重い電子系概論

(作成日)2008/1/26
物理講義室・改 管理人
のまネコ (量産型)
http://shrcat.blog91.fc2.com/

- 重い電子系とは

アクチノイド系列では、一般に磁性原子が多いと磁気秩序が起こりやすいが、Ce($4f^1$) や Yb($4f^{13}$) を含む合金や金属間化合物では、高密度に磁性原子が存在するにも関わらず低温まで磁気秩序が起こらない。実験的には Ce 化合物において、低温まで磁気秩序を示さず、比熱が大きく有効質量換算で電子が 1000 倍程度も「重くなった」系が発見された。(1975 年 $CeAl_3$) また、重い電子系化合物の中には強磁性体 (磁石) になるものや超伝導 (BCS 理論では説明できない) を示すものがあり現在も研究の対象になっている。

- 重い電子系の名前の由来について

イメージでは、$4f$ 軌道は局在していて広がりを持たない軌道なので、その中にある $4f$ 電子は狭い場所に閉じ込められ、電子間の相互作用がとても大きい状態になり身動きが取りにくくなっていると考えられる。(現在の系の物理を難しくしている原因でもある) 理論ではその状態を

電子間相互作用が強く動きにくい ⇒ 有効量換算で電 子が重くなって動きにくい

という簡単な描像 (電子間相互作用が表に出てこない形) に置き換えて考えるので”重い電子系”と呼ばれている。

冒頭でも述べたが、実験的には比熱が大きいということが有効質量が大きいということに対応している。具体的に説明すると。

$$C_e = \gamma T \quad (\text{電子比熱})$$

$$\gamma = \frac{k_B^2}{3\hbar^2} m^* k_F \quad (m^* : \text{有効質量},\ k_F : \text{Fermi 波数})$$

というように、電子比熱 C_e の係数 γ が有効質量 m^* に比例している。

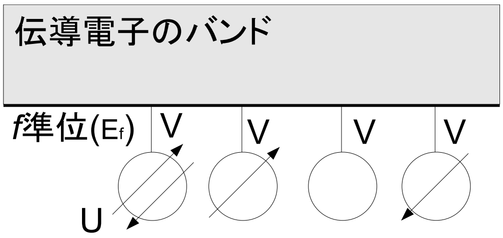
- 重い電子系の理論モデル

次に、重い電子系の理論モデルである周期的 Anderson モデル (PAM) と Kondo 格子モデルを紹介する。

[周期的 Anderson モデル]

$$\mathscr{H}_{And.} = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k,\sigma} + \sum_{k,\sigma} (V_k c^\dagger_{k\sigma} f_{k\sigma} + V_k^* f^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma}) + E_f \sum_{i,\sigma} f^\dagger_{i\sigma} f_{i\sigma} + U \sum_i f^\dagger_{i\uparrow} f_{i\uparrow} f^\dagger_{i\downarrow} f_{i\downarrow}$$

上のハミルトニアンにおいて、$c^\dagger_{k\sigma}(c_{k\sigma}), f^\dagger_{k\sigma}(f_{k\sigma})$ はそれぞれ伝導電子と f 電子の生成 (消滅) 演算子である。周期的 Anderson モデルではこれらが V_k で混成し、同じ原子内の f 電子間には Coulomb 相互作用 U が働く。($f^\dagger_{i\sigma}(f_{i\sigma})$ は i 番目のサイトにおける f 電子の生成 (消滅) 演算子である。)



左図では f 電子と伝導電子の混成エネルギーを V、f 軌道に電子が 2 個入る場合の Coulomb 相互作用を U としている。

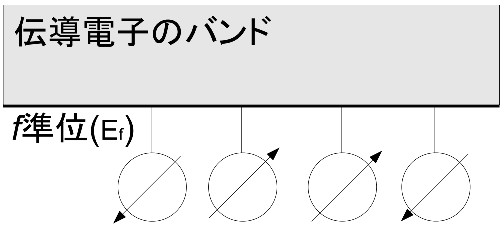
図 1　周期的 Anderson モデルの概念図

もう一つの理論モデルである Kondo 格子モデルは以前に書いた「近藤効果 I」で議論したように Anderson モデルから $s-d$ モデルを導く過程と全く同じで周期的 Anderson モデルより導くことができる。(Kondo 格子モデルは言い換えると周期的 $s-d$ モデルとも言える)

