

参考文献

- 1) Y. Kuramoto, Z. Phys. 3 (in press).

実験及びNCAに関する文献は、この中に引用してある。

- 2) B. Brandow, J. Magn. Magn. Mater. 52 (1985) 25.

22. 合金系の高密度近藤状態

阪大・工 笠井 秀 明

阪大・基礎工 吉 森 昭 夫

CeCu_6 , CeAl_3 , CeCu_2Si_2 などのCe化合物は, Ce原子をLa原子で置換していくとき, 高密度近藤状態から希薄極限の近藤不純物状態へと遷移していく^{1,2)}。それにともない電気抵抗, 比熱, 帯磁率等の温度依存性が変化をみせる。ここでは, とくに高密度近藤状態から近藤不純物状態への遷移に対応する電気抵抗の温度依存性の変化について述べたい^{3,4)}。

高密度近藤状態にあるCe化合物の電気抵抗は, 次のような温度依存性を示す。絶対零度ではCe原子が規則格子をつくっているので電気抵抗は零であり, 温度 T の上昇にともない T^2 に比例して増加する。そしてやがて電気抵抗は最大値を示し, さらに高温側では, ほぼ温度の対数依存性をもって減少していく。この温度依存性は, 周期的アンダーソンモデルをつかい, 自己エネルギー及びバーテックス部分に対する相互作用 U の高次の異なる格子点にまたがる項の寄与が無視できるとすれば, 理論計算によって定性的に説明できる³⁾。

一方, 希薄極限での近藤不純物状態では, 電気抵抗はユニタリティー極限の残留抵抗値を絶対零度でとり, 温度上昇にともない T^2 に比例して減少し, さらに特性温度 T_K よりも高温側では, 温度の対数依存性をもって減少する。この希薄系での電気抵抗の温度依存性は既に理論的に説明されている。

では, 合金系の電気抵抗がどのような温度依存性を示すのか調べていくことにする。合金系を記述するハミルトニアンは,

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + V \sum_{k,\sigma} (f_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + C_{k\sigma}^+ f_{k\sigma}) + \sum_{k,\sigma} \epsilon_V(k) f_{k\sigma}^+ f_{k\sigma}$$

$$+ \sum_{l,\sigma} (\nu_{Cl} E_C n_{l\sigma} + \nu_{Ll} E_l n_{l\sigma}) + U \sum_l \nu_{Cl} f_{l\uparrow}^+ f_{l\uparrow} f_{l\downarrow}^+ f_{l\downarrow}, \quad (1)$$

と書ける。右辺第1項は伝導電子の運動エネルギー、第2項はf電子と伝導電子との混成項、第3項はf電子のバンドエネルギーである。f電子のエネルギー準位には2種類あり、 l 番目の格子点にA原子(Ce原子)がいるときには E_C で、B原子(La原子)がいるときには E_L であり、

$$E_C = -U/2, \quad E_L \rightarrow \infty$$

とおく。A, B原子の分布は完全にランダムであるとし、 $\nu_{Cl} (\nu_{Ll})$ はその分布での確率変数であり、

$$\nu_{Cl} (\nu_{Ll}) = \begin{cases} 1 & l \text{ 番目の格子点に A (B) 原子がいるとき} \\ 0 & l \text{ 番目の格子点に A (B) 原子がいないとき} \end{cases}$$

で与えられるとする。各格子点はA, B原子のいずれかによって占められているから、

$$\nu_{Cl} + \nu_{Ll} = 1$$

であり、A原子の濃度を x とすると、

$$\langle \nu_{Cl} \rangle = x, \quad \langle \nu_{Ll} \rangle = 1 - x$$

である。ここで $\langle \dots \rangle$ はA, B原子の配置平均を意味する。また、

$$n_{l\sigma} = f_{l\sigma}^+ f_{l\sigma}$$

であり、(1)式の最後の項はA原子がいる格子点で、f電子間に働くクーロン相互作用を表わしている。系は完全な電子・空孔対称性をもつものとする。また、 $U=0$ で系を金属的にしたので、f電子にもバンドを導入したが、簡単のために

$$\varepsilon_V(k) = \alpha \varepsilon_k \quad (\alpha \ll 1)$$

とする^{5,6)}。

クーロン相互作用 U の自己エネルギー Σ への寄与には、異なる格子点にまたがる項からのものもあるが、ここでは、同一格子点だけを含む項の寄与が主要であり、異なる格子点にまたが

