

## 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12日現在

機関番号：12601  
 研究種目：基盤研究(B)  
 研究期間：2009～2011  
 課題番号：21340090  
 研究課題名（和文） 近藤系における部分近藤スクリーニングによる自己組織化と新奇な磁気伝導現象  
 研究課題名（英文） Self-organization and Novel Magneto-transport Phenomena by Partial Kondo Screening in Kondo Systems  
 研究代表者  
 求 幸年 (MOTOME YUKITOSHI)  
 東京大学・大学院工学系研究科・准教授  
 研究者番号：40323274

研究成果の概要（和文）：伝導電子と局在スピンの相互作用する近藤格子系において、幾何学的フラストレーションがもたらす効果を理論的に調べた。特に、磁性と非磁性が共存した部分無秩序状態のユニークな例である部分近藤スクリーニング形成に着目し、この現象に特有の磁性現象や伝導現象を明らかにした。関連して、フラストレート伝導系特有の興味深い物理として、異常ホール効果の要因であるスカラーカイラリティの発現機構や、局所スピン相関による非自明な伝導現象などの研究も行った。

研究成果の概要（英文）：Effects of geometrical frustration are theoretically investigated in the Kondo lattice systems in which itinerant electrons interact with localized spins. In particular, we clarified the peculiar magnetic and transport properties with focusing on the partial Kondo screening, which is a peculiar example of the partial disorder with a spatial coexistence of magnetic and nonmagnetic sites. In addition, we also studied the intriguing physics in frustrated itinerant electron systems, such as the stabilization mechanism of the spin scalar chirality leading to the anomalous Hall effect and nontrivial transport properties due to local spin correlations.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	6,700,000	210,000	6,910,000
2010年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2011年度	1,400,000	420,000	1,820,000
年度			
年度			
総計	9,600,000	1,080,000	10,680,000

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，計算物理，磁性，低温物理

## 1. 研究開始当初の背景

近藤系における部分秩序の可能性は、1980年代から  $Rm_2$  といった金属間化合物を中心として実験的に指摘されてきた。同時期に、磁性状態を±1、近藤シングレット状態を0と有効的に摸した Blume-Emery-Griffiths 型のモデルに対する平均場近似計算が行われ、部分近藤シングレット状態を含む相図が提

案された。しかしこれらの理論研究では、モデルが現象論的なパラメタを含む単純化されたものであること、計算手法が平均場的な取り扱いにとどまっていることから、近藤スクリーニングを伴った部分秩序形成において本質的に重要と考えられる量子揺らぎの効果が正しく考慮されていなかった。また、この有効モデルは局在スピンモデルであるた

め、磁性との絡みが興味深い輸送現象の解析を行うことができないという本質的な欠点があった。一方、実験研究の方はその後も着実に進められ、特に近年、強相関電子系における幾何学的フラストレーションの研究の盛り上がりと呼応して、近藤系においてもフラストレーションという切り口での研究が精力的に進められるようになり、部分秩序化を含めた自己組織化現象が新たな興味を集めていた。

近藤系の理論自体は、近藤やDoniachらによる先駆的な研究以来多くの蓄積がなされ、特に近年は計算機の急速な発展によって、揺らぎの効果まで含めた数値的研究が盛んに行われるようになり、相競合や量子臨界性などを含めた興味深い結果が得られていた。こうした状況で、上記のような自己組織化とそれに関連した興味深い輸送現象の理論が長らく手付かずにあるのは驚くべき状況であり、国内を中心とした実験研究に密接に連携した理論研究の推進は急務であった。

