

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 4 月 5 日現在

機関番号：17104

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2009 ～ 2011

課題番号：21740240

研究課題名（和文） 量子縮退領域における 1 次転移の臨界終点がもたらす量子現象とその波及効果の解明

研究課題名（英文） CLARIFICATION OF QUANTUM PHENOMENA AND THEIR EFFECTS OF CRITICAL END POINT OF FIRST ORDER TRANSITION IN QUANTUM DEGENERATE 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

研究成果の概要（和文）：強相関遍歴電子系において 1 次転移の臨界終点が絶対零度に抑制された量子臨界終点近傍で新しい量子臨界現象が出現することを理論的に示した。具体的には、Ce や Yb の 1 次の価数転移の量子臨界終点近傍では降温とともに一様磁気帯磁率と核磁気緩和率が発散し、電気抵抗率は温度に比例し、電子比熱係数は  $\log$  発散することを示した。この結果は、Ce や Yb 系重い電子系の常磁性金属相で最近観測されている、非従来型の量子臨界現象を自然に説明する。

研究成果の概要（英文）：It is shown theoretically that in strongly correlated electron systems, near the quantum critical end point where the critical end point of the first-order transition is suppressed to absolute zero, new quantum critical phenomena emerge. Near the quantum critical end point of the first-order valence transition, as temperature is decreased, uniform magnetic susceptibility and nuclear magnetic relaxation rate show divergence, resistivity shows a T-linear dependence, and electronic specific-heat coefficient shows logarithmic divergence. These results naturally explain unconventional quantum critical phenomena observed recently in paramagnetic-metal phases in Ce- and Yb-based heavy electron systems.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	2,100,000	630,000	2,730,000
2010 年度	800,000	240,000	1,040,000
2011 年度	600,000	180,000	780,000
年度	0	0	0
年度	0	0	0
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

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：強相関系

## 1. 研究開始当初の背景

圧力下の  $\text{CeCu}_2\text{Ge}_2$  や  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  では、残留抵抗率が最大値をもち、温度に比例する非フェルミ液体的な電気抵抗が現れる圧力領域で超伝導転移温度が増大するという異常な振る舞いが観測されており、その圧力近傍

で電子の有効質量および NQR 周波数の急激な変化が生じていることから、Ce の価数の急激な変化による臨界価数ゆらぎがこれらの物性異常の起源として注目を集めている。一方、単体の Ce 金属では、温度・圧力相図中で  $\gamma$ - $\alpha$  転移とよばれる 1 次の価数転移が生

じることが知られている。この相転移では結晶構造は不変で同じ対称性が保たれるので、温度・圧力相図中で1次転移の臨界終点が存在し、そこでは液体・気体相転移の発散する密度ゆらぎと同様に、価数のゆらぎが発散する。このことから、上記のCe化合物が示す電子の不安定性の問題の背後には、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、増大した臨界価数ゆらぎが重要な役割を果たしていると考えられる。

このような中、2008年になって、1次の価数転移を示すYbInCu<sub>4</sub>の姉妹物質であるYbAuCu<sub>4</sub>の温度・磁場相図において、Cu-NQR測定が行われ、NQR周波数が急激な変化を示す温度 $T^*(H)$ が観測された。NQR周波数の変化は、Ybとその周りの原子イオンでの電荷分布の変化を意味しており、 $T^*(H)$ でYbの価数クロスオーバーが生じていることが実験的に明らかとなった。さらに興味深いことに、価数クロスオーバー温度 $T^*(H)$ でNQR核磁気緩和率 $(T_1T)^{-1}$ が発散的増大を示すことが観測され、新たな問題が提起された。これは、本質的に電荷移動のゆらぎが増大するYbの価数クロスオーバー温度で磁気ゆらぎが増大していることを意味しており、新しい概念の構築が必要とされている。

この価数クロスオーバー温度 $T^*(H)$ は、Ybの1次の価数転移温度を、臨界終点からさらに高温側に延長した温度と考えられるので、上述したCeCu<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>やCeCu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>と同様に、Yb化合物においても、1次の価数転移の臨界終点が絶対零度近傍まで抑制されて増大したYbの臨界価数ゆらぎがこれらの物性異常の起源となっていると考えられる。

