

論文の内容の要旨

Slave Boson Analysis on Multi-Orbital Periodic Anderson Model
(スレーブボソン法を用いた多軌道アンダーソンモデルの解析)

氏名 檜原 太一

U や Pr を含む重い電子系化合物の中には、一般的な重い電子系の振る舞いを説明したドニアック相図に従わない物性が現れることが知られている。その原因として、U や Pr では f 軌道に電子が 2 つ配置された系(f^2 電子配置系)であることが指摘されている。 f^2 電子配置系では、f 軌道の多軌道性を考慮しなければならない事や、結晶場基底状態がクラマースの定理を満たさないために非磁性基底状態が現れることが、一般的な重い電子系とは異なっている。実験的にも UPt₃ や UBe₁₃ で奇パリティ超伝導状態や磁場に鈍感な非フェルミ液体などの興味ある物性が報告されている。 f^2 電子配置の特性を踏まえた微視的な模型に基づく理論解析により、これらの物性の起源を明らかにすることは、重い電子系の研究における長年の課題である。

この系を理論的に研究する際の問題点として、多軌道周期アンダーソン模型に基づく解析手法が限られているということが挙げられる。従来研究されてきた模型は主に、近藤格子模型や不純物アンダーソン模型である。これらの模型では、格子系での f 電子の遍歴性を議論することができないが、f 電子の遍歴性は重い電子状態や超伝導状態を理解するうえで不可欠である。

そのような状況にある中で本研究は、近年開発された一般的な多軌道系に適用できるスレーブボソン法である、回転不変スレーブボソン(RISB)法の鞍点近似を用いることで、多軌道周期アンダーソン模型の解析を行った。この手法は、グッツウィラー近似と等価である

ことが証明されている。また、現在はまだ手法として確立してはいないが、ガウシアン揺らぎを取り込むことにより、準粒子間相互作用など鞍点近似を超えた解析が可能になることが期待されている。RISB法は主に多軌道ハバード模型に適用されてきた。本論文では、この手法が f^2 電子配置重い電子系の解析をするうえで有用であることを提案した。

本論文では2種類の非磁性一重項基底状態を有する模型に対して、RISB法に基づく解析を行った。一つは立方晶での Γ_1 一重項基底である。この模型は UBe_{13} での磁場に鈍感な非フェルミ液体を説明できると考えられている。もう一つは六方晶での Γ_4 一重項基底であり、 UPt_3 の基底状態がこれだと考えられている。

本論文の2章において、それぞれの模型を導出している。具体的には7軌道ある f 軌道を、結晶場効果、スピン軌道相互作用、電子間相互作用を考慮しながら有効的な3軌道模型の導出を行い、その3軌道模型と伝導電子との混成を考えた3軌道周期アンダーソン模型を構成した。立方晶系ではスピン軌道相互作用無限大極限を考えて $j=5/2$ からくる3軌道模型(Γ_7 , Γ_{81} , Γ_{82} の3軌道)を構築した。一方、六方晶系で同じ近似に基づいて解析を行うと、 Γ_4 基底が常に Γ_3 基底と縮退してしまうという問題が生ずる。それを回避するために六方晶系では、有限だが大きいスピン軌道相互作用の効果を検討し、 $j=7/2$ の寄与が含まれた有効3軌道模型(Γ_7 , Γ_8 , Γ_9 の3軌道)を構築した。

本論文の4章において、上述した二つの模型をRISB法の鞍点近似に基づいて解析した結果を議論している。結果として、二つの模型はどちらも非磁性一重項基底であるにもかかわらず、その基底が f 電子の遍歴性に与える効果は著しく異なるものであることを明らかにした。

立方晶系の Γ_1 基底では、結晶場一重項と二種類の遍歴的な電子状態が存在し、それぞれ一次相転移を示すことが分かった。これらの一次相転移は、有効エネルギー準位の交差によるものと、 f 軌道内での電荷移動によるものの2種類が存在する。本論文で採用したパラメータ領域では、全ての f 軌道で重い電子の形成は見られなかった。

注目すべきこととして、先行研究の不純物アンダーソン模型の数値繰り込み群(NRG)の研究で示唆されていた結晶場三重項基底は、今回の模型では現れないことが分かった。先行研究では多くの結晶場励起状態を無視しているために、人為的な電子状態として結晶場三重項基底が現れたのだと考えている。

一方で六方晶の Γ_4 基底では Γ_7 , Γ_8 の2軌道で重い電子を形成したのち、一次のブリンクマン-ライス転移が現れることを示した。

この二つの非磁性一重項が f 電子の遍歴性に与える影響が異なる原因として、二つの基底の固有状態の違いが挙げられる。即ち、 Γ_1 基底は一つの軌道に電子が2個占有したフォック基底の線形結合で構成されているのに対し、 Γ_4 基底は二つの軌道に電子が1個ずつ占有するフォック基底の線形結合で構成される。この固有状態の違いから、異なる物性が得られたと考えている。

また、六方晶系において、中間価数領域での重い電子形成についても議論を行った。これ

は、UPt₃のf電子数は2.7程度となることが指摘されている為である。この中間価数領域で混成強度の異方性を考慮し、どの軌道で重い電子を形成するか解析を行った。結果として、f²電子配置の基底状態が Γ_4 非磁性一重項である限り、どのような混成であっても Γ_9 軌道は重い準粒子を形成しないこと、 Γ_7 、 Γ_8 軌道は Γ_9 軌道の混成強度が大きいときに重い電子を形成することを明らかにした。

UPt₃の超伝導は大きな比熱のとびを示すことから、重い電子が超伝導を担っていると考えられている。 Γ_9 軌道によって構成されるフェルミ面では、超伝導ギャップは Γ_7 、 Γ_8 軌道との混成によって間接的にギャップが開くにとどまり、結果として小さなギャップしか開かないことが考えられる。