

平成 23 年 6 月 13 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2008 ~ 2010

課題番号：20740189

研究課題名 (和文) 圧力下重い電子系における臨界反強磁性-軌道揺らぎと超伝導

研究課題名 (英文) Critical antiferromagnetic and orbital fluctuations and superconductivity in heavy-fermion systems under pressure

研究代表者

服部 一匡 (HATTORI KAZUMASA)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号：30456199

研究成果の概要 (和文)：

電気抵抗が零になる超伝導現象の新奇な機構として、電子の軌道自由度 (つまり個々の電子の電荷密度の空間的異方性) の揺らぎが重要な役割を果たしている可能性を解析し、圧力下における重い電子系といわれる物質群においてそのような揺らぎが非常に発達している可能性を指摘した。

研究成果の概要 (英文)：

We have investigated orbital fluctuations in heavy-fermion systems as a candidate for the pairing mechanism of superconductivity in these systems and analyzed their properties near a critical end point of these fluctuations.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2009 年度	400,000	120,000	520,000
2010 年度	400,000	120,000	520,000
年度			
年度			
総計	2,300,000	690,000	2,990,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・(4303)物性 II

キーワード：強相関係、金属、超伝導・密度波

1. 研究開始当初の背景

Ce や Yb 等の元素を含む金属化合物は低温において伝導を担う電子が非常に実空間局在性の強い f 電子であり、局所的な強いクーロン相互作用が無視できず、さまざまな強相関効果が報告されている。これらの物質はその有効電子質量の大きさ (真空中の電子質量に比べて 1000 倍にもなる) から重い電

子系と呼ばれている。そのなかで、圧力下において磁気秩序転移温度を絶対零度まで抑制した場合に現れる、非フェルミ液体と呼ばれる異常な金属状態が注目を集めている。代表的な重い電子系化合物 CeCu_2Si_2 では磁気秩序を抑制した低温領域で超伝導が発見されさらに圧力を加えるとその超伝導転移温度がピークを持つ事が知られている。さらに

関連物質においてもそのピーク構造が2つのピークになっており、1つは磁気転移温度が零になる圧力領域、他方はそれよりも高压に位置していることが報告されている。

これら二つの超伝導の起源として、前者は磁気揺らぎを媒介としたものであることが期待されているが、後者に関してはf電子の価数揺らぎの超伝導という提案があるのみで、更なる研究が求められている。

また磁気秩序転移温度が絶対零度になる圧力（量子臨界点）での非フェルミ液体の性質についても盛んに議論がなされており、上述の物質に置いても二つの超伝導転移温度ピークそれぞれで異なった振る舞いをする事がわかっている。高压側での非フェルミ液体に関しては磁気秩序相とは無関係なものと期待されている。

2. 研究の目的

本研究では、上記 Ce 系重い電子化合物の軌道自由度という観点から圧力下におけるその揺らぎについて解析を行い、超伝導発現機構および反強磁性揺らぎとの相関について解析することが目的である。ここで言う「軌道」自由度はf電子のもつ軌道自由度であり、多くの重い電子化合物においてはその強いスピン-軌道相互作用のため全角運動量 J で特徴づけられる状態がより小さなエネルギースケールの結晶場によって分裂したものを指す。最も典型的なものでは、その分裂した状態で最もエネルギーの低いものが低エネルギーの物性を支配し、他の高エネルギー状態は重要ではない。しかしながら、その励起エネルギーが低い場合には状況は単純ではない。本研究は圧力下の物性を解析する事であるが、圧力を高くしていくと、それぞれの状態の「ぼやけ」具合（エネルギーの不確定さ）が大きくなり、十分に励起エネルギーが低い場合には励起状態も低温物性に寄与するようになる。実際に $CeCu_2Si_2$ や $CeAl_2$ においてはそのような結晶場状態が高压下において重要になることが実験的に調べられている。本研究では、それら結晶場状態の圧力依存性を強相関効果を取り入れた微視的なモデルの計算により解析する。

3. 研究の方法

本研究で解析する重い電子化合物は上記にもあるように、f電子の局在性が強く、従って強い電子間のクーロン斥力が無視できない。このような強相関電子系を理論的に解析することは容易なことではないが、本研究では最も有効であると考えられている動的平均場理論を用いる。図1に示したように、動的平均場理論では、すぐには解く事が難しい格子上の強相関モデルを1サイトの有効不純物モデルに焼き直す事で問題を近似的に解