## 2. 研究の目的

強相関電子系において、量子縮退領域における1次相転移の臨界終点とその波及効果がさまざまな系での物性異常の引き金となっており、これまで謎とされてきた現象を解明する鍵を握ると考えられることから、本研究では1次の価数転移の量子臨界点がもたらす新しい量子現象を解明することがその目的である。

## 3. 研究の方法

従来議論されてきた、磁気臨界点近傍の量子臨界現象を超えた効果として本研究において重要であると着目した点は、オンサイトのf電子間に働くクーロン斥力が、いま問題のCeおよびYb系の電子状態に寄与する最も大きな相互作用であり、この局所相関の効果を取り入れた上で量子臨界現象の枠組みをつくる必要がある、ということであった。そのために、CeおよびYb系重い電子系のミニマルモデルである周期アンダーソンモデルに基

づいて、強い局所相関の効果を取り入れた価数ゆらぎの量子臨界現象の理論的枠組みを構築した。具体的には、f電子のオンサイトのクーロン斥力が大きい場合の電子状態を鞍点解として求めた上で、その状態を用いてCeやYbの臨界価数ゆらぎのモード結合理論を構築した。

## 4. 研究成果

強い局所相関の効果を取り入れた結果、ほとんど分散のない、臨界価数ゆらぎのモードが波数 $q=0$ 近傍に出現することを見出した。このことは、臨界価数ゆらぎの動的帯磁率に現れる波数依存性の係数が非常に小さいことに反映される。このほとんどlocalな(局所的な)臨界価数ゆらぎの出現によって、非従来型の量子臨界現象が引き起こされることを明らかにした。具体的には、1次の価数転移の量子臨界終点近傍において、一様な価数帯磁率は、 $\chi_v(T) \sim T^{-\alpha}$  ( $\alpha=2/3$ )という、新しいタイプの量子臨界性を示すことを解析的に示した。この結果は、実験の測定温度が、臨界価数ゆらぎの特徴的溫度 $T_0$ にくらべて十分高温の場合( $T \gg T_0$ )に得られた結果であるが、測定温度が下がって $T_0$ に近づくにつれて、溫度のべき $\alpha$ は0.5に近づくことを数値計算により明らかにした。すなわち、溫度のべき $\alpha$ は、測定溫度領域に応じて $0.5 \leq \alpha \leq 0.7$ という異常な値をとることがわかった。

ここで重要なことは、強い局所相関の効果により、臨界価数ゆらぎのモードがほとんど分散をもたなくなり、臨界価数ゆらぎの特徴的溫度 $T_0$ が非常に小さくなることである。その結果、実験で到達できる最低溫度が $T_0$ よりも高温に位置する状況が生じる(つまり、 $T > T_0$ となる)ことで、上述したような異常な溫度依存性が現れるという点である。

さらに、価数転移の量子臨界点では、一様なf電子の磁気帯磁率も価数帯磁率と同様の溫度依存性を示すことを解析的に明らかにした。すなわち、価数転移の量子臨界点近傍では、価数の動的帯磁率とf電子の動的磁気帯磁率が共通の構造をもつため、波数 $q=0$ の一様な磁気揺らぎ(すなわち、強磁性ゆらぎ)が増大し、量子臨界点では一様磁気帯磁率は $\chi(T) \sim T^{-\alpha}$ のように非従来型のべき $\alpha$ による発散的振る舞いを示すことを示した。

さらにNMR・NQRによる核磁気縦緩和率を計算した結果、一様磁気帯磁率と同じ溫度依存性 $(T_1T)^{-1} \sim T^{-\alpha}$ をもつことを示した。

