

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 5 月 26 日現在

機関番号：17104

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540378

研究課題名(和文) 局所相関と電荷移動の自由度がもたらす新しい量子現象

研究課題名(英文) New quantum phenomena induced by local correlations and charge-transfer degrees of freedom

研究代表者

渡辺 真仁(WATANABE, SHINJI)

九州工業大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：40334346

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000円

研究成果の概要(和文)：近年発見された重い電子系準結晶 $\text{Yb}_{15}\text{Al}_{134}\text{Au}_{51}$ が、ゼロ磁場・常圧下で非従来型の量子臨界現象を発現するのみならず、圧力下でrobustな量子臨界性を示す理由、および、この物質と共通の非従来型の量子臨界現象を示す重い電子系金属 $\beta\text{-YbAlB}_4$ の低温での磁化率が、温度と磁場の比の4桁以上にわたって1つのスケーリング関数で表される実験事実が、Ybの価数ゆらぎの量子臨界現象の観点から、自然にかつ統一的に理解できることを理論的に示した。

研究成果の概要(英文)：It is shown to be understood theoretically in the natural and unified way from the viewpoint of the quantum critical phenomena of Yb-valence fluctuations that the mechanism of emergence of zero-tuning unconventional quantum criticality as well as its robustness under pressure in the heavy-electron quasicrystal  $\text{Yb}_{15}\text{Al}_{134}\text{Au}_{51}$  and the origin of emergence of the T/B scaling over four decades observed in the magnetization data in  $\beta\text{-YbAlB}_4$ .

研究分野：物性理論

キーワード：量子臨界現象 量子相転移 T/Bスケーリング 準結晶 重い電子系 非フェルミ液体 モード結合理論

### 1. 研究開始当初の背景

2000年に重い電子系物質  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  の常磁性金属相において、従来型のスピンゆらぎの量子臨界現象とは異なる新しいタイプの量子臨界現象が発見された。すなわち、温度  $T$  を下げるにつれて一様磁化率が  $\chi(T) \sim T^{-0.6}$  のように発散的に増大し、電気抵抗率は温度に比例し ( $\rho \sim T$ )、電子比熱係数は  $C/T \sim -\log T$  のように低温で増大する振る舞いが観測され、大きな注目を集めた。その後2008年に別の重い電子系物質  $\beta\text{-YbAlB}_4$  の常磁性金属相でも各物理量が同様の振る舞いを示すことが観測され、非従来型の量子臨界現象をいかに理解するかが、強相関電子系において大きな問題となっていた。

このような中、2010年にYbの価数転移の量子臨界点近傍で増大する、臨界価数ゆらぎが非従来型の量子臨界現象の起源ではないかと考え、臨界価数ゆらぎの量子臨界現象の理論的枠組みを構築した (S. Watanabe *et al.*, Phys. Rev. Lett. **105** (2010) 186403)。その結果、 $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  および  $\beta\text{-YbAlB}_4$  で観測された一様磁化率や電気抵抗率、電子比熱係数や核磁気緩和率などの物理量の振る舞いが自然に説明されることがわかった。

その後2011年に  $\beta\text{-YbAlB}_4$  において、磁化率  $\chi$  が温度と磁場の比  $T/B$  の4桁以上にわたって1つのスケール関数で表される驚くべき振る舞いを示すことが実験により発見された。この不思議な現象を説明するため、これまでいくつかの理論提案がなされているが、各物理量が示す非従来型の量子臨界現象と磁化率の  $T/B$  スケール関数の振る舞いを、格子系の微視的モデル計算に基づいて統一的に説明することに成功した理論はなく、完全な解明には至っていない状況であった。