## 2. 研究の目的

固体中を運動する伝導電子と局在スピンの相互作用は、重い電子的挙動や非フェルミ液体的挙動、非従来型超伝導などの多くの非自明な性質を引き起こすことから、物性物理学における中心的課題のひとつとして精力的な研究がなされている。本研究は、こうした系における部分磁気秩序、あるいは部分近藤スクリーニングを中心とした自己組織化現象の発現機構と、その下での輸送現象や動的性質を理論的に解明することを目的とする。ここでいう部分秩序・部分近藤スクリーニング状態とは、系のうち、ある部分格子で磁気秩序が生じ、磁気秩序に参加しない局在モーメントが伝導電子による近藤スクリーニングを受けた状態である。これは、近藤シングレットを形成する部分と磁性を有する部分とが共存すること、またそうした新奇な磁性状態と伝導電子との相互作用から非自明な輸送現象が期待できることから、これまで主に局在スピン系で研究されてきた部分秩序状態とは本質的に異なる新しい状態である。従来の研究における現象論的なモデルに対する平均場的な取り扱いを超えて、より現実的な近藤格子モデル等に対して量子効果と揺らぎの効果まで含めた数値的なアプローチを含む多角的な理論手法を駆使することにより、近藤系の自己組織化現象の本質を明らかにし、近年急速に展開する実験研究と密接な連携をとりながら、伝導電子-局在スピン間の相互作用がもたらす新しい物理を開拓することが本研究の目的である。

## 3. 研究の方法

近藤格子系における部分磁気秩序、部分近

藤スクリーニング、電荷秩序といった非自明な秩序状態の発現機構と、こうした状態における新奇な輸送現象の理論的な解明を目標とし、問題の本質を抽出するために互いに関連の深い理論モデルとして、近藤ネックレスモデル、近藤格子モデル、周期的アンダーソンモデルを同時進行的に取り扱った。これらのモデルに対して、基本となる平均場近似による研究に加えて、特に近藤スクリーニングにおいて重要となる量子効果や伝導特性を考える上で本質的な揺らぎの効果を取り入れた理論的なアプローチとして、Lanczos法による厳密対角化、変分モンテカルロ法、クラスタ動的な平均場法などの理論手法を用いた研究を行った。

## 4. 研究成果

### 【2009年度】

(1) 三角格子上の近藤ネックレスモデルおよび近藤格子モデルの基底状態を、高精度変分モンテカルロ法を用いて調べ、磁気秩序相と近藤スピン液体相の間に、部分近藤スクリーニング (PKS) 相が現れることを見出した。PKS相の安定化に、量子揺らぎとスピンの異方性が重要な寄与をしていることを明らかにした。また伝導電子が、磁気秩序相を相対的に安定化するとともに、電荷分離を示すという重要な働きをしていることを見出した。

(2) パイロクロア格子上の古典的な局在スピンと結合した近藤格子モデルの性質を、モンテカルロシミュレーションを用いて調べ、相競合の様子を明らかにした。古典スピン間の反強磁性交換相互作用を強くしていくと、二重交換相互作用で安定化していた強磁性金属相が徐々に不安定化し、フラストレーションによって反強磁性が強く抑制された常磁性金属相へと転移することを見出した。この常磁性金属相は、強いスピン揺らぎによって電気伝導がインコヒーレントであり、特に臨界点付近では温度依存性がほとんどない非フェルミ液体状態となる。また、相競合領域では金属状態間の相分離状態が現れることも見出した。

### 【2010年度】

(1) フラストレート近藤格子系における部分近藤シングレット相の研究：前年度の三角格子上の近藤ネックレスモデルおよび近藤格子モデルに対する計算をさらに発展させ、フラストレーションがより強いカゴメ格子上の近藤ネックレスモデルに対する計算を行った。その結果、カゴメ格子においても部分近藤シングレット相が現れることを明らかにした。三角格子との比較を通じて、フラストレーションが部分近藤シングレット相の安定化に与える影響を調べた。

(2) 古典局在スピンをもつ近藤格子モデルにおけるスカラーカイラル秩序：三角格子上

の強磁性近藤モデルの基底状態を調べ上げ、特異な非共面的な4副格子秩序構造をもったスカラーカイラル秩序が生じることを見出した。特に、これまで知られていた3/4フィリング相に加えて、1/4フィリング近傍に広い領域にわたってスカラーカイラル秩序が安定化することを明らかにした。