電気抵抗率についても計算を行った結果、 $T > T_0$ の溫度領域で、溫度に比例する振る舞うこと( $\rho(T) \sim T$ )が明らかとなった。

また、臨界価数ゆらぎによる電子の自己エネルギーを計算した結果、電子比熱係数は低温で $C/T \sim \log T$ のように振る舞うことを示し

た。

これにより、臨界価数ゆらぎの増大により、一様スピンゆらぎが増大することが理論的に示され、そのメカニズムが明らかにされた。この結果は、空間次元1次元系での周期アンダーソン模型における密度行列数値繰り込み群法により、1次転移の量子臨界終点で一様磁気帯磁率が発散するという数値計算結果と整合するとともに、その理論的説明を与えるものである。この結果により、YbAuCu<sub>4</sub>の温度・磁場相図におけるYbの価数クロスオーバー温度 $T^*(H)$ でCu-NQR核磁気緩和率 $(T_1T)^{-1}$ が発散的増大を示す理由がこれまで謎とされていたが、理論的説明が自然な形で与えられた。

さらに、この機構は重い電子系物質YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>や $\beta$ -YbAlB<sub>4</sub>などの常磁性金属相において、強磁性相が近くに存在しないにもかかわらず、一様磁気帯磁率が増大する謎を解明する鍵を握ると考えられる。

注目すべきことに、本研究で明らかにされた、1次の価数転移の量子臨界終点近傍で出現する新しい量子臨界現象 $\chi(T) \sim T^{-\alpha}$ 、 $(T_1T)^{-1} \sim T^{-\alpha}$  ( $0.5 \leq \alpha \leq 0.7$ )、 $\rho(T) \sim T$ 、 $CT \sim \log T$ は、強相関電子系の分野でここ10年来懸案となっている、非従来型の量子臨界現象を示すYbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>で観測された低温での物理量の温度依存性と一致している。さらに、2008年に観測された、 $\beta$ -YbAlB<sub>4</sub>の低温での物理量の温度依存性も同様の振る舞いを示している。このことから、1次の価数転移の量子臨界終点近傍で出現する量子臨界現象が、これらの物質の非従来型の量子臨界現象の起源となっている可能性があることを指摘した。今後CeやYbの価数変化をとらえる実験の遂行を行うことによって、価数転移の量子臨界終点の実験的証拠が与えられれば、ここ10年来の強相関電子系における最も重要な問題の一つが、本研究成果に基づいて解明されることになる。

このように、本研究成果は国内外に強いインパクトを与えており、強相関電子系での国際会議において招待講演6件、招待論文1件、国内学会において招待講演および研究会での依頼講演を行っている。さらに、本研究成果を含む一連の研究成果により日本物理学会の第5回若手奨励賞を受賞した。

今後の展望として、本研究で構築した新しい量子臨界現象の理論的枠組みを発展させるとともに、非従来型の量子臨界現象を示す物質においてCeおよびYbの価数変化の直接観測を行うことが今後の重要な課題である。YbRh<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>や $\beta$ -YbAlB<sub>4</sub>以外の物質でもこの新しい量子臨界現象を示す可能性があるため、本研究を契機として、新しい普遍性クラスを形成する物質群を同定する物質探索を行う実験研究の進展が望まれる。これにより、強相

関電子系における非従来型の量子臨界現象の全貌の解明につながることを期待される。

## 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7件)

① 渡辺真仁、三宅和正、Roles of Critical Valence Fluctuations in Ce- and Yb-Based Heavy Fermion Metals、J. Phys. Condens. Matter、**23**、2011、094217-1-094217-11、査読有、(SCES2010招待論文)

DOI:10.1088/0953-8984/23/9/094217

② 渡辺真仁、三宅和正、Sharp Valence Change as Origin of Drastic Change of Fermi Surface and Transport Anomalies in CeRhIn<sub>5</sub> under Pressure、J. Phys. Conference Series **273**、2011、012063-1-012063-4、査読有

DOI:10.1088/1742-6596/273/1/012063

③ 渡辺真仁、三宅和正、Quantum Valence Criticality as an Origin of Unconventional Critical Phenomena、Phys. Rev. Lett.、**105**、2010、186403-1-186403-4、査読有

