

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 6 月 11 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2009～2011

課題番号：21740242

研究課題名（和文） 遷移金属化合物における重い電子挙動の研究

研究課題名（英文） Study of heavy fermion behavior in transition metal compounds

研究代表者

宇田川 将文 (UDAGAWA MASAFUMI)

東京大学・大学院工学系研究科・助教

研究者番号：80431790

研究成果の概要（和文）：重い電子挙動を示す遷移金属化合物が共通して持つ特徴である幾何学的フラストレーションと電子相関の協調効果を追求した。この二つの要素を併せ持つ未だ丸モデルであるカゴメ格子 Hubbard model においてカイラリティー自由度に起因する重い伝状態の形成を見出した。

研究成果の概要（英文）：Transition metal oxides with large quasiparticle mass have two features in common: geometrical frustration and strong electron correlation. I have examined the interplay of these two effects, and have revealed that chirality-driven heavy-fermion behavior emerges in Kagome lattice Hubbard model, which is a minimal model with these two ingredients.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2010 年度	600,000	180,000	780,000
2011 年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	2,400,000	720,000	3,120,000

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：強相関系・遷移金属化合物

1. 研究開始当初の背景

(1) 希土類化合物における重い電子挙動は長い研究の歴史を持ち、その起源は伝導電子と局在スピン系の相互作用に起因する多体効果として基本的には理解されている。一方で、LiV₂O₄、YxSc_{1-x}Mn₂など、あらわには局在スピン系を持たない強相関遷移金属化合物においても重い電子挙動が見出され、

大きな関心を呼んでいた。特に、代表的な物質であるLiV₂O₄の重い電子挙動については近藤効果に基づくシナリオと幾何学的フラストレーションの役割を重視する立場と大きく分けて二通りの理論が存在した。

(2) 幾何学的フラストレーションを持つ伝導電子系は重い電子挙動以外にも様々な新奇物

性を産み出す可能性を秘めたフロンティアである。とりわけ、アイスルー的な局所相関を持つ局在自由度と相互作用する伝導電子系については、 $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ における抵抗極小現象、非従来型異常ホール効果の発現などを契機として大きな関心が持たれていた。

(3)伝導電子系の物性において軌道自由度の存在は本質的な役割を果たす。取り分け、スピン軌道相互作用の強い系では常磁性帯磁率が増大し、Ir酸化物などではWilson比が30を超える物質が見出された。常磁性帯磁率の異常な増大の可能性はナイトシフトによる超伝導状態におけるクーパー対のパリティーの決定という観点からも興味深い事実であった。

2. 研究の目的

(1)幾何学的フラストレーションの役割を重視する立場を取り、カゴメ格子ハバードモデルに対する詳細な解析を通じて重い電子挙動の本質を理解する事を試みた。

(2)アイスルール系と伝導電子系の相互作用を記述する拡張 Falicov-Kimball 模型についてその振る舞いを調べるために、解析的、数値的な研究を行った。

(3)スピン軌道相互作用と電子相関が常磁性帯磁率に与える影響を帯磁率を Pauli 成分と Van Vleck 成分に分解する事により理解を試みた。

3. 研究の方法

(1)幾何学的フラストレーションと電子相関という二つの要素を兼ね備えたミニマルモデルであるカゴメ格子ハバードモデルに対し、クラスター動的平均場理論を適用することにより、低温での準粒子質量を調べた。クラスター動的平均場理論では格子モデルを不純物モデルにマップする事により必要となる計算コストを節約する。その過程でクラスター内の時間相関を忠実に取り入れるものの、空間相関についてはクラスターサイズ程度によるカットオフが生じる事になる。本研究では大きなクラスターサイズでの計算に適した、弱結合展開に基づく連続時間補助場量子モンテカルロ法に基づくクラスター動的平均場理論を展開し、用いるクラスターとして最大 12 サイトまでを考慮した。その上で、低温比熱を計算して準粒子質量を直