(3) アイスルールに従う自由度と結合した伝導電子系における金属絶縁体転移：フラストレーションに特有な局所拘束条件として、正四面体上のアイスルールに着目し、アイスルールに従う自由度と相互作用する伝導系の基底状態を調べた。パイロクロア格子をはじめとするフラストレート格子に対する数値計算と、伏見カクタス格子に対する厳密解による研究を相補的に組み合わせ、電荷アイスと呼べるような特異な絶縁体状態への相転移の様子を明らかにした。

#### 【2011年度】

(1) 周期的アンダーソンモデルにおける部分無秩序相：三角格子上の周期的アンダーソンモデルに対して平均場近似による基底状態の計算を行い、部分無秩序相の発現可能性を調べた。その結果、ハーフフィリングにおいて、非共線的な反強磁性金属相と近藤絶縁相の間に、部分無秩序相が現れることを明らかにした。この部分無秩序相は、ハニカムネットワーク上の共線的な反強磁性状態と、残ったサイトの常磁性状態が共存した状態である。以前得た近藤格子モデルにおける結果との比較を通じて、アンダーソンモデル特有の局在電子がもつ電荷の自由度が重要な役割をしていることを明らかにした。

(2) 近藤格子モデルにおけるスカラーカイラル秩序の起源：前年度に得た1/4フィリング近傍のスカラーカイラル秩序の起源を調べ、フラストレーションのもとでのフェルミ面効果（高次のコーン異常）が重要な役割を果たしていることを明らかにした。

(3) パイロクロアスピンアイス近藤モデルにおける特異な磁気構造と抵抗極小現象：スピンアイスの異方性をもったイジングスピンと相互作用する伝導電子系の有限温度の性質を、多項式展開モンテカルロ法とクラスタ動的な平均場法を用いて調べた。その結果、これまでに知られていなかった32幅格子構造をもった特異な磁気構造が現れることを示した。また、アイス規則的な短距離相関によって電気抵抗が増大する特異な振舞いも明らかにした。

#### 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 17 件)

1. H. Ishizuka and Y. Motome, “Partial disorder in an Ising-spin Kondo lattice model on a triangular lattice”, Phys. Rev. Lett. に掲載決定, 査読有り, preprint (arXiv:1205.4826)
2. S. Hayami, M. Udagawa, and Y. Motome, “Carrier doping to a partially disordered state in the periodic Anderson model on a triangular lattice”, J. Phys.: Conf. Ser. に掲載決定, 査読有り, preprint (arXiv:1107.4401)
3. H. Ishizuka, M. Udagawa, and Y. Motome, “Application of polynomial-expansion Monte Carlo method to a spin-ice Kondo lattice model”, J. Phys.: Conf. Ser. に掲載決定, 査読有り, preprint (arXiv:1107.4174)
4. Y. Akagi, M. Udagawa, and Y. Motome, “Hidden Multiple-spin Interactions as an Origin of Spin Scalar Chiral Order in Frustrated Kondo Lattice Models”, Phys. Rev. Lett. **108**, 096401 (2012), DOI:10.1103/PhysRevLett.108.096401, 査読有り
5. M. Udagawa, H. Ishizuka, and Y. Motome, “Non-Kondo mechanism for resistivity minimum in spin ice conduction systems”, Phys. Rev. Lett. **108**, 066406 (2012), DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.066406, 査読有り
6. S. Hayami, M. Udagawa, and Y. Motome, “Partial Disorder in the Periodic Anderson Model on a Triangular Lattice”, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 073704 (2011), DOI: 10.1143/JPSJ.80.073704, 査読有り
7. H. Ishizuka, M. Udagawa, and Y. Motome, “Metal-insulator transition caused by the coupling to localized charge-frustrated systems under ice-rule local constraint”, Phys. Rev. B **83**, 125101 (2011), DOI: 10.1103/PhysRevB.83.125101, 査読有り
8. Y. Akagi and Y. Motome, “Noncoplanar spin canting in lightly-doped ferromagnetic Kondo lattice model on a triangular lattice”, J. Phys.: Conf.

