

|             |                                 |
|-------------|---------------------------------|
| 氏 名         | みやざわ もり お 雄                     |
| 学位(専攻分野)    | 博 士 (理 学)                       |
| 学 位 記 番 号   | 理 博 第 2976 号                    |
| 学位授与の日付     | 平 成 18 年 3 月 23 日               |
| 学位授与の要件     | 学 位 規 則 第 4 条 第 1 項 該 当         |
| 研究科・専攻      | 理 学 研 究 科 物 理 学 ・ 宇 宙 物 理 学 専 攻 |
| 学 位 論 文 題 目 | Fermi 液体論に基づいた Ce 化合物の帯磁率の解析    |

|        |                      |             |             |
|--------|----------------------|-------------|-------------|
| 論文調査委員 | (主 査)<br>教 授 山 田 耕 作 | 教 授 松 田 祐 司 | 助教授 池 田 隆 介 |
|--------|----------------------|-------------|-------------|

### 論 文 内 容 の 要 旨

セリウム Ce やウランウム U を含む金属間化合物は重い電子系と呼ばれ、電子の有効質量が100倍から1000倍も大きくなる。これは f 電子間のクーロン斥力によるもので電子相関効果と呼ばれる。この有効質量の増大に対応して、重い電子系の磁化率も同じオーダーで増大することが実験・理論の両面で示されている。具体的には、 $T=0$  での磁化率と温度  $T$  に比例する電子比熱係数の比はウイelson比と呼ばれ、おおよそ1から2の間の値をとることが知られている。

このような重い電子系では電子間のクーロン相互作用によって磁性や超伝導が起こる。申請論文は、長距離秩序が起こる以前の、低温の正常状態における磁化率と比熱係数を求める方法を開発し、実行したものである。

このような研究が必要である理由は、電子間相互作用の働く多体問題であるために理論計算が非常に困難であることによる。そのため、磁化率や比熱という基本的な物理量でありながら、この問題を正面から取り上げて研究する人は極少数である。申請者は多体問題を一体問題の形式に還元し、それを用いて磁化率や比熱などの低温の物理量を計算する方法を提案し、実行し、実験と整合性のある結果を提出したものである。

まず、ミクロなハミルトニアンとして周期的 Anderson Hamiltonian から出発し、f 電子のサイト内のクーロン相互作用によって増大する自己エネルギーの磁場または周波数による繰り込み効果を詳細に調べた。繰り込み因子はそれぞれ増大因子の逆数で、1 より小さい  $zH, z$  を用いて表される。自己エネルギーは一般に軌道間の非対角項を持つから、複雑な行列要素を持つことになる。これらをミクロな Hamiltonian から出発して  $U$  の関数として計算することは大変難しい。そこで申請者は軌道準位や混成項、遷移行列がそれらの非対角項も含めた繰り込みの結果として定まっており、実験で観測される結晶場準位が決定されるとして、その実験値から出発してこの困難を回避する方法を開発した。

この過程で実験値で与えられ、数百度の大きさを持つ結晶場分裂はすでに繰り込まれた値であることを明らかにした。このことを利用して、繰り込まれたフェルミ液体を構成した。この時、バンド計算やド・ハース・ファンアルフェン効果の実験で決定されたフェルミ面は繰り込みでも不変であることを用いて、電子状態を決めるパラメーターを定めた。この還元された一体的な電子状態に一体の場合の磁化率の計算式を適用し、物理量を計算した。このような方法を用いて磁化率と比熱の温度変化を実験に合わせることができた。こうしてこのような現象論で磁化率と比熱が計算できることを示した。その際、磁化率の異方性と温度変化を実験にあわせるには結晶場の上のレベルが一般に無視できないことが示された。

特に  $\text{CeCoIn}_5$  に関して詳細な計算が行われ、パウリ項の寄与やヴァン・ブレック項の寄与が求められ、実験と比較できた。ほぼ、ナイトシフトの実験に対応する値が得られた。

逆に磁化率を説明するのに用いた電子状態を繰り込まない状態に戻すことによって、バンド計算の結果を基本的に再現できることを示した。こうして一様な繰り込みの手法が妥当であることが確かめられた。

## 論文審査の結果の要旨

重い電子系の磁化率に関しては国際的な論争を伴いながら、難問として微視的な計算は放置されてきたものである。15年ほど前、Zou・Anderson はパウリ項は増大するが Van・Vleck 項は多体効果で増大しないという論文を発表した。これに対していくつかのグループが異議を唱え、Van・Vleck 項の増大を主張した。Anderson も反論し、決着を見なかった。これを解決したのが紺谷浩らの縮退した周期的 Anderson 模型を用いて、磁化率を計算した論文である。中野正浩はフェルミ液体論を駆使して、磁化率の表式を導出したが、Van・Vleck 項がフェルミ面の状態密度のみでなく、バンドの底からの積分で与えられ、現実的な計算が困難であることを原因を含めて示した。しかし、具体的計算には踏み込まなかった。

申請論文は磁化率の計算という永年の難問を解決し、何とか実験と比較し、物理的機構を議論できる段階まで理論を発展させたものである。永年放置されてきた原因は計算困難な多体問題にある。増大因子が100倍にもなるのでオンサイト斥力  $U$  の2次摂動では不十分で4次まで計算する必要がある。行列要素が多数あり、計算は困難である。

そのような困難を避け、繰り込まれたフェルミ液体の電子状態から出発して磁化率を計算するのが本申請論文の方法である。しかし、この方法も確立されたものはなかった。

例えば、真栄平、堀田、上田の論文では、実験で観測された結晶場は繰り込まれた値ではないとして取り扱ったために混乱した結果を生じた。申請論文はこれらの混乱を丁寧な解析で明らかにし、正しい方法を提案し、実験を説明したものである。

まず、ミクロな周期的 Anderson 模型から出発し、クーロン斥力による自己エネルギーを導入し、磁場と周波数での繰り込みの様子を調べた。その後、それに整合する現象論を導入して、一体の低温での電子状態を求めた。結局、その一体の状態から、一体問題として磁化率を計算して妥当な値が得られることを示した。このようなことが可能かどうかは実行しなければわからなかったことである。思考錯誤の末、正しい方式が得られた。さらに Wilson 比に対応する  $z/z_H$  として、1と1.5を用いて計算し、磁化率はその値に敏感でないことが示され、現象論的な解析の妥当性が確認された。磁化率の異方性を含めて説明し、同じ電子状態を用いて比熱係数の増大を説明した。このように地味な計算ではあるが、多体効果の下での磁化率の計算という困難な問題に関する解決策を見つけた点で高く評価できる。今後、関連の強い電子系の磁化率、比熱の解析方法として広く適用されると考えられる。

公聴会における申請論文に関連する事項についての試問の結果、十分な学識と研究能力を有することを確認した。以上の結果から、博士として合格と認めた。