く理論である。この理論は空間次元が ∞ の場合に厳密になることが示されており、今日では広く用いられており、確立した理論である。この理論の長所は弱相関から強相関までを統一的に解析できる点と強相関系において高エネルギーの局在的な電子状態と低エネルギーでの遍歴的な状態を同時に扱える点である。短所としては空間的な相関効果が平均場としてしか考慮されていない点であり、その部分は以下の相補的な理論により解析する。解析する具体的なモデルとしては格子アンダーソンモデルと呼ばれるモデルであり、本研究では局在電子軌道を二種類、伝導電子を一種類含み、二つの局在軌道が一つの伝導電子軌道と混成しているモデルである。

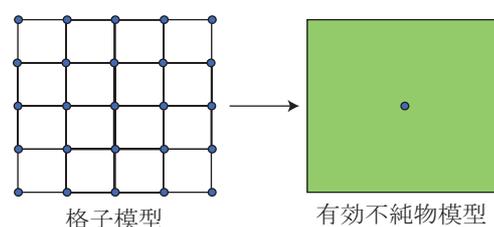


図1：動的平均場理論における格子模型から有効不純物模型へのマッピングの概念図。

本研究では、動的平均場理論で扱えない空間的な相関を自己無撞着繰り込み理論を用いて解析する。自己無撞着繰り込み理論は磁気揺らぎの理論として発展したが、本研究では軌道揺らぎに応用し理論を構築する。この理論は上記の微視的な解析である動的平均場理論と異なり現象論ではあるが、例えば重い電子系量子臨界点近傍の非フェルミ液体を説明する可能性のある理論として用いられているものである。軌道揺らぎの場合に拡張する際の新しい点は、相転移が一次転移から臨界終点に移り変わる性質を記述しなければならない点であり、そのためには秩序変数自身をその揺らぎと自己無撞着に扱う必要がある。

本研究では秩序変数とその揺らぎの統一的記述を目指し、ガウシアン揺らぎに秩序変数の変化を記述する変数を追加し変分的に自己無撞着繰り込み群理論を構築する。

4. 研究成果

- ① 二軌道アンダーソン格子模型の動的平均場理論の解析
- ② 軌道揺らぎの自己無撞着理論の構築
- ③ 反強磁性相関と近藤効果による残留抵抗の増大の理論
および派生的な研究として、
- ④ ベータパイロクロア化合物の一次転移お

よび超伝導理論の構築
 ⑤ 電子格子系における2チャネル近藤効果の解析

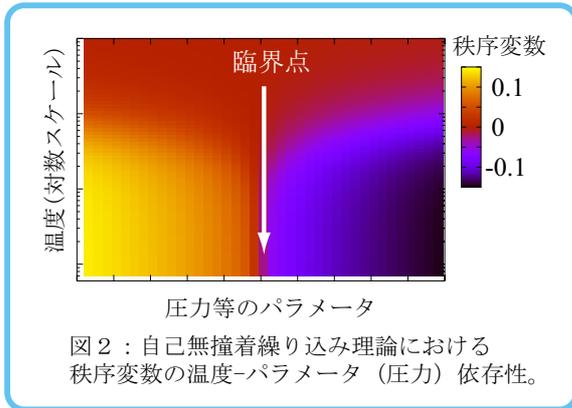


図2：自己無撞着繰り込み理論における秩序変数の温度-パラメータ（圧力）依存性。

図2は軌道揺らぎの自己無撞着繰り込み理論から計算された量子臨界点（臨界終点）近傍での秩序変数の温度とパラメータ（近似的に圧力に対応）依存性である（成果②）。図2は量子臨界点近傍の結果であるが、本研究では一次転移および臨界終点の移り変わりを記述する事に成功している。絶対零度の臨界終点近傍では秩序変数は温度の2/3乗に比例して変化する事が解析的に示す事ができた。また、有限温度の臨界終点ではこの冪が1/3に変わる事も示した。これは量子-古典クロスオーバーに対応している。

秩序変数は微視的な動的平均場理論においても計算を行っており（図3）、微視的なモデルからも軌道揺らぎの臨界点を解析した。図3では、A軌道のエネルギー準位を固定し、B軌道のエネルギー準位を変化させたときのf電子軌道占有数の変化を表した物である。f電子と伝導電子の混成が小さい場合に鋭いクロスオーバーが見られ、最も小さいパラメータにおいては一次転移が生じる。動的平均場理論では電子の状態密度を解析する事ができるが、その軌道依存性は臨界点近傍におい