る項の寄与は無視できるものとする。この仮定をすれば、自己エネルギーのスケルトンは、1個の不純物の近藤効果のものと同じになり、それについて知られている結果を利用できる。

一方、A, B 原子のランダムな配置に基づく効果は、コヒーレントポテンシャル近似 (CPA) で取扱う。このとき出発となる有効ハミルトニアンは、(1) 式において右辺の最後の項を除き、第 4 項を

$$\sum_{l,\sigma} [\nu_{Cl} \Sigma(z) n_{l\sigma} + \nu_{Ll} E_L n_{l\sigma}]$$

と置き換えたものである。クーロン相互作用は $\Sigma(z)$ に繰込まれている。f 電子の準位は l 番目の格子点に A 原子がいるときは $\Sigma(z)$ であり、B 原子がいるときは E_L である。これに対して CPA では、各格子点に有効なエネルギー準位 $S(z)$ をもつ原子を並べる。この有効媒質中で系は並進対称性を回復する。 $S(z)$ は

$$1 - x - x \frac{[\Sigma(z) - S(z)] F(z)}{1 - [\Sigma(z) - S(z)] F(z)} = 0, \quad (2)$$

によって定められる。ここで、 $F(z)$ は f 電子のグリーン関数で、

$$F(z) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{z - \epsilon_V(k) - S(z) - \frac{V^2}{z - \epsilon_K}}, \quad (3)$$

で与えられる。自己エネルギー $\Sigma(z)$ が与えられると、(2), (3) 式より $S(z)$, $F(z)$ が求められる。それをつかうと A 原子がいる格子点での f 電子のグリーン関数 $F_C(z)$ は

$$F_C(z) = \frac{F(z)}{1 - [\Sigma(z) - S(z)] F(z)}, \quad (4)$$

で与えられる。さらに、伝導電子のグリーン関数も $S(z)$ をつかって計算することができる。このようにして求められる f 電子及び伝導電子のグリーン関数をつかうと、電気伝導度 σ は、

$$\sigma = A \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{df}{d\epsilon} \frac{|S(\epsilon + i0^+)|^2 + r \Delta^2(1)}{S_I(\epsilon + i0^+)}, \quad (5)$$

と書けることがわかる。ここで A は定数、 f はフェルミ分布関数、 S_I は S の虚部であり、

$$r = 4(\pi \rho V)^2 / \alpha$$

である。 ρ は伝導電子のフェルミ準位での状態密度である。また $\Delta(x)$ は A 原子がいる格子点での f 電子の無摂動のグリーン関数 $F_C^0(z)$ をつかい、

$$1/\Delta(x) = -\operatorname{Im} F_C^0(i0^+), \quad (6)$$

と表わされる。(5)式で与えられる電気伝導度 σ は、 $x \rightarrow 1$ の近藤格子系及び $x \rightarrow 0$ の希薄極限の近藤不純物でのそれを再現することは、 $S(z)$ が対応する極限のものになることから確かめることができる。

モデルに含まれるパラメーターは伝導電子のバンド幅 $2D$ 、 U 、 V 、 α の4つであり、以下で示す計算結果は、

$$V/D = 0.1, \quad \alpha = 0.05, \quad U/D = 0.4 \quad (U/V = 4)$$

としたときのものである。まず、低温($T \ll T_K(x)$)での電気抵抗 $R (= 1/\sigma)$ を求める。自己エネルギー Σ は ε 、 T の小さい所で

$$\Sigma(\varepsilon + i0^+) = -\frac{\Delta(x)}{T_K(x)} \varepsilon - i \frac{\Delta(x)}{2} \left\{ \left[\frac{\varepsilon}{T_K(x)} \right]^2 + \left[\pi \frac{T}{T_K(x)} \right]^2 \right\}, \quad (7)$$

