

高濃度近藤系の基底状態についての理論の現状と問題点

京大基研 山田耕作

理論の現状

昨年開かれたICMでもそうであったが、近藤効果と高濃度とを共に考慮した基底状態の理論は全くないと言ってもよいと思う。低濃度なら近藤効果も記述できて、高濃度の場合は難しい。通常のHartree-Fock近似やCPA等の方法では近藤効果を記述できない。

問題点について

したがって、基底状態の理論として報告できるもので、日頃考えている問題点を述べたいと思う。まず、低濃度であれば近藤効果が存在するのは確かである。これをrandomに高濃度にしてゆくとCuMnのようなspin glassになる。この時、Mnの濃度按比例する T_g という温度以下ではorderが起り、近藤効果は現われにくくなるだろう。周期的な系として高濃度にすれば、Periodic Anderson Hamiltonianやその極限としてのKondo latticeのHamiltonianである。Periodic Anderson Hamiltonianは

$$H = \sum_{k,n} E_k n_{kn} + \sum_{kn} V_k (a_{kn}^+ c_{kn} + c_{kn}^+ a_{kn}) + U \sum_i a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow} + E_0 \sum_i a_{i\uparrow}^+ a_{i\uparrow} \dots (1)$$

と表わされ、同一原子内でクーロン反発力 U をもつ局在level E_0 の状態が E_k のenergyをもつ伝導電子系と V で混成しているものである。ここで、 $E_0 = -U/2$ としてsymmetricな場合とし、 $U \gg \pi \rho V^2 = \Delta$ (ρ はconduction bandのFermi面でのstate density), さらに各siteに平均2個の電子が存在する場合を考える。この時、各siteの局在軌道に1個の電子がつまり、そのスピンのsite当り1個の(bandとしてはhalf-filled)伝導電子系とs-f exchange相互作用をするKondo latticeと呼ばれるHamiltonianになる。このHamiltonianは近藤効果を表わすHamiltonianを密にして各siteに並べたもので、dense Kondo系を記述するのに不足の部分はないはずである。したがって、(1)式のPeriodic Anderson Hamiltonianはその一部としてDense Kondo系を記述するはずで、(1)の基底状態をくまなく調べればよいはずである。

では(1)のHamiltonianがDense Kondo系を記述するのはどのような場合だろうか。

(a) 少なくともKondo効果を記述しなければならないから、 $T_K \sim 10K$ かそれ以下の必要がある。 T_K が高いと抵抗異常等が観測されない。したがって $\Delta/E_0 \ll 1$, ($\Delta/E_0 \sim \frac{1}{5}$)でなければならない。この条件は局在軌道がmagneticで、局在スピンの確立している条件を表わす。

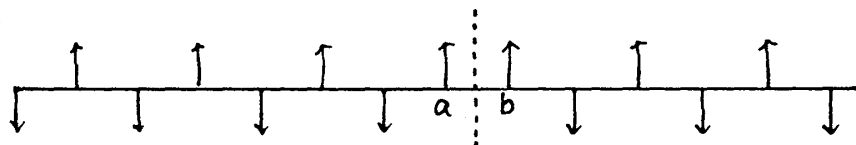
(b) もう1つの条件は、long range orderが起る温度 T_c なり T_N が上に述べた低い T_K と同じくらいか、もっと低くなければならない。そうでなければ、長距離秩序が高濃度から実現し、Hartree-Fock近似でもそう悪くない基底状態となり、近藤効果はどこにも現われない。重いrare earth metalのscrew構造はこの場合に相当すると思われる。もちろん、現実の稀土類金属を説明するには軌道縮退を入れ、L-S couplingや結晶場を考え、異方性も

要かも知れないが、主にはRKKY相互作用から決まる最大の $J(Q)$ の大きさが長距離秩序を決めるだろう。とすれば長距離秩序を決めるRKKY相互作用、 $J(Q)$ が小さい理由が問題になると思われる。(1)やKondo latticeのHamiltonianを考える限り、伝導電子のバンド構造によってしか説明できないように見える。ただし、以前(昨年の芳田の報告)我々が述べたようにparamagneticな状態でもFermi面にGapが存在し、energyを下げ、long range orderが起りにくい場合もありうると思われる。いずれにせよ、局在スピンのRKKY相互作用もしている系で長距離秩序が起りにくいcaseとその理由が重要な問題と思われる。ただし、(c)の場合局在スピンの小さいから、それだけでも T_c は10K位になる。

また、上に述べたようにPeriodic Anderson HamiltonianはDense Kondo系のみならず、広い内容を含んでおり、金属磁性全体の問題と深くかかわっていると思われる。

Dense Kondo systemの基底状態について

T_K と T_c が低いことが必要条件であるにしても、基底状態で各siteで近藤効果の意味でのsingletが実現したり、その影響が残っているかどうかは基底状態を求めてみなければわからない。 T_K が低い場合のparamagneticな基底状態を求めることが最も重要な問題と思われるが難しい。そこで、この場合について少し(思いついたことを述べて)内容が願うことをする。long range orderが存在しない系($T_N \rightarrow 0$)として、1次元Kondo latticeを考える。さらに T_K は低く、 $J \rightarrow 0$ の場合を考え、conduction bandはhalf-filledとする。この場合、 $q = 2k_F = \pi/a$ でconduction bandの χ_q は対称発散し、spin density waveができる。この際、局在スピンは各siteで交互に反強磁性的に並ぶ。この反強磁性的な秩序によるenergyの下りは $Nj^2 \log(D/j)$ ($j = J/4$, D はconduction bandの巾)となる。この下りは仮りに各siteで独立にconduction electronをcoupleしたsinglet ground stateを作ったときのenergyの下り $N(De^{J^2} + O(J^2) + O(J^2) + \dots)$ よりも $\log D/j$ の効果で大きくなり、反強磁性的な秩序を無視しては基底状態を記述するのは難しいと思われる。上の比較は強いNestingの存在する系であれば3次元でも同様である。1次元ではこの反強磁性的な秩序が無限の遠方まで続かず、逆向きのdomainも存在した常磁性状態になるだろう。我々の以前の話では J の小さい常磁性状態から今述べたような状態へFermi面近くのGapを保持したまま、(ただし、最小Gapの位置は $k=0$ と $k=\pi/a$ の間から $k=\pi/2a$ と $3\pi/2a$ の間へ移動する)連続的に移行することになる。



上図のような状態で2つのDomainが接している時、s-exchangeの横成分 $J_{\perp}(S^x_a + S^x_b)$ が働く場合を考える。注目したいのはDomainの境界にある2つのスピンa, bは反転によってもそれぞれのDomainが伸縮するだけでenergyをかえないことである。この局在スピンの反転と同時にconduction electron spinは逆方向に反転し、Kondo効果似たような状態を伴いつつ、Domainの境界が格子間をtransferしていく。この時、conduction electronのspin density waveが乱される効果があり、問題は複雑で、このようなmodelの現実性を検討中である。