

# 論文内容要旨

(NO. 1)

氏名	若目田 寛	提出年	平成 27 年
学位論文の 題 目	一次元 f 電子系における新しい量子状態の研究		

## 論文目次

### 第 1 章 イントロダクション

1.1 はじめに	5
1.2 近藤格子模型と周期アンダーソン模型の歴史	6
1.3 一次元近藤格子模型の基底状態	11
1.4 古典的な一次元近藤格子模型	17
1.5 一次元周期アンダーソン模型の基底状態	18
1.6 研究目的	21

### 第 2 章 密度行列くりこみ群と SineSquareDeformation

2.1 密度行列くりこみ群	23
2.2 SineSquareDeformation	24
2.2.1 Tightbinding 模型における SSD	25
2.2.2 近藤格子模型における SSD	26
2.2.3 周期アンダーソン模型における SSD	28

### 第 3 章 一次元近藤格子模型の低電子密度領域

3.1 局在スピンの構造の波数の J 依存性	33
3.2 局在スピンの構造の波数の電子密度の依存性	40
3.3 絶縁相	45
3.4 複合粒子描像の直接的な確認	50
3.5 古典的な近藤格子模型	51
3.6 常磁性金属相と強磁性金属相の境界	53
3.7 一次元近藤格子模型の低電子密度領域の相図	64

### 第 4 章 一次元近藤格子模型の低電子密度領域

4.1 一次元周期アンダーソン模型の計算のセットアップ	65
4.2 $n_c = 1/3$ における絶縁相	67
4.3 複合粒子金属相	68

### 第 5 章 結論

5.1 一次元近藤格子模型	71
5.2 一次元周期アンダーソン模型	71
参考文献	75

## 要旨

### 研究背景

f 電子系は低温において電子の有効質量が1000倍になる等の多彩な現象が実現する系である。その起源は伝導電子と局在電子の相互作用であると考えられている。この系を記述する理論模型として周期アンダーソン模型とその強相関極限の近藤格子模型があり、従来から研究がなされてきた。近藤格子模型において主要な役割を果たすものが近藤効果とRKKY相互作用である。近藤効果は伝導電子と局在電子がシングレットを組み局在スピンを遮蔽する。一方で、RKKY相互作用は局在電子同士が伝導電子を媒介として相互作用をすることで局在スピンを顕在化させる。両者は正反対の性質を持っており、特にJの中間領域ではこの両者が競合し、絶対零度において量子相転移が存在すると考えられている。この量子相転移近傍の電子状態を調べるため、特にRKKY相互作用からくる局在スピンの長距離相関の効果を取り入れることができる一次元の研究がこれまで盛んに行われてきた。

一次元近藤格子模型の基底状態は電子密度  $n_c$  と相互作用の大きさ  $J/t$  の2つパラメータによって決まり、近藤絶縁相、強磁性金属相、常磁性金属相の3つの相が存在することがわかっている。このうち近藤絶縁相と強磁性金属相についてはその物理的な描像が明らかになっているが、常磁性金属相についてはその詳細がよくわかっていない。従来はフェルミ流体の一次元版である朝永-ラッティンジャー流体が実現すると考えられ、その低エネルギー励起を特徴づけるフェルミ波数  $k_F$  がどの描像で記述されるかということが研究された。フェルミの波数  $k_F$  は系の電子密度によって決まるが、近藤格子模型においては電子密度の考え方が2通りある。小さなフェルミ面という近藤格子模型の  $J=0$  の描像に整合する伝導電子のみがフェルミ面に寄与するという考え方、もうひとつは大きなフェルミ面という周期アンダーソン模型の  $U=0$  の極限と整合する考え方である。この2つのフェルミ面はいずれも相互作用のない自由電子における描像であるが、Luttinger の定理から相互作用があっても相転移がない限り  $k_F$  はその値を保つことが示されている。したがって近藤格子模型の常磁性金属相において、大きなフェルミ面か小さなフェルミ面のどちらかが実現すると考えられる。しかし、局在スピンの構造の波数  $k_S$  からフェルミ波数  $k_F$  を見積もるという研究の結果は  $J \sim t$  となるような領域で、局在スピンの構造の波数  $k_S$  が大きなフェルミ面描像とも小さなフェルミ面描像とも異なる、J に対して連続的に変化するような振る舞いを示した。

### 目的

本研究の目的は、従来あまり調べられていなかった一次元近藤格子模型のクォータフィリング以下の常磁性相を包括的に調べ、近藤効果とRKKY相互作用が拮抗する領域で見られる上記のような低エネルギー素励起の特異な振る舞いを理解することである。

## 手法

境界条件として Sine Square Deformation(SSD)を使用したハミルトニアンを密度行列くりこみ群(DMRG)を使って基底状態を求める。SSD は系の端ほどエネルギースケールが小さくなるような境界条件である。それによって系の端からくる有限サイズ効果を低減するほか、通常  $1/L$  で離散化される電子密度などの物理量を連続的に変化させることができる。この手法によって電子密度と局在スピン構造の波数の関係を従来よりも細かく調べられる。

