

# Theory of Magnetic Instabilities and Dynamics in the Kondo Lattice Model

(近藤格子模型における磁気的不安定性と動力学の理論)

東北大学大学院 理学研究科 物理学専攻 大槻純也

希土類元素の  $4f$  電子は、結晶においても比較的局在性が強く、その磁気モーメントに起因した様々な現象を引き起こす。それは、理論的には、縮退した伝導電子の中に配列した局在磁気モーメントの問題である。金属中のひとつの磁気モーメントは、伝導電子の分極により遮蔽され、低温でスピン-重項状態を形成する。一方、伝導電子の分極は伝播し、離れたモーメント間に有効的な交換相互作用をもたらす。前者は近藤効果、後者は RKKY 相互作用と呼ばれ、どちらも伝導電子と  $4f$  電子の混成効果から導かれるものである。それらは互いに競合し、低温で重い電子状態が形成される。

$4f$  電子の電荷の自由度を無視した場合の出発点は、以下の近藤格子模型である：

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^c,$$

ここで、 $\mathbf{S}_i$  は局在スピン、 $\boldsymbol{\sigma}_i^c$  は伝導電子の Pauli スピン演算子である。この模型は、周期 Anderson 模型の局在・強相関極限に対応する。この基本的模型の性質を明らかにすることは、重い電子系の理解を深める上で重要なことである。

格子模型に対するアプローチは大きく 2 つに分けられる。すなわち、系を有限のサイズに制限しそれを対角化によって解く方法と、動的平均場理論に基づき有効的な一不純物問題へ置き換える方法である。前者は主に 1 次元で有効であり、後者の理論は無限次元で厳密となる。1 次元の近藤格子模型は既に精力的に調べられており、その性質はかなりわかっている。それに比べると、高次元の近藤格子模型の数値的研究はほとんどない。本研究の目的は、無限次元の近藤格子模型を数値的に高い精度で解き、その性質を定量的に明らかにすることである。そのために、(1) 動的平均場理論の枠組みで局在スピンの空間相関の表式を導き、(2) 数値的に厳密な有効不純物問題の解法を開発する。

局在模型に対する動的平均場理論

近藤格子模型では、 $4f$  電子の電荷の自由度が消去されているため、 $4f$  電子に対しては Green 関数が定義できない。そこで、動的平均場理論の全ての方程式を、不純物  $t$  行列で書き直すことにより、強相関極限へ適用可能にした。

常磁性状態の不安定性を議論するためには、二体相関関数が必要である。本研究では、局在スピンの相関関数を扱うために、一粒子 Green 関数において定義される  $t$  行列を二体 Green 関数へと拡張した。スピン相関の情報は、二体  $t$  行列に高振動数極限として含まれる。二体  $t$  行列を導入することにより、近藤格子模型のスピン相関を周期 Anderson 模型と同じ枠組みで扱うことが可能となり、動的平均場理論に基づいて空間相関の表式を導出した。

連続時間量子モンテカルロ法 (CT-QMC)

実際に動的平均場理論の枠組みで物理量を計算するためには、有効不純物問題を解く必要がある。本研究では、近年開発された連続時間量子モンテカルロ法 (CT-QMC) を、近藤格子模型へ拡張した。この手法は、通常の量子モンテカルロ法で用いられている Trotter 分解を用いないため定式化は厳密で、また、負符号問題はない。したがって、得られる物理量は統計誤差の範囲で厳密である。これにより、近藤模型の動的物理量の高い精度での計算が可能となった。

まず、CT-QMC を用いて、一不純物模型における各種 Fermi 液体関係式を調べた。その結果、バンド幅  $D$  が有限の場合、あるいは  $J/D$  が有限の場合には、帯磁率の実部と虚部を結ぶ Korrington-Shiba の関係式は一般には満たされないということを明らかにした。一方、

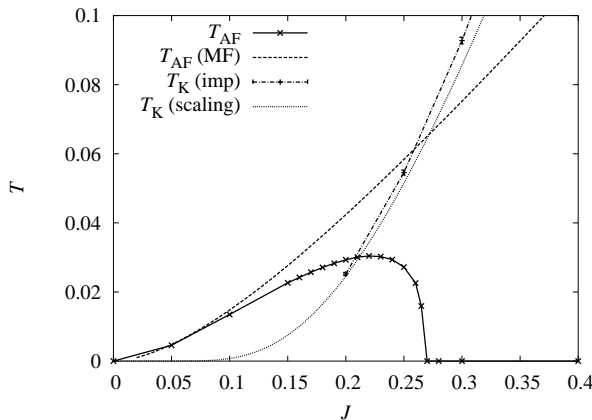


図 1: ハーフ・フィリングにおける無限次元近藤格子模型の反強磁性転移温度  $T_{AF}$ 。  $T_{AF}$  は平均場近似による転移温度。  $T_K^{(imp)}$  及び  $T_K^{(scaling)}$  は、それぞれ低温帯磁率及びスケール理論により見積もった、不純物模型における近藤温度。

