

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 8 月 17 日現在

機関番号：82118

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2012～2016

課題番号：24340072

研究課題名(和文) f電子系の局所的電子相関と非自明な秩序

研究課題名(英文) Local correlation and nontrivial orders in f-electron systems

研究代表者

倉本 義夫 (KURAMOTO, Yoshio)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・特別教授

研究者番号：70111250

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 5,200,000円

研究成果の概要(和文)：成果の第一は、伝導電子と局在f電子の両方を含む複合体秩序の存在を理論面から確立したことである。複合体秩序は典型的には遍歴多極子あるいは奇数波超伝導として出現し、「隠れた秩序」の理解に向けての有力な情報を与える。第二に、近藤格子の反強磁性量子臨界点では、重い電子の遍歴性が保たれることを立証した。遍歴・局在転移が、反強磁性相の内部で生じることは、ある種のCe化合物の精密な実験結果をよく説明する。第三に、価数揺動の特性エネルギーが、伝導電子とのクーロン相互作用により減少する条件を明らかにした。この機構は、伝導帯が多数ある場合に、磁場に鈍感な重い電子の形成を可能にする。

研究成果の概要(英文)：As the primary result of the project, we have demonstrated the new form of electronic orders which involve both conduction and localized f electrons. The composite order appears typically as an itinerant multipole order, or an exotic superconducting order with odd frequency pairing. Secondly, we have shown for the Kondo lattice that the quantum critical point of antiferromagnetism preserves the itinerant nature of heavy electrons. The localized character sets in at another transition within the antiferromagnetic phase. This conclusion is in good agreement with accurate experimental results for some Ce compounds. Thirdly, we have clarified the condition for decrease of the characteristic energy for valence fluctuations by the Coulomb repulsion with conduction electrons. This mechanism is a candidate for emergence of heavy electrons that are insensitive to magnetic fields.

研究分野：物性理論

キーワード：近藤格子 非クラマース系 複合体秩序 軌道近藤効果 電荷近藤効果 奇数波超伝導 量子モンテカルロ法 動的平均場理論

## 1. 研究開始当初の背景

f 電子を含む希土類やアクチノイド類化合物においては、有効質量の極めて大きい電子が現れ、重い電子と呼ばれている。この実現には局在スピンの局在化過程が必要であり、近藤効果が本質的な役割を果たす。重い電子が秩序化すると超伝導や奇妙な磁性などを示す。これらの興味ある物性は電子の局在・局在描像の適用境界付近で現れる。したがって、どの極限から出発しても高次効果が重要になり、摂動論や分子場理論を使いにくい状況になっている。例えば、強相関系の強い磁気異方性は、結晶場モデルで容易に説明される。しかし結晶場モデルでは、分散的な磁気励起が秩序状態でのみ観測されることを説明できない。一方、単純な局在モデルでは磁気異方性や局在モーメント的挙動を説明できない。これらの実験事実の説明には、局在・局在の二元論を超えた新しい多電子描像が必要である。

一方、スピン以外の自由度による重い電子形成の可能性が注目されている。たとえば、SmOs<sub>4</sub>Sb<sub>12</sub> の重い電子は、外部磁場にほとんど影響されないため、通常近藤効果では説明できない。同様の挙動は他の物質でも報告されている。Sm 系には価数揺動が存在するので、重い電子の生成と電荷揺らぎの関係を探るのが自然である。本研究では、混成相互作用に加えて、伝導電子と f 電子のクーロン斥力による効果が重要と考える。両者の干渉効果は分子場近似ではとらえることができない。

本研究の対象となる系は、局所的な電子相関が強いこと、および相転移の秩序変数が非自明であることを共通項として持つ。通常の f 電子系の磁気秩序はサイト間の RKKY 相互作用によるものであり、その概要は分子場近似で理解できる。しかし本研究で扱う系は、秩序をもたらず原動力が一般化された近藤効果なので、局所的相関効果まで踏み込む必要がある。したがって、局在・局在問題に迫る新しい舞台を提供している。