- Ser. **320**, 012059 (2011), DOI:  
10.1088/1742-6596/320/1/012059, 査読  
有り
9. Y. Motome, K. Nakamikawa, Y. Yamaji, and  
M. Udagawa, “Variational Monte Carlo  
Study of the Kondo Necklace Model with  
Geometrical Frustration”, J. Phys. Soc.  
Jpn. **80**, Suppl. A, **SA133** (2011),  
DOI:10.1143/JPSJS.80SA.SA133, 査読有  
り
  10. Y. Motome and N. Furukawa,  
“Electronic phase separation in the  
pyrochlore double-exchange model”,  
Phys. Rev. B **82**, 060407(R) (2010), DOI:  
10.1103/PhysRevB.82.060407, 査読有り
  11. Y. Akagi and Y. Motome, “Spin  
chirality ordering and anomalous Hall  
effect in the ferromagnetic Kondo  
lattice model on a triangular lattice”,  
J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 083711 (2010),  
DOI: 10.1143/JPSJ.79.083711, 査読有り
  12. Y. Motome, K. Nakamikawa, Y.  
Yamaji, and M. Udagawa, “Partial Kondo  
screening in frustrated Kondo lattice  
systems”, Phys. Rev. Lett. **105**, 036403  
(2010), DOI:  
10.1103/PhysRevLett.105.036403, 査読  
有り
  13. M. Udagawa, H. Ishizuka, and Y.  
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”, Phys. Rev. Lett. **104**, 226405  
(2010), DOI:  
10.1103/PhysRevLett.104.226405, 査読  
有り
  14. M. Udagawa and Y. Motome,  
“Chirality-driven mass enhancement in  
the kagome Hubbard model”, Phys. Rev.  
Lett. **104**, 106409 (2010), DOI:  
10.1103/PhysRevLett.104.106409, 査読  
有り
  15. Y. Motome and N. Furukawa, “Phase  
competition in the double-exchange  
model on the frustrated pyrochlore  
lattice”, Phys. Rev. Lett. **104**, 106407  
(2010), DOI:  
10.1103/PhysRevLett.104.106407, 査読  
有り
  16. Y. Motome and N. Furukawa,  
“Ferromagnetic transition in the  
double-exchange model on the pyrochlore  
lattice”, J. Phys.: Conf. Ser. **200**,  
012131 (2010),  
DOI:10.1088/1742-6596/200/1/012131,  
査読有り
  17. M. Udagawa and Y. Motome,  
“Chirality-spin separation in the  
Hubbard model on the kagome lattice”,  
J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 012214 (2010),  
DOI:10.1088/1742-6596/200/1/012214,  
査読有り
- [学会発表] (計 39 件)
1. Y. Motome, “Frustration in Kondo  
lattice systems”, UK-Japan Meeting  
2012 in Tokyo, 2012 年 1 月 10 日, 東京  
大学
  2. Y. Motome, “Emergent order and  
fluctuation in frustrated spin-charge  
coupled systems - spin chirality,  
partial disorder, and spin ice”,  
Novel Quantum States in Condensed  
Matter 2011 (NQS2011), 2011 年 11 月  
10 日, 京都大学
  3. Y. Motome, “Theoretical study of  
spin-charge coupled systems on  
geometrically frustrated lattices”,  
Tokyo-Cologne Workshop on Strongly  
Correlated Transition-Metal  
Compounds, 2011 年 9 月 9 日, ドイツ・  
ケルン大学
  4. Y. Motome, “Emergent order in  
spin-charge coupled systems on  
frustrated lattices”, CIFAR/MEXT  
Japanese Network Meeting, 2011 年 5  
月 30 日, カナダ・バンクーバー
  5. Y. Motome, “Emergent Order in  
Spin-Charge Coupled Systems on  
Frustrated Lattices”, Novel  
Phenomena in Frustrated Systems, 2011  
年 5 月 23 日, アメリカ・サンタフェ
  6. Y. Motome, “Emergent order in  
frustrated Kondo lattice systems”,  
International Conference on  
Frustration in Condensed Matter  
(ICFCM), 2011 年 1 月 13 日, 仙台国際セ

