

## 自己評価報告書

平成23年 4月 7日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：2008～2011

課題番号：20340084

研究課題名（和文）

f 電子系の高次多極子転移と乱れの効果

研究課題名（英文）

Higher-multipole transitions and disorder effects in f-electron systems

研究代表者

倉本 義夫 (KURAMOTO YOSHIO)

東北大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号：70111250

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：f 電子, 多極子, 量子モンテカルロ, 磁気八極子, 金属絶縁体転移

## 1. 研究計画の概要

八極子以上の高次多極子が現実の系 ( $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{B}_6$ ,  $\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$ ,  $\text{PrRu}_4\text{P}_{12}$ ,  $\text{SmRu}_4\text{P}_{12}$ ,  $\text{NpO}_2$  など) で秩序化することは、最近の様々な実験とその理論的解釈から疑いのないものになっている。しかし、その結果現れる物性については未知の点が多い。多極子転移にともない、弱い遍歴・局在転移が起こり、秩序状態で巨大磁気熱電効果などの独特な物性を示す場合がある。また、ある系（例えば  $\text{Pr}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_4\text{P}_{12}$ ）は乱れに非常に敏感で、わずかな不純物（この場合は  $\text{La}$ ）で多極子転移が抑制されるのに対して、別の系（例えば  $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{B}_6$ ）では鈍感である。本研究では、固体中電子の高次多極子転移をもたらす特徴的な物性を以下のような計画で理論的側面から明らかにする。

(1) ランダウ現象論を用いて、高次多極子の秩序変数と観測量の結合を調べ、奇妙な実験結果を熱力学の見地から説明する。

(2) 高次多極子を担う局在 f 電子と伝導電子との相互作用、特に近藤効果を考慮して微視的な研究を行う。数値的手法として、連続時間量子モンテカルロ法 (CT-QMC) と動的分子場理論 (DMFT) を組み合わせる。この段階までは乱れの効果をあからさまには考えない。

(3) 高次多極子の近藤効果と乱れ効果を同時に考慮し、現実系の理解をはかる。乱れの効果は CPA によって扱う。これにより長年の謎である  $\text{URu}_2\text{Si}_2$  の隠れた秩序とその希釈系の非フェルミ流体状態を高次多極子の立場から解釈することを試みる。

## 2. 研究の進捗状況

(1) 現象論的な研究は、ほぼ予定通り遂行された。例えば、スクッテルダイト  $\text{SmRu}_4\text{P}_{12}$

の磁気相図は、時間反転対称性を破る秩序状態に由来する特徴ある構造があり、その実態解明が待たれていた。我々は、4 重縮退した結晶場基底状態だけでなく、近接している 2 重縮退した励起状態が本質的に重要であることを見出した。この擬 6 重項を用いて主な秩序変数である八極子の成長にともなって、電荷分布の変形をともなう四極子と、さらに高次の十六極子が誘起されことを示した。本研究では、分子場理論で 6 個の結晶場状態から構成される可能な多極子をすべて取り入れ、 $\text{SmRu}_4\text{P}_{12}$  の磁場中の相図を半定量的に再現した。

(2) CT-QMC と DMFT を組み合わせる研究は、予想以上の進展をしている。特に、 $\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$  のスカラー秩序に対して、結晶場 1 重項と近藤 1 重項のサイトが交替的に整列した微視的モデルを提案し、静的・動的物理量が実験結果と定性的に対応することを示した。

(3) Ce 化合物を想定した通常近藤格子系に対して、La 置換の効果を CT-QMC と DMFT に加えて CPA を用いることにより研究を進めた。その結果、フェルミ面の大きさが不純物の濃度に対して特徴的に変化することを見出し、その機構を直観的に明らかにした。

## 3. 現在までの達成度

① 研究は当初の計画以上に進展している。（理由）固体内電子の遍歴・局在の変化は長年の基本的難問であるが、原子あたり偶数の電子数を持つ非クラマース系では、遍歴局在転移と多極子転移との関連が現実的な問題になっている。我々は通常近藤格子モデルに加えて、単重項・3 重項近藤格子の秩序状態も研究した。この精密な理論は、 $\text{PrFe}_4\text{P}_{12}$

の不思議な秩序状態の本性を説明し、長年の懸案である URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> の秩序変数解明も視野に入ってきた。

#### 4. 今後の研究の推進方策

- (1) 数値的研究は、これまで積み上げた経験を生かして、さらに強力に推進する。
- (2) 多極子と不純物の効果について、精密な計算の結果を直観的に理解できるような量子力学的現象論を発展させる。

#### 5. 代表的な研究成果

(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) すべて査読有

(1) S. Hoshino, J. Otsuki, and Y. Kuramoto: Electronic Order with Staggered Kondo and Crystalline Electric Field Singlets, J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010) 074720-1 - 074720-10

(2) Y. Kuramoto, H. Kusunose, and A. Kiss: Multipole Orders and Fluctuations in Strongly Correlated Electron Systems, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 072001-1 - 072001-33 (招待レビュー論文)

(3) J. Otsuki, H. Kusunose, Y. Kuramoto: Evolution of a Large Fermi Surface in the Kondo Lattice, Phys. Rev. Letters 102 (2009) 017202-1 - 017202-4

(4) Y. Kuramoto: Electronic Higher Multipoles in Solids, Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 176 (2008) 77-96

[学会発表] (計 4 件)

(1) Y. Kuramoto: "Electronic Orders Induced by Kondo Effect in Non-Kramers f-Electron Systems", International Conference on Heavy Electrons (ICHE2010) (招待講演, September 19, 2010, Tokyo Metropolitan University, Tokyo, Japan)

(2) 大槻純也, 楠瀬博明, 倉本義夫: 重い電子系Ce化合物のフェルミ面に対する磁場とLa置換効果の理論, 日本物理学会講演概要集 65(2-3), 506, 2010-08-18 (岡山)

(3) 星野晋太郎, 大槻純也, 倉本義夫: 結晶場単重項・三重項系における近藤効果と結晶

場効果の競合, 日本物理学会講演概要集 64(2-3), 455, 2009-08-18 (東京)

(4) 倉本義夫: スクッテルダイトの多極子秩序, 日本物理学会講演概要集 63(2-3), 450, 2008-08-25 (招待講演) (盛岡)

[図書] (計 3 件)

(1) 倉本義夫: 量子多体物理学 (179 ページ, 朝倉書店, 2010)

(2) Y. Kuramoto and Y. Kato: Dynamics of One-Dimensional Quantum Systems: Inverse-Square Interaction Models, (Cambridge University Press, 2009, 488 pages)

(3) 倉本義夫, 江澤潤一: 量子力学 (216 ページ, 朝倉書店, 2008)

[その他]

ホームページ:

<http://www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~qmbt/index.html>