

KADOWAKI-WOODSの 関係の異方的な系への拡張

京大理

深澤英人

南方雅成

(1998年4月8日受理)

1 はじめに

フェルミ液体論に従う固体は、低温においてその電気抵抗率 ρ が温度 T の関数として

$$\rho(T) = AT^2 + \rho_0 \quad (1)$$

のように記述される。ただし A 、 ρ_0 は定数である。

また、固体の比熱 $C_p(T)$ は、

$$C_p(T) = \gamma T + \beta T^3 \quad (2)$$

のように書ける。

この時、比 $\frac{A}{\gamma}$ をKADOWAKI-WOODS比といい、フェルミ液体論に従う異方的でない物質では、 $\frac{A}{\gamma}$ がほぼ物質によらない定数になることが知られており [1]、これは理論的にも示されている [2]。この関係をKADOWAKI-WOODSの関係という。

我々の課題は、異方的な系に、この関係を拡張する事である。

3次元自由電子においてはよく知られているように、 γ はフェルミ面における状態密度 $D(\epsilon_F)$ (ϵ_F ; フェルミエネルギー) に直接比例する。このことから異方的な系においても状態密度は、KADOWAKI-WOODS比に重要な影響を与えると考え、異方的な系(最も簡単な擬2次元系)における状態密度の計算をまず行ってみる。ただし、簡単のために、実際にはフェルミ面の近くではバンドがいくつかあるが、以後の計算では伝導に寄与するバンドは単一であると仮定する。

次に、KADOWAKI-WOODS比を、そのフェルミ面近くでのエネルギー分散が簡単に記述できる異方的な系に対して適用できる形で求め、これを状態密度の計算結果と合わせて考えることで、KADOWAKI-WOODSの関係を拡張する。

その結果、キャリア密度の低い有機導体など特殊な擬2次元系においては c 軸方向の格子定数 c と、キャリア密度 n の比 $\frac{c}{n}$ によりKADOWAKI-WOODS比 $\frac{A}{\gamma}$ が、ずれることがわかった。

2 異方的な系における状態密度の計算

2.1 考える異方的な系—擬2次元系—

この節では異方的な系として、以下に示すような系を考える。この系は、擬2次元系の最も簡単な場合にあたる。擬2次元系は、ある面内での運動に、残り一方向の運動を許すことが特徴である。

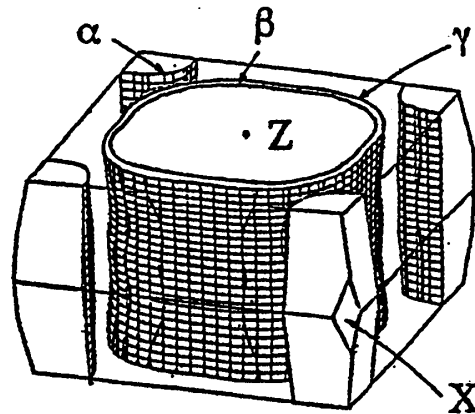
この節ではこの系の状態密度を求める。ただし、先にも述べたように、実際には複数あるバンドを、ここでは伝導に有効なバンドが1つであると仮定して、議論を進める。この仮定は、以下の全ての節で共通した仮定である。

2.2 tight-binding 近似を用いた系での状態密度—擬2次元系—

Sr_2RuO_4 のフェルミ面は図(2.1)のようになっている [3] が、このうち内側の β 面はおよそ

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) - 2t \cos(k_z c) \quad \left(-\frac{\pi}{c} \leq k_z \leq \frac{\pi}{c}\right) \quad (3)$$

という、面内は完全な自由電子、面間は tight-binding 近似を用いたエネルギー分散で近似できる。ただし、ここで m は電子の有効質量、 \hbar は Dirac 定数、 t は面間の飛び移り積分、 c は c 軸方向の格子定数である。(c を格子定数としたのは、議論を一般的なものにするためであり、 Sr_2RuO_4 の β 面の場合、実際には c ではなく、面間距離 $d (= \frac{c}{2})$ が入る。)



図(2.1) Sr_2RuO_4 のフェルミ面 [3]

有機導体の中にもこのようなフェルミ面をもつ物質が存在する。実際に興味があるのはフェルミ面における状態密度 $D(\epsilon_F)$ であるが、この場合の系の状態密度 $D(\epsilon)$ を $\epsilon > 2t$ と $\epsilon < 2t$ の2つの場合にわけて考えてみることにする。

【1】 $\epsilon > 2t$ の時、

系の単位体積あたりの状態密度 $D(\epsilon)$ は、

$$D(\epsilon)d\epsilon = \frac{1}{4\pi^3} \int d^3k \times \begin{cases} 1 & ; \quad \epsilon \leq \epsilon(k) \leq \epsilon + d\epsilon \text{の時} \\ 0 & ; \quad \text{上記以外の時} \end{cases} \quad (4)$$

