

平成22年 6月10日現在

研究種目：若手研究 (B)  
 研究期間：2007～2009  
 課題番号：19740195  
 研究課題名 (和文) 現実的な電子状態を反映した強相関電子系の有効モデルの構築とその物性評価  
 研究課題名 (英文) Construction of effective model with realistic electronic structures of Strongly correlated electron systems and its analysis  
 研究代表者  
 今井 剛樹 ( IMAI Yoshiki )  
 埼玉大学・大学院理工学研究科・助教  
 研究者番号：10396666

研究成果の概要 (和文)：相関の強い電子系に対して、定量性を備えた有効モデルの構築及びその物性評価を試みた。特に希土類化合物系に対する有効モデルを構築し、それを出発点として各種物理量を計算した。得られた結果は実験結果とも良い一致を示し、強相関電子系を定量的に解析するにあたり、一つの指針を示すことが出来たと考えている。

研究成果の概要 (英文)：For the strongly correlated electron systems, we constructed more accurate effective models and investigated physical properties quantitatively. In particular, we focus on the rare earth materials which are well known as the typical strongly correlated systems. Some physical quantities were calculated based on the constructed effective models. The obtained results were in good agreement with the experimental ones. We could propose the quantitative theoretical method to study the strongly correlated electron systems.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2008年度	500,000	150,000	650,000
2009年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	2,000,000	600,000	2,600,000

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：強相関電子系、希土類化合物、第一原理計算

## 1. 研究開始当初の背景

遷移金属酸化物、希土類化合物および有機化合物などの強相関電子系では超伝導、磁性などの基礎的のみならず工業的な応用が期待される物理現象が多数報告され、物性物理学の最も重要なテーマの一つとなっている。しかしながらこれらの系は複雑な電子状態を

もつことが多く、さらに強い電子相関効果による典型的な量子多体問題であることから、その取り扱いには困難を伴う。そのため定量性を備えた強相関系の解析手法の確立、およびその物性評価が求められていた。

## 2. 研究の目的

これまで様々な系で大きな成功を収めてきた密度汎関数法に基づく局所密度近似は強相関電子系では定性的にも正しい結果を与えないことがしばしば見られている。一方多体効果の解析に主眼を置いた多体電子論的手法は模型の簡単化のために定量性に問題があることが多い。したがって定量性を備えた微視的な有効模型を構築して、強相関電子系の具体的な物性評価を行う上での一つの方向性を示すことを目的とした。

## 3. 研究の方法

理論的立場からの解析および評価を試みた。

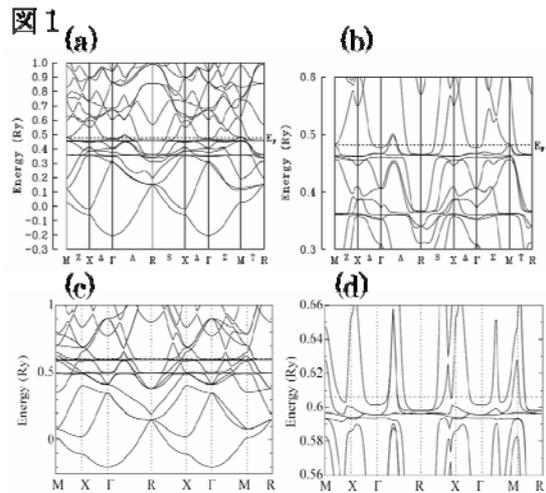
## 4. 研究成果

典型的な強相関電子系である希土類化合物は、多彩な物理現象の出現が多数報告されている。そこでは f 電子は局在性が大変強く、極めて狭いバンドを形成するが、それが数エレクトロンボルト程度のエネルギー領域の広がりをもった伝導バンドと混成を起こす。さらに f 電子間に働くスピン軌道相互作用や結晶場効果が、系のバンド構造をより複雑なものとする。そしてこの複雑な絡み合いが多彩な物理現象を生み出す源となっている。しかしながら複雑なバンド構造や f 電子間の強いクーロン相互作用による繰りこみ効果などの影響もあり、遷移金属氧化物系に比べて物理量の特徴的なエネルギースケールは極めて小さくなる。その一方で、一般的な希土類化合物の有効模型の構築するに当たっては、エネルギースケールの大きな伝導バンドと、ほとんど局在した f 電子状態の両方の情報を取り入れた模型を構築する必要がある。また強相関電子系に対しては密度汎関数法に基づくバンド計算は定性的にも誤った結果を与えることがしばしば見られる。そのため本研究では、定量性を備えた微視的な有効模型を構築することを試みた。それを出発点にして各種物理量を求め、バンド計算や実験結果との比較検討を行い、その有効性を議論した。

