

平成22年 4月14日現在

研究種目：若手研究（B）
 研究期間：2007～2009
 課題番号：19740209
 研究課題名（和文） 自己エネルギー汎関数理論による重い電子系における磁気秩序と近藤効果の競合の研究
 研究課題名（英文） Study of competition between the magnetic ordering and the Kondo effect in the heavy fermion systems by the self-energy functional method
 研究代表者
 武藤 哲也（MUTOU TETSUYA）
 島根大学・総合理工学部・准教授
 研究者番号：50312244

研究成果の概要（和文）：重い電子系のモデルである周期的アンダーソンモデルを対象にして、磁性イオン希釈系における特徴的な物性を取り扱う手法の構築を試みた。自己エネルギー汎関数理論や動的平均場理論は、局所的な量子多体効果を正しく取り込む方法である。自己エネルギーを摂動論的・非摂動論的に構成する方法を併用し、コヒーレント・ポテンシャル近似と組み合わせて、磁性イオン希釈系のランダムネス効果と電子相関効果を統一的に取り扱うことができることを示した。

研究成果の概要（英文）：We have tried to construct the scheme by which we can investigate characteristic properties observed in magnetic-ion diluted heavy fermion systems modeled by the periodic Anderson model. The self-energy functional theory and the dynamical mean-field theory are numerical methods by which one can treat the local quantum many-body effect correctly. It has been shown that one can treat the randomness effect of magnetic-ion diluted systems and the electron correlation effect on the same footing by using the above scheme and the coherent potential approximation.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,600,000	0	1,600,000
2008年度	800,000	240,000	1,040,000
2009年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
総計	3,200,000	480,000	3,680,000

研究分野：物性理論

科研費の分科・細目：物性II

キーワード：強相関電子系，重い電子系，周期的アンダーソンモデル，磁性イオン希釈，自己エネルギー汎関数理論，動的平均場理論，コヒーレント・ポテンシャル近似

1. 研究開始当初の背景

(1) 重い電子系において、磁気モーメントを示す磁性イオンの濃度を希薄にしていくと、磁性イオンのコヒーレンスが失われ、個々の

磁気モーメントにおける近藤効果に起因する振る舞いが現れてくる。従って、重い電子系における磁気秩序と近藤効果の競合を研究する際にも、磁性イオン希釈効果を調べる

ことは重要な課題であった。

(2) 重い電子系における磁性イオン希釈効果を調べるためには、磁気秩序と近藤効果の両方に重要な電子相関効果と磁性イオン希釈によるランダムネス効果を、統一的に扱う理論的手法が必要であった。局所的な電子相関効果を適切に取り扱う方法として、動的平均場理論や自己エネルギー汎関数理論が発展してきている。

2. 研究の目的

(1) 電子相関効果とランダムネス効果を統一的に扱うための理論的枠組を構築する

(2) 理論的枠組を重い電子系の理論モデルに適用して、磁気秩序と近藤効果の競合を系統的に調べる

(3) 現実の重い電子系における磁気秩序と近藤効果の競合問題、さらには、特異な超伝導の起源など、重い電子系の物性の理解に役立てる

3. 研究の方法

(1) 周期的アンダーソンモデルにおいて、 f 軌道電子を持つサイト（磁性イオンに対応）と持たないサイト（非磁性イオンに対応）を考える。局所的な量子多体効果を取り扱うために、動的平均場理論や自己エネルギー汎関数理論を用い、ランダムネス効果を扱うためにコヒーレント・ポテンシャル近似を用いる。両者を自己無撞着に組み合わせたスキームを上述のモデルに適用して、電気抵抗率や磁化率などの諸物性について磁性イオン濃度依存性を調べる。

(2) 動的平均場理論において、有効媒質中の一不純物問題を解く際に、自己エネルギーを摂動論的に構成する方法と非摂動論的に構成する方法を相補的に併用する。特に、自己エネルギーを摂動論的に構成する方法として、逐次摂動理論を用いるが、電子-正孔対称性のない一般的な場合にも適用できる修正逐次摂動理論を援用する。

