

SmB_6 の異常. Gap の origin と $4f$ 伝導機構

東北大理 糟谷忠雄 竹原克彦 笠谷光男

Introduction の §4 に於て述べてある様に SmB_6 は Sm 二価 ($4f^6, S=3, L=3, J=0 \cdots 6$) と三価 ($4f^5, S=\frac{5}{2}, L=5, J=\frac{5}{2} \cdots \frac{15}{2}$) が 1:2 の比で存在する典型的価数揺動状態を示す物質で特に低温でみられるギャップ状態の起源及び狭い $4f$ 擬粒子の運動 (伝導) 機構に多くの興味がある。

Gap formation mechanism としては, Mott の $d-f$ hybridization model と吾々の amorphous Wigner crystallization model があるが種々の実験は後者に favorable と思われる (比熱の fitting, 格子常数の低温での上昇 ($d-f$ mixing model では Ce 化合物にみられる様に減少する), 異常ホール効果の温度変化, NMR の T_1 , 超音波吸収, 音速の温度変化等) が決定的な実験はなかなか難しい (糟谷 ICM Kyoto review)。

$4f$ 伝導としては 100 K 以上にみられる異常に大きな異常ホール効果が $4f$ の運動によるものと思われる (希土類金属に典型的に現われる $5d$ 伝導電子による異常ホール効果より二桁大きい)。これは 100 K 以下で急速に消えて $4f$ が伝導に寄与しなくなる事を示し, Wigner crystal formation による局在化を示す。 4 K 以下の低温になると $5d$ の寄与は gap により exponential に減少して再び $4f$ の impurity state による伝導が現われる。これは Si, Ge に於る impurity conduction と異って最低温度 (15 mK) に於て常に金属伝導を与え (no activation energy, 但し抵抗は $80\Omega\text{ cm}$ にも達する) ホール効果 (正常ホール効果と思われる) も観測される。これから得られる見掛けの carrier number は $10^{17}/\text{cm}^3$ に達する。Si に於てより遙かに小さい有効質量の場合に於てさえ $10^{17}/\text{cm}^3$ では完全に non-metallic region であることを考えると非常に重い有効質量を持った $4f$ impurity が non-localized 的振舞いをするのは不思議である。これは比熱の T -linear term (普通の金属程度ある) の存在と合せて amorphous Wigner crystal 中に存在する two level tunneling state が互にクーロン相互作用をして居ると共に dynamical に新しい two level system を作りながら non-activating に $4f$ polarization を電場方向に動かして居るのではないと思われるが, 未だ具体的な計算はなされて居ない (佐宗)。

多体力が主になって局在した系に randomness が少しある系の伝導は逆の立場の approach に比して大きな相違があると思われるがこれも今後の問題である。なお低温の熱起電力はホール効果と同じ符号を取るが, その絶対値, 温度変化共に単純な従来知られて居る不純物モデルでは説明出来ない。 $4f$ 伝導を扱うには $4f$ を擬バンドとして考えなければならぬが, その最も簡便な方法は Hubbard I モデルの拡張であろう。これは当然高温で正しい原子レベルモデルとは一致しないと思われるが, 詳細な数値計算によれば数百度 K に至る迄極めて良く atomic model と一致することが分った。何故それ程良く合うのか目下検討中である。