## 2. 研究の目的

本研究では、通常の高濃度近藤効果では捉えきれない f 電子系の特異な秩序状態を理論的に研究し、局在と局在のはざまにある強相関電子の新描像を創出する。特に(i)非クラマース配置と複合電子秩序、(ii)磁場に鈍感な重い電子に注目する。(i)では2軌道近藤格子をとり、新概念である「2体相関秩序」を掘り下げ、対応する観測量を求める。(ii)では価数揺動における励起的相関の効果を明らかにする。(i),(ii)双方とも局所的な電子相関が本質的であることから、数値計算には動的平均場理論と連続時間モンテカルロ法を用いる。現実系への適用として、特に2体相関秩序と URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> の隠れた秩序との関連を追求する。また SmOs<sub>4</sub>Sb<sub>12</sub> などの重い電子と特異な秩序を電荷揺動近藤効果の描像により

説明する。

## 3. 研究の方法

本研究は、典型モデルとして(i)2軌道近藤格子、および(ii)f電子と伝導電子のクーロン反発力を取り入れた拡張アンダーソン格子をとる。これらのモデルでは、局所的な強い電子相関が重要である。そこで動的分子場理論(DMFT)を適用する。その際(iii)有効不純物モデルを解く必要がある。(i),(ii)では2副格子 DMFT と連続時間モンテカルロ法(CT-QMC)を組み合わせる。さらに現象論を用いて結果を直感的に理解する。(iii)に対しては CT-QMC とともに、解析的手法として繰込み群を活用する。さらに非自明な秩序を観測量から同定することを図る。

## 4. 研究成果

(1) 伝導電子と局在 f 電子の両方を含む新しい複合秩序の存在を確立した。これは、対角秩序としては局在多極子に対応し、非対角秩序としては奇数波超伝導を与える。複合秩序は、強相関電子系の長年の難問である「隠れた秩序」の理解に向けて、新しい有力な知見を与える。

(2) 近藤格子の量子臨界点近傍で重い電子が局在化するかどうかについては、活発な論争がある。本研究は、反強磁性量子臨界点では局在性が保たれ、局在性が強まるのはその低温側に生ずる別の相転移(リフシツツ転移に相当)であることを立証した。この結論は Ce 化合物に対する精密な実験の結果と対応している。

(3) f 電子の価数が揺動することにもなう特性エネルギーは、通常は近藤温度より大きい。本研究では、繰込み群による解析理論と連続時間モンテカルロ法による数値計算を併用し、特性エネルギーを求めた。伝導帯が多数ある場合には、伝導電子とのクーロン相互作用によって有効混成が減少し、磁場に鈍感な重い電子の形成が可能であることを示した。

## 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 27 件)

(1) Sho Ozaki, Kazunori Itakura, and Yoshio Kuramoto, Magnetically induced QCD Kondo effect, Phys. Rev. 査読あり, D94, 2016, 074013-1 -- 074013-16

(2) Yoshio Kuramoto, Composite electronic orders induced by orbital Kondo effect, Science Bulletin, 査読あり, 61, 2016, 1563-1582

(3) A. Kiss, Y. Kuramoto, J. Otsuki, Exact Dynamics of Charge Fluctuations

in the Multichannel Interacting Resonant Level Model, J. Phys. Soc. Jpn., 査読あり, 84, 2015, 104602-1 -- 104602-9

(4) Shintaro Hoshino, Yoshio Kuramoto, Collective excitations from composite orders in Kondo lattice with non-Kramers doublets, J. Phys.: Conf. Ser., 査読あり, 592, 2015, 012098-1 -- 012098-9

(5) Taku Kikuchi, Shintaro Hoshino, Yoshio Kuramoto, Anisotropic Magnetic Response in Kondo Lattice with Antiferromagnetic Order, J. Phys. Soc. Jpn., 査読あり, 83, 2014, 114706-1 -- 114706-8