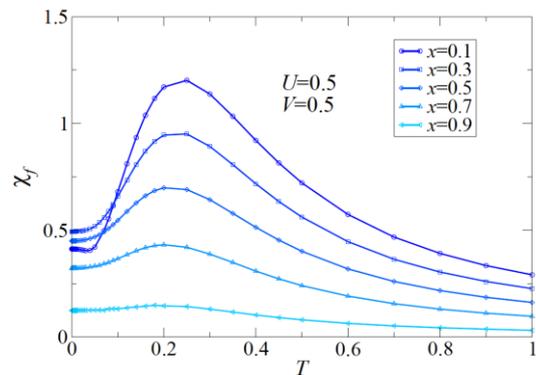
4. 研究成果

(1) 電子-正孔対称性のない一般的なパラメータを仮定した周期的アンダーソンモデルに、動的平均場理論とコヒーレント・ポテンシャル近似を組み合わせたスキームを適用することで、電気抵抗率の温度依存性を調べた。一般的なモデルに対しても上述のスキームが適用できることが明らかになった。

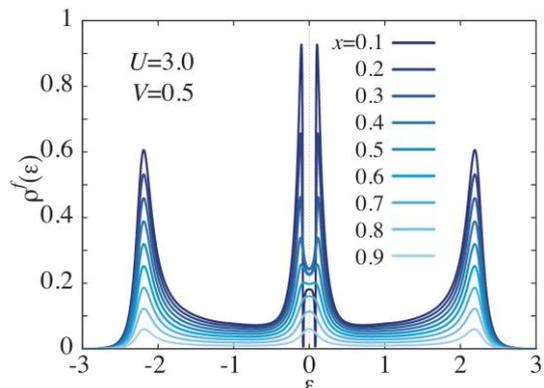
(2) 電気抵抗率については、磁性イオンに対応するサイトの濃度が高いと重い電子系的

な温度依存性を示し、濃度が低いと近藤効果的な温度依存性を示す。

(3) 近藤絶縁体に対応するパラメータを仮定したモデルに対して、磁化率の温度変化を計算し、その磁性イオンサイト濃度依存性を調べた。 $\text{YB}_{1-x}\text{Lu}_x\text{B}_{12}$ の磁化率の実験結果と定性的に一致する結果を得た（図1、図2）。上述のスキームの適用対象の広さを示唆しており、今後、強相関電子系の広範囲の研究対象に適用できる可能性の高さが示された。

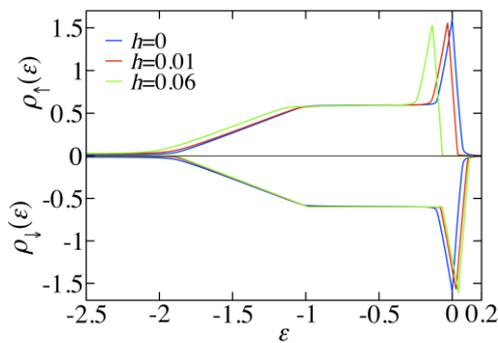


(図1：近藤絶縁体に対応するパラメータを仮定した周期的アンダーソンモデルの磁化率の温度変化。磁性イオンサイト濃度を x としている。)

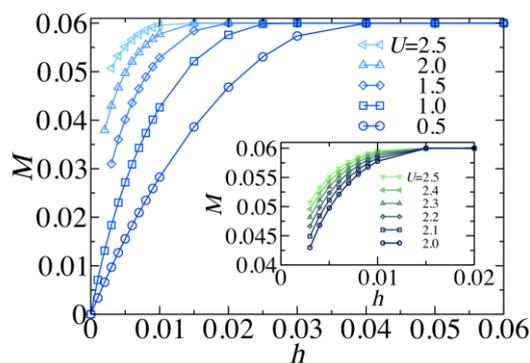


(図2：近藤絶縁体に対応するパラメータを仮定した周期的アンダーソンモデルの状態密度の f 電子成分の x 依存性。)