(1) s および p 電子が主に伝導電子バンドを構成する系に対し、伝導電子バンドをほとんど自由な電子模型 (NFE) で記述することによって、重い電子系の有効模型の構築を試みた (論文番号 1-5)。そこでは典型的な重い電子的振る舞いを示す物質として知られている  $\text{YbAl}_3$  を例にとった。 $\text{YbAl}_3$  はゾンマーフェルト係数が  $40\text{mJ/mol K}^2$  程度で中程度に重く、また、低温で電気抵抗が温度の 2 乗になり、フェルミ液体的な振る舞いを示すなど、有効模型を構築してその有効性を検証する

物質として適したターゲットであると言える。

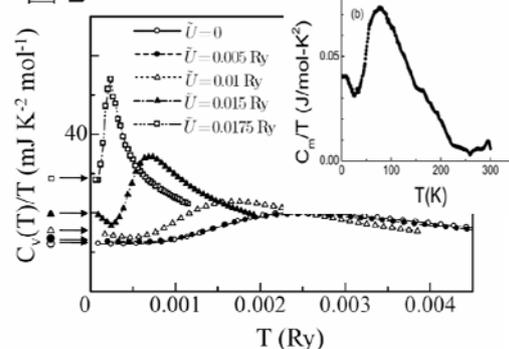
s, p 電子は格子間距離に比べて大きく広がっており、そのため伝導電子は弱い周期ポテンシャル中を伝搬していると見なすことができる。さらにポテンシャルの有効価数やコア半径は固体物理の教科書などに記載されている原子単体の値を流用し、さらに周期ポテンシャルの遮蔽効果を電子ガスの誘電関数で記述する。また簡単な周期アンダーソン模型では定数として扱われることが多い f 電子と伝導電子間の混成項は、実際にはその角度依存性は無視できないことも多い。そのため伝導電子、f 電子を球面調和関数で展開し、その重なりを考慮した際に出現する波数の



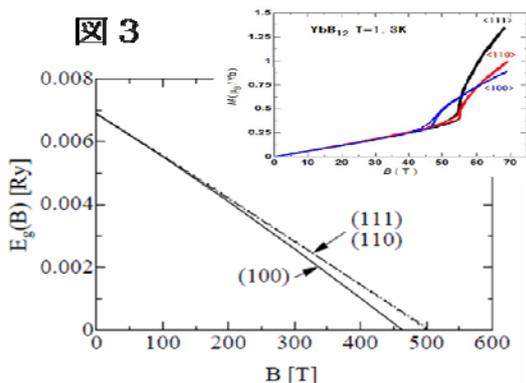
動径方向依存性の積分値は定数で近似してパラメータと見なす一方で、角度依存性は近似せずに残した。このようにして出来るだけ調整するパラメータを少なくして、s, p 電子を伝導バンドとする f 電子系に対する定量性をもつ有効模型を構築した。最終的に残された主なパラメータは f 電子のエネルギー準位レベルと混成項の動径方向依存性の 2 個のみである。

構築した有効模型を対角化してバンド分散を求めたところ、局所密度近似の結果と大変良い一致を得た (図 1)。(a), (b) は播磨に

図 2



よる局所密度近似の結果、(c), (d) は今回開発した手法による結果。(b), (d) は(a), (c)のそれぞれフェルミレベル付近を拡大したもの。また状態密度、光学伝導率などもバンド計算や実験結果と大変良い一致を見た。その一方で、相関効果の影響を強く反映する比熱係数は実験値の1/4程度になった。そのため、構築した有効模型を出発点にして、さらに相関効果の影響を議論した(論文番号1-3)。その結果、比熱の温度変化まで再現することができ、そのピークの構造の起源を明らかにすることができた(図2、 $U$ はf電子間に働くクーロン相互作用の大きさを表す。挿入図はCornelius等による実験結果)。そこでは高温側(~80K)のピークはバンドの構造に起因し、その一方で低温側のピークの上昇(30K以下)は相関効果の影響による可能性を指摘した。このように、典型的な重い電子系YbAl<sub>3</sub>に対して、高々数個のパラメータを含む有効模型を構築し、それを出発点にして物理量を議論した結果、実験結果とも良い対応を得たと考えている。本手法による有効模型はs, p電子系により構成された伝導電子バンドをもつような重い電子系に対する良い出発点となる可能性を示唆している。



(2) 伝導電子がd電子などから構成される系に対しては、強束縛模型で記述する方法を試みた(論文番号6)。YbB<sub>12</sub>は各種実験結果から100K程度のギャップをもつ典型的な近藤絶縁体として知られている。その一方で磁場誘起絶縁体-金属転移を示すが、その臨界磁場が異方的であることが知られている。ここではフェルミレベル付近の電子状態は主に局在性の強いYb4f電子とYb5d電子により構成されていることを考慮して、強束縛模型を用いた有効模型を構築し、磁場の異方性を調べた(図3、挿入図は伊賀等による実験結果)。縦軸はバンド絶縁体における電荷ギャップの大きさを表し、値がゼロになった点が絶縁体-金属転移を表す。一方、挿入図は縦軸は磁化を表し、磁化の飛びが起こった点で絶縁体-金属転移が起こっていることを表している。なお弱磁場下では結晶の等方性の

