

強相関電子系におけるフェルミ液体論と近藤効果

東北大学大学院理学研究科 楠瀬博明*¹

1. はじめに

Landau によって提唱されたフェルミ液体理論は、多体相互作用の断熱接続性の概念に基づき多大な成功を収めてきた。特に、1970年代後半に Ce や U を含む化合物で発見された「重い電子系」は、フェルミ液体論の適用範囲の広さを示す好例といえる。一方、近藤効果は、局在スピンの揺らぎによって生じる電気抵抗の特異な温度依存性を解明する理論として提出された。その後の研究により、近藤効果は、スピンの揺らぎの特徴的なエネルギーを境にして高温側の局在スピンの物理と低温側の局所フェルミ液体の物理が連続的に移り変わる現象として位置づけられている。現在では、重い電子がフェルミ液体論で記述されること、なぜ重くなるのか、という基本的な点については理解が得られている。しかし、現実の重い電子系では、複雑なフェルミ面、軌道の自由度、結晶場などの要素があり、これらが重い電子系のもつ個性にどのような影響を及ぼしているのか、あまり理解されていないのが現状である。

本稿の目的は、こうした現状を打破する糸口となるよう、フェルミ液体論や近藤効果に関する基本事項を解説することにある。まず、現象論的なフェルミ液体論を簡単に復習した後、重い電子系のフェルミ液体論について述べる。また、局所フェルミ液体が形成されるプロセスとしての近藤効果を説明する。その後、局所フェルミ液体が実現しない特殊な近藤効果や、局所電子格子相互作用系で起こる「近藤効果」について述べる。本稿では、 $\hbar = k_B = 1$ とする。

2. フェルミ液体論入門

フェルミ液体理論は、 ^3He の液体状態を記述する目的で Landau によって提出された現象論である [1]。この理論は、相互作用のあるフェルミ粒子系の基底状態と低励起状態が、相互作用のないフェルミ気体の対応する状態と断熱的に繋がっているという仮定の上に成り立っている。フェルミ液体論の初歩とグリーン関数法との関係について簡単に説明しよう [2,3]。

*¹E-mail: kusu@cmpt.phys.tohoku.ac.jp

2.1. 現象論的フェルミ液体論

自由電子系の基底状態は、フェルミ波数 $k_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$ 以下の波数を持つ平面波一電子状態に電子を詰めた状態である。基底状態に対する低エネルギー励起は、フェルミ球付近に電子またはホールを付け加えることで作られる。このような励起は運動量分布関数の基底状態からのずれ

$$\delta n(\mathbf{k}, \sigma) = n(\mathbf{k}, \sigma) - n_0(\mathbf{k}, \sigma), \quad n_0(\mathbf{k}, \sigma) = \theta(k_F - |\mathbf{k}|) \quad (2.1)$$

で特徴づけられる。例えば、フェルミ球内部の \mathbf{k}_1 、スピン σ_1 の状態を、球外側の状態 \mathbf{k}_2, σ_2 へ移動する励起であれば、 $\delta n(\mathbf{k}, \sigma) = -\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \delta_{\sigma, \sigma_1} + \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2} \delta_{\sigma, \sigma_2}$ と表せる。このような表現を用いることで、基底状態を構成するフェルミ球内部の 10^{23} 個程度の電子状態を直接相手にせず、フェルミ準位近傍の限られた電子状態のみで系の低エネルギー状態を記述することが可能となる。

Landau は、相互作用のある系の低励起状態は自由電子系の低エネルギー状態と一対一対応がある、と仮定した。すなわち、相互作用系の低エネルギー状態も $\delta n(\mathbf{k}, \sigma)$ を用いて表せるはずである。そこで、相互作用系の全エネルギーを $\delta n(\mathbf{k}, \sigma)$ の汎関数と考え、ずれ δn で展開すれば

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}, \sigma} \delta n(\mathbf{k}, \sigma) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} f(\mathbf{k}\sigma; \mathbf{k}'\sigma') \delta n(\mathbf{k}, \sigma) \delta n(\mathbf{k}', \sigma') + O(\delta n)^3 \quad (2.2)$$