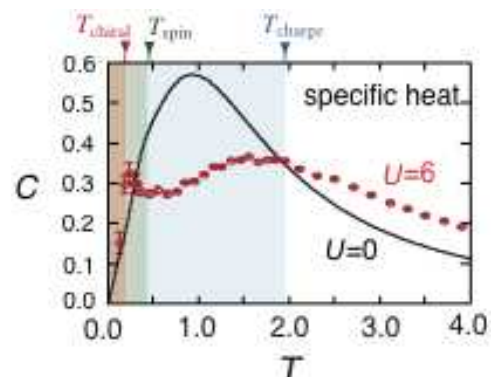
接調べるとともに、クラスター内密度行列、帯磁率、一粒子スペクトル、エントロピー等の計算を通じ、多角的に電子状態の理解を試みた。

(2)通常アイスルールが定義されるパイロクロア格子を変形した四面体伏見カクタスと呼ばれるネットワークについて拡張 Falicov-Kimball 模型の基底状態を解析的な手法により考察した。また、パイロクロア格子、チェッカーボード格子、カゴメ格子などの各種フラストレート格子上におけるアイスルール伝導系の一粒子スペクトルと伝導特性を数値対角化に基づく数値的手法で調べた。

(3) Sr_2RuO_4 をモデル物質として、スピン軌道相互作用と電子相関の競合効果を動的平均場理論により調べた。特に、常磁性帯磁率に注目して、その Pauli 成分と Van Vleck 成分を適切に分離し、各々の成分がスピン軌道相互作用と電子相関の変化に対してどのように振る舞うかを詳細に調べた。

4. 研究成果

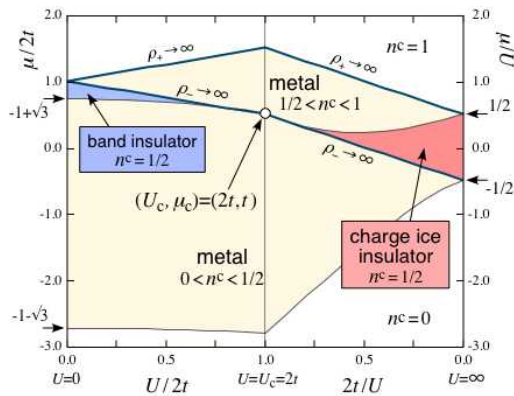
(1)一粒子スペクトルの詳細な解析の結果、フラストレーションの無い正方格子などの場合とは異なり、この系では金属絶縁体転移近傍の広い金属領域で低温に向けて成長する準粒子ピークが安定に存在しする事を見出した。また、クラスター内密度行列の解析の結果、この系には電荷、スピン、スピンカイラリティーに起因する3つの典型的なエネルギースケールが存在する事を示し、準粒子ピークはスピンカイラリティーモーメントの遮蔽に基づいて生じる事を見出した。スピンカイラリティーモーメントの遮蔽に伴い、比熱は鋭いピークを生じ、帯磁率は大きく増大する。ピーク温度以下では3サイトクラスターあたり $k_B \log 4$ に対応するエントロピーが電子比熱の形で放出される。



図：比熱の温度依存性と各エネルギースケール

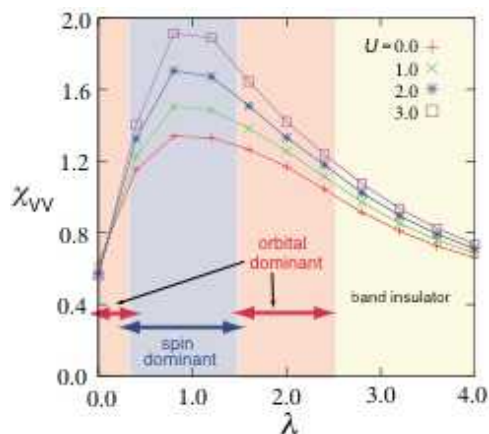
相互作用を大きくするにつれて比熱のピークは低温に移動し、結果、スピカイラリティモーメントの遮蔽に伴う重い電子状態が形成される事を見出した。

(2) アイスルール伝導系のミニマルモデルとして採用した拡張Falicov-Kimball 模型について、四面体伏見カクタスにおける厳密解を見つける事に成功した。厳密解に基づいて得られる基底状態相図は二種類の性質の異なる絶縁層と金属相を含み、これら二つの相は量子臨界点によって隔てられている。量子臨界点直上では電子の自己エネルギーが異常なベキを示し、非フェルミ液体的な挙動が現れる。また強結合側に広がる電荷アイス相においては分数励起の存在が示唆されるなど厳密解が豊富な物理を包含する事を見出した。