から与えられる。従って、

$$V(\epsilon) = \int_{\epsilon(k) \leq \epsilon} d^3k \quad (5)$$

を考えると、

$$\begin{aligned} D(\epsilon)d\epsilon &= \frac{1}{4\pi^3} \{V(\epsilon + d\epsilon) - V(\epsilon)\} \\ &\simeq \frac{1}{4\pi^3} \frac{dV}{d\epsilon} \cdot d\epsilon \end{aligned} \quad (6)$$

となり、

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \frac{dV}{d\varepsilon} \quad (7)$$

となる。また、フェルミエネルギー ε_F は、キャリア密度 n が一定の条件

$$n = \frac{1}{4\pi^3} V(\varepsilon_F) \quad (8)$$

から求まる。

今の場合、

$$k_x^2 + k_y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \{ \varepsilon + 2t \cos(k_z c) \} \quad (9)$$

であるから、

$$\begin{aligned} V(\varepsilon) &= \int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} dk_z \times \pi(k_x^2 + k_y^2) \\ &= \frac{4\pi^2 m \varepsilon}{\hbar^2 c} + \frac{4\pi m t}{\hbar^2} \times \underbrace{\left[\frac{\sin(k_z c)}{c} \right]_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}}}_{\rightarrow 0} \\ &= \frac{4\pi^2 m \varepsilon}{\hbar^2 c} \end{aligned} \quad (10)$$

がわかり、

$$D(\varepsilon) = \frac{m}{\pi \hbar^2 c} \quad (= \text{const.}) \quad (11)$$

となる。

【2】 $\varepsilon < 2t$ の時、

$$\cos(k_z c) = -\frac{\varepsilon}{2t} \quad (12)$$

を満たす解

$$k_{z0} = \frac{1}{c} \arccos\left(-\frac{\varepsilon}{2t}\right) \quad (13)$$

(ただし、 \arccos の値の範囲は 0 以上 π 以下とする。)

が存在するので、(5) 式の積分は【1】の場合とは異なり、

$$V(\varepsilon) = \int_{-k_{z0}}^{k_{z0}} dk_z \times \pi(k_x^2 + k_y^2) \quad (14)$$

に変更をうける。この積分を実行すると、

$$V(\varepsilon) = \frac{4\pi m \varepsilon k_{z0}}{\hbar^2} + \frac{8\pi m t}{\hbar^2 c} \times \sin(k_{z0} c) \quad (15)$$

を得る。すると状態密度 $D(\epsilon)$ は (12)、(13) 式を利用して、

$$\begin{aligned}
 D(\epsilon) &= \frac{1}{4\pi^3} \frac{dV}{d\epsilon} \\
 &= \frac{mk_{z0}}{\pi^2 \hbar^2} + \frac{m\epsilon}{\pi^2 \hbar^2} \frac{dk_{z0}}{d\epsilon} - \frac{2mt}{\pi^2 \hbar^2} \cos(k_{z0}) \times \frac{dk_{z0}}{d\epsilon} \\
 &= \frac{mk_{z0}}{\pi^2 \hbar^2} + \frac{m\epsilon}{\pi^2 \hbar^2} \frac{dk_{z0}}{d\epsilon} - \frac{m\epsilon}{\pi^2 \hbar^2} \frac{dk_{z0}}{d\epsilon} \\
 &= \frac{mk_{z0}}{\pi^2 \hbar^2} \\
 &= \frac{m}{\pi^2 \hbar^2 c} \arccos\left(-\frac{\epsilon}{2t}\right)
 \end{aligned} \tag{16}$$

となる。

以上【1】、【2】より求めた状態密度 $D(\epsilon)$ をグラフにすると、図 (2.2) のようになる。この図を見てもわかるように、 $\epsilon_F > 2t$ であるならば、フェルミ面における状態密度 $D(\epsilon_F)$ は一定である。

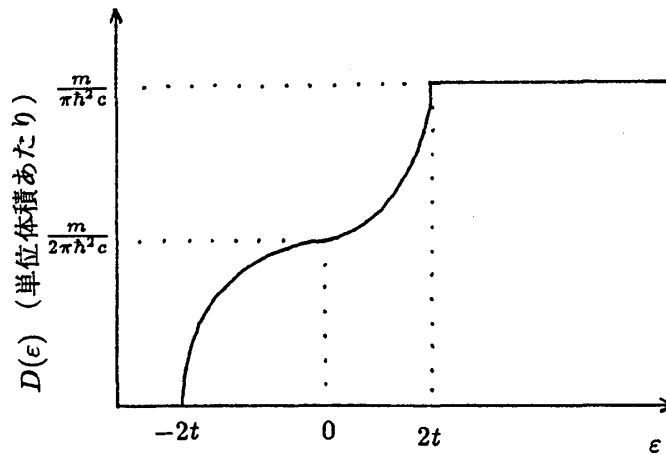


図 (2.2) 単位体積あたりの状態密度 $D(\epsilon)$

3 KADOWAKI-WOODS の関係の異方的な系への拡張

この節では、まず §2 で考えたような、異方的ではあるがそのエネルギー分散が簡単に記述できるフェルミ面を仮定して、KADOWAKI-WOODS 比を数係数を除いて、その異方性を電子の速さに押しつけることで求める。

