,
New Quantum States and Phenomena in
Condensed Matter, Hiroshima
Kondo Effect of Vibrating Magnetic Ion
- ④ 屋敷賢、桐野俊輔、上田和夫、
2010 年 3 月 20 日、
日本物理学会第 65 回年次大会、岡山大学
カゴ中を振動する磁性イオンの近藤効果

- ⑤ 竹地正輝、上田和夫、2009 年 3 月 30 日、
日本物理学会第 64 回年次大会、立教大学
電子系と相互作用する非調和格子振動の
理論
- ⑥ 上田和夫、2008 年 9 月 30 日、
10th German-Japanese Symposium
-- Collective Quantum-Phenomena in
Correlated Condensed Matter Systems--,
Ringberg Castle
Theory of anharmonic lattice vibration of
the β -pyrochlore superconductors
- ⑦ 上田和夫、2008 年 9 月 20 日、
日本物理学会秋季大会、岩手大学
重い電子系の起源
—多体相関と電子格子相互作用の再検討—

6. 研究組織

(1) 研究代表者

上田 和夫 (UEDA KAZUO)
東京大学・物性研究所・教授
研究者番号：70114395