図：四面体伏見カクタス上の拡張 Falicov-Kimball 模型の基底状態相図

(3) スピン軌道相互作用の小さい領域では Van Vleck 帯磁率の電子相関による増大は小



図：Van Vleck 帯磁率のスピ軌道相互作用依存性

さく抑えられる事を見出した。一方で、スピン軌道相互作用が増大するにつれて電子相関による増大因子は大きくなる。これらの振る舞いを Van Vleck 帯磁率におけるスピン感受率と軌道感受率の寄与の仕方がスピン軌道相互作用の大きさによって変化する事から理解出来る事を示した。

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 13 件)

① Yutaka Akagi, Masafumi Udagawa and Yukitoshi Motome, Hidden Multiple-spin Interactions as an Origin of Spin Scalar Chiral Order in Frustrated Kondo Lattice Models, Physical Review Letters, 査読有, 108, 2012, 096401/1-4

DOI:10.1103/PhysRevLett.108.096401

② Masafumi Udagawa, Hiroaki Ishizuka and Yukitoshi Motome, Non-Kondo mechanism for resistivity minimum in spin ice conduction systems, Physical Review Letters, 査読有, 108, 2012, 066406/1-4

DOI:10.1103/PhysRevLett.108.066406

③ Satoru Hayami, Masafumi Udagawa and Yukitoshi Motome, Partial disorder in the periodic Anderson model on a triangular lattice, Journal of the Physical Society of Japan, 査読有, 80, 2011, 073704/1-4

DOI:10.1143/JPSJ.80.073704

④ Hiroshi Uchigaito, Masafumi Udagawa and Yukitoshi Motome, Mean-field study of charge, spin, and orbital orderings in triangular-lattice compounds ANiO₂ (A=Na, Li, Ag), Journal of the Physical Society of Japan, 査読有, 80, 2011, 044705/1-10

DOI:10.1143/JPSJ.80.044705

⑤ Hiroaki Ishizuka, Masafumi Udagawa and Yukitoshi Motome, Metal-insulator transition caused by the coupling to localized charge-frustrated systems under ice-rule local constraint, Physical Review B, 査読有, 83, 2011, 125101/1-15

DOI:10.1103/PhysRevB.83.125101

⑥ Yukitoshi Motome, Kyouya Nakamikawa, Youhei Yamaji and Masafumi Udagawa, Variational Monte Carlo study of the Kondo necklace model with geometrical frustration, Journal of Physical Society in Japan, 査読有, 80, Suppl. A, 2011, SA133/1-3

DOI:10.1143/JPSJS.80SA.SA133

⑦ Masafumi Udagawa and Youichi Yanase, Interplay of spin-orbit interaction and

electron correlation on the Van Vleck susceptibility in transition metal compounds, Journal of the Physical Society of Japan, 査読有, 79, 2010, 123601/1-4 DOI:10.1143/JPSJ.79.123601

⑧ Yukitoshi Motome, Kyoya Nakamikawa, Youhei Yamaji and Masafumi Udagawa, Partial Kondo screening in frustrated Kondo lattice systems, Physical Review Letters, 査読有, 105, 2011, 036403/1-4 DOI:10.1103/PhysRevLett.105.036403

⑨ Masafumi Udagawa, Hiroaki Ishizuka and Yukitoshi Motome, Quantum melting of charge ice and non-Fermi-liquid behavior: An exact solution for the extended Falicov-Kimball model in the ice-rule limit, Physical Review Letters, 査読有, 104, 2010, 226405/1-4 DOI:10.1103/PhysRevLett.104.226405

⑩ Masafumi Udagawa and Yukitoshi Motome, Chirality-driven mass enhancement in the kagome Hubbard model, Physical Review Letters, 査読有, 104, 2010, 106409/1-4 DOI:10.1103/PhysRevLett.104.106409

⑪ Masafumi Udagawa and Yukitoshi Motome, Chirality-spin separation in the Hubbard model on the kagome lattice, Journal of Physics: Conference Series, 査読有, 200, 2010, 012131/1-4 DOI:10.1088/1742-6596/200/1/012214

⑫ Yukitoshi Motome, Youhei Yamaji and Masafumi Udagawa, Instability to partial Kondo-singlet state in the Kondo necklace model on frustrated lattices, Journal of Physics: Conference Series, 査読有, 145, 2009, 012068/1-4 DOI:10.1088/1742-6596/145/1/012068