次に、求まる式を、等方的な系と §2 で考えた系に対して実際に適用してみる。

3.1 異方的な系での KADOWAKI-WOODS 比

低温においてフェルミ液体論に従う系の電気伝導率 $\sigma_{\mu\nu}$ は、電子間散乱のウムクラップ過程を考えに入れて¹、

$$\sigma_{\mu\nu} = e^2 \sum_{\mathbf{k}} \delta(\mu - E_{\mathbf{k}}^*) J_{\mathbf{k}\mu} \frac{1}{2\Gamma_{\mathbf{k}}^*} \frac{1}{C_{\mathbf{k}}} J_{\mathbf{k}\nu} \quad (\mu, \nu = x, y, z) \quad (17)$$

となる。ただし、 $\sum_{\mathbf{k}}$ は、フェルミ面にわたってとるものとする。ここで、 e は電子の電荷、 μ は化学ポテンシャル、 $E_{\mathbf{k}}^*$ は準粒子のエネルギー、 $J_{\mathbf{k}}$ は準粒子の流れ、 $\Gamma_{\mathbf{k}}^*$ は準粒子の寿命、 $C_{\mathbf{k}}$ はウムクラップ過程を考慮したことによる1のオーダーの数因子である。

さて、 $z_{\mathbf{k}}$ を電子のくり込み因子として、

$$\begin{aligned} J_{\mathbf{k}} &\simeq v_{\mathbf{k}}^* \\ &= z_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (18)$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}}^* = z_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \rho_{\mathbf{k}}^*(0) &= \delta(\mu - E_{\mathbf{k}}^*) \\ &\simeq \frac{\rho_{\mathbf{k}}(0)}{z_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (20)$$

である。ここで、 $v_{\mathbf{k}}^*$ は準粒子の速度、 $v_{\mathbf{k}}$ は裸の電子の速度、 $\rho_{\mathbf{k}}^*(0)$ は準粒子の状態密度、 $\rho_{\mathbf{k}}(0)$ は裸の電子の状態密度である。 $\Delta_{\mathbf{k}}$ は裸の電子の自己エネルギーの虚数部分で、くり込まれた電子間の相互作用を表わす4点バーテックス $\Gamma_{\sigma\sigma'}(k_1 k_2; k_3, k_4)$ を用いて、

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &\simeq \frac{4(\pi T)^2}{3} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} \pi \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(0) \rho_{\mathbf{k}'}(0) \rho_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}}(0) \\ &\quad \times \left[\{\Gamma_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{k}'+\mathbf{q}, \mathbf{k}-\mathbf{q})\}^2 + \frac{1}{2} \{\Gamma_{\uparrow\uparrow}^A(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{k}'+\mathbf{q}, \mathbf{k}-\mathbf{q})\}^2 \right] \end{aligned} \quad (21)$$

である。ただし、 A は反対称化を表わす記号である。(18)、(19)、(20)式を(17)式に代入すると、くり込み因子 $z_{\mathbf{k}}$ は互いに打ち消しあつて、

$$\sigma_{\mu\nu} = e^2 \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}}(0) \frac{1}{2\Delta_{\mathbf{k}}} \frac{1}{C_{\mathbf{k}}} v_{\mathbf{k}\mu} v_{\mathbf{k}\nu} \quad (22)$$

となる。ここで、フェルミ面を§2で扱ったようなエネルギー分散が簡単に記述できるような異方的なものであると仮定し、(21)式を用い、 $\Gamma_{\sigma\sigma'}$ の波数依存性が無視できるとして、その大きさを Γ で代表させて、また $\rho_{\mathbf{k}}(0)$ 等もその波数依存性を無視してフェルミ面での状態密度 $D(\epsilon_F)$ でおきかえ、数係数を除いて、

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu} &\sim e^2 D(\epsilon_F) \frac{1}{T^2 \{D(\epsilon_F)\}^3 \Gamma^2} \langle v_{F\mu} v_{F\nu} \rangle \quad (v_F \text{ ; フェルミ速度}) \\ &= \frac{e^2 \langle v_{F\mu} v_{F\nu} \rangle}{T^2 \{D(\epsilon_F)\}^2 \Gamma^2} \end{aligned} \quad (23)$$

