論 文 内 容 要 旨

(NO. 1)

氏　　名	石山　竜平	提出年	平成 27 年
学位論文の 題　　目	一次元近藤格子模型における磁場誘起相転移		

論 文 目 次

第 1 章 背景

1.1 不純物模型. 3
1.2 近藤効果. 4
1.3 RKKY 相互作用. 5
1.4 重い電子系. 6
1.5 周期アンダーソン模型. 7
1.6 近藤格子模型. 9
1.7 1 次元近藤格子模型. 10
1.8 1 次元近藤格子の基底状態の相図. 11
1.9 1 次元近藤格子模型における磁化過程. 14
1.10 研究目的. 20

第 2 章 計算手法

2.1 密度行列繰り込み群法(Density Matrix Renormalization Group) 23
2.2 サイン二乗変形法(Sine-Square-Deformation) とその応用. 27

第 3 章 計算結果

3.1 磁化過程. 31
3.2 磁化分布. 36
3.3 μ と伝導電子密度. 46
3.4 第二強磁性金属相と磁化プラトーの起源について. 54

第 4 章 まとめ

付録 A DMRG のコーディングについて

A.1 Heisenberg model 65
A.2 fermion sign について. 71
A.3 Kondo lattice model 74
A.4 相関関数のとりかた. 77

A.5 計算結果の確認の仕方. 79
A.6 SSD に関する諸計算. 79
参考文献

博 士 論 文 要 旨

背景

近藤効果は非磁性金属中に磁性不純物が存在する場合に生じる効果で,電気抵抗がある温度で最小値をとりその後降温とともに抵抗値が増加する現象である.この現象は 1964 年に近藤淳によって理論的に解明され,その後数値繰り込み群や厳密解によってその本質が伝導電子による局在スピンの遮蔽効果であることが分かった.しかし,磁性不純物の割合が多くなってくると電気抵抗は低温において再び減少するという現象が生じる.このような現象が生じる系は重い電子系と呼ばれ,様々な特異な性質がそこに現れる.これらの系では,局在スピンを遮蔽する近藤効果に加えて,局在スピンを整列させて安定化する RKKY 相互作用も重要になる.しかし,その 2 つをどちらも正しく取り扱う解析は難しい.それは近藤効果は不純物スピンによる局所的な量子多体効果であるが, RKKY 相互作用は不純物スピン間に生じる長距離の相互作用であるために長距離の空間相関を発達させるからである.近藤効果と RKKY 相互作用はどちらも伝導電子と局在スピン間の相互作用から生じる.この相互作用を考慮した最も基礎的な模型が近藤格子模型である.近藤効果と RKKY 相互作用をどちらも等しく扱い,精度の高い計算を行う必要があるが,これが可能なのはほぼ 1 次元の場合に限られる. 1 次元近藤格子模型は重い電子系の基礎的模型として 30 年近く研究されているが,近藤効果と RKKY 相互作用の競合領域の基底状態の特徴はまだ明らかになっていない.この模型の基底状態は近藤相互作用 J の大きさと 1 サイトあたりの平均電子数である伝導電子の電子密度 n_cによって決まる.ホッピングの大きさ t をエネルギーの単位と考え, $t = 1$ とすると, 2 つのパラメータ J / t と n_cによって基底状態の相図が決まる.この模型の基底状態は先行研究により $J >> t$ の領域,また伝導電子の電子密度が低い極限および half-filling の場合などの特定の電子密度の領域についてすでに理解されているが,近年注目されている第二強磁性相や常磁性金属相のような $J \approx t$ の領域の理解は不十分なままである.この領域ではまさに近藤効果と RKKY 相互作用が競合しており,この領域を理解することは,近藤効果と RKKY 相互作用がどちらも重要である重い電子系の理解のために必要と言える.

目的

本研究では,近藤効果と RKKY 相互作用の競合領域である一次元近藤格子模型の第二強磁性相の周辺において磁化過程の解析を行い,第二強磁性相の起源およびその発現に伴う相転移を理解することを目的とする.

手法

密度行列繰り込み群(DMRG)にサイン二乗変形法(SSD)を適用した計算法を用いた.サイン二乗変形法とは,エネルギー定数に局所スケール変換を施すことにより端の効果を抑制する手法である.この手法を用いることにより磁化過程を連続的に解析できるようになり低

磁場領域の解析が可能になった.