ンター

7. 速水 賢, 宇田川将文, 求 幸年, “三角格子上周期的アンダーソン模型におけるコメンシュレートフィリング近傍の部分無秩序”, 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
8. 求 幸年, “相関電子系に現れる高次・複合自由度 —新しい量子状態と伝導現象—”, 領域8, 領域3, 領域7合同シンポジウム, “新物質が切り拓く次世代の強相関物性科学”, 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
9. 赤城 裕, 求 幸年, “三角格子強磁性近藤格子模型における自発的なカゴメネットワーク形成”, 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
10. 石塚大晃, 求 幸年, “三角格子上のイジングスピン近藤格子模型における部分無秩序状態”, 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
11. H. Ishizuka, M. Udagawa, and Y. Motome, “Monte Carlo study of a spin-ice type Kondo lattice model on a pyrochlore lattice”, 2012 APS March Meeting, 2012年2月29日, アメリカ・ボストン
12. Y. Akagi, M. Udagawa, and Y. Motome, “Spin scalar chiral ordering and hidden positive biquadratic interaction in frustrated Kondo lattice systems”, 2012 APS March Meeting, 2012年2月29日, アメリカ・ボストン
13. S. Hayami, M. Udagawa, and Y. Motome, “Partial disorder in the periodic Anderson model on a triangular lattice”, 2012 APS March Meeting, 2012年2月29日, アメリカ・ボストン
14. Y. Motome, M. Udagawa, and H. Ishizuka, “Non-Kondo mechanism of resistivity upturn in a spin-ice Kondo lattice model”, 2012 APS March Meeting, 2012年2月29日, アメリカ・ボストン
15. 速水 賢, 宇田川将文, 求 幸年, “幾何学的フラストレーションをもつ周期的アンダーソンモデルにおける部分無秩序状態”, 日本物理学会 2011年秋季大会, 2011年9月22日, 富山大学
16. 宇田川将文, 石塚大晃, 求 幸年, “スピニアイス伝導系における非近藤抵抗極小現象”, 日本物理学会 2011年秋季大会, 2011年9月22日, 富山大学
17. 石塚大晃, 宇田川将文, 求 幸年, “パイクロア格子上イジングスピン近藤格子模型における低温磁気構造とスピン液体”, 日本物理学会 2011年秋季大会, 2011年9月22日, 富山大学
18. 赤城 裕, 宇田川将文, 求 幸年, “フラストレート近藤格子系におけるカイラリティ秩序と伝導電子に由来する有効磁気相互作用”, 日本物理学会 2011年秋季大会, 2011年9月22日, 富山大学
19. 赤城 裕, 求 幸年, “幾何学的フラストレート強磁性近藤系におけるスピнкаイラリティ秩序とその発現機構”, 日本物理学会第66回年次大会, 2011年3月27日, 新潟大学
20. 宇田川将文, 石塚大晃, 求 幸年, “スピニアイス伝導系の電子状態と伝導特性”, 日本物理学会第66回年次大会, 2011年3月27日, 新潟大学
21. 速水 賢, 宇田川将文, 求 幸年, “幾何学的フラストレーションをもつ周期的アンダーソンモデルにおける部分近藤スクリーニング形成”, 日本物理学会第66回年次大会, 2011年3月26日, 新潟大学
22. Y. Motome, K. Nakamikawa, Y. Yamaji, and M. Udagawa, “Partial Kondo screening in geometrically frustrated Kondo lattice systems”, 2011 APS March Meeting, 2011年3月21日, アメリカ・ダラス
23. M. Udagawa, “Geometrical frustration in itinerant electron systems”, Japan-Swiss Joint Workshop, New Trends in Theory of Correlated Materials, 2010年9月11日, 千葉・生命の森リゾート
24. M. Udagawa, “Quantum criticality in itinerant ice-rule systems”, International Conference on Highly Frustrated Magnetism 2010, 2010年8月5日, アメリカ・バルチモア