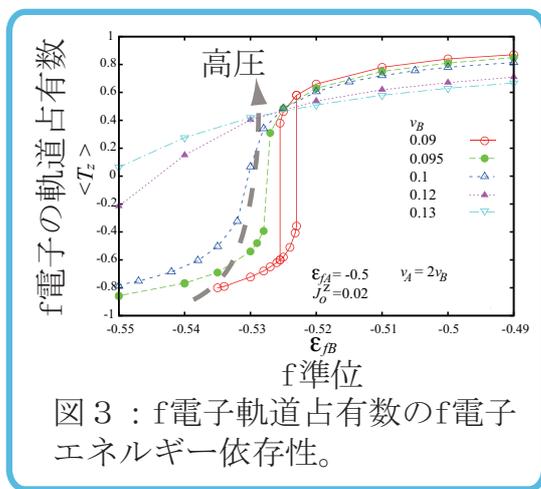


図3：f電子軌道占有数のf電子エネルギー依存性。

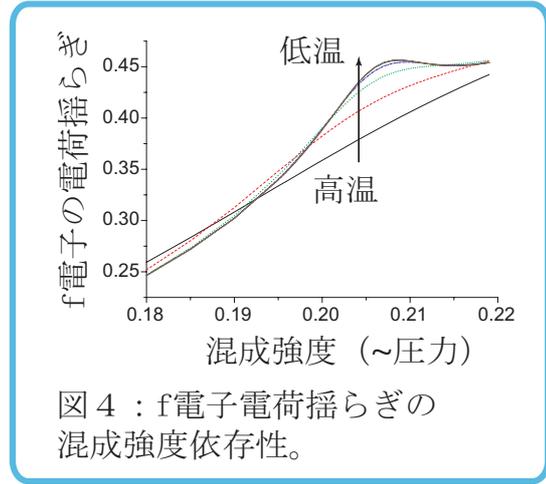


図4：f電子電荷揺らぎの混成強度依存性。

て、低エネルギーの結晶場状態を反映し、強度の遷移が軌道間で起きることがわかった。フェルミ面での状態密度の結果から臨界終点近傍では状態密度の急激な変化が起きる事も判明し、軌道自由度のあるCe系重い電子物質における圧力下の電気抵抗係数や、比熱の圧力依存性を説明する有望な候補となることがわかった。

CeCu₂Si₂等の圧力下電気抵抗の実験からも結晶場状態が、高圧側の超伝導転移温度ピーク近辺から複数寄与しているという報告がなされており、本研究の軌道自由度の揺らぎおよび臨界終点の物性が現実の物質に関連していることが示唆される。これまでのところ、この揺らぎを媒介とした微視的な超伝導理論を構築する事はできていないが、今後の課題となる。また理論的にはこの軌道揺らぎが反強磁性揺らぎと結合した場合の新奇な物性を解析する事も重要な課題である。

また、反強磁性相互作用と近藤効果の競合によりf電子の電荷揺らぎが増大する事を明らかにした（成果③）。このことはCeAl₂、CeCu₅Au等にみられる残留抵抗の増大が近藤温度と反強磁性転移温度が拮抗する圧力領域で観測される事を定性的に示すものであり、我々の研究によって残留抵抗の増大に関する新たな知見が得られた。解析は二不純物アンダーソンモデルを数値繰り込み群を用いて行った。図4に示すように、f電子と伝導電子の混成を増加させると、f電子の電荷揺らぎが増大が見られることがわかった。この混成強度は近藤効果が強い領域と反強磁性相関が強い領域のちょうど中間であることが重要である。電荷揺らぎは残留抵抗の起源となる不純物散乱を増加させる事が知られており、このことは残留抵抗の増大が近藤効果と反強磁性相関の競合で起き得ることを示している。今後の展開としては本研究の解析を格子模型に基づいて行い、この機構の正当性を確かめる必要がある。