と近似し、 $\sigma_{\mu\nu}$ の異方性を $\langle v_{F\mu} v_{F\nu} \rangle$ に押しつけることにする。ただし、 $\langle \dots \rangle$ はフェルミ面での平均値をとるものとする。

¹この節での電気伝導率 $\sigma_{\mu\nu}$ や電子比熱係数 γ の最初の式や、くり込み因子に関する式は全て、山田耕作：電子相関（岩波、1993）によっている。

電気抵抗率 $\{\rho_{\mu\nu}(T)\}$ は $\rho_{\mu\nu} = \sigma_{\mu\nu}^{-1}$ で定義される。実際に必要なのは $\rho_{\mu\mu}(T) \equiv \rho_{\mu}$ なので、(23) 式より $\sigma_{\mu\mu}$ は、

$$\sigma_{\mu\mu} \sim \frac{e^2 \langle v_{F\mu}^2 \rangle}{T^2 \{D(\epsilon_F)\}^2 \Gamma^2} \quad (24)$$

となるので、

$$\rho_{\mu} \sim \frac{\{D(\epsilon_F)\}^2 \Gamma^2}{e^2 \langle v_{F\mu}^2 \rangle} T^2 \quad (25)$$

となり、 $\rho(T)$ は残留抵抗 ρ_0 を除いて T^2 に比例することがわかる。従って、(1) 式の A は異方性を考慮して、

$$A_{\mu} \sim \frac{\{D(\epsilon_F)\}^2 \Gamma^2}{e^2 \langle v_{F\mu}^2 \rangle} \quad (26)$$

となる。

一方、電子比熱係数 γ は電子相関によって、電子の電荷ゆらぎが抑えられるときは、ボルツマン定数を k_B として、

$$\begin{aligned} \gamma = & \frac{2\pi^2 k_B^2}{3} \sum_{k,q} \rho_k(0) [\Gamma_{\uparrow\downarrow}(k, k+q; k+q, k) \\ & + \Gamma_{\uparrow\uparrow}^A(k, k+q; k+q, k)] \rho_{k+q}(0) \end{aligned} \quad (27)$$

で与えられる。そこで、(23) 式で用いた近似をここでも用いて、

$$\gamma \sim k_B^2 \{D(\epsilon_F)\}^2 \Gamma \quad (28)$$

となる。

以上(26)、(28)式から KADOWAKI-WOODS 比 $\frac{A_{\mu}}{\gamma}$ は、数係数を除いて

$$\frac{A_{\mu}}{\gamma^2} \sim \frac{1}{e^2 k_B^4 \{D(\epsilon_F)\}^2 \langle v_{F\mu}^2 \rangle} \quad (29)$$

となる。今まで(23)、(28)式で無視してきた数係数は、フェルミ面の波数に関する和においてほとんど等しいと考えられる。(このような仮定は、近似の粗さを考慮すれば許されるはずである。) (29) 式で重要な点は、 A_{μ} を γ^2 でわることで、電子相関の大きさ Γ が消え、その値 $\frac{A_{\mu}}{\gamma^2}$ が、フェルミ面での状態密度 $D(\epsilon_F)$ の2乗と、各方向での速さの2乗平均 $\langle v_{\mu}^2 \rangle$ に反比例し、 $\langle v_{\mu}^2 \rangle$ が異方性を表わしている点である。

ここではいったんこの式が正しいとして、§ 2 からフェルミ面における状態密度 $D(\epsilon_F)$ は1つの系で変わらないので、フェルミ速度の2乗平均 $\langle v_{F\mu}^2 \rangle$ を考えることで $\frac{A_{\mu}}{\gamma^2}$ の異方性を調べることにする。

3.2 等方的な系への適用

等方的な系であれば、

$$v_F \sim \frac{p_F}{m}$$

$$D(\epsilon_F) \sim \frac{\hbar k_F}{m p_F} \quad (30)$$

$$= \frac{m k_F}{\hbar^2} \quad (31)$$

として、これらを (29) 式に代入すれば、

$$\frac{A}{\gamma^2} \sim \frac{\hbar^2}{e^2 k_B^4 k_F^4} \quad (32)$$

となって、裸の電子の質量によらないので、KADOWAKI-WOODS の関係が成り立っていると考えられる。

実験的には等方的な系では、KADOWAKI-WOODS 比 $\frac{A}{\gamma^2}$ は、図 (3.1) [2] のようになり、重い電子系では、

$$\begin{aligned} \frac{A}{\gamma^2} &= a_0 \\ &= 1.0 \times 10^{-5} \quad [\mu\Omega\text{cm}/(\text{mJ}/\text{Kmol})^2] \end{aligned} \quad (33)$$