(6) Satoshi Yamazaki, Shintaro Hoshino, and Yoshio Kuramoto, Continuous-Time Quantum Monte Carlo Study of Strong Coupling Superconductivity in Holstein-Hubbard Model, JPS Conf. Proc., 査読あり, 3, 2014, 016021-1 -- 016021-4

(7) Shintaro Hoshino and Yoshio Kuramoto, Strong Quasi-Particle Renormalizations in Heavy-Electron Magnets, JPS Conf. Proc., 査読あり, 3, 2014, 011022-1 -- 011022-4

(8) Yoshio Kuramoto, Summary of SCES2013: Theoretical Aspects, JPS Conf. Proc., 査読あり, 3, 2014, 010002-1 -- 010002-7

(9) Satoshi Yamazaki and Yoshio Kuramoto, Cooperation between Coulomb and Electron-Phonon Interactions in Fulleride Superconductors, JPS Conf. Proc., 査読あり, 1, 2014, 012112-1 -- 012112-4

(10) Yoshio Kuramoto and Shintaro Hoshino, Composite Orders and Lifshitz Transition of Heavy Electrons, J. Phys. Soc. Jpn., 査読あり, 83, 2014, 061007-1 -- 061007-8

(11) Shintaro Hoshino and Yoshio Kuramoto, Superconductivity of composite particles in two-channel Kondo lattice, Phys. Rev. Lett., 査読あり, 112, 2014, 167204-1 -- 167204-4

(12) Annamaria Kiss, Junya Otsuki, and Yoshio Kuramoto, Scaling Theory vs Exact Numerical Results for Spinless Resonant Level Model, J. Phys. Soc. Jpn., 査読あり, 82, 2013, 124713-1 -- 124713-8

(13) J. Otsuki, Y. Kuramoto, Dynamical mean-field theory for quantum spin systems: Test of solutions for magnetically ordered states, Phys. Rev. B, 査読あり, 88, 2013, 024427-1 -- 024427-7

(14) Shintaro Hoshino and Yoshio Kuramoto, Itinerant vs localized heavy-electron magnetism, Phys. Rev. Lett., 査読あり, 111, 2013, 026401-1 -- 026401-5

(15) A. Yamakage, K. Nomura, K.-I. Imura, and Y. Kuramoto, Criticality of the metal-topological insulator transition driven by disorder, Phys. Rev. B, 査読あり, 87, 2013, 205141-1 -- 205141-11

(16) Satoshi Yamazaki and Yoshio Kuramoto, Symmetry of Superconductivity in Fullerides by Repulsive Interaction Model, Physics Procedia, 査読あり, 45, 2013, 29--32

(17) Satoshi Yamazaki and Yoshio Kuramoto, Repulsive Interaction Helps Superconductivity in Fullerides, J. Phys. Soc. Jpn., 査読あり, 82, 2013, 054713-1 -- 054713-7

(18) R. Peters, S. Hoshino, N. Kawakami, J. Otsuki, Yoshio Kuramoto, Charge order in Kondo lattice systems, Phys. Rev. B, 査読あり, 87, 2013, 165133-1 -- 165133-6

(19) Shintaro Hoshino, Junya Otsuki and Yoshio Kuramoto, Resolution of  $(1/2)$  In 2 Entropy by Spontaneous Symmetry Breaking, J. Phys. Soc. Jpn., 査読あり, 82, 2013, 044707-1 -- 044707-9

(20) S. Hoshino, J. Otsuki and Y. Kuramoto, Mott Insulator in Two-Channel Kondo Lattice, J. Phys.: Conf. Ser., 査読あり, 391, 2012, 012155-1 -- 012155-4

(21) A. Yamakage, K.-I. Imura, J. Cayssol and Y. Kuramoto, Spin-Orbit Effects in Graphene p - n Junction, AIP Conf. Proc., 査読あり, 1504, 2012, 867-870

(22) Ken-Ichiro Imura, Yoshio Kuramoto and Kentaro Nomura,  $Z_2$ -Classification of Localization Properties in Graphene, AIP Conf. Proc., 査読あり, 1504, 2012, 871-874