また、軌道揺らぎという観点で関連のある

強結合超伝導体ベータパイロクロア化合物の一次転移の理論およびその超伝導についても解析を行った(成果④)。その一次転移は液体-気体転移と同じクラスに属し、軌道自由度のものと同じものである。ベータパイロクロア化合物では非調和格子振動の物理としてその一次転移が現れる。現在でも実験的に盛んに議論されているがその超伝導および非調和振動については我々の解析により説明が統一的になされた。特に非調和振動子の中性子散乱の実験結果を解析し、そのデータを強結合超伝導理論に用いる事で、実験で得られている超伝導転移温度を定量的に再現することができ、ベータパイロクロア化合物は非調和振動子が媒介する超伝導であることを確認した。

最後に、電子格子系における2チャンネル近藤効果の実現について詳細な解析を行った。

(成果⑤) これまで実現するかどうか不明確であったが、厳密な数値繰り込み群による計算によって、実現条件を見いだした。そこでは電子格子相互作用だけでは十分でなく、電子間のクーロン斥力が重要であることを証明した。

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6件)

①

・ Satoshi Yashiki, Shunsuke Kirino, Kazumasa Hattori, and Kazuo Ueda, "Kondo Effect of a Magnetic Ion Vibrating in a Harmonic Potential", J. Phys. Soc. Jpn. 80, (2011)064701.

②

・ Kazumasa Hattori and H. Tsunetsugu, "Phonon Dynamics and Multipolar Isomorphic Transition in beta-Pyrochlore KOs_2O_6 ", J. Phys. Soc. Jpn. 80, 023714 (2011).

③

・ Kazumasa Hattori, "Meta-Orbital Transition in Heavy-Fermion Systems: Analysis by Dynamical Mean Field Theory and Self-Consistent Renormalization Theory of Orbital Fluctuations", J. Phys. Soc. Jpn. 79, 114717 (2010) selected as Editor's Choice.

④

Kazumasa Hattori and Kazumasa Miyake "Enhanced charge fluctuation due to competitions between inter-site and Kondo-Yosida singlet formation in heavy-fermion systems" J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010) 073702.

⑤

Kazumasa Hattori and Hirokazu Tsunetsugu "Strong coupling superconductivity mediated by three-dimensional anharmonic phonons" Phys. Rev. B 81 (2010) 134503.

⑥

Kazumasa Hattori and Hirokazu Tsunetsugu, "A Possible Isomorphic Transition in beta-pyrochlore Compounds" J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 013603.

[学会発表] (計8件)

国際会議における発表

①

9/17-20, 2010, International Conference on Heavy Electrons 2010, Tokyo, Japan, "Enhanced orbital fluctuations in a two-orbital Anderson lattice model" K. Hattori

②

3/15-19, 2010, APS march meeting, A40-10, Portland, USA, "Superconductivity mediated by anharmonic phonons: application to beta-pyrochlore oxides" K. Hattori and H. Tsunetsugu.

③

7/26-31, 2009, International Conference on Magnetism 2009 Mo-D-1.1-96, Karlsruhe Germany "Evolution of Orbital Fluctuations in Two-orbital Anderson Lattice" Kazumasa Hattori

④

7/8-10, 2009, ISSP International Workshop on New Developments in Theory of Superconductivity, OC09, ISSP Univ. of Tokyo, Kashiwa, Japan, "Theory of anharmonic and anisotropic phonon systems" K. Hattori and H. Tsunetsugu

国内での発表

⑤

2010年9月23日 日本物理学会 大阪府立大学 23pWJ-3
「二軌道アンダーソン模型における軌道揺らぎの解析」服部一匡、常次宏一

⑥

2010年3月21日 日本物理学会 岡山大学 21pGE-6
「ベータパイロクロア化合物における非調

和振動子と強結合超伝導の解析」 服部一匡、
常次宏一

⑦

2009年11月24-27日 文部科学省・科学研究補助金・新学術領域研究（研究領域提案型）「重い電子系の形成と秩序」重い電子系秋の学校 関西セミナーハウス（京都）

「強相関係としての電子-非調和振動の物理」 服部一匡

⑧

2009年8月18-20日 文部科学省・科学研究補助金・新学術領域研究（研究領域提案型）「重い電子系の形成と秩序」第2回研究会 18b2 広島大学東広島キャンパス

"Superconductivity induced by three-dimensional anharmonic oscillators"

K. Hattori and H. Tsunetsugu

[その他]

ホームページ等

<http://sites.google.com/site/khathome/home>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

服部 一匡 (HATTORI KAZUMASA)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号：30456199