## 一次元近藤格子模型の低電子密度領域

まず伝導電子密度  $n_c$  を固定して  $J$  局在スピンの構造の波数  $k_S$  の関係を調べた。まず  $J$  が小さい領域では、小さなフェルミ面描像によって説明できる  $k_S$  が実現する。その  $J$  を大きくしていくと  $k_S$  が連続的に小さくなり、そのまま強磁性相に振る舞いを確認した。が、 $J$  を大きくするにつれて小さなフェルミ面から波数  $k_S$  が連続的に小さくなるが、各  $J$  において局在スピンの構造の波数と電子密度の関係が、 $k_S=\pi(1-n_c)/2$ ,  $k_S=\pi(1-n_c)/3$  と表される新しい関係式が成り立つ領域が存在する。この関係式はそれぞれ伝導電子と局在電子が 1:3、1:4 のかたまりとなる複合粒子描像によって説明できる。またこれらの準粒子が隙間なく並ぶ電子密度  $n_c=1/3, 1/4$  において絶縁相の存在を新たに発見し、この描像との整合性が確認できた。また局在スピンの構造の波数が  $J$  に対し連続的に変化する振る舞いを古典的近藤格子模型に基底状態におけるらせん磁化の波数と比較し、定性的に一致することを確認した。それによって先行研究で示された局在スピンの波数の  $J$  に依る連続的な変化は古典的ならせん磁化によって説明できることを明らかにした。

以上の結果を踏まえて一次元近藤格子模型の低電子密度領域における基底状態の相図の詳細を明らかにした。

## 周期アンダーソン模型における複合粒子描像

一次元近藤格子模型において実現する複合粒子描像による金属相と絶縁相が、周期アンダーソン模型においても実現するかを確かめた。

まず複合粒子絶縁相について  $1/3$  フィリングにおいて絶縁相が実現し、その時の電子状態が近藤格子模型における絶縁相と似たものであることを確かめた。複合粒子金属相について、 $J=8V^2/U$  を固定して  $U$  を小さくしていくと、局在スピンの相関の波数は徐々に小さなフェルミ面のものに近づく。しかし  $U \sim t$  程度の弱相関領域まで、複合粒子金属相が成り立つと考えられる局在スピンの相関の波数が確認できた。

## 結論

本研究によって一次元近藤格子模型において伝導電子と局在電子が 1:3、1:4 の組となる複合粒子描像によって説明できる絶縁相、金属相の存在が初めて明らかになった。また、従来から指摘されていた局在スピン構造の波数  $k_S$  の相互作用  $J$  による連続的な変化が古典的な描像で理解でき

ることを示し、それらを踏まえて、低電子密度領域の相図の詳細を明らかにした。また一次元アンダーソン模型において1:3複合粒子描像による絶縁相金属相の存在を確かめ、複合粒子金属相が  $U \sim t$  程度の弱相関領域でも実現することを明らかにし、複合粒子描像の一般性を確認した。

#### 論文審査の結果の要旨

固体物質中の f 電子は一般に強い局在性により磁気モーメントをもつが、伝導電子との相互作用が強く働き近藤効果が生じると、低温で重い電子状態を形成し磁性が消失する。このような系は重い電子系と呼ばれ、その特異な現象を理解するための実験的、理論的研究が蓄積されている。しかしながら、f 電子が周期的に配置された重い電子系の電子状態を理解するためには、伝導電子を介して磁気モーメントが安定化させる RKKY 相互作用の効果を理解する必要があり、近藤効果と RKKY 相互作用の競合の問題を解決する必要がある。本論文の目的は、このような近藤効果と RKKY 相互作用の競合領域における電子状態を数値的に解析することで、局在電子と伝導電子が共存する系で実現する新しい量子多体状態を解明することである。

若目田寛提出の博士論文は、局在電子と伝導電子を含む最も基礎的な模型である一次元近藤格子模型の基底状態を数値的に調べたものである。近藤効果と RKKY 相互作用の競合領域における特異な電子状態を明らかにするために、局在スピンの磁気構造と電荷感受率の電子密度および相互作用依存性を密度行列繰り込み群にエネルギースケールの空間変調を組み合わせた新しい方法を用いて解析し、その結果、複数の正孔が束縛された複合粒子によって理解できる新しい金属相と絶縁相を発見した。さらにより一般的な周期アンダーソン模型を解析することで、この新しい電子状態が電子間斥力の弱い領域まで存在することを明らかにした。

これらの研究は固体中の電子状態に対して新しい知見をもたらし、自立した研究活動を行うに足る高度の研究能力と学識を有することを示した。よって若目田寛提出の論文は博士（理学）の学位論文として合格と認める。