DOI:10.1103/PhysRevLett.105.186403

④ 渡辺真仁、三宅和正、Origin of Drastic Change of Fermi Surface and Transport Anomalies in CeRhIn<sub>5</sub> under Pressure、J. Phys. Soc. Jpn.、**79**、2010、033707-1-033707-4、査読有

DOI: 10.1143/JPSJ.79.033707

⑤ 渡辺真仁、三宅和正、Influence of Quantum Critical Point of First-Order Valence Transition on Ce- and Yb-based Heavy Fermions、Phys. Status. Solidi B、**247**、2010、490-494、査読有

DOI: 10.1002/pssb.200983011

⑥ 渡辺真仁、鶴田篤史、三宅和正、J. Flouquet、Valence Fluctuations Revealed by Magnetic Field and Pressure Scans: Comparison with Experiments in YbXCu<sub>4</sub> (X=In, Ag, Cd) and CeYIn<sub>5</sub> (Y=Ir, Rh)、J. Phys. Soc. Jpn.、**78**、2009、104706-1-104706-13、査読有

DOI: 10.1143/JPSJ.78.104706

⑦ 渡辺真仁、鶴田篤史、三宅和正、J. Flouquet、Magnetic-Field Induced Quantum Critical Points of Valence Transition in Ce- and Yb-Based Heavy Fermions、Physica B、**404**、2009、2942-2945、査読有

DOI:10.1016/j.physb.2009.07.040

[学会発表] (計16件)

①渡辺真仁、Quantum Valence Criticality and Magnetism in Ce- and Yb-Based Heavy-Electron Systems、韓国物理学会、2011年10月20日、釜山（韓国）（招待講演）

②渡辺真仁、価数転移の量子臨界現象とその波及効果、日本物理学会若手奨励賞受賞記念講演会（領域8）、2011年9月21日、富山大学（招待講演）

③渡辺真仁、New Universality Class of Quantum Criticality in Ce- and Yb-based Heavy Fermions、International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2011)、2011年9月2日、ケンブリッジ大学（英国）（招待講演）

④渡辺真仁、New Quantum Criticality in Itinerant-Electron Systems with Strong Local Correlations、International Conference on Ultra Low Temperature 2011 (ULT2011)、2011年8月20日、KAIST（韓国）（招待講演）

⑤渡辺真仁、Interplay of Quantum Valence Criticality and Magnetism in Ce- and Yb-Based Heavy-Electron Systems、SKKU-APCTP International Symposium on Heavy Electrons and Novel Quantum Phases、2011年8月17日、成均館大学（韓国）（招待講演）

⑥渡辺真仁、New Trend of Superconductivity and Quantum Critical Phenomena in Correlated Electron Systems、International Workshop on Advanced Materials and Nanotechnology 2009、2009年11月24日、ハノイ大学（ベトナム）（招待講演）

⑦渡辺真仁、Influence of Quantum Critical Point of First-Order Valence Transition on Ce- and Yb-based Heavy Fermions、International Conference on Quantum Criticality and Novel Phases (QCNP09)、2009年8月3日、マックスプランク研究所（ドイツ）（招待講演）

〔図書〕（計2件）

①渡辺真仁、重い電子系における近藤効果と量子臨界現象、物性研究、Vol. 97、2012、605-636

②渡辺真仁、量子モンテカルロ法における負符号問題とその克服：経路積分繰り込み群法の開発とその発展、素粒子論研究、Vol. 116、2009、87-92

〔その他〕

受賞

渡辺真仁、日本物理学会 第5回若手奨励賞（領域8）受賞、2011年3月25日

JPSJ オンライン—ニュース&コメント  
渡辺真仁、New Frontiers of Quantum Critical End Point、J. Phys. Soc. Jpn. Online — News and Comments、2011年8月10日（JPSJ編集委員長による依頼記事）  
[http://jpsj.ipap.jp/news/jpsj-nc\\_92.htm](http://jpsj.ipap.jp/news/jpsj-nc_92.htm)  
1

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

渡辺 真仁 (WATANABE SHINJI)

九州工業大学・大学工学研究院・准教授

研究者番号：40334346