局在電子数と一粒子励起に関する Friedel の総和則は、高い精度で満たされていることを確認した。

#### 近藤格子模型の基底状態相図

以上の手法を用いて、無限次元超立方格子の計算を行った。超立方格子のフェルミ面は、任意の次元でハーフ・フィリングにおいて完全なネスティングの性質を持ち、それによる不安定性が期待される。局在電子の帯磁率、及び伝導電子の電荷・スピン感受率の発散を調べることにより、転移温度を決定した。

図 1 はハーフ・フィリングにおける反強磁性転移温度  $T_{AF}$  の  $J$  依存性である。弱結合領域では、RKKY 相互作用による反強磁性転移がおり、その転移温度は平均場近似の見積もりと一致する。一方、 $J$  が大きくなると、近藤効果により転移温度が抑えられ、臨界値  $J_c/D = 0.27$  よりも強結合領域では常磁性状態となる。この臨界値は、RKKY 相互作用と近藤温度の比較により見積もられる値とおよそ一致しており、ハーフ・フィリングにおいて、いわゆる Doniach の描像の妥当性が数値的に確かめられたといえる。

同様の方法で、任意の伝導電子数における相関関数の発散を調べた。図 2 が得られた相図である。低密度キャリア領域で強磁性転移が見つかったが、これは RKKY 相互作用から期待される秩序である。ただし、強磁性相は近藤温度が十分大きい強相関領域まで広がってお

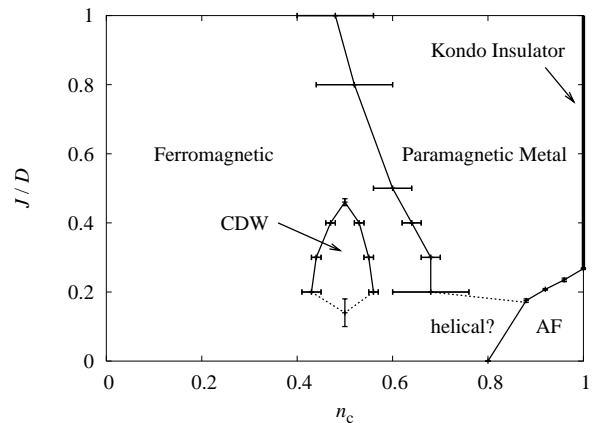


図 2: 無限次元近藤格子模型の基底状態相図。  $n_c$  はサイト当りの伝導電子数。伝導電子の状態密度は  $\rho(\epsilon) = D^{-1} \sqrt{2/\pi} \exp(-2\epsilon^2/D^2)$  で与えられる。

り、図の範囲では常磁性相との境界は見られなかった。したがって、ハーフ・フィリングから離れた領域では、Doniach の描像は成り立たないといえる。これは、伝導電子の数が少ないために、全ての局在スピンを遮蔽することができないことに起因する。

強磁性・反強磁性のほかに、1/4 フィリングにおいて、伝導電子の電荷感受率の発散、すなわち電荷密度波 (CDW) 転移が見つかった。この転移は、近藤一重項によるエネルギー利得を大きくするために起こると考えられ、新しい機構の CDW 転移である。CDW 相が強磁性相に囲まれていることからわかるように、局在スピン間には強磁性相関が存在する。したがって、基底状態では、CDW 状態に加えて局在スピンの強磁性状態が実現することが期待される。

以上のように、本研究で無限次元の近藤格子模型の全体像が明らかになった。これにより、1次元と無限次元の両極端を押さえられたことになる。実際の2次元・3次元系の理解のために、動的平均場理論を超えて、有限次元における空間的揺らぎの効果を取り込むことが次の課題である。

#### 発表論文

“Continuous-Time Quantum Monte Carlo Method for the Coqblin-Schrieffer Model”

J. Otsuki, H. Kusunose, P. Werner and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 114707-1-11.

他 9 編