となる。第二項は、準粒子間の相互作用に対応し、 $f(\mathbf{k}\sigma; \mathbf{k}'\sigma')$ をランダウパラメータと呼ぶ。準粒子の有効エネルギーは

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\delta E}{\delta n(\mathbf{k}, \sigma)} = \epsilon_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} f(\mathbf{k}\sigma; \mathbf{k}'\sigma') \delta n(\mathbf{k}', \sigma') \quad (2.3)$$

である。第1項は自由な準粒子の持つエネルギー、第2項は他の準粒子との相互作用から生じるエネルギーである。

k_F は密度 $n = N/V$ の関数として決まり、相互作用によって変化しない^{*2}。そこで自由電子気体にならって

$$\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \epsilon_F^* + \frac{k_F}{m^*} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_F) + \dots \quad (2.4)$$

のように有効質量 m^* を定義する。ここで、 ϵ_F^* は繰り込まれたフェルミエネルギーである。フェルミ準位近くの準粒子のスピンあたりの状態密度は

$$\rho_F = \frac{m^* k_F}{2\pi^2} V = \frac{m^*}{m} \rho_{F0} \quad (2.5)$$

である。 ρ_{F0} は自由電子気体の状態密度を表す。

ランダウパラメータは、スピン空間に回転対称性がある場合、スピン σ と σ' の相対的な向きだけに依存するので

$$F^{s,a}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \rho_F [f(\mathbf{k}\sigma; \mathbf{k}'\sigma) \pm f(\mathbf{k}\sigma; \mathbf{k}' - \sigma)] \quad (2.6)$$

のように、スピンについて対称、反対称部分を導入する。 $F^{s,a}$ は無次元 $O(1)$ の量である。低温では、 \mathbf{k} 、 \mathbf{k}' としてフェルミ準位近傍だけ考えればよい。さらに、空間の等方性から \mathbf{k} と \mathbf{k}' の相対角だけに依存す

^{*2}実際の金属のように結晶の対称性を持つ系では、フェルミ波数 k_F は相互作用によって変形する。しかし、フェルミ面で囲まれる領域の体積は不変である(ラッティンジャーの定理 [4])。

ることを考慮してルジャンドル展開する。

$$F^{s,a}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\ell=0}^{\infty} F_{\ell}^{s,a} P_{\ell}(\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{F}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'_{\mathbf{F}}) \quad (2.7)$$

ここで、 $\hat{\mathbf{k}}_{\mathbf{F}} = \mathbf{k}/k_{\mathbf{F}}$ とした。

さて、簡単のため F_0^s 以外はすべてゼロの場合を考えてみよう。このとき

$$\tilde{\epsilon}_{k\sigma} = \epsilon_{k\sigma} + \phi, \quad \phi = \bar{\chi}_c^{-1} F_0^s \delta n, \quad \delta n = \sum_{k\sigma} \delta n(\mathbf{k}, \sigma) \quad (2.8)$$

である。 δn は全粒子数の変化を表す。第2項はハートリー型の有効ポテンシャルの役割を果たす。

$\bar{\chi}_c = 2\rho_{\mathbf{F}}$ は、質量 m^* の自由粒子の電荷感受率である。

次に、スピン依存性も加えて F_0^s, F_0^a のみゼロでない場合を考える。すると

$$\tilde{\epsilon}_{k\sigma} = \epsilon_{k\sigma} + \phi - \mu_B \sigma h, \quad h = -\bar{\chi}_s^{-1} F_0^a \delta \sigma, \quad \delta \sigma = \mu_B \sum_{k\sigma} \sigma \delta n(\mathbf{k}, \sigma) \quad (2.9)$$

となり、第3項はワイス型の分子場を表している。 $\bar{\chi}_s = 2\rho_{\mathbf{F}} \mu_B^2$ は質量 m^* の自由電子のパウリ帯磁率である。

