

Title	Dense Kondo系について(V. 理論,価数揺動状態の総合的研究,科研費研究会報告)
Author(s)	山田, 耕作
Citation	物性研究 (1984), 42(6): 36-39
Issue Date	1984-09-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/91429
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

Dense Kondo 系 について

京大基研 山田耕作

主に Ce 系と Yb 系の金属・合金・化合物で観測される Dense Kondo 的振舞の起源について考へる。結論からいへば Dense Kondo 系は文字通り「Kondo 効果が高密度で実現している系」であつて、高密度なり、周期系であることによる特徴はあるものの基本的には Kondo 効果で理解できるということである。ただし、これまでこのように考へるとしても、磁性イオン間の相互作用に打ち勝つて、Kondo 効果が現われる理由がはっきりしなかつた。その理由について報告する。¹⁾

1] 異なる格子点にある局在スピンの相互作用 (RKKY) は局在スピン S の大きさの 2 乗に比例すると考へられる。Ce や Yb では夫々 f 電子, f 正孔が 1 個で $S = \frac{1}{2}$ であり, Gd ($S = 7/2$) の約 2% にまで相互作用が小さくなると考へられる。

2] f 電子と伝導電子の間の交換相互作用は, s 間の RKKY 相互作用にも Kondo 温度 T_K にも共に効く parameter である。従つて, Kondo 温度 T_K が相対的に高くなるためには, 何か特別の事情があると思へられる。

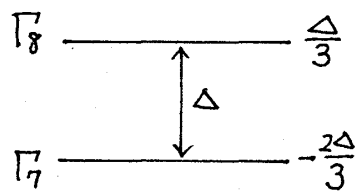
10 年前, Okada-Yosida は²⁾ d -shell 内に局在電子をもつ系の Kondo 効果を議論した。その中で, d -shell 内に 1 個の局在電子がある場合には, d 軌道の縮退のため, 基底状態の結合エネルギーが $\tilde{E} = -D_0 \exp[N/(2l+1)PT_0]$ となることを示した。ここで D_0 は伝導帯の中, $J < 0$ である ($l=2$)。一方, M_n に相当して, Hund's coupling が強く, それによつて軌道角運動量が消滅して $L=0$ となつた系では, 逆に $\tilde{E} = -D_0 \exp[N(2l+1)/PT_0]$ とかわめて小さくなることを示した。このような違いは, 局在電子 (正孔) が 1 個の場合, 縮退した軌道の $2l+1$ 個の channel を通じて, bound state が強く結合できるためである。

以上の議論は, 軌道・スピン相互作用の大きい f 電子系でも同様で, 電子又は正孔が 1 個の場合, Coeffin-Schrieffer の Hamiltonian を仮定して, $\tilde{E} = -D_0 \exp[N/PT_0(2j+1)]$ となる。ここで Ce では $j=5/2$, Yb では $j=7/2$ である。従つてこのように f -shell に縮退があれば, 高い T_K , 大きな結合エネルギーが期待される。ところが現実には結晶場分裂が数 10 ~ 数 100 K の大きさで存在し, これは T_K より大きく基底状態の縮退度は小さくなると考へられる。従つて上述のような縮退の効果で T_K を高くすることは期待できないように見える。しかし, 結晶場の果す役割は微妙であり, 詳しく検討する必要がある。その点を明らかにするのが本稿の主な目的である。

例として Ce ($j=5/2$) が Cubic な結晶場で doublet Γ_7 と quartet Γ_8 に分裂した場合を考へる。図 1 に Γ_7 が基底状態の場合が示してあるが Γ_8 が下の時は splitting Δ が

負と考ればよい。伝導帯の中(D)を小さくし、その効果を Coupling Constant \tilde{J} にくり込むという Anderson の scaling の方法に従うと次の方程式を得る。

$$\frac{d\tilde{J}}{dD} = \frac{4}{D+\Delta} \tilde{J}^2 + \frac{2}{D} \tilde{J}^2 \quad \dots (1)$$



(図 1)

ここで、右辺の係数 4 と 2 は結晶場分裂した levels の縮重度を反映している。又、 Γ_8 1 項の分母に Δ が入るのは局在電子が中間状態として Γ_8 ($\Delta > 0$) に入ったためである。Scale するもとの Hamiltonian は M, M' を $j=5/2$ の結晶場分裂した固有状態として

$$H_{ex} = -\frac{J_0 \rho}{2N} \sum_{\substack{k, k' \\ M, M'}} C_{kM}^+ C_{k'M'}^+ a_{M'}^+ a_M \quad \dots (2)$$

のように与えられるものを考えている。³⁾ この方程式を初期条件 $D=D_0$, $\tilde{J} = \frac{J_0 \rho}{2N}$ のもとで解くと

$$\tilde{J} = \frac{J_0 \rho}{2N} \left[1 + \frac{2J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{D+\Delta} + \frac{J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{D} \right]^{-1} \quad (3)$$