また、2012年に重い電子系準結晶  $\text{Yb}_{15}\text{Al}_{34}\text{Au}_{51}$  において、低温で一様磁化率とNMR核磁気緩和率が発散的振る舞い  $\chi(T) \sim T^{-0.51} \propto (T_1 T)^{-1}$  を示し、電気抵抗率は温度に比例し ( $\rho \sim T$ )、電子比熱係数は  $C/T \sim -\log T$  のように低温で増大する量子臨界現象が観測された。さらに、驚くべきことに、圧力を約1.5 GPa以上印加しても、これらの量子臨界性が強固 (robust) に保たれることが発見された。これらの各物理量の量子臨界性は、Yb系周期結晶の  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  や  $\beta\text{-YbAlB}_4$  で観測された非従来型の量子臨界現象と共通であり、Ybの臨界価数ゆらぎの理論により、よく説明される。このことは、Ybの臨界価数ゆらぎが強い局所性をもつために、格子が周期性をもつか、準周期性をもつかにはよらない可能性を示唆しており、Ybの価数ゆらぎを起源として新しい普遍性クラスが形成されている可能性が高いと考えられる。

そこで、非従来型の量子臨界現象を統一的に説明する、臨界価数ゆらぎの理論を発展させ、最近の実験により明らかになってきたこれらの新しい物理現象を解明するために、理論研究に取り組む。すなわち、f電子間の強

いクーロン斥力が作用する遍歴電子系において、f電子と伝導電子の間の電荷移動の自由度がもたらす新しい量子現象の解明に取り組む。

### 2. 研究の目的

局所相関と電荷移動の自由度がもたらす新しい量子現象を解明することが研究の目的である。具体的には、

(1) 重い電子系準結晶  $\text{Yb}_{15}\text{Al}_{34}\text{Au}_{51}$  において零磁場・常圧で非従来型の量子臨界現象が発現し、圧力下でそれが強固に保たれるメカニズムの解明

(2) 重い電子系金属の  $\beta\text{-YbAlB}_4$  が非従来型の量子臨界現象を示し、磁化率が  $T/B$  スケール関数の振る舞いを示すメカニズムの解明

に取り組む。

### 3. 研究の方法

(1) 重い電子系準結晶  $\text{Yb}_{15}\text{Al}_{34}\text{Au}_{51}$  は零磁場・常圧下で量子臨界現象を発現しているが、本研究ではその理由を洞察することを目的として、準結晶と近似結晶の基本格子構造を構成する、同心円状のシェル構造をもつクラスターについて、f電子と伝導電子の混成により形成される電子状態を記述するミニマルモデルを構築した。オンサイトのf電子間の強いクーロン相互作用の効果により生じる局所相関の効果を取り入れるため、スレーブボゾン平均場理論を適用して基底状態の相図を決定し、その性質を調べた。

(2) 重い電子系金属  $\beta\text{-YbAlB}_4$  が示す非従来型の量子臨界現象および磁化率の  $T/B$  スケール関数の振る舞いを理論的に解明するため、Ybの価数ゆらぎの量子臨界現象を記述する、拡張周期アンダーソン模型に、 $\beta\text{-YbAlB}_4$  の異方的 c-f 混成を取り入れた模型から出発して、磁場下での価数ゆらぎのモード結合方程式を導出して解析を行った。

この理論的枠組みにより、ハミルトニアンのパラメータを入力することで価数ゆらぎのモード結合方程式の入力パラメータが自動的に定まるようになり、エネルギースケールの階層構造 (伝導バンド幅  $D >$  近藤温度  $T_K >$  臨界価数ゆらぎの特徴的溫度  $T_0$ ) が正しく記述され、実験の  $T$ - $B$  相図と理論相図との定量的比較が可能となった。

### 4. 研究成果

(1) 重い電子系準結晶  $\text{Yb}_{15}\text{Al}_{34}\text{Au}_{51}$  と近似結晶の基本格子構造を構成する、同心円状のシェル構造をもつクラスター上のf電子と伝導電子についてのミニマルモデルの基底状態の相図を決定した。その結果、Al-Au mixed site の存在のために、Ybの価数転移の量子臨界点が相図上で斑点状に出現し、量子臨界領域が互いに重なり合って広大な量子臨界領域が出現することを見出した。これにより、この物質で観測された圧力に対して robust な量子臨界性が、臨界価数ゆらぎの観点から

自然に説明されることがわかった。

また、このことがチューニングなしに量子臨界物質が実現している事実を理解する鍵を握ると考えられる。また、近似結晶においても温度-圧力相図中で準結晶系と共通の量子臨界性が出現し、その量子臨界領域は準結晶系に比べて狭いことを理論的に予言していたが、最近の実験 (K. Deguchi *et al.*, SCES2014 poster-We-013) により、それが実際に確認された。