の一定値をほほとる。

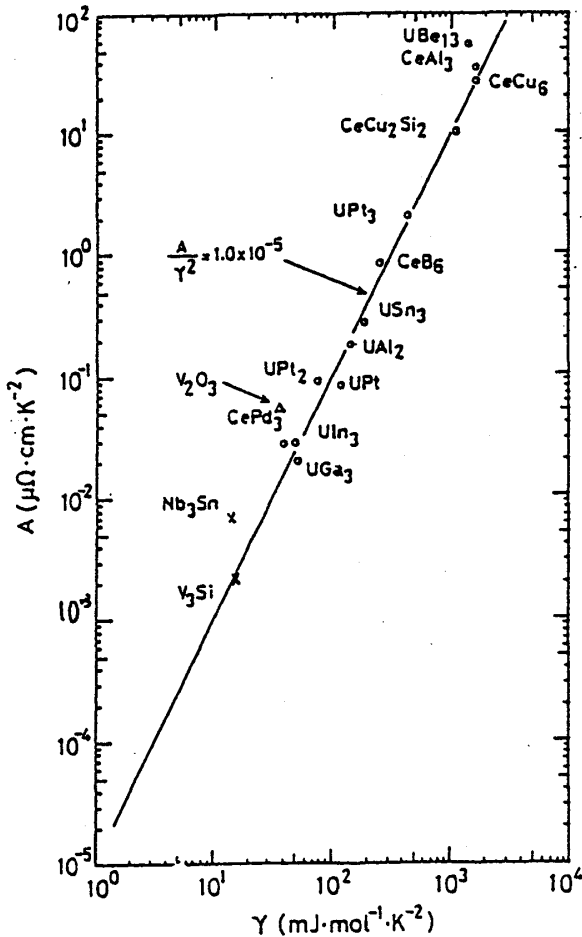


図 (3.1) 重い電子系での KADOWAKI-WOODS 比の対数プロット [2]

3.3 tight-binding 近似を用いた系への適用—擬 2 次元系—

エネルギー分散が²

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) - 2t \cos(k_z c) \quad \left(-\frac{\pi}{c} \leq k_z \leq \frac{\pi}{c} ; \epsilon_F > 2t\right) \quad (34)$$

で与えられる場合、フェルミ速度 v_F は

$$v_F = \left(\frac{\hbar k_x}{m}, \frac{\hbar k_y}{m}, \frac{2tc}{\hbar} \sin(k_z c)\right)_{\epsilon(k)=\epsilon_F} \quad (35)$$

である。すると、

$$\begin{aligned} \langle v_{F_x}^2 \rangle &= \frac{1}{2} \frac{\int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \frac{\epsilon_F + 2t \cos(k_z c)}{m} dk_z}{\int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} dk_z} \\ &= \frac{\epsilon_F}{2m} \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \langle v_{F_z}^2 \rangle &= \frac{\int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} \left\{ \frac{2tc}{\hbar} \sin(k_z c) \right\}^2 dk_z}{\int_{-\frac{\pi}{c}}^{\frac{\pi}{c}} dk_z} \\ &= \frac{2t^2 c^2}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (37)$$

であるから、(11)、(36)、(37) 式を (29) 式に代入すれば、

$$\frac{A_{ab}}{\gamma^2} \sim \frac{\hbar^4 c^2}{e^2 k_B^4 m \epsilon_F} \quad (38)$$

$$\frac{A_c}{\gamma^2} \sim \frac{\hbar^6}{e^2 k_B^4 m^2 t^2} \quad (39)$$

となる。この結果は大変興味深い。なぜならば、(39) 式は裸の電子質量と t によるものの²、(38) 式は、(10)、(8) 式よりフェルミエネルギー ϵ_F が²、

$$\epsilon_F \sim \frac{\hbar^2 n c}{m} \quad (40)$$

なので、これを (38) 式に代入すれば、

$$\begin{aligned} \frac{A_{ab}}{\gamma^2} &\sim \frac{\hbar^2 c}{e^2 k_B^4 n} \\ &\propto \frac{c}{n} \end{aligned} \quad (41)$$

となって、この式は裸の電子質量によらないからである。従って、 c 軸方向の格子定数 c とキャリア密度 n の比がほぼ一定な物質の間では、 $\frac{A_{ab}}{\gamma^2}$ のみが²、KADOWAKI-WOODS の関係を示すと考えられる。ただし、(38) 式に

$$\epsilon_F \sim \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \quad (42)$$

² $\langle v_{F_x}^2 \rangle \approx \langle v_{F_z}^2 \rangle$ の時は本文以下の議論を $\frac{A_c}{\gamma^2}$ にも適用できる。