となる。この(3)式は

$$D \gg \Delta \text{ では } \tilde{J} = \frac{J_0 \rho}{2N} \left[1 + \frac{3J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{D} \right]^{-1} \quad (4)$$

$$D \ll \Delta \text{ では } \tilde{J} = \frac{J_0 \rho}{2N} \left[1 + \frac{2J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{\Delta} + \frac{J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{D} \right]^{-1} \quad (5)$$

と近似できる。今、 $T_k < \Delta$ とすると T_k は(5)式で $\tilde{J} = \infty$ を与える D として定まる。

$$T_k = D_0 e^{\frac{N}{J_0 \rho} \left(1 + \frac{2J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{\Delta} \right)} = \left(\frac{D_0}{\Delta} \right)^2 D_0 e^{\frac{N}{J_0 \rho}} \quad (6)$$

ここで得られた T_k には、 $\Delta \rightarrow \infty$ として上の Γ_8 の level を無視した場合に比べて $(D_0/\Delta)^2$ 倍にする factor がかかっている。

同様に quartet Γ_7 が基底状態の場合は (Case 2)

$$T_k = \sqrt{\frac{D_0}{\Delta}} D_0 e^{\frac{N}{2J_0 \rho}} \text{ となる。}$$

以上の結果を用いて T_k 及び $\tilde{J} = \frac{J_0 \rho}{N}$ の数値を例示したのが表である。

また、これまで scaling law に基いて議論してきたが、Yosida 理論に基いて基底状態の結合エネルギーを議論することも可能で、すでに小川-吉森によってなされている。³⁾ その理論を用いて cubic field の下で Γ_7 が下 (Case 1) の場合の essential binding energy (T_k に対応する) と Γ_7 states の weight (真線) を Δ の関数として表わし

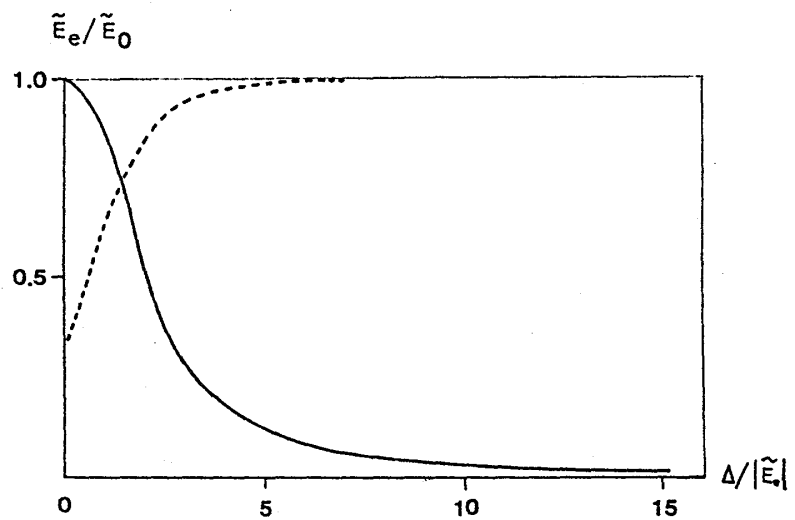
たのが図2である。△と \tilde{E}_e 共に $\Delta=0$ の時の結合エネルギー \tilde{E}_0 を unit にしてある。 $\Delta/|\tilde{E}_e| = 10$ の場合、 D_0 を 6% 取り込むことにより基底状態の結合エネルギーは 10^4 倍にも増大する。表1を見てわかるように△が T_K より大きくても D_0 より充分小さければ T_K は $\Delta=\infty$ よりも $\Delta=0$ で縮退のある場合の高い T_K に近い。

Table 1. Kondo temperature T_K for typical values of Δ and \tilde{J}_0

	T_K	$ \Delta $	\tilde{J}_0	\tilde{J}_0^2
$\Delta > 0$ (Case 1)	50	0	0.062	0.004
	10	100	0.062	0.004
	0.001	∞	0.062	0.004
	10	∞	0.145	0.021
$\Delta < 0$ (Case 2)	20	0	0.054	0.003
	10	100	0.054	0.003
	1	∞	0.054	0.003
	10	∞	0.072	0.005