結果

磁化過程を示す図の縦軸は伝導電子の磁化と局在スピンの磁化を合わせた合計の磁化の値で $< s^z_{c,i} + S^z_{f,i} > = m$ と表す.横軸は磁場 h の値である. $J/t = 0.7$ において $n_c = 2/3$ ではゼロ磁場からプラトーになっており,基底状態は強磁性になっていることがわかる.この $n_c = 2/3$ から電子密度をずらすとプラトーは 2 段に分かれる.例として $n_c = 5/8$ の磁化過程のグラフを載せた.上段に出ているプラトーは,近藤効果によって理解できるプラトーである.下段に出てくるプラトーは, 本研究によって新たに明らかにされた m_2の式に対応するプラトーである.プラトー磁化が 0 になる点では無磁場の状態でスピンギャップが存在することを確認している.このスピンギャップが存在している $n_c = 1/2,3/4$ では電荷ギャップも存在していることを確認した.加えて, $n_c = 2/3$ において第二強磁性相に対応している領域で電荷ギャップが存在していることが分かった.この第二強磁性相およびその絶縁相の出現機構については以下のようにして理解することが可能である. $n_c = 2/3$ は近藤ブロック(K)と RKKY ブロック(R)が 1:1 で交互に並ぶことにより安定化し, $n_c = 3/4$ における K:R:K:R=1:1:3:1 の強磁性安定相と接続することで第二強磁性相が高占有率側に広がる一方,低占有率側では,強磁性を安定化する K:R の組み合わせがないために $n_c = 2/3$ を境に強磁性相が消失する. $n_c = 2/3$ において J/t を小さくしていくと近藤効果は弱くなり, K:R = 1:1 の安定性は低下し,常磁性の金属状態に転移する.しかし,この常磁性領域では磁場をかけると 1:1 の強磁性状態の安定性が回復し,磁化プラトー状態が形成されるとともに電荷ギャップが開く.しかし,磁場をさらに加えると,今度は近藤効果自身が磁場によって阻害され,プラトーが壊れるとともに電荷ギャップは再び閉じ金属状態になる.このように $n_c = 2/3$ において磁場誘起の金属絶縁体金属転移があることが明らかになった.

まとめ

$n_c = 2/3$ という電子密度は第二強磁性相に移り変わる節目の電子密度であり, J が小さい領域において磁場によって誘起される金属絶縁体金属転移があることがわかった.

第二強磁性相や電荷ギャップの存在している電子密度においては近藤効果と RKKY 相互作用が協調して秩序化し,磁化プラトーが存在する新しい安定相が形成されることが明らかになった.

論文審査の結果の要旨

Ce 化合物を代表とする f 電子をもつ物質では、f 電子と伝導電子との相互作用により近藤効果が生じ、電子の有効質量が極めて大きい重い電子系としての特徴を示すものが多く現れる。このような系では f 電子の持つ粒子性と伝導電子の波動性が絡み合うことで、低温で様々な相転移が生じ、その起源を探る実験及び理論研究が長く続けられてきた。しかしながら、その解明のためには、局在電子の磁気モーメントが低温で消失する近藤効果と、その効果と相反して磁気モーメントの安定化と磁気秩序の形成を促す RKKY 相互作用との競合という極めて難しい量子多体問題を解く必要があり、その完全な理解は未だに得られていない。このような近藤効果と RKKY 相互作用の競合の問題を明らかにすることは、局在電子と伝導電子が共存する系の振る舞いを理解する上で大きな意義がある。

石山竜平提出の博士論文は、この近藤効果と RKKY 相互作用の競合が生じる最も基礎的な模型である一次元近藤格子模型の磁場応答を調べたもので、その特異な磁場依存性から近藤効果と RKKY 相互作用の競合の問題を論じている。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計算法を用いて解析することで、常磁性相の中に現れる新しい強磁性相の発現機構と電荷およびスピン励起にギャップがある複数の安定相を発見し、さらに、電子占有率に依存する多数の磁化プラトーの存在、および複数の磁場誘起相転移を近藤効果と RKKY 相互作用の協調現象という新しい視点で論じ説明した。

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。よって石山竜平提出の論文は博士（理学）の学位論文として合格と認める。