これらの例から分かるように、ランダウのフェルミ液体論ではいろいろな分子場中で質量 m^* の自由粒子が運動していると見なすことができる。相互作用があっても、熱励起では正味の粒子数変化はない、つまり、 $\delta n = 0$ 。従って、比熱には分子場の寄与はなく、有効質量の効果だけを考慮して

$$C = \frac{2\pi^2}{3} \rho_{\mathbf{F}} T = \frac{m^*}{m} C_0 \quad (2.10)$$

となる。

次に化学ポテンシャルの変化 $\delta\mu$ によって全粒子数の変化 δn が生じたとする。このとき、分子場からの寄与も含めた有効的な化学ポテンシャルの変化は $\delta\mu_{\text{eff}} = \delta\mu - \phi$ である。一方 $\delta n = \bar{\chi}_c \delta\mu_{\text{eff}}$ が成り立つ。これらを連立して $\delta\mu_{\text{eff}}$ を消去すれば、フェルミ液体の電荷感受率

$$\chi_c = \frac{\partial n}{\partial \mu} = \frac{\bar{\chi}_c}{1 + F_0^s} = \frac{(m^*/m)\chi_{c0}}{1 + F_0^s} \quad (2.11)$$

を得る。 χ_c は圧縮率 $\kappa = -(\partial V/\partial p)/V$ と $\kappa n^2 = \chi_c$ の関係にある。

同様に一様外部磁場 H をかけた時、 $h_{\text{eff}} = H + h$ および $\delta\sigma = \bar{\chi}_s h_{\text{eff}}$ より、

$$\chi_s = \frac{\partial \sigma}{\partial H} = \frac{\bar{\chi}_s}{1 + F_0^a} = \frac{(m^*/m)\chi_{s0}}{1 + F_0^a} \quad (2.12)$$

となる。ここで、 $C_0, \chi_{c0}, \chi_{s0}$ は自由電子系の比熱と感受率である。

上記の説明では、準粒子が系全体に静的かつ一様に分布していると考えていた。準粒子の分布が空間的かつ時間的に緩やかに変化している限り、半古典的な準粒子分布 $\delta n(\mathbf{k}\sigma; \mathbf{r}t)$ を考えることができる。このような考えに基づいて、準粒子に対する輸送方程式を導くこともできる。詳しくは文献 [2] を参照されたい。

準粒子は系の厳密な固有状態ではない。すなわち、 (\mathbf{k}, σ) で指定される準粒子状態は、準粒子間の衝突によって有限の寿命 $\tau_{\mathbf{k}}$ をもつ。衝突の際、エネルギーと(結晶)運動量は保存されなければならない。

フェルミ準位近傍の準粒子を考えると、パウリ原理のために、エネルギーと運動量の保存則を満たす衝突の確率は非常に小さくなる。実際、3次元の場合には $\gamma_k = 1/2\tau_k \propto \xi_k^2$ と評価され^{*3}、 $\xi_k \rightarrow 0$ で、寿命から生じる幅 γ_k は準粒子の持つエネルギー $|\xi_k|$ に比べて十分小さいことが分かる。準粒子が十分に長い寿命を持つため、あたかも一体的な記述が可能となり、多体系の低励起状態がその分布によって記述されるのである。一方、1次元では $\gamma_k \propto |\xi_k|$ と評価され、準粒子の寿命はそのエネルギーと同程度となる。この場合フェルミ液体論は成立しない^{*4}。1次元では系の低エネルギー状態は粒子の集団運動によって支配され、朝永・ラッティンジャー液体と呼ばれている [6,7]。

2.2. グリーン関数と準粒子

相互作用する系の性質を調べるための道具としてグリーン関数がしばしば用いられる。詳しい解説は専門書 [8] を参考にしてもらおうとして、ここでは、準粒子がグリーン関数の言葉でどのように表されるかについて簡単に触れる。

遅延グリーン関数は

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\mathbf{k}}^{(0)} - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A(\mathbf{k}, x)}{\omega - x + i\delta} \quad (2.13)$$

と表すことができる。ここで、 $\xi_{\mathbf{k}}^{(0)}$ は自由電子のエネルギーである^{*5}。 δ は正の微小量とする。 $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ は自己エネルギーと呼ばれ、相互作用の効果による自由電子エネルギーの補正を表す。強相関係の自己エネルギーは、磁気転移点近傍などを除いて、一般に短距離型で \mathbf{k} 依存性は弱く、強い ω 依存性をもつ。スペクトル密度 $A(\mathbf{k}, x) = (-1/\pi)\text{Im}G(\mathbf{k}, x)$ は、波数 \mathbf{k} 、エネルギー x をもつ状態の重みを表し、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx A(\mathbf{k}, x) = 1 \quad (2.14)$$