(23) Ai Yamakage, Kentaro Nomura, Ken-Ichiro Imura and Yoshio Kuramoto,  $Z_2$  Topological Anderson Insulator, J. Phys.: Conf. Ser., 査読あり, 400, 2012, 042070-1 -- 042070-4

(24) S. Masuda, and Y. Kuramoto: Interference effects of helical current, Geometry-dependent spin polarization of

transmitted electrons, Phys. Rev. B, 査読あり, 85, 2012, 195327-1 -- 195327-8

(25) 倉本義夫, 物性理論のツール, 固体物理, 査読あり, 51, 2016, 53-63

(26) 倉本義夫, 電子の多極子秩序, 日本物理学会誌, 査読あり, 71, 2016, 4-5

(27) 倉本義夫, 重い電子系理論への視点, 固体物理, 査読あり, 47, 2012, 199-206

[学会発表](計 29 件)

(1) 倉本義夫, 近藤効果が誘起する新奇電子秩序, J-Physics 若手夏の学校, 2016 年 8 月 9 日, 高野山大学 (和歌山県高野町)

(2) A. Kiss and Y. Kuramoto, Orthogonality and excitonic correlations leading to Kondo-like effect, 日本物理学会春季大会, 2016 年 3 月 21 日, 東北学院大学 (宮城県仙台市)

(3) Y. Kuramoto, Composite orders and virtual hybridization in two-channel Kondo lattice, Memorial Symposium for Prof. Thomas Pruschke, July 21, 2016, Göttingen (Germany)

(4) Yoshio Kuramoto, Composite Electronic Orders in Non-Kramers Kondo Lattice, International Workshop on Heavy Fermions and Quantum Phase Transitions, April 14, 2015, Hangzhou (China)

(5) Yoshio Kuramoto, Diagonal and off-diagonal composite electronic orders in non-Kramers Kondo lattice, 24th ASRC International Workshop, 5 December 2014, 東北大学(宮城県仙台市)

(6) Yoshio Kuramoto, Composite electronic orders in non-Kramers Kondo lattice, Novel Quantum States in Condensed Matter, November 4, 2014, 京都大学(京都府京都市)

(7) Yoshio Kuramoto, Shintaro Hoshino, Itinerant multipoles and superconductivity of composite particles in two-channel Kondo lattice, 13th Japan-Germany Seminar on "Interplay of Spin- and Orbital Degrees of Freedom in Strongly Correlated Electron Systems", July 14, 2014, Schloss Ringberg (Germany)

(8) Yoshio Kuramoto, Shintaro Hoshino, Unconventional orders in Kondo lattice and related models, Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems, July 10, 2014,

Grenoble (France)

(9) 菊地琢, 星野晋太郎, 倉本義夫, 近藤格子模型における磁気・電荷相関の波数依存性と秩序相, 日本物理学会春季大会, 2014 年 3 月 28 日, 東海大学 (神奈川県平塚市)

(10) Shintaro Hoshino and Yoshio Kuramoto, Odd-frequency superconductivity in two-channel Kondo lattice, APS March Meeting, March 3, 2014, Denver (USA)

(11) Yoshio Kuramoto, Phase transitions in heavy electrons, January 22, 2014, 台湾物理学会, Taichung (Taiwan)

(12) 倉本義夫, f 電子と伝導電子の結合による新奇多極子状態, 物性研究所短期研究会「強相関電子系における局所対称性の破れと量子物性」, 2013 年 11 月 27 日, 東大物性研 (千葉県柏市)

(13) 倉本義夫, 軌道近藤効果と新奇秩序状態, 日本物理学会秋季大会, 2013 年 9 月 27 日, 徳島大学 (徳島県徳島市)

(14) 山崎智史, 星野晋太郎, 倉本義夫, Holstein-Hubbard 模型における動的応答と Hebel-Slichter ピーク, 日本物理学会秋季大会, 2013 年 9 月 26 日, 徳島大学 (徳島県徳島市)