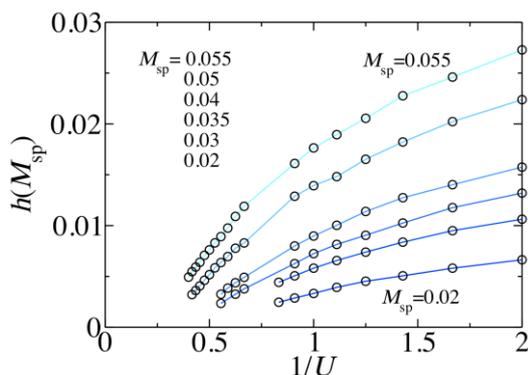
(4) 動的平均場理論における自己エネルギーを摂動論的に構成する方法を用いて、金属強磁性の問題への適用を試みた。具体的には、強磁性金属である Ni のバンド構造に対応するような、バンド端にピークのある特徴的な構造を持つ状態密度を仮定したハバードモデルに対して、動的平均場理論に修正逐次摂動理論を用いたスキームを適用して、磁化過程や磁化率を調べた。クーロン斥力エネルギーが大きい系に対しては、金属的な強磁性状態が生じる可能性があることが示された（図3、図4、図5）。



(図3：特徴的な状態密度を仮定したハバードモデルのスピンの状態密度の磁場変化)



(図4：特徴的な状態密度を仮定したハバードモデルの磁化過程のクーロン斥力エネルギーU依存性. 大きなUの値に対しては、磁場の大きさhが0となる極限でも有限磁化を与える解が存在する可能性が示唆される.)



(図5：特徴的な状態密度を仮定したハバードモデルにおける、有限磁化を生じさせる磁場の強さの1/U依存性. 大きなU(小さな1/U)の値に対しては、磁場がなくとも0.02程度の有限磁化が生じる強磁性基底状態が期待される.)

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1件)

① Atsuo Suzuki, Syunsuke Tanaka, Tetsuya Mitou and Dai S. Hirashima : “Dynamical Spin Susceptibility of Electron-Doped High- T_c Cuprates – Comparison with Hole-Doped Systems –”, *Journal of the Physical Society of Japan*, 査読有, 79巻, 2010, 024708-1 - 024708-7

[学会発表] (計9件)

- (1) 波田浩文, 武藤哲也 : 「特異な状態密度を持つHubbardモデルの磁化過程II」, 日本物理学会 第65回年次大会, 2010年3月21日, 岡山 (岡山大学)
- (2) 武藤哲也, 関谷泰輝 : 「磁性イオンを希釈した近藤絶縁体の帯磁率II」, 日本物理学会 2009年秋季大会, 2009年9月25日, 熊本 (熊本大学)
- (3) 波田浩文, 武藤哲也 : 「重い電子系における磁性イオン希釈効果」, 日本物理学会 2009年秋季大会, 2009年9月25日, 熊本 (熊本大学)
- (4) 関谷泰輝, 武藤哲也 : 「磁性イオンを希釈した近藤絶縁体の帯磁率」, 日本物理学会 第64回年次大会, 2009年3月28日, 東京 (立教大学)
- (5) 露無祐加, 武藤哲也 : 「特異な状態密度を持つHubbardモデルの帯磁率」, 日本物理学会 第64回年次大会, 2009年3月27日, 東京 (立教大学)
- (6) 鈴木厚壮, 田中俊介, 武藤哲也, 平島大 : 「電子ドープ型高温超伝導体における動的スピン帯磁率」, 日本物理学会 第64回年次大会, 2009年3月27日, 東京 (立教大学)
- (7) 関谷泰輝, 武藤哲也 : 「重い電子系磁性イオン希釈効果モデルの磁化率」, 日本物理学会 2008年秋季大会, 2008年9月23日, 盛岡 (岩手大学)
- (8) 露無祐加, 武藤哲也 : 「特異な状態密度を持つHubbardモデルの磁化過程」, 日本物理学会 2008年秋季大会, 2008年9月23日, 盛岡 (岩手大学)
- (9) 鈴木厚壮, 武藤哲也 : 「Hubbardモデルにおける修正逐次摂動理論の収束条件の検討」, 日本物理学会 2008年秋季大会, 2008年9月23日, 盛岡 (岩手大学)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

武藤 哲也 (MUTOU TETSUYA)

島根大学・総合理工学部・准教授

研究者番号：5 0 3 1 2 2 4 4