

# 学位申請論文公開講演会

日 時：2008 年 1 月 22 日 (火) 15:30 ~

申請者：杉林 卓

場 所：理学館 506 講義室

題 目：Valence Instability in an Extended Periodic Anderson Model

(拡張周期アンダーソンモデルにおける価数不安定性)

(主論文の要旨)

多くのセリウム化合物の超伝導の起源は、反強磁性スピン揺らぎを媒介していると考えられている。しかし、 $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$ ,  $\text{CeCu}_2\text{Ge}_2$  や  $\text{CeRh}_{1-x}\text{Ir}_x\text{In}_5$  では、単に反強磁性スピン揺らぎだけで超伝導が起こっているとは考えにくい。その理由として、例えば、超伝導転移温度 ( $T_c$ ) が圧力に対して非単調なふるまいを示していることや、反強磁性スピン揺らぎが弱くなるにつれて超伝導転移温度が上昇し、最大値をもつことが実験的に示されていることが挙げられる。また、 $T_c$  が最大値をもつ周辺で、臨界的なふるまいを示すことが熱力学・転移特性の実験から示されている。

理論的には、 $T_c$  が最大値になる周辺の超伝導は価数揺らぎによってもたらされる可能性が提唱されている。すなわち、 $f$  電子と伝導電子間斥力  $U_{cf}$  を加えた周期アンダーソンモデル (拡張 PAM) の研究の結果、 $U_{cf}$  によって価数の揺らぎが増強され、超伝導が発現することが提唱されている。その提唱に従って、密度行列繰り込み群 (DMRG) を用いた、1 次元における拡張 PAM の価数揺らぎの研究が行われた。その結果、(1 次元において) 実際に価数揺らぎの発散が見出された。しかしながら、価数揺らぎの発散が生じるパラメータの値はやや現実的でない領域にあるように思われる。Ce 化合物での価数揺らぎの増大のシナリオを更に確かめるためには、より大きい次元での研究が必要である。

本研究では動的平均場理論 (DMFT) による拡張 PAM と、更に  $f$  電子軌道の縮退を考慮した拡張 PAM の計算を行った。DMFT は強相関電子系の解析に強力な手法の一つであると同時に、1 次元における DMRG の計算と相補的なアプローチである (DMFT は高次元極限で正確になる)。

本研究では  $c$ - $f$  混成項の波数依存性を簡単のため無視した。以下に結果を示す。

(1) 拡張 PAM での価数転移: 総電子数を固定して、圧力に対応するパラメータである  $f$  電子レベル ( $\epsilon_f$ ) を変化させた。クーロン相互作用  $U$  をバンド幅より十分大きい値に選び  $U_{cf}$  を様々な値にして、 $f$  電子数の  $\epsilon_f$  依存性を調べた。 $U_{cf}$  を考慮しないとき、 $f$  電子数は滑らかに減少し、不連続な価数転移は見られない。 $U_{cf}$  を大きくしていくと、 $f$  電子数は急激な減少を示し、価数揺らぎは増大する。そして、 $U_{cf}$  がバンド幅より大きいかつ  $c$ - $f$  混成項が小さいとき、 $f$  電子数の価数のとびが見られる。更に、 $f$  電子数の  $\epsilon_f$  に対する変化から、価数転移の量子臨界点の位置を決めた。結果は、DMRG 計算の結果とよく一致する。また、この結果は、 $c$ - $f$  混成項が小さいほど価数揺らぎが増強されることも示している。

(2) 縮退のある拡張 PAM での価数転移: 軌道縮退のある拡張 PAM では、通常の周期アンダーソンモデルと同様に実効的に  $c$ - $f$  混成項が増強され、価数転移は縮退のない場合に比べ抑制される傾向にあることが確かめられた。しかし、 $c$ - $f$  混成項が十分小さければ軌道縮退がある場合でも価数転移が起こることが見出された。このことは、現実の物質では必ず存在する  $c$ - $f$  混成項の角度依存性が重要な役割を演じる可能性を示唆する。