を代入した

$$\frac{A_{ab}}{\gamma^2} \sim \frac{\hbar^2 c^2}{e^2 k_B^4 k_F^2} \quad (43)$$

において KADOWAKI-WOODS 比の k_F 依存性が、等方的な系 ((32) 式参照) とは異なることから、 $c \neq \frac{1}{k_F}$ の場合は従来の KADOWAKI-WOODS 比の一定値はとらないと考えられる。

すなわち、(41) 式にしたがって、 $\frac{A_{ab}}{\gamma^2}$ は $\frac{c}{n}$ に比例してずれうる。

4 近似の妥当性についての検証と考察

4.1 tight-binding 近似を用いた系における比 $\frac{A_{ab}}{A_c}$ からの検証

(29) 式で求めた KADOWAKI-WOODS 比の式は、途中でかなり大雑把な近似をして求めたものである。従って、この式を求める過程における近似の妥当性を検証しなければならない。

(34) 式のようなエネルギー分散は Sr_2RuO_4 や有機導体に対して仮定したものであり、有機導体の場合、比 $\frac{t}{\epsilon_F}$ が、実験的に $\sim 10^{-2}$ であることが知られている [5]。そこで (26)、(36)、(37) 式より比

$$\begin{aligned} \frac{A_{ab}}{A_c} &= \frac{\langle v_{Fz}^2 \rangle}{\langle v_{Fx}^2 \rangle} \\ &= \frac{4mc^2 t^2}{\hbar^2 \epsilon_F} \\ &= \frac{4mc^2}{\hbar^2} \left(\frac{t}{\epsilon_F}\right)^2 \epsilon_F \end{aligned} \quad (44)$$

を考えて、 A_μ の導出過程での近似が正しいのかを議論する。有機導体の場合、比 $\frac{A_{ab}}{A_c}$ は実験的に、 $\sim 10^{-3} - 10^{-2}$ であり、 $\epsilon_F \sim 10^{-1} [eV]$ であり、 $c \sim 10^{-9} [m]$ なので [5][6]、(44) 式の右辺は、

$$\frac{A_{ab}}{A_c} \sim 10^{-4} \quad (45)$$

となり、実験値とは $\sim 10 - 10^2$ の程度の違いである。

一方、 Sr_2RuO_4 の場合、

$$\begin{aligned} \epsilon_F &\simeq 1.0 [eV] \\ &= 1.6 \times 10^{-19} [J] \quad ([7]) \end{aligned} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} c &= 1.27 [nm] \\ &= 1.27 \times 10^{-9} [m] \quad ([8]) \end{aligned} \quad (47)$$

である。図 (2.1) の α 面、 β 面、 γ 面での飛び移り積分 t の値は、それぞれ [9]、

$$t_\alpha = 1.65 \times 10^{-23} [J] \quad (48)$$

$$t_\beta = 2.34 \times 10^{-22} [J] \quad (49)$$

$$t_\gamma = 1.21 \times 10^{-22} [J] \quad (50)$$

である。(23)式における平均値を伝導に最も寄与する面でとることになると、今の場合、(37)式から、 t が最も大きい β 面の値を用いればよい。その際、 β 面では格子定数 c を面間距離 $d (= \frac{c}{2})$ でおきかえる。最後に、それらを(44)式に代入すれば、

$$\frac{A_{ab}}{A_c} = 4.5 \times 10^{-5} \quad (51)$$

となる。 Sr_2RuO_4 の場合 [8]、

$$\frac{A_{ab}}{A_c}|_{exp} = 6.4 \times 10^{-4} \sim 1.9 \times 10^{-3} \quad (52)$$

なので、 Sr_2RuO_4 の場合も数倍程度、実験値とずれる。

以上のように、有機導体でも Sr_2RuO_4 でも $\frac{A_{ab}}{A_c}$ の理論値が、実験値とずれてしまったが、(44)式の一番上の等式

$$\frac{A_{ab}}{A_c} = \frac{\langle v_{Fz}^2 \rangle}{\langle v_{Fz}^2 \rangle} \quad (53)$$

に注目し、この $\langle v_{Fz}^2 \rangle$ 、 $\langle v_{Fz}^2 \rangle$ に Sr_2RuO_4 のバンド計算による値 [7]

$$\langle v_{Fz}^2 \rangle = 5.3 \times 10^{10} [m^2/s^2] \quad (54)$$

$$\langle v_{Fz}^2 \rangle = 4.4 \times 10^8 [m^2/s^2] \quad (55)$$

を代入すると、

$$\frac{A_{ab}}{A_c} = 8.3 \times 10^{-3} \quad (56)$$

という値を得ることができ、今度も実験値とは数倍程度ずれるものの、2つの理論値の間に実験値があるので、このずれは誤差の範囲であると考えられる。従って、 A_{μ} を導出するにあたっての仮定や近似は、この系に対しては、ほぼ正しいと結論できる。同様に、 γ についてもほぼ正しいと考えられる。

