

平成 30 年 6 月 2 日現在

機関番号：17104

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K05177

研究課題名(和文) 強相関電子系の新しい量子臨界現象の微視的理論の構築

研究課題名(英文) Construction of microscopic theory of new quantum critical phenomena in strongly-correlated electron systems

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

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：任意のバンド構造をもつ混成した2軌道の電子系における伝導度とホール伝導度の厳密な表式を久保公式から出発して導出し、重い電子系の基礎的模型である周期アンダーソン模型における量子輸送現象の性質をフェルミ液体論に基づいて明らかにした。また、磁気量子臨界点近傍の磁気体積効果の理論的枠組みの構築を行った。スピンゆらぎのSCR理論に基づいて比熱、熱膨張係数、グリュナイゼンパラメータを正しく計算する枠組みを構築した。

研究成果の概要(英文)：Exact formulas of diagonal conductivity and Hall conductivity are derived from the Kubo formula in hybridized two-orbital systems with arbitrary band dispersions. On the basis of the theoretical framework for the Fermi liquid based on these formulas, quantum transport phenomena in the periodic Anderson model are clarified. The theoretical framework of the magneto volume effect near the magnetic quantum critical point is constructed. On the basis of the self-consistent renormalization theory of spin fluctuations, the specific heat, the thermal-expansion coefficient, and Gruneisen parameter are formulated.

研究分野：物性理論、強相関電子系

キーワード：量子臨界現象 量子輸送現象 周期アンダーソン模型 ホール効果 SCR理論 熱膨張係数 グリュナイゼンパラメータ 比熱

1. 研究開始当初の背景

強く相互作用する電子系は強相関電子系とよばれており、新しい量子現象が発現する舞台として注目を集めている。CeやYbを含む化合物では4f電子間に強いクーロン斥力が働き、自由電子系の数百倍から数千倍もの電子の有効質量の増大が生じ、重い電子系が実現している。重い電子系では、重い電子自身がクーパー対を形成する超伝導や、電気抵抗率や磁化率などの物理量が通常金属の従うフェルミ液体的振る舞いとは異なる量子臨界現象が発現することが知られており、世界的に精力的な研究が続けられている。

Ce系およびYb系化合物における重い電子系の電子状態を記述する基礎的理論模型として、周期アンダーソン模型がある。この模型について、フェルミ液体論に基づいて電気伝導度 σ_{xx} (K. Yamada and K. Yosida, Prog. Theor. Phys. **76** (1986) 621) およびホール伝導度 σ_{xy} (H. Kohno and K. Yamada, Prog. Theor. Phys. **80** (1988) 623) の定式化がYamada等によって行われた。これらの定式化は2つのエネルギーバンドのうち下側のバンドにフェルミ準位が位置している、本質的に1バンドの場合について行われており、f電子のエネルギー準位が深い位置にある近藤領域についての解析がなされていた。一方、これまでの実験により、Ce系およびYb系化合物で電気抵抗率の圧力依存性が観測されており、価数揺動領域を含む量子輸送特性の理論的解明が待たれていた。

そこで、本研究では任意のバンド構造をもつ混成した2軌道系における電気伝導度とホール伝導度を理論的に計算する枠組みの定式化を行う。これにより、フェルミ準位に2バンドがかかっている場合の σ_{xx} と σ_{xy} の理論計算が可能となる。この枠組みを用いて、周期アンダーソン模型において近藤領域から価数揺動領域までを含む量子輸送特性を理論的に明らかにし、実験と比較を行う。

強磁性秩序や反強磁性秩序の相転移の温度が絶対零度に抑制されると、量子臨界点が発現し、そこでは量子力学的な臨界ゆらぎの効果が非フェルミ液体的振る舞いを発現することが知られており、磁気量子臨界現象とよばれている。これまで遍歴電子系における磁気量子臨界現象は、Moriya等により開発されたスピンゆらぎの理論 (Self-Consistent Renormalization (SCR) 理論)、およびHertz, Millisによる繰り込み群の理論に基づいて理解されてきた。

一般に、磁気秩序へ相転移する際に物質の体積が変化することが知られており、磁気体積効果とよばれている。遍歴電子系における磁気量子臨界点近傍の磁気体積効果について、スピンゆらぎの理論の考え方に基づいたMoriya-Usamiの理論 (T. Moriya and K. Usami, Solid State Commun. **34** (1980) 95) が先駆的研究として知られている。しかしながら、Moriya-Usami理論の熱膨張係数

α と、SCR理論の比熱を温度で積分して得られたエントロピーから導出した熱膨張係数が一致しない問題が指摘されている (S. Kambe *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **9** (1997) 4917)。一方、繰り込み群の理論により、磁気量子臨界点近傍の熱膨張係数 α とグリュナイゼンパラメータ Γ の臨界性が報告されており (L. Zhu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 066404)、 Γ は量子臨界点で発散することが指摘されているが、その起源は未解明であった。