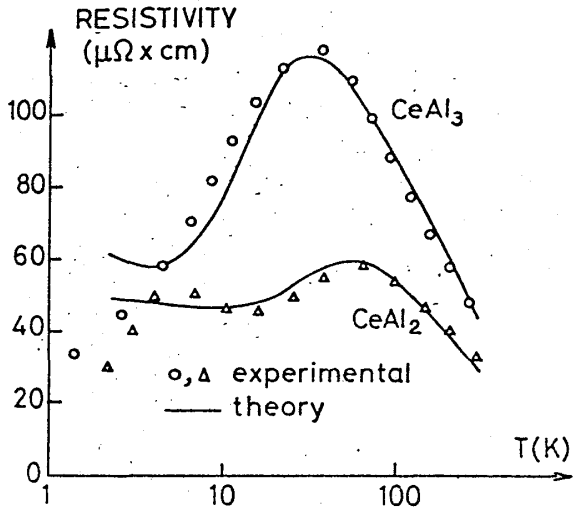
通常、Nand's coupling は D_0 に近い大きさであり、複数の電子や正孔をもつ系ではその効果で軌道やスピンを交換する自由度が抑えられ T_K が低くなる。Ce や Yb では1電子、1正孔の f-shell のため上述のように T_K を高くできると考えられる。もし、結晶場と同様、Nand's coupling や s coupling が T_K より大きくても D_0 よりかなり小さい場合には、 T_K に影響を与えるわけである。

(表1) $\tilde{J}_0 = |J_0|/N$, $D_0 = 10^4 K$.

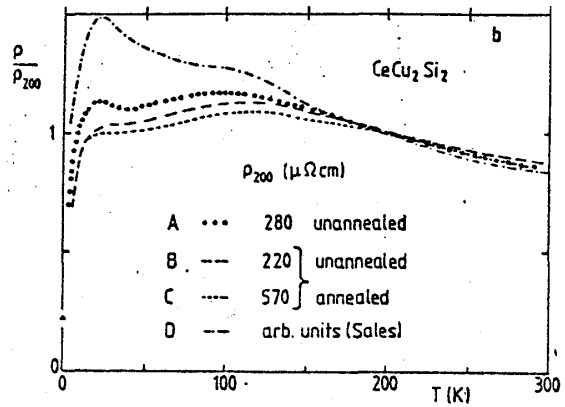


(図 2)

上述の議論を $CeAl_2$ (図3), $CeAl_3$ (図3), $CeCu_2Si_2$ (図4) の電気抵抗に応用してみよう。D に関する \tilde{J}_0 の scaling 則 (3) 式において、D を T におきかえれば温度 T に関する scaling law を得る。もし、 $T > \Delta$ の温度では (4) 式のようにあたかも $\Delta=0$ の如く振舞う。つまり系は6重縮退の時の $T_K^0 = D \exp[N/3J_0\rho]$ をもつがのように振舞い抵抗は T が下ると共に増大する。ところが T が Δ より低くなると結晶場が効いて、(6) 式で与えられる本当の T_K で系の振舞いは定されるから、 Δ に相当する温度は真の T_K に比べ高温となり、抵抗は一度減少する。さらに温度が下り真の T_K に近づくと再び抵抗が増大することになる。これが $CeAl_2$ に見られる抵抗の2つの山と考えられる。 $CeAl_3$ は hexagonal 構造で細く分れること、分裂自体小さいので1つの のようになるらしい。 $CeCu_2Si_2$ は Cubic ではないが (Tetragonal) 2つの結晶場の level が丁度、実験の領域内にあり、 $CeAl_2$ と同様の効果が見られると考えられる、($E_1 - E_0 = 140K$, $E_2 - E_0 = 364K$)。



(図 3)



(図 4)

最後に sites 間の相互作用が弱く、相対的に T_K が高い場合の Kondo lattice の基底状態について考えてみよう。磁性不純物に対する理論を参考にして⁴⁾⁵⁾ 我々は most divergent 近似の範囲内では、異なる sites の局在 spins のからむ項は無視できることを示すことができる。(ただし、あくまで sites 間の相互作用が弱いという条件のもとである。)従って、single impurity の場合と同じ scaling law (例えば (3) を) によって伝導帯の中 D を小さくしていくと各 site 一着に strong coupling の極限に近づき、夫々の sites で同じ T_K となり、結合エネルギーをもつ bound state が実現すると思われる。この時 T_K を scaling law には sites 間の相互作用は効かないが、基底状態の波動関数は most divergent の範囲でも変化をうける。従って、一般に基底状態は各 site を中心とした bound state が periodic に実現しており、我々はその状態を出発点として sites 間の相互作用を擾動として扱入れていけばよいと思われる。

- 1). K. Yamada, K. Yosida and K. Hanzawa, Prog. Theor. Phys. に投稿中
- 2). I. Okada and K. Yosida, Prog. Theor. Phys. 49 (1973), 1483.
- 3). A. Ogawa and A. Yoshimori, " 53 (1975), 315.
- 4). K. Sato and Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. 49 (1973), 1377.
- 5). H. Ishii, " 50 (1973), 1777.