また、Yb 系および Ce 系周期結晶の重い電子系において、磁場を印加すると Yb および Ce の価数転移の量子臨界点が絶対零度から有限温度へと誘起され、臨界点から昇温につれて価数クロスオーバー線が現れることを理論的に示していたが (S. Watanabe *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 236401)、重い電子系準結晶 Yb<sub>15</sub>Al<sub>34</sub>Au<sub>51</sub> では、温度-磁場相図中で、価数クロスオーバー線が密集して出現し、Yb の価数クロスオーバー「領域」が現れることを理論的に指摘した。さらに、磁場の増加とともに Yb の価数が 3 価に向かって単調に増大していく通常の振る舞いとは対照的に、価数クロスオーバー領域を横切る際に Yb の価数が減少する振る舞いが生じ、それが有限の磁場範囲で出現する可能性を理論的に指摘した。今後この興味深い現象が起こっているか否か、磁場下の Yb 価数測定の実験を行うことにより、明らかにすることができると考えられる。

(2) 重い電子系金属  $\beta$ -YbAlB<sub>4</sub> に対する磁場下での Yb の価数ゆらぎのモード結合方程式を解析した結果、Yb の価数転移の量子臨界点近傍で、臨界価数ゆらぎの特徴的温度  $T_0$  が測定最低温度と同程度か、それより低い場合には、価数帯磁率および磁化率に  $T/B$  スケーリングの振る舞いが 4 桁以上にわたって出現することを見出した。

その起源は、f 電子の強い局所相関の効果により、実空間で非常に局所的な臨界価数ゆらぎのモードが出現することにあることがわかった。この機構によれば、f 準位の混成バンド端への fine tuning を要請しなくても  $T/B$  スケーリングの振る舞いが現れることが示される。

また、非常に小さなエネルギースケール  $T_0$  の存在は、最近のメスバウアー分光による、非常にゆっくりとした Yb 価数ゆらぎの時間スケールの観測結果からも示唆されている

(H. Kobayashi *et al.*, SCES2014 We-IS17-5)。

これにより、 $\beta$ -YbAlB<sub>4</sub> の各物理量 ( $\chi$ ,  $C/T$ ,  $\rho$ ,  $(T_1 T)^{-1}$ ) が示す非従来型の量子臨界現象と  $T/B$  スケーリングの振る舞いが統一的に説明されることがわかった。

このようにして明らかになった (1) および (2) の結果は、強相関電子系における量子臨界現象について新しい概念の構築につながる重要な研究成果として世界的にみて大きな関心を集めており、強相関電子系の国際会議 Strongly Correlated Electron Systems

(SCES2011 と SCES2013) の招待論文に選ばれた (以下の「5. 主な発表論文等」〔雑誌論文〕欄の論文⑤と⑧)。また、国内でも重い電子系の今後の研究の展望として、本研究成果は今後の発展につながる重要な成果として注目を集めており、2013 年に開催された日本物理学会のシンポジウム「価数と軌道が誘起する新しい量子臨界現象」において、理論の立場から今後の展望についてシンポジウム講演を行った (以下の「5. 主な発表論文等」〔学会発表〕欄の⑤)。

今後、重い電子系の周期結晶および準結晶において、Yb および Ce などの価数転移の量子臨界現象がもたらす新しい量子現象の全貌の解明に向けてさらなる理論・実験研究の発展が期待される。

## 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 8 件)

① S. Watanabe and K. Miyake, Wide Quantum Critical Region of Valence Fluctuations: Origin of Robust Quantum Criticality in Quasicrystal Yb<sub>15</sub>Al<sub>34</sub>Au<sub>51</sub> under Pressure, J. Phys.: Conf. Ser. **592** (2015) 012087-1-012087-7、査読有  
DOI: 10.1088/1742-6596/592/1/012087