[Kondo 格子モデル]

$$\mathscr{H}_{Kon.} = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} + J_{cf} \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{s}_i \qquad \left[J_{cf} = 2\langle |V|^2 \rangle \left(\frac{1}{E_f + U - \varepsilon_F} + \frac{1}{\varepsilon_F - E_f} \right) \right]$$

上のハミルトニアンにおいて、$\vec{S}_i$ はサイト i における局在した f スピンを表し、$\vec{s}_i$ は同じサイトにおける伝導電子のスピン密度を表している。



左図の f 準位に局在した電子は電荷としての自由度は失っておりスピン自由度のみ有している。

図 2　Kondo 格子モデルの概念図

- 重い電子系に対する理論的アプローチ

相互作用 U が無いときの周期的 Anderson モデル (PAM) は混成バンドを作ることにより完全に解くことができる。

$$E^{\pm}_{k\sigma} = \frac{1}{2}\left[\varepsilon_k + E_f \pm \sqrt{(\varepsilon_k - E_f)^2 + 4V^2} \right] \quad \text{(分散関係)}$$

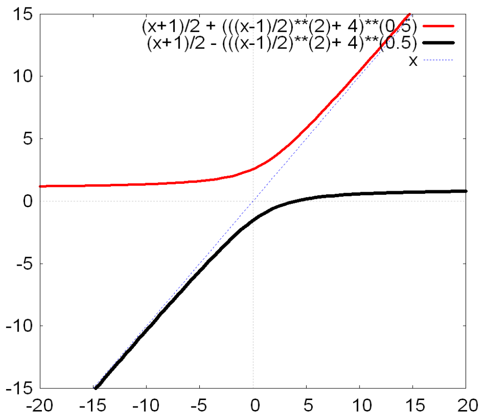


図 3　$U = 0$ における PAM の分散関係

サイト当たりの電子数が 2 個で、下側の混成バンド $E^{-}_{k\sigma}$ が詰まったときが絶縁体で、それ以外のときは Fermi 面が存在する金属状態となる。

相互作用の効果を Hatree-Fock 近似 (一体近似) を超えて議論しようとするのが電子相関の最大のテーマである。問題を扱う理論には色々な手法があるが、ここではその中の一つの「Gutzwiller の変分理論」を紹介する。

[Gutzwiller の変分理論]

現在の系で重要なことは「電子間の二重占有の数」であると考え

$$
\begin{aligned}
|\psi_g\rangle &= P_{n_f} P |\psi_0\rangle \\
&= P_{n_f} \prod_i [1-(1-g)n_{if\uparrow} n_{if\downarrow}] |\psi_0\rangle
\end{aligned}
$$

[P:二重占有を排除する演算子, P_{n_f} : f 電子の数を一定にする演算子]

のような変分関数を定義して系の基底状態を探る。(ただし、g は 0〜1 まで変化するパラメータである。)

また、上の内容を考えることは以下の有効ハミルトニアンを考えることに対応しており

[有効ハミルトニアン]

$$
\mathscr{H}_{eff}(n_f) = \sum_{k\sigma} [\varepsilon_k c^{\dagger}_{k\sigma} c_{k\sigma} + \sum_l \tilde{V}_{kl\sigma} (c^{\dagger}_{k\sigma} + f^{\dagger}_{kl\sigma} c_{k\sigma}) + E_f \sum_l f^{\dagger}_{kl\sigma} f_{kl\sigma}] \tag{1}
$$

$$
\tilde{V}_{kl\sigma} = q^{1/2}_{l\sigma}(n_f, L) V_{kl}, \quad q_{l\sigma}(n_f, L) = \frac{1-n_f}{1-n_{fl\sigma}}) \tag{2}
$$

[L : 縮退度, n_f : f 電子の総数]

今、周期的 Anderson モデルの U は $q_{l\sigma}(n_f, L)$ を通して $\tilde{V}_{kl\sigma}$ に繰り込まれている。

このハミルトニアンより基底状態を計算すると

$$E_g = \left[\frac{1+E_f-\varepsilon_f}{2L-1} - \frac{1}{2} \right] (1-n_f)^2 \tag{3}$$

となる。これは一不純物 Kondo 問題の基底エネルギー ($K_B T_K \propto 1-n_f$) と大体 $(1-n_f)$ 倍程度異なることを示している。

参考文献

[1] 芳田 奎　「磁性」 岩波書店

[2] 上田 和夫, 大貫 惇睦 「重い電子系の物理」 裳華房

[3] T.M.Rice and K.Ueda :Phys.Rev.Lett 55(1985) 995 ; Phys.Rev.B34(1986)6420.