Takahashiは、全スピン振幅の保存則を導入したスピンゆらぎの理論を展開し、従来考慮されていた熱スピンゆらぎに加えて零点スピンゆらぎとSCRの停留値条件を取り入れた比熱および熱膨張係数の計算を行った (Y. Takahashi, J. Phys.: Condens. Matter **11** (1999) 6439; J. Phys.: Condens. Matter **18** (2006) 521)。しかしながら、磁気量子点での熱膨張係数 α とグリュナイゼンパラメータ Γ の臨界性、および繰り込み群の理論との関係、それに Γ の発散の起源はこれまで未解明であった。

そこで本研究では、元々のSCR理論の枠組みにおいて、熱スピンゆらぎに加えて零点スピンゆらぎ、およびSCRの停留値条件を正しく考慮して、比熱、熱膨張係数、およびグリュナイゼンパラメータの定式化を行い、空間次元3次元系および2次元系における、強磁性および反強磁性量子臨界点での完全な表式を導出する。

2. 研究の目的

強相関電子系の新しい量子現象を解明するには、量子輸送現象、および臨界体積効果の微視的理論を構築することが必要である。

- そこで、
- (1) 重い電子系の基礎的模型である周期アンダーソン模型において、近藤領域から価数揺動領域全領域において、電気伝導度、ホール伝導度、ホール係数を計算する理論的枠組みを構築すること
 - (2) 磁気量子臨界点近傍における磁気体積効果の理論的枠組みを構築すること
- を研究の目的とする。

この枠組みの構築により、今後強相関電子系における従来型および非従来型の量子臨界点近傍での量子輸送特性、および臨界体積効果を計算する際の理論的枠組みの礎が確立することになる。

3. 研究の方法

- (1) 任意のバンド構造をもつ混成した2軌道の電子系における電気伝導度 σ_{xx} とホール伝導度 σ_{xy} の表式を、久保公式から出発して導出する。これにより、フェルミ準位に2バンドがかかっている場合の計算を行うことが可能となる。この定式化を用いて周期アンダーソン模型においてフェルミ液体論に基づいて、弱い不純物散乱の効果を取り入れて電気

伝導度 σ_{xx} とホール伝導度 σ_{xy} 、ホール係数 R_H を計算する。正方格子において数値計算を行い、 σ_{xx} 、 σ_{xy} 、 R_H の f 準位、 f_c 混成、電子濃度依存性を求める。さらに、得られた結果をCe系およびYb系化合物の重い電子系の実験結果と比較する。

(2) スピンゆらぎのSCR理論において、零点スピンゆらぎと熱スピンゆらぎの寄与を正しく取り入れて、比熱、熱膨張係数、グリュナイゼンパラメータを計算する解析的理論を構築する。その定式化に基づいて、空間次元3次元および2次元における強磁性量子臨界点と反強磁性臨界点近傍での比熱、熱膨張係数、グリュナイゼンパラメータの温度依存性を数値計算により求める。さらに、臨界点近傍の臨界性を解析的に評価する。

4. 研究成果

(1) Ce系およびYb系化合物における重い電子系の基礎的モデルである周期アンダーソンモデルにおいて、 f 電子間の強いクーロン相互作用と弱い不純物散乱の効果による電気伝導度 σ_{xx} とホール伝導度 σ_{xy} の計算をフェルミ液体論の枠組みで行った(J. Phys. Soc. Jpn. **85** (2016) 044704-1-16)。

圧力をCe化合物に印加すると f 電子のエネルギー準位 ϵ_f は一般に上昇するのに対し、Yb化合物では圧力印加につれて $4f$ ホールの準位 ϵ_f は減少するので、これらの実験との比較を行うことを念頭に σ_{xx} と σ_{xy} の f 準位依存性を系統的に調べた。 f 準位 ϵ_f が深い位置にある、いわゆる近藤領域では、準粒子の質量増強因子の打ち消しあいが生じるため、 σ_{xx} と σ_{xy} は弱い ϵ_f 依存性しか示さないのに対し、 f 準位 ϵ_f が上昇するにつれて価数揺動領域に入ると、準粒子の質量増強因子の打ち消しあいが不完全になり、 σ_{xx} と σ_{xy} の増大が生じることを明らかにした。この結果は、圧力下のCe化合物において残留抵抗率 ρ_0 が圧力印加につれて減少する実験事実、および圧力下のYb化合物において ρ_0 が圧力印加につれて増大する実験事実と理論的説明を与えるものである。

一方、正常ホール係数 R_H の計算を行った結果、近藤領域でも価数揺動領域でもほとんど f 準位 ϵ_f 依存性を示さないことがわかった。このことは価数揺動領域において準粒子の質量増強因子の打ち消しあいが不完全に生じた結果 σ_{xx} と σ_{xy} の増大がそれぞれ生じていたのが、ホール係数では $R_H = \sigma_{xy} / (H\sigma_{xx})$ の表式により、互いに打ち消しあうことによることがわかった。

さらに、正方格子におけるホール係数 R_H の電子濃度(filling)依存性を計算した結果、half-filling近傍のフェルミ面が丸い形に近い場合には、 e を電荷、 n をホール濃度として $R_H = 1/(ne)$ と表され、よく知られている自由電子系の表式で表されることがわかった。一方、電子濃度が減少して1/4 fillingに近づくとフェルミ面は丸い形からずれ、ホ

ール係数は $R_H = 1/(ne)$ の表式では表されず、フェルミ面の曲率を反映した値をとることを確認した。

(2) 遍歴電子系における磁気量子臨界点近傍の熱膨張係数 α およびグリュナイゼンパラメータ Γ を、スピンゆらぎのSCR理論に基づいて正しく計算するための理論的枠組みを構築した(J. Phys. Soc. Jpn. **86** (2018) 034712-1-6)。

SCR理論で従来考慮されてこなかった零点スピンゆらぎの効果、およびSCRの停留値条件を正しく考慮して、空間次元3次元系および2次元系における強磁性および反強磁性量子臨界点での α と Γ の完全な表式を導出した。これによりSCR理論による比熱と熱膨張係数の表式が熱力学的に一致しなかった問題が完全に解決するとともに、過去の繰り込み群の研究では未報告であった温度に依存する係数が α と Γ の臨界項に存在することを明らかにした。この枠組みにより、高温のキュリー・ワイス領域から低温の量子臨界領域まで統一的に熱膨張係数とグリュナイゼンパラメータを計算することが可能となった。

数値計算の結果、温度に依存する係数の寄与により、各クラスともに中間温度領域での α と Γ の温度依存性は、繰り込み群で報告されている臨界的振る舞いとは異なる温度依存性を示すことがわかった。2次元反強磁性の場合には、その温度依存する係数が α と Γ の臨界性にまで影響を及ぼし、繰り込み群で報告されている温度依存性とは異なる臨界性を示すことを見出した。これにより、2次元反強磁性の量子臨界点近傍では α が発散しないことが今回の計算で初めて明らかになった。また、各クラスともに、繰り込み群で報告されているように Γ は発散する一方で、2次元反強磁性の場合には、上述した温度依存する係数の存在により、臨界性が繰り込み群で報告されているものと異なることも明らかとなった。

また、各クラスともにスピンゆらぎの特徴的溫度 T_0 に対して溫度 T/T_0 が 10^{-4} 以下で量子臨界性を示すことが示され、実験との比較を行う際に重要であることが明らかとなった。

さらに、磁気量子臨界点での Γ の発散の起源が、逆磁化率の体積依存性の項に由来することを明らかにした。

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9件)

① S. Watanabe, K. Miyake, “Effects of Crystalline Electronic Field and Onsite Interorbital Interaction in Yb-based Quasicrystal and Approximant Crystal”, J. Phys.: Condens. Matter **30** (2018) 184001-1-11, 査読有, **【AIRAPT26 招待論文】**

DOI: 10.1088/1361-648X/aab817

② S. Watanabe, K. Miyake, “Grüneisen Parameter and Thermal Expansion by the Self-Consistent Renormalization Theory of Spin Fluctuations”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86** (2018) 034712-1-6, 査読有

DOI: 10.7566/JPSJ.87.034712

③ Z. Ren, G. W. Scheerer, D. Aoki, K. Miyake, S. Watanabe, D. Jaccard, “Coincidence of Magnetic and Valence Quantum Critical Points in CeRhIn₅ under Pressure”, *Phys. Rev. B* **96** (2017) 184524-1-5, 査読有

DOI: 10.1103/PhysRevB.96.184524

④ K. Miyake, S. Watanabe, “Ubiquity of Unconventional Phenomena Associated with Critical Valence Fluctuations in Heavy Fermion Metals”, *Philos. Mag.* **97** (2017) 3495-3516, 査読有, 【SCES2016 招待論文】

DOI:10.1080/14786435.2017.1314561

⑤ S. Watanabe, K. Miyake, “New Quantum Criticality Revealed under Pressure”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **56** (2017) 05FA01-1-7, 査読有, 【HPSP17&WHS 招待論文】

DOI:10.7567/JJAP.56.05FA01

⑥ N. Kawamura, N. Kanai, H. Hayashi, Y. H. Matsuda, M. Mizumaki, K. Kuga, S. Nakatsuji, S. Watanabe, “Lifetime-Broadening-Suppressed X-ray Absorption Spectrum of β -YbAlB₄ Deduced from Yb 3d \rightarrow 2p Resonant X-ray Emission Spectroscopy”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86** (2017) 014711-1-7, 査読有

DOI: 10.7566/JPSJ.86.014711

⑦ S. Watanabe, K. Miyake, “Origin of Quantum Criticality in Yb-Al-Au Approximant Crystal and Quasicrystal”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85** (2016) 063703-1-5, 査読有

DOI: 10.7566/JPSJ.85.063703

⑧ S. Watanabe, K. Miyake, “Quantum Criticality and Emergence of the T/B Scaling in Strongly Correlated Metals”, *J. Mag. Mag. Mat.* **400** (2016) 13-16, 査読有

DOI: 10.1016/j.jmmm.2015.09.042

⑨ S. Watanabe, K. Miyake, “Basic Properties of Conductivity and Normal Hall Effect in the Periodic Anderson Model”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85** (2016) 044704-1-16, 査読有

DOI: 10.7566/JPSJ.85.044704

[学会発表] (計 12 件)

① S. Watanabe, “Quantum Criticality Universal to Yb-Based Quasicrystal and Periodic Crystal”, International Workshop on Multipole Physics and Related Phenomena (J-Physics 2017), Iwate, Japan, 2017 年, 【招待講演】

② 渡辺真仁、三宅和正、「遍歴電子系の磁気量子臨界点における熱膨張係数とグリユナイゼンパラメータ」、日本物理学会 (岩手大学)、2017 年

③ S. Watanabe, “Universality of Quantum Criticality in Yb-Based Heavy Fermions on Quasicrystal and Pressurized Approximant Crystal”, The 26th International Conference on High Pressure Science and Technology (AIRAPT26) joint with the 8th Asian Conference on High Pressure Research (ACHPR8) & the 19th China High Pressure Conference (CHPC19), Beijing, China, 2017 年, 【招待講演】

④ S. Watanabe, “Novel Superconductivity and Quantum Criticality Induced by Critical Valence Fluctuations”, The International Workshop on Recent Progress in Superconductivity (IWRs 2017), Pyeong Chang, Korea, 2017 年, 【招待講演】

⑤ S. Watanabe, “Origin of Quantum Criticality in Yb-Al-Au Quasicrystal and Approximant Crystal”, International Workshop on “Open Space Between Aperiodic Order and Strong Electronic Correlations”, Annecy, France, 2017 年

⑥ 渡辺真仁、三宅和正、「Yb 系準結晶と近似結晶の量子臨界性と T/B スケーリングの出現機構」、日本物理学会、(大阪大学)、2017 年

⑦ S. Watanabe, “Universality of Unconventional Quantum Criticality in Correlated Electrons on Periodic- and Quasi-crystal Systems”, 14th Bilateral Japanese -German Symposium “Effects of Parity Mixing in Correlated Electron Systems”, Gateaux Kingdom Sapporo, Japan, 2016 年, 【招待講演】

⑧ S. Watanabe, “New Quantum Criticality Revealed under Pressure”, The 17th International Conference on High Pressure in Semiconductor Physics (HPSP-17) and Workshop on High-pressure Study on Superconducting (WHS), Univ. of Tokyo, Tokyo, 2016 年, 【招待講演】

⑨ S. Watanabe, “Unconventional Quantum Criticality Universal to Yb-Based Periodic- and Quasi-Crystal Systems”, International Workshop on Fermi-Surface Topology and Emergence of Novel Electronic States in Strongly Correlated Systems, Natal, Brazil, 2016 年, 【招待講演】

⑩ 渡辺真仁、三宅和正、「f 電子系準結晶・近似結晶の量子臨界性」、日本物理学会、領域 6・領域 8 合同シンポジウム「f 電子系準結晶及び近似結晶の最近の展開」(東北学院大学)、2016 年, 【招待講演】

⑪ S. Watanabe, “Universal Quantum

Criticality in the Yb-Based Heavy Fermions on the Quasicrystal and Periodic-Crystal Systems”, Toyota RIKEN International Workshop 2015 on “Strongly Correlated Electron Systems: Open Space between Heavy Fermions and Quasi-crystals”, Nagoya University, Japan, 2015年, 【招待講演】
⑫ S. Watanabe, “Quantum Criticality and Emergence of the T/B Scaling in Strongly Correlated Metals”, International Conference on Magnetism 2015 (ICM2015), Barcelona, Spain, 2015年, 【招待講演】

ホームページ

<https://www.mns.kyutech.ac.jp/~swata/>

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：4 0 3 3 4 3 4 6