(45)、(51)の理論値に実験値とのずれが生じた原因として考えられる点を列挙しておく。

- (36)、(37)式での平均値のとり方。
- 実際には複数あるバンドを単一として扱ったこと。
- tight-binding 近似の適用限界。
- A_{ab} 、 A_c における数係数のフェルミ面の異方性による違い。

バンド計算の値を用いた理論値(56)が、実験値とずれた原因としては、 $\langle v_{Fz}^2 \rangle$ 、 $\langle v_{Fz}^2 \rangle$ の値そのものが2乗できくので、数倍程度は簡単にずれてしまうことが主な原因であると考えられる。

4.2 tight-binding 近似を用いた系における KADOWAKI-WOODS 比 $\frac{A_{ab}}{\gamma^2}$ から の考察

さらに直接的な考察を行うために、§ 3.3で予想したように c 軸方向の格子定数 c とキャリア密度 n の比が一定な tight-binding 近似を用いた系について面内での抵抗率(1)式の T^2 の係数 A_{ab} に関する

KADOWAKI-WOODS 比 $\frac{A_{\mu}}{\gamma^2}$ のデータを見てみる。有機導体 $(BEDT-TTF)_2X$ (X はアクセプター) は、比 $\frac{\epsilon}{n}$ もほぼ一定で、tight-binding 近似でよく近似でき、しかもフェルミ面でのバンドは 1 つだけである。図 (4.1) [10][11] では各 $(BEDT-TTF)_2X$ での γ に対する A_{ab} を対数プロットしてある (ET は $(BEDT-TTF)$ の略称であり、 β, κ は、構造の違いを表わす) が、ある程度のずれはあるものの、ほぼ図 (4.1) の太い直線にのっていると考えてよい。太線からのずれは、有機導体では、面内、面間の抵抗率をはっきり区別して測定することが難しいことから生じているものと考えられる。従って、以上のことから、 $\frac{A_{\mu}}{\gamma^2}$ を導出するにあたっての仮定や近似がほぼ正しい、と考えられる。また、 c 軸方向の格子定数 c とキャリア密度 n (有機導体においてはこの値が特に小さい) の比 $\frac{\epsilon}{n}$

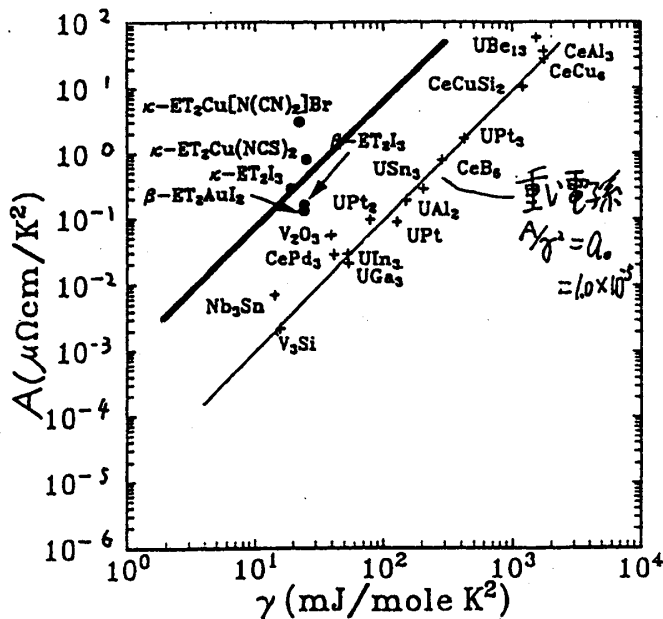


図 (4.1) ET 塩での KADOWAKI-WOODS 比の対数プロット (太線) [10][11]

が、有機導体 $(BEDT-TTF)_2X$ と Sr_2RuO_4 では ~ 10 倍程度は前者が大きいこと [8][12][13][14][15][16] や、無視した数係数の違いにより、 $(BEDT-TTF)_2X$ での $\frac{A_{\mu}}{\gamma^2} \simeq 8.0 \times 10^{-4} [\mu\Omega cm / (mJ / K mol)^2]$ は、重い電子系での値より数十倍程度大きい。

5 結論と課題

§ 4 の検証と考察から、「フェルミ面が今回考えたようなエネルギー分散で記述できると見なせる異方的な系」においては、KADOWAKI-WOODS 比は、数係数の不定性は残すものの、

$$\frac{A_{\mu}}{\gamma^2} \sim \frac{1}{e^2 k_B^4 \langle D(\epsilon_F) \rangle^2 < v_{F\mu}^2 \rangle} \quad (57)$$