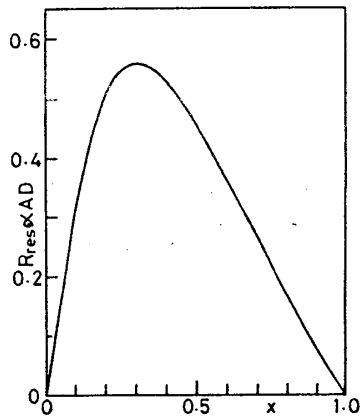
と書ける^{7,8)}。ここで特性温度 $T_K(x)$ は、

$$T_K(x) = \sqrt{8U\Delta(x)/\pi} \exp[-\pi U/8\Delta(x)]$$

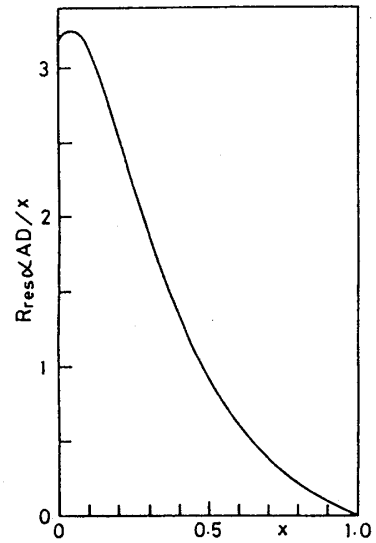
で与えられるとする。この自己エネルギー Σ をつかうと、(2)、(3)式より $S(z)$ が求められ、(5)式より電気抵抗が計算できる。残留抵抗 R_{res} の x 依存性を第1図に示す。 $x=1$ では、系は規則格子を形成しているから残留抵抗は零であり、 $x \rightarrow 0$ の極限においても磁性不純物がないので零である。 $0 < x < 1$ で有限の値をもつ。第2図には磁性不純物1個当りの残留抵抗 R_{res}/x が示されている。やはり $x \rightarrow 1$ で零であるが、 x の減少につれて増加し、 $x \rightarrow 0$ でユニタリティー極限の値へと近づく。次に少し温度を上げてみる。このときの残留抵抗を差し引いた電気抵抗 $R - R_{\text{res}}$ を第3図に示す。磁性不純物の濃度 x によらず抵抗は T^2 に比例している。

$$R - R_{\text{res}} = AT^2$$

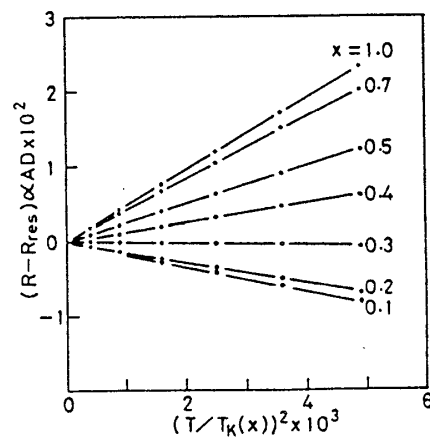
と表わすとき、 x が小さい所で A は負の値をとっているが、 x が大きい所では A は正の値をとる。すなわち、希薄合金では電気抵抗は絶対零度で最大値をとり、まず T^2 に比例して減少する。一方、高密度系では電気抵抗は T^2 に比例して増加する。この低温での電気抵抗の T^2 の係数の符号の変化が、この計算での近藤不純物状態から高密度近藤状態への遷移に対応していると解釈できる。