ため、磁化が重なっている。その結果、実験結果とギャップの閉じる磁場方向が極めて良い一致を見せている。特に<110>方向と<111>方向の転移点がきわめて接近している様子も再現できている。なお計算を簡単化するため、有効模型におけるエネルギーギャップを人為的に10倍程度大きく見積もった。そのため臨界磁場も同程度実験値より大きくなっている。

臨界磁場の異方性の出現する理由としては、Yb4f電子は結晶場効果により $\Gamma_6$ 状態が基底状態になるが、その空間分布は等方的でないため磁場の印加方向によりその応答も異なる、のようにシングルサイトイオンの描像で定性的には理解できる。しかしながら実際にはYbは結晶状態を構成し、Yb4f電子もバンドを形成しているため磁場による応答は各波数毎に異なる。そのため臨界磁場に対してより定量性を備えた結果を今回得ることができたと考えている。なおここでは多体効果は考慮していないが、多体効果が磁化の波数依存性を増強することは考えにくく、結果が大きく変更する可能性は小さいと思われる。そのため、臨界磁場の異方性がこれだけ実験とよく一致するという事は、有効模型の妥当性を示すものであり、相関効果の影響を議論する上での良い出発点になることを強く期待している。

(3) 充填スクッテルダイト系に対しても低エネルギー有効模型を構築し、その磁場下での特異な相転移についても議論した(論文番号7, 8)。充填スクッテルダイトCeOs<sub>4</sub>Sb<sub>12</sub>は磁場を印加すると秩序相が出現するが、その転移温度は弱磁場領域で印加磁場の増大に伴い増大し、さらに磁場を加えると減少するという非単調な相図になることが報告されていた。そこで強束縛模型に基づいて有効模型を構築し、磁場下での振る舞いを調べた。その結果CeOs<sub>4</sub>Sb<sub>12</sub>は半金属的なバンド構造をもつが、相関効果により反強磁性的な秩序相が出現し、さらに低エネルギー領域の状態密度の構造が非単調な相図の出現に極めて大きな影響を及ぼしていることを示した。

また平成21年11月に京都で開催された、新学術領域研究「重い電子系の形成と秩序化」若手秋の学校で講師として招かれ、「現実的なバンド構造を考慮した重い電子系の理論」というタイトルで上記の内容を含めた定量性を考慮した強相関電子系の解析手法について、若手研究者および大学院生に対して講演を行った。

### 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 8 件)

- ① Y. Imai and T. Saso: J. Phys.: Conf. Series 200 (2010) 012066 査読有
- ② Y. Imai and T. Saso, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 064707 pp.1-7, 2009 査読有
- ③ Y. Imai and T. Saso, J. Phys.: Conf. Series, 150 042065, 2009 査読有
- ④ H. Kuroiwa, Y. Imai and T. Saso: J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) Suppl. A, pp. 196-198 査読有
- ⑤ H. Kuroiwa, Y. Imai and T. Saso, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 124704 pp.1-8, 2007 査読有
- ⑥ T. Izumi, Y. Imai and T. Saso, J. Phys. Soc. Jpn. 76, 084715 pp.1-4, 2007 査読有
- ⑦ Y. Imai and T. Saso, Phys. Rev. B 75, 165102, pp.1-8, 2007 査読有
- ⑧ Y. Imai, K. Sakurazawa and T. Saso: J. Mag. Mat. 310 (2007) 243-245 査読有

〔学会発表〕(計 7 件)

- ① 今井剛樹、新学術領域研究「重い電子系の形成と秩序化」若手秋の学校講師(2009年11月24日、京都、関西セミナーハウス)
- ② 今井剛樹、佐宗哲郎、25aPS-104, 日本物理学会 2009 年秋季大会 (2009 年 9 月 22 日、熊本大学)
- ③ Y. Imai and T. Saso, ICM2009, Mo-D-1.1-40、ドイツ、カールスルーエ、2009 年 7 月 27 日
- ④ 今井剛樹、佐宗哲郎、22pQB-11, 日本物理学会 2008 年秋季大会 (2008 年 9 月 22 日、岩手大学)
- ⑤ Y. Imai and T. Saso, LT26, PC-Mo172、オランダ・アムステルダム、2008 年 8 月 11 日
- ⑥ 今井 剛樹、佐宗哲郎: Skutterudite 2007 (2007 年 9 月 28 日、神戸大学)
- ⑦ 黒岩宏征、今井剛樹、佐宗哲郎、23pWE-6, 日本物理学会 第 62 回年次大会 (2007 年 9 月 23 日、北海道大学)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：

国内外の別：

○取得状況 (計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：  
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

<http://sces.th.phy.saitama-u.ac.jp/~imai/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

今井 剛樹 (IMAI YOSHIKI)

研究者番号：10396666

(2) 研究分担者

( )

研究者番号：

(3) 連携研究者

( )

研究者番号：