② K. Matsubayashi, T. Hirayama, T. Yamashita, S. Ohara, N. Kawamura, M. Mizumaki, N. Ishimatsu, S. Watanabe, K. Kitagawa, and Y. Uwatoko, Pressure-Induced Valence Crossover and Novel Metamagnetic Behavior near the Antiferromagnetic Quantum Phase Transition of YbNi<sub>3</sub>Ga<sub>9</sub>, Phys. Rev. Lett. **114** (2015) 086401-1-086401-5、査読有

DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.086401

③ F. Honda, Y. Hirose, A. Miyake, M. Mizumaki, N. Kawamura, S. Tsutsui, T. Watanuki, S. Watanabe, T. Takeuchi, R. Settai, D. Aoki, and Y. Onuki, X-ray Absorption Spectroscopy and Novel Electronic Properties in Heavy Fermion Compounds YbT<sub>2</sub>Zn<sub>20</sub> (T: Rh and Ir), Journal of Physics: Conference Series **592** (2015) 012021-1-012021-5、査読有  
DOI: 10.1088/1742-6596/592/1/012021

④ S. Watanabe, K. Miyake,  $T/B$  Scaling in  $\beta$ -YbAlB<sub>4</sub>, J. Phys. Soc. Jpn. **83** (2014) 103708-1-103708-5、査読有  
DOI: 10.7566/JPSJ.83.103708

⑤ K. Miyake, S. Watanabe, Unconventional Quantum Criticality Due to Critical Valence Transition, J. Phys. Soc. Jpn. **83** (2014) 061006-1-061006-10、査読有

〔SCES2013 招待論文〕

DOI: 10.7566/JPSJ.83.061006

⑥ N. Kawamura, R. Sasaki, K. Matsubayashi,

N. Ishimatsu, M. Mizumaki, Y. Uwatoko, S. Ohara and S. Watanabe, Journal of Physics: Conference Series **568** (2014) 042015-1-042015-5、査読有  
DOI: 10.1088/1742-6596/568/4/042015  
⑦S. Watanabe, K. Miyake, Robustness of Quantum Criticality of Valence Fluctuations, J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 083704-1-083704-4、査読有  
DOI: 10.7566/JPSJ.82.083704  
⑧S. Watanabe, K. Miyake, New Universality Class of Quantum Criticality in Ce- and Yb-based Heavy Fermions, J. Phys.: Condens. Matter **24** (2012) 294208-1-294208-10、査読有【SCES2011 招待論文】  
DOI: 10.1088/0953-8984/24/29/294208

〔学会発表〕(計6件)

- ①渡辺真仁、三宅和正、 $\beta$ -YbAlB<sub>4</sub>における  $T/B$  スケーリングの出現機構：価数ゆらぎの量子臨界現象の理論に基づく解析、日本物理学会、2015年3月22日、早稲田大学
- ②S. Watanabe、Quantum Criticality of Valence Fluctuations in Ce- and Yb-Based Heavy Fermions、International Workshop on Quantum Criticality in Correlated Materials and Model Systems、2014年7月31日、Natal (ブラジル)【招待講演】
- ③S. Watanabe、Wide Quantum Critical Region of Valence Fluctuations -Origin of Robust Quantum Criticality in Quasicrystal Yb<sub>15</sub>Al<sub>34</sub>Au<sub>51</sub> under Pressure-、International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2014)、2014年7月9日、Grenoble (フランス)
- ④渡辺真仁、三宅和正、重い電子系準結晶 Yb<sub>15</sub>Al<sub>34</sub>Au<sub>51</sub> の量子臨界性、日本物理学会、2014年3月30日、東海大学
- ⑤渡辺真仁、価数ゆらぎと量子臨界：理論と展望、日本物理学会(領域8)シンポジウム、2013年9月27日、徳島大学【招待講演】
- ⑥S. Watanabe、Unconventional Criticality in Heavy Electron Systems (ICHN2012)、2012年7月7日、Gyeongju (韓国)【招待講演】

〔その他〕

受賞  
渡辺真仁、重い電子系研究奨励賞受賞、2013年1月13日、東京工業大学

ホームページ

<http://www.mns.kyutech.ac.jp/~swata/topics.html>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

渡辺 真仁 (WATANABE, Shinji)

九州工業大学・大学院工学研究院・准教授

研究者番号：40334346