(15) 山影相, 野村健太郎, 井村健一郎, 倉本義夫, 金属・トポロジカルアンダーソン絶縁体転移の量子臨界性, 日本物理学会秋季大会, 2013 年 9 月 25 日, 徳島大学 (徳島県徳島市)

(16) 菊地琢, 星野晋太郎, 倉本義夫, 異方的近藤格子模型における反強磁性秩序の発生と帯磁率の異方性, 日本物理学会秋季大会, 2013 年 9 月 25 日, 徳島大学 (徳島県徳島市)

(17) 星野晋太郎, 倉本義夫, マルチチャンネル近藤格子における奇周波数超伝導, 日本物理学会秋季大会, 2013 年 9 月 25 日, 徳島大学 (徳島県徳島市)

(18) 倉本義夫, 物性物理学の一断面, 京都大学基礎物理学研究所 60 周年シンポジウム, 2013 年 9 月 19 日, 京都大学 (京都府京都市)

(19) Yoshio Kuramoto, Summary: Theoretical issues in SCES 2013, Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems, 8 August 2013, 東京大学 (東京都文京区)

(20) 菊地琢, 星野晋太郎, 倉本義夫, 磁場

誘起による重い電子の反強磁性秩序,  
日本物理学会大会, 2013年3月28日, 広島  
大学 (広島県東広島市)

(21) 星野晋太郎, 倉本義夫, 近藤格子の反  
強磁性秩序相内における遍歴・局在転移, 日  
本物理学会大会, 2013年3月28日, 広島大  
学 (広島県東広島市)

(22) Satoshi Yamazaki, Yoshio Kuramoto,  
Repulsive interaction helps  
superconductivity in fullerides, APS  
March meeting, March 21, 2013, Baltimore  
(USA)

(23) 星野晋太郎, 倉本義夫, 近藤一重項と  
結晶場一重項の競合による重い電子形成と  
PrFe<sub>4</sub>P<sub>12</sub> の高磁場相, 日本物理学会秋季分  
科会, 2012年9月20日, 横浜国立大学 (神  
奈川県横浜市)

(24) 山崎智史, 星野晋太郎, 倉本義夫, 量  
子モンテカルロ法による Holstein-Hubbard  
模型の強結合超伝導, 日本物理学会秋季分  
科会, 2012年9月20日, 横浜国立大学 (神  
奈川県横浜市)

(25) 増田俊平, 倉本義夫, Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 型トポロ  
ジカル絶縁体の磁場中エネルギースペクト  
ルと有効g因子, 東北大理日本物理学会秋季  
分科会, 2012年9月19日, 横浜国立大学 (神  
奈川県横浜市)

(26) 菊地琢, 星野晋太郎, 倉本義夫, 結晶  
場モデルによる URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> の動的帯磁率 -- 二  
重項と単重項モデルによる多極子秩序の検  
証, 日本物理学会秋季分科会, 2012年9月  
18日, 横浜国立大学 (神奈川県横浜市)

(27) Y. Kuramoto, Exotic orders in heavy  
electron systems, The Fourth  
International Workshop on Dual Nature of  
f-Electrons, Himeji, Jibasan Center  
July 5, 2012 (兵庫県姫路市)

(28) Y. Kuramoto, Unconventional  
electronic orders in non-Kramers electron  
systems, 12th Japan-German Symposium on  
Emergent phenomena in novel quantum phases  
of condensed matter, 14-17 July 15, 2012  
(静岡県伊豆市)

(29) Yoshio Kuramoto, Exotic orders in  
heavy electron systems,  
International WORKSHOP on Strongly  
Correlated Electron systems in high  
magnetic Fields (SCEF), May 23, 2012,  
Ecole de Physique des Houches (France)

{図書}(計1件)

倉本義夫, 朝倉書店, 物性物理学ハンド  
ブック(磁性), 2012, pp.1-15

{産業財産権}

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

{その他}

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

倉本義夫 (KURAMOTO, Yoshio)

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科  
学研究所・特別教授

研究者番号: 70111250

### (2) 研究分担者

該当者なし

### (3) 連携研究者

該当者なし

### (4) 研究協力者

該当者なし