のように記述できると結論する。この式を導出するにあたり、無視してきたことを列挙しておく。

- くり込まれた電子間の相互作用を表わす 4 点バーテックス $\Gamma_{\sigma\sigma'}(k_1, k_2; k_3, k_4)$ の波数依存性。
- $\rho_k(0)$ 等の波数依存性。
- 近似に伴う数係数。(これにはフェルミ面の次元性により異方性があると考えられる。)

また、このように和を近似する根拠は全て、フェルミ面が (34) 式のように簡単な系として近似できるといふ仮定に基づいている。

(57) 式に従って、次のことが予測できた。

- tight-binding 近似を用いた系一擬 2 次元系一において、c 軸方向の格子定数 c とキャリア密度 n の比がほぼ一定の物質の間では、その比の値 $\frac{c}{n}$ に従って、 $\frac{A_{94}}{\gamma}$ が新しい一定値 (その結果有機導体 (BEDT-TTF)₂X ではキャリア密度 n が、従来の重い電子系に比べ小さく、 $\frac{c}{n}$ が大きくなり、 $\frac{A_{94}}{\gamma} \simeq 8.0 \times 10^{-4} [\mu\Omega\text{cm}/(m\text{J}/\text{Kmol})^2]$) をもつこと。

以上のように結論したわけであるが、さらなる拡張のためには近似の際に複数のバンドをいかに考えにいれるかということが、最大のポイントになると考えられる。この難点は、平均値をとる操作にうまくとり込めるかもしれない。また、もう少しフェルミ面がくずれた場合、どのように (57) 式が修正されるかについては、課題である。

6 謝辞

最後に、山田教授には、大変興味深いテーマをお与え下さり、我々の不勉強ゆえの取るに足りない質問や意見にも快くお答え頂き、心より感謝致します。また、石黒教授、前野助教授、中野助教授にも資料のご呈示や論文に対するご意見ご助言を頂き、大変感謝致します。さらに、固体物理学研究室の諸先輩方にも、大変感謝致します。

参考文献

- [1] K. Kadowaki and S. B. Woods : *Solid State Commun.* **58**(1986)507.
- [2] K. Miyake, T. Matsuura and C. M. Varma : *Solid State Commun.* **71**(1989)1149.
- [3] A. P. Mackenzie, S. R. Julian, A. J. Diver, G. J. McMullan, M. P. Ray, G. G. Lonzarich, Y. Maeno, S. Nishizaki and T. Fujita : *Phys. Rev. Lett.* **76**(1996)3786.
- [4] 山田耕作 : 電子相関 (岩波, 1993).
- [5] J. Woshitza : *Fermi Surfaces of Low-Dimensional Organic Metals and Superconductors* (Springer-Verlag, Berlin, 1996).
- [6] 山内康寛 : 平成 7 年度修士論文.
- [7] T. Oguchi : *Phys. Rev. B* **51**(1995)1385.
- [8] Y. Maeno, K. Yoshida, H. Hashimoto, S. Nishizaki, S. Ikeda, M. Nohara, T. Fujita, A. P. Mackenzie, N. E. Hussey, J. G. Bednortz and F. Lichtenberg : *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**(1997)1405.
- [9] K. Yoshida, Y. maeno, S. Nishizaki, S. Ikeda and T. Fujita : *J. Low. Temp. Phys.* **105**(1996)1593.
- [10] M. Dressel, G. Grüner, J. E. Eldridge and J. M. Williams : *Synthetic Metals* **85**(1997)1503.
- [11] L.N.Bulaevskii : *Adv. Phys.* **37**(1988)443.

- [12] R. P. Shibaeva, V. F. Kaminskii and V. K. Bel'skii : *Sov. Phys. Crystallogr.* **31**(1984)638.
- [13] R. Kato, H. Kobayashi, A. Kobayashi, S. Moriyama, Y. Nishio, K. Kajita and W. Sasaki : *Chem. Lett.* (1987)459, 507.
- [14] H. H. Wang, M. A. Beno, U. Geiser, M. A. Firestone, K. S. Webb, L. Nunez, G. W. Crabtree, K. D. Carlson, J. M. Williams, L. J. Azevedo, J. F. Kwak and J. E. Schirber : *Inorg. Chem.* **24**(1985)2465.
- [15] A. M. Kini, U. Geiser, H. H. Wang, K. D. Carlson, J. M. Williams, W. K. Kwok, K. G. Vandervoort, J. E. Thompson, D. L. Stupka, D. Jung and M. -H. Whangbo : *Inorg. Chem.* **29**(1990)2555.
- [16] H. Urayama, H. Yamochi, G. Saito, S. Sato, A. Kawamoto, J. Tanaka, T. Mori, Y. Maruyama and H. Inokuchi : *Chem. Lett.* (1988)463.