25. Y. Motome, “Spin-charge-orbital coupled phenomena in Mo pyrochlore oxides: Monte Carlo study of the pyrochlore double-exchange model”, International Conference on Highly Frustrated Magnetism 2010, 2010年8月2日, アメリカ・バルチモア
26. M. Udagawa, “Quantum criticality in itinerant ice-rule systems”, International Conference on Statistical Physics XXIV, 2010年7月23日, オーストラリア・ケアンズ
27. 赤城 裕, 求 幸年, “2次元フラストレート強磁性近藤系におけるスピнкаイラリティ秩序と異常ホール効果”, 日本物理学会2010年秋季大会, 2010年9月24日, 大阪府立大学
28. 石塚大晃, 宇田川将文, 求 幸年, “電荷フラストレート系と結合した伝導電子系における伝導特性と次元性”, 日本物理学会2010年秋季大会, 2010年9月24日, 大阪府立大学
29. 宇田川将文, 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”, 日本物理学会2010年秋季大会, 2010年9月24日, 大阪府立大学
30. 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”, 日本物理学会2010年秋季大会, 2010年9月23日, 大阪府立大学
31. 石塚大晃, 宇田川将文, 求 幸年, “電荷フラストレート系における局所束縛条件と電子状態”, 日本物理学会2010年第65回年次大会, 2010年3月22日, 岡山大学
32. 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”局所拘束系との結合効果”, 日本物理学会2010年第65回年次大会, 2010年3月22日, 岡山大学
33. 赤城 裕, 求 幸年, “三角格子上の強磁性近藤模型におけるスピнкаイラリティ秩序と異常ホール効果”, 日本物理学会2010年第65回年次大会, 2010年3月21日, 岡山大学
34. 中三川京弥, 山地洋平, 宇田川将文, 求 幸年, “近藤格子系における部分近藤スクリーニングの変分モンテカルロ法による研究”, 日本物理学会2010年第65回年次大会, 2010年3月20日, 岡山大学
35. Y. Motome and N. Furukawa, “Spin-charge coupled phenomena in Mo pyrochlore oxides under pressure: Monte Carlo study of the double-exchange model on a frustrated pyrochlore lattice”, 2010 APS March Meeting, 2010年3月18日, アメリカ・ポートランド
36. M. Udagawa and Y. Motome, “Chirality-driven heavy-fermion behavior in kagome Hubbard model”, 2010 APS March Meeting, 2010年3月16日, アメリカ・ポートランド
37. Y. Motome and N. Furukawa, “Phase competition and large residual entropy in the pyrochlore double-exchange system”, International Conference on Magnetism 2009, 2009年7月26日, ドイツ・カールスルーエ
38. 求 幸年, 古川信夫, “パイロクロア格子上の二重交換模型における相競合と相分離”, 日本物理学会2009年秋季大会, 2009年9月27日, 熊本大学
39. 宇田川将文, 求 幸年, “カゴメ格子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”, 日本物理学会2009年秋季大会, 2009年9月27日, 熊本大学

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

求 幸年 (MOTOME YUKITOSHI)  
 東京大学・大学院工学系研究科・准教授  
 研究者番号: 40323274

### (2) 研究分担者

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  
 ※2009, 2010年度のみ

### (3) 連携研究者

( )

研究者番号: