

平成 21年 6月 4日現在

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2006～2008

課題番号：18740191

研究課題名（和文） 価数転移の量子臨界点近傍の電子状態の解明

研究課題名（英文） CLARIFICATION OF ELECTRONIC STATES NEAR QUANTUM CRITICAL POINT OF VALENCE TRANSITION

研究代表者

渡辺 真仁(WATANABE SHINJI)

東京大学・大学院工学系研究科・助教

研究者番号 40334346

研究成果の概要：

価数転移の量子臨界点近傍の近藤領域で、超伝導相関が増大することを、正確な数値計算によって示した。そのメカニズムは既存のものと異なり、電荷圧縮率の増大を伴わない、電子のコヒーレンスの増大による新しいタイプの機構であることを見出した。磁場によって価数転移、及びその量子臨界点がどのように制御されるのか、その機構を明らかにした。これにより、CeIrIn₅ や YbXCu₄ (X=In, Ag, Cd) でこれまで謎とされてきた奇妙な磁場応答の起源を、自然に説明することができた。Ce や Yb を含む系での未解明の磁場応答を理解する上での鍵となる概念が明らかとなった。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1800,000	0	1,800,000
2007年度	900,000	0	900,000
2008年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	3,300,000	180,000	3,480,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物性 II

キーワード：価数転移、量子臨界点、超伝導、メタ磁性、1次転移、磁場誘起臨界現象

1. 研究開始当初の背景

圧力下の CeCu₂Ge₂ や CeCu₂Si₂ において、Ce の価数の変化が顕著な領域において超伝導転移温度の増大が観測されており、価数のゆらぎと超伝導発現機構の関係に関心が高まっている。同様な振る舞いは他の Ce 化合物でも観測されており、CeIrIn₅ では圧力下で反強磁性ゆらぎが抑えられるにもかかわらず、超伝導転移温度が増大することから、反

強磁性ゆらぎとは異なる超伝導機構の存在が実験的に示唆されている。

一方、Ce 元素は圧力下で γ -転移とよばれる1次の価数転移を起こすことが知られている。これはCeの4fバンドがフェルミ面付近に位置しているため、圧力下で容易に伝道電子と混成することによるものであり、Ceに価数不安定性が内在することはよく知られている。この価数転移は臨界温度が約600Kと

高く、液相-気相型の相転移と考えられるが、1次転移の臨界終点では価数の感受率が発散する。上記のCe化合物の超伝導は、価数が急激に変化するクロスオーバーの領域で実現していることから、価数転移の臨界温度が低温、或いは絶対零度まで抑制され、増大した価数ゆらぎが重要な役割を果たしていると考えられる。理論的には、従来古典的な枠組みでのみ捉えられてきた1次転移の終端点としての臨界点が低温まで抑制され、フェルミ縮退領域に入ってきたときに、臨界ゆらぎとフェルミ面の不安定性が相乗効果を起こすと考えられるが、そのメカニズムはよくわかっていない。

上記のCe化合物が示す電子の不安定性の問題も、価数転移の臨界温度が絶対零度付近にまで抑制された場合に、顕著な量子効果の結果、どのような臨界現象とゆらぎの効果を示すのか、量子縮退領域における1次転移の機構の観点から普遍的な問題を提起している。

このように、量子縮退領域における1次転移の臨界点の性質の解明がいろいろな系で重要な焦点となっており、新しい超伝導発現機構の解明につながる可能性もあることから、本研究では、系の詳細に依らない普遍的なメカニズムの可能性を念頭において、量子価数転移の臨界現象、およびその近傍の電子状態の解明を行う。

2. 研究の目的

価数転移の量子臨界点の臨界的性質、および価数転移の量子臨界点近傍の電子状態、特に価数ゆらぎと超伝導発現機構の関係、を明らかにすることが研究の目的である。

3. 研究の方法

CeやCe化合物を記述する基礎的模型である、拡張周期アンダーソン模型に、スレーブボゾン平均場法、密度行列数値繰り込み群法を適用した。さらに、熱力学関係式を用いて得られた物理量の間関係を解析的に評価した。

4. 研究成果

量子縮退領域における価数転移の性質とその臨界点近傍の電子状態の性質を明らかにするため、f電子と伝導電子間の斥力 U_{fc} をとりいれた1次元周期アンダーソン模型に平均場近似、及び密度行列数値繰り込み群(DMRG)法を適用して基底状態の性質を調べた。

その結果、平均場近似では価数の1次転移とともに相分離が生じるのに対し、DMRG法では価数の1次転移は生じるが、相分離は生じないことがわかった。つまり、量子ゆらぎと電子相関の効果によって相分離は実現せず、Kondo状態からMixed Valence状態へのクロスオーバーが強く安定化されること

がわかった。このゆらぎの強い、シャープな価数クロスオーバー近傍のKondo状態で超伝導相関が発達するが、これは電荷速度が増大することによるものであり、朝永ラッティンジャーパラメータ $K > 1$ を示す既存の模型に共通な、電荷圧縮率の増大を起源としない点で、特筆すべき結果である。価数の感受率が増大するにもかかわらず全電荷の圧縮率が増大しない理由は、全電荷の相関関数のうちf電子と伝導電子に対して対角的、非対角的な項の主要項の符号が反対であるために互いに相殺しあうことによる。このことからこの系の超伝導の起源は、電子の有効バンド幅が増大することにより、価数ゆらぎをもつ電子のコヒーレンスが增大したことによると考えられる。

価数転移について、 γ - α 転移を起こすCe金属と異なり、Ce化合物で1次転移が起きにくい理由は、化合物では U_{fc} が小さくなるためと考えられることを指摘した。