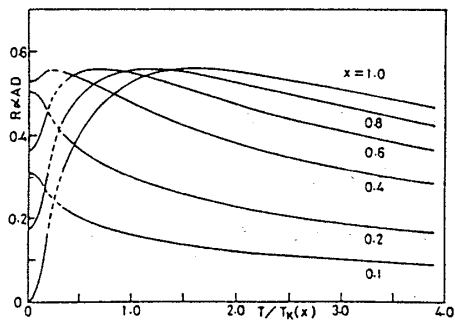
第1図 残留抵抗 ($R_{\text{res}} \propto AD$) の x 依存性



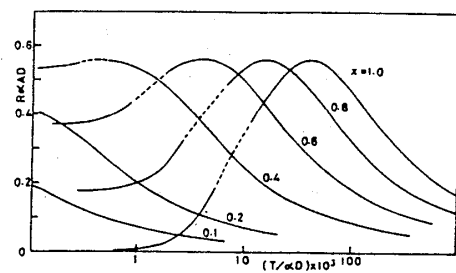
第2図 $R_{\text{res}} \propto AD / x$ の x 依存性



第3図 低温の電気抵抗 ($R - R_{\text{res}} \propto AD$) の T^2 依存性



第4図 電気抵抗の温度変化



第5図 電気抵抗の温度変化

次に高温 ($T \geq T_K(x)$) の電気抵抗を調べる。自己エネルギー Σ は

$$\Sigma(i0^+) = iA(x) \left[\ln(T/T_K(x)) + \{ (\ln(T/T_K(x)))^2 + a \}^{1/2} \right] \\ \times \left[\ln(T/T_K(x)) - \{ (\ln(T/T_K(x)))^2 + a \}^{1/2} \right]^{-1}, \quad (8)$$

と書ける⁹⁾。ここで、 $a = 3\pi^2/4$ である。これを用いて、(2), (3) 式より $S(i0^+)$, (5) 式より電気抵抗を求める。第4図に電気抵抗の低温から高温までの変化を示した。第5図は、第4図と同じ計算結果であるが、横軸は温度の対数にしてある。計算結果は、 $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$,¹⁰⁾ $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_2\text{Si}_2$ ¹⁾ などの合金系でみられる電気抵抗の温度変化を定性的に説明している。

ここでは、 CeCu_6 , CeAl_3 , CeCu_2Si_2 などの Ce 化合物の Ce 原子を La 原子で置換した合金において、Ce 原子の濃度の低い希薄系から濃度の高い系に至るまで、その電気抵抗の温度依存性を調べた。抵温での電気抵抗は Ce 原子の濃度によらず、温度 T に関して T^2 の依存性を示すが、その係数は符号、大きさともに Ce 原子の濃度に依存している。とくに、 T^2 の係数の符号の変化は、この計算での近藤不純物状態から高密度近藤状態への遷移に対応していると考えることができる。

文 献

- 1) N. B. Brandt and V. V. Moschalkov, Adv. Phys. **33** (1984) 373.
- 2) P. A. Lee, T. M. Rice, J. W. Serene, L. J. Sham and J. W. Wilkinson, Comments on Solid State Physics に投稿中。
- 3) A. Yoshimori and H. Kasai, J. Mag. Mag. Mat. **31-34** (1983) 475.
- 4) A. Yoshimori and H. Kasai, Solid State Commun. **58** (1986) 259.
- 5) H. Jichu, T. Matsuura and Y. Kuroda, Prog. Theor. Phys. **72** (1984) 366.
- 6) H. Fukuyama, Proc. 8th Taniguchi Symposium ed. T. Kasuya and T. Saso (Springer Verlag, Berlin, 1985) 209.
- 7) P. Nozieres, J. Low. Temp. Phys. **17** (1974) 31.
- 8) K. Yosida and K. Yamada, Prog. Theor. Phys. **53** (1975) 1286.
- 9) W. Brenig and J. Zittartz, Magnetism V, ed. H. Suhl (Academic Press, New York, 1973) 185.
- 10) A. Sumiyama, Y. Oda, H. Nagano, Y. Onuki and T. Komatsubara, J. Phys. Soc. Japan **54** (1985) 877.