博士(理 学) 松 本 尚 之

学 位 論 文 題 名

Kondo lattice model in infinite dimensions

(無限次元近藤格子模型)

学位論文内容の要旨

希土類やアクチナイドのイオンを含むある種の合金の電子状態を表す言葉として「重い電子系」と言う言葉が使われる。低温でのこの系の振舞いは、定性的には通常の金属と同じで、フェルミ液体的である。比熱は温度に比例し、帯磁率は温度依存性の弱いパウリ常磁性的となる。ただし、例えば、比熱の比例係数の大きさは、通常の金属に比べて 100 ～ 1000 倍大きい。このことは電子の有効質量が、通常の金属に比べて 100 ～ 1000 倍重いことを意味する。高温ではこのフェルミ液体的な振舞いはなくなる。例えば、帯磁率はキュリー・ワイス則に従うようになる。高温では、通常の有効質量を持つ電子と局在スピンという描像が当てはまる。

「重い電子系」を記述するモデルとして、この論文で扱う近藤格子模型がある。このモデルでは、各サイトに存在する局在スピンと、それらと交換相互作用で結合する伝導電子の集まりとして系を記述する。近藤格子模型では、局在性の強い電子を局在スピンとして扱っているので、低温のフェルミ液体をいかに記述するのかが一つの問題である。例えば、近藤格子模型でのフェルミ面総和則がどうなっているのか、というのは長い間論争になっている重要な問題である。Luttinger の理論によれば、解析接続が妥当な限り、フェルミ面によって囲まれる部分の体積は系の全電子数によってきまり電子間の相互作用にはよらない。近藤格子模型の局在スピンは電子相関により電荷の揺らぎが抑えられた電子状態を表しているのであるから、近藤格子模型のフェルミ面は局在スピンの数も含めて決まる「大きな」フェルミ面を持つと考えることができる。最近の変分法等の理論もこれを支持する。一方、フェルミ面というのは動き回る

電子の持つ特性であるから、局在スピンからの寄与のない「小さな」フェルミ面であるという主張もある。最近の $CeRu_2Si_2$ のドファース・ファンアルフェン効果に関する実験は、この「小さな」フェルミ面の考え方を示唆している。

近藤格子模型 については様々な研究が行われているが、2・3次元系について近似なしに得られた結果は少ない。このような状況は 近藤格子模型 に限らず強相関電子系一般に言えることである。従って現時点では、意味がわかりやすく、一貫性のある近似が望まれる。最近 Metzner と Vollhardt によって、空間次元無限大での格子フェルミオン模型が導入された。さらにその模型にもとづいて 1/d 展開法が開発された。ここで d は空間次元数である。この方法は 1/d を展開パラメーターとしているので、その零次項を考えると空間次元無限大で厳密となる解が得られる。1/d 展開法は強相関電子系を扱う一つの有力な手法である。実際3次元系に対する数値計算結果は 1/d の最低次近似である無限次元系の解に近い事が知られている。したがって無限次元系を考えることで有限次元系について有力な情報が得られるものと期待できる。

この 1/d 展開法を応用するには、グリーン関数を摂動論を使って取り扱うのが一つのやり方である。電子の自己エネルギーのダイアグラムでサイト対角的なものだけをすべて拾うと、1/d の零次項をすべて集める。この近似を一サイト近似と呼ぶ。Ohkawa によって一サイト近似でハバード模型、あるいは周期的アンダーソン模型を解く問題が、アンダーソン模型を条件付きで解く問題に帰着されることが示された。この取り扱いの利点は、アンダーソン模型が現在では解けてしまっている事にある。アンダーソン模型について開発された手法、またその手法を用いて得られている様々な結果、等をそのまま利用することができる。

この論文では、上記の手法を無限次元近藤格子模型に応用する。無限次元近藤格子模型の解を得るためには一サイト近似 を考えればよい。その結果、無限次元近藤格子模型を解く問題を s-d 模型を条件つきで解く問題に帰着することができる。さらに s-d 模型とアンダーソン模型が Shrieffer-Wolff 変換でつながっていることを利用して、問題をアンダーソン模型を解く問題にまで帰着させることができる。

具体的には以下の３つの問題を取り扱った。

（１）フェルミ面総和則

フェルミ面総和則について調べた。局在スピンの数も含めて決まる「大きな」フェルミ面が得られた。近藤格子模型では、局在スピンと伝導電子が各サイトで一重項を形成することにより、重い準粒子バンドが形成されると考えられている。「大きな」フェルミ面は、この物理像で理解できる。$CeRu_2Si_2$ の実験では一部の重い電子のフェルミ面が観測されていない可能性がある。より詳細な実験が望まれる。

（２）近藤絶縁体の安定性

フェルミ面総和則により、伝導電子バンドが一枚で伝導電子の数が格子点当り１個、すなわち半分詰まった場合、系は絶縁体になることが示された。この絶縁体の安定性を議論した。一サイト近似で帰着される s-d 模型での問題は、絶縁体中の近藤効果の問題とは異なり、基底状態は常に一重項である。最近発見された CeNiSn 等の近藤絶縁体と呼ばれる一群の系の安定性についての物理機構を与えた。

（３）近藤絶縁体の低エネルギ励起

最近、高温超伝導機構の理論の一つに刺激されスピン・電荷分離と言う考えが注目を浴びている。事実、一次元近藤格子絶縁体でスピン・電荷分離が実現しているという、少数系に対する数値的対角化の結果がある。この問題意識から、無限次元近藤絶縁体の低エネルギの電荷励起とスピン励起を調べた。いずれの励起もギャップを持ち、その大きさはほぼ等しい。この結果は無限次元系での近藤絶縁体ではスピン・電荷分離は起きていないことを示唆する。無限次元の解を出発点に 1/d の摂動が使える範囲では、この結果は正しい。２・３次元でどうなっているかは興味ある将来の問題であるが、他の物理量からの類推からは少なくとも３次元では、スピン・電荷分離が起きていない事が類推される。