⑬ Masafumi Udagawa and Yukitoshi Motome, Cluster dynamical mean-field study of the Hubbard model on a 3D frustrated hyperkagome lattice, Journal of Physics: Conference Series, 査読有, 145, 2009, 012013/1-4 DOI:10.1088/1742-6596/145/1/012013

[学会発表] (計 28 件)

① 宇田川 将文, 伝導電子系における幾何学的フラストレーション - スピンアイス伝導系 Pr₂Ir₂O₇ の抵抗極小現象-, 強相関電子系理論の最前線 - 若手によるオープン・イノベーション -, 2011 12/21-23, 紀伊勝浦

② 宇田川 将文, 幾何学的フラストレーションを持つ伝導電子系の数値的研究, 次世代ナノ情報 合同研究会 「計算物質科学の課題と展望」, 2011 1/5-7, 東京大学物性研究所

③ 宇田川 将文, 石塚 大晃, 求 幸年, フ

ラストレート伝導電子系の励起状態: 電荷アイス相のモノポール励起と分数電荷, 2010 年日本物理学会秋季大会, 2010 9/23-26, 大阪府大

④ 宇田川 将文, 石塚 大晃, 求 幸年, スピンアイスと結合した伝導電子系の磁気秩序と電子状態, 2010 年日本物理学会秋季大会, 2010 9/23-26, 大阪府大

⑤ Masafumi Udagawa, Geometrical frustration in itinerant electron systems, Japan-Switzerland Joint Workshop "New Trends in Theory of Correlated Materials", 2010 9/8-10, Chiba

⑥ Masafumi Udagawa, Quantum criticality in itinerant ice-rule systems, Highly Frustrated Magnetism 2010 (HFM2010), 2010 8/1-6, Baltimore

⑦ Masafumi Udagawa, Quantum criticality in conduction electrons coupled to an ice-rule localized system, the XXIV International Conference on Statistical Physics of the International Union for Pure and Applied Physics (STATPHYS24), 2010 7/19-23, Cairns

⑧ 宇田川 将文, 石塚 大晃, 求 幸年, フラストレート伝導電子系の特異な性質: "ice rule" 局所拘束条件との結合効果, 日本物理学会第 65 回年次大会, 2010 3/20-23, 岡山山

⑨ Masafumi Udagawa, Yukitoshi Motome, Chirality-driven heavy-fermion behavior in kagome Hubbard model, APS March meeting, 2010 3/15-19, Portland

⑩ 宇田川 将文, 石塚 大晃, 求 幸年, フラストレート伝導電子系における "ice rule" 局所拘束条件の効果, 特定領域研究 「フラストレーションか」創る新しい物性」平成 21 年度領域成果報告会, 2010 1/7-9, 京都大学

⑪ 宇田川 将文, 求 幸年, カゴメ格子上ハバードモデルにおけるカイラリティと重い電子状態形成, 2009 年日本物理学会秋季大会, 2009 9/25-28, 熊本大学

⑫ 宇田川 将文, 柳瀬 陽一, 遷移金属化合物の Van Vleck 常磁性に対する強相関効果, 2009 年日本物理学会秋季大会, 2009 9/25-28, 熊本大学

⑬ Masafumi Udagawa, Theoretical study of Van Vleck susceptibility in transition metal compounds, Japan UK meeting, 2009 9/17-18, Kyoto University

⑭ 宇田川 将文, 求 幸年, スピンカイラリティ自由度の解放による重い電子形成機構 - カゴメ格子上ハバードモデルの解析から -, 特定領域研究 「フラストレーションか創る新しい物性」第 4 回トヒカルミーティング 「フラストレーションとカイラリティ」,

2009 7/3-4, 有馬

⑤宇田川 将文、柳瀬 陽一, Theoretical Study of Van-Vleck susceptibility in Sr_2RuO_4 , 科研費「特定領域」スーパークリン物質で実現する新しい量子相の物理 A03, A04 合同研究会, 2009 4/19-21, 箱根

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況 (計◇件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

宇田川 将文 (UDAFAWA MASAFUMI)

東京大学・大学院工学系研究科・助教

研究者番号：80431790

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：