また、熱力学関係式を解析的に導出することにより、価数転移のf電子の跳びの最大値が空間次元によらず $2n-1$ (n は全電子のフィリング)で表されることを示した。これより、(1)配位数 zU_{fc} が大きい(z は配位数)、(2)フェルミ面にかかっているバンド全体の占有数の大きいCe化合物で1次の価数転移が実現する可能性が高いことを指摘した。

価数ゆらぎは本質的にf電子と伝導電子の電荷の相対的な揺らぎであるが、価数転移の量子臨界点が磁場によってどのように制御されるのか、その機構を明らかにした。有限温度における1次転移の終端点が、磁場をかけることにより、絶対零度に抑えられることを示し、その温度依存性をクラウジウスクラペイロンの関係式を導くことにより明らかにした。ここで導いた関係式は、これまで知られていた高温極限でのみ正しい関係式を絶対零度につなぐものであり、磁場によって量子臨界点を制御する際に重要な意義をもつ。さらに絶対零度において量子臨界点が非単調な磁場依存性を示すことを見出した。これにより、価数のクロスオーバーを示す物質に磁場をかけると、量子臨界点が誘起されることが明らかとなった。このメカニズムは磁場下でゼーマン効果と近藤効果によりエネルギーをともしようとする協力現象であることを明らかにした。

この機構は、CeIrIn₅において、40テスラの磁場を加えると1次転移が誘起される奇妙な振る舞いに説明を与えるものであり、この物質で観測されている圧力下での超伝導転移温度の異常な増大の起源を解明する上で重要である。また、この機構はYbXCu₄のX=Inにおける1次転移を説明し、同程度の近藤温度をもつにもかかわらず、異なった磁場応答を示すX=AgとX=Cdに自然な説

明を与える。YbAgCu₄は40テスラの磁場下で、磁化が急激に増大するメタ磁性が観測されているが、YbCdCu₄は単調な増加を示すに過ぎない。さらに、ゼロ磁場下でも、YbAgCu₄は40K付近に一様帯磁率がピーク構造をもつものに対し、YbCdCu₄は単調なパウリ常磁性を示すに過ぎない。これらの対照的な振る舞いは、相図上でYbAgCu₄の方が、価数転移の量子臨界点に近くに位置しており、YbCdCu₄は遠くに位置していると考え、自然に説明することができる。すなわち、価数転移の量子臨界点からの近さで定義される、近藤温度とは別のエネルギースケールが存在することを理論解析の結果は示しており、CeやYbなどを含む価数揺動物質を理解する上で重要な意義をもつ。

グラファイトに吸着されたヘリウム3の第2層で形成される4/7固体相が、固液相境界近傍に位置していることを見出し、第3層への強い密度ゆらぎにより、実験で観測されている飽和磁場の異常な増大が説明できることを示した。さらに4/7固体相でのスピン液体状態の安定化に密度ゆらぎが重要な寄与をしており、フラストレートしたハバード模型のモット転移近傍で実現するスピン液体と本質的に同じ起源をもつことを指摘した。

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4件)

S. Watanabe, M. Imada and K. Miyake, Journal of the Physical Society of Japan, 75, 043710-043713, 2006, 査読有

S. Watanabe, M. Imada and K. Miyake, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 310, 841-842, 2006, 査読有

S. Watanabe and M. Imada, Journal of the Physical Society of Japan, 76, 113603-113606, 2007, 査読有

S. Watanabe, A. Tsuruta, K. Miyake and J. Flouquet, Physical Review Letters, 100, 236401-1-236401-4, 2008, 査読有

[学会発表](計10件)

渡辺真仁、磁場制御による価数転移と臨界点の性質、日本物理学会、2007年3月19日、鹿児島大学

S. Watanabe, Quantum Valence Criticality and Superconductivity, ICM2006, 2008年8月21日、京都国際会館

S. Watanabe, Fluctuations near Quantum Critical Points of Valence Transition and Superconductivity, MSM2007, 2007年9月26日、ウズベキスタン

渡辺真仁、グラファイトに吸着されたヘリウム3の4/7固体相における密度ゆらぎの重要性、日本物理学会、2008年3月26日、近畿大学

S. Watanabe, Magnetic-Field Control of Quantum Critical Point of Isostructural First-Order Transition in Charge Degrees of Freedom, ULT2008, 8月16日、ロンドン大学

S. Watanabe, Magnetic-Field Induced Quantum Critical Points of Valence Transition in Ce- and Yb-Based Heavy Fermions, SCES2008, 2008年8月18日、ブラジル

渡辺真仁、Ce及びYb化合物における磁場励起の臨界価数ゆらぎとその波及効果、日本物理学会、2008年9月22日、岩手大学

S. Watanabe, The Nature of the Quantum Critical Point of the First-Order Valence Transition, SciSSP2009, 2009年2月16日、東京大学物性研究所

S. Watanabe, Magnetic Field Control of Quantum Critical Point of Isostructural First-Order Transition in Charge Degrees of Freedom, PSM2009, 2009年1月10日、ハワイ大学

S. Watanabe, Magnetic Field Induced Quantum Critical Points of Valence Transition in Ce- and Yb-Based Heavy Fermions, アメリカ物理学会、2009年3月16日、ピッツバーグ

[図書](計0件)

[産業財産権]

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

[その他]

ホームページ

<http://www.solis.t.u-tokyo.ac.jp/swata/swata1.html>

6. 研究組織

(1)研究代表者

渡辺 真仁 (WATANABE SHINJI)

東京大学・大学院工学系研究科・助教
研究者番号：40334346

(2)研究分担者

(3)連携研究者