学位論文審査の要旨

主　査　教　授　大　川　房　義
副　査　教　授　和　田　　宏
副　査　助教授　榊　原　俊　郎
副　査　助教授　根　本　幸　児
副　査　助教授　北　　孝　文

学位論文題名

Kondo lattice model in infinite dimensions

（無限次元近藤格子模型）

希土類原子の4f電子とアクチナイド類原子の5f電子は局在性が強く、強相関効果の最も強い電子である。希土類合金とアクチナイド類合金における強相関電子系の問題は、「重い電子系」の問題として近年活発に研究が進んでいる。強相関電子はその強いクーロン斥力のため電荷揺動が抑えられる。電荷揺動が抑えられた極限では、強相関電子はスピンの自由度しか持たない。このような強相関電子系の一つの重要な有効ハミルトニアンとして近藤格子模型がある。この模型では強相関電子のスピン自由度を表す局在スピンが各格子点にあり、それと反強磁性的に結合する伝導電子がある。強相関電子を局在スピンで書いてしまうと、それはもはやフェルミ粒子でない。この模型においてフェルミ面で囲まれた体積は伝導電子のみで決まる「小さなフェルミ面」なのか、それともフェルミ粒子でなくかつ動けない局在スピンの数も含めて決まる「大きなフェルミ面」なのかどうかが、フェルミ面総和則の問題として「重い電子系」で長い間論争なっている問題である。また、「重い電子系」ばかりでなく銅酸化物系での高温超伝導の機構に間連した問題としても論争になっている問題である。

フェルミ面総和則とは、フェルミ面で囲まれた波数空間の体積は全電子数によってのみ決まり、電子間の相互作用に依らないという「定理」である。この「定理」はランダウの現象論的フェルミ液体論においては仮定である。その後Luttingerにより微視的に証明されている。ただしこの証明には、相互作用の無いときから断熱的に相互作用を入れていったとき系に不連続な変化は起きないという「解析接続」が仮定されている。「解析接続」が電荷揺動が抑えられた極限でも使えればフェルミ面総和則から近藤格子のフェルミ面は

「大きなフェルミ面」であると議論できる。

この問題に対して、申請者は無限大次元模型をとり理論的検討を行った。無限大次元では単一サイト近似が厳密になることは既によく知られている。この単一サイト近似はワイスの分子場の拡張であるが、ワイスの静的分子場とは異なり「動的な分子場効果」として取り込む必要がある。申請者は近藤格子模型に対する単一サイト近似はs-d模型を解く問題に帰着できることを示した。さらにs-d模型がアンダーソン模型にSchrieffer-wolff変換で写像できることはよく知られている。アンダーソン模型については既によく理解されている。たとえば相互作用が有限なかぎりいかに大きくとも相互作用のないときからの「解析接続」が妥当であることは示されている。アンダーソン模型についての結果を使い、フェルミ面総和則を証明した。すなわち、局在スピンの数を含めた電子数により決まる「大きなフェルミ面」であることを示した。

この学位論文以前になされた研究、1次元近藤格子模型で反強磁性結合が無限大の場合の研究、また2次元系での有限サイズの系にたいする変分理論等も同じ結論を得ている。これらの低次元での結果と、この学位請求論文の無限大次元の結果とをあわせ、一般の次元でも「大きなフェルミ面」であることが推論される。

伝導電子バンドが1枚で伝導電子数が単位胞当たり1個の場合、フェルミ面総和則からの理論的帰結としてフェルミ面で囲まれた体積は第一ブリリアン域と同じであることを示した。すなわちフェルミ面の消えた絶縁体である。この絶縁体は最近発見された常磁性的な近藤絶縁体と呼ばれる一群のモデルの可能性があることを指摘した。するとひとつの問題が生じる。近藤効果において局在スピンが遮蔽されて常磁性的になるためには、フェルミ面の存在が不可欠であり、単純に考えれば提案されている近藤絶縁体は安定でないように見える。この点に関して、申請者は写像されたs-d模型は絶縁体中の局在スピンの問題でなく、局在スピンとの相互作用を無視した時の伝導電子の状態密度としてフェルミ準位上にデルタ関数的なものを持つ特異的なものであることを示した。このデルタ関数的な状態密度が系を常磁性的に安定化する効果がある。単一サイト近似は回りの強相関電子の効果をいわば「分子場」として取り込む近似であるので、この特異的なフェルミ準位上のデルタ関数的状態密度は回りの局在スピンとの相互作用の効果を表している。ただし、サイト間の交換相互作用によって引き起こされる磁気的不安定性については、この論文では議論されていない。近藤絶縁体の磁気的安定性については今後の検討課題である。

さらに応用として、近藤絶縁体の低エネルギの電荷励起とスピン励起を考察し、二種類の励起エネルギはほぼ等しいことを示した。この結果は既に報告されている1次元近藤格子模型に対する結果と全く異なる。1次元近藤格子模型で推論される電荷・スピン分離は無限大次元ではおきていないと推論できるとしている。

以上、申請された学位論文は、無限大次元近藤格子模型についての新しく重要な理論結果を報告していると判断でき、高く評価できる。審査員一同は博士（理学）の資格が十分にあると判定した。