の和則を満たす。 $\rho(x) = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, x)$ は一粒子状態密度を与える。

例えば、 $A(\mathbf{k}, x) = \delta(x - \xi_{\mathbf{k}}^{(0)})$ とすれば、 $\rho(x)$ は自由電子の状態密度に帰着し、自己エネルギーはゼロ ($-i\delta$) となる。スペクトル密度が、全体の重みが z でエネルギー ξ に幅 γ のローレンツ型

$$A(\mathbf{k}, x) = \frac{z}{\pi} \frac{\gamma}{(x - \xi)^2 + \gamma^2} \quad (2.15)$$

で表されるとき、グリーン関数は

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{z}{\omega - \xi + i\gamma} \quad (2.16)$$

^{*3}有限温度では $\tau^{-1} \sim T^2$ 。

^{*4}いわゆる非フェルミ液体と呼ばれるものには、いくつかの形態があり注意が必要である。自由気体から断熱接続によって得られる準粒子を用いた一体的な記述が完全に不可能な朝永・ラッティンジャー液体や後で述べるマルチチャンネル近藤効果における局所非フェルミ液体などがその典型例である。一方、量子臨界点近傍に現れる異常なベキ依存性を伴う現象では、フェルミ面の大部分の領域で準粒子的な記述が可能であると言う点でフェルミ液体の範疇に属すると考えられる。つまり、臨界揺らぎによって種々のベキ異常が現れ、結果としてフェルミ面の一部で減衰率が異常に増大してフェルミ面が失われると考えることができる [5]。ただし、このような場合には、フェルミ液体論が妥当な温度領域の評価が難しく、このことが多くの論争を呼ぶ原因となっている。U 先生は、否定接頭語が付くような物理は発展性に乏しいと仰っていたが、理解が進み適切な語が与えられて初めて一人前というのはその通りだと思う。

^{*5}エネルギーは、化学ポテンシャル μ から測る。すなわち、 $\xi_{\mathbf{k}}^{(0)} = \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} - \mu$ 。

となる。自由粒子の場合と見比べると、このグリーン関数は、エネルギー ξ 、寿命 γ^{-1} で重みが z の準粒子を記述していると思わせる。実際、自己エネルギーをフェルミ準位近傍 $\omega = 0$ のまわりで

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) \sim \Sigma'(\mathbf{k}_F, 0) + \left. \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \omega + \frac{\partial \Sigma'}{\partial \mathbf{k}_F} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_F) + i \Sigma''(\mathbf{k}_F, \omega) \quad (2.17)$$

のように展開すると、

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{z_k}{\omega - \xi_k + i\gamma_k} + G_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.18)$$

となる。ここで、 A' は A の実部、 A'' は虚部を表す。また、

$$z_k = \left[1 - \left. \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \right]^{-1}, \quad (2.19a)$$

$$\xi_k = z_k \left[\xi_k^{(0)} + \Sigma'(\mathbf{k}_F, 0) + \frac{\partial \Sigma'}{\partial \mathbf{k}_F} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_F) \right], \quad (2.19b)$$

$$\gamma_k = -z_k \Sigma''(\mathbf{k}_F, \xi_k) \quad (2.19c)$$

とおいた。以上より、準粒子の減衰率 γ_k がそのエネルギー $|\xi_k|$ に比べて十分小さい時、準粒子による記述が意味を持つことが分かる。フェルミ準位近傍で、自己エネルギーの実部が負の大きな傾きを持てば、 $z_k \ll 1$ となり大きな有効質量が生じる。逆に正の傾きを持つ場合に傾きが 1 を超えると $-\Sigma''$ が $\omega \sim 0$ にピークを持つようになり、スペクトル密度に擬ギャップ的な振る舞いが現れる。 G_{inc} は準粒子では記述できない部分を表し、インコヒーレント部分と呼ばれる。インコヒーレント部分全体が持つ重みは $\int d\omega A_{\text{inc}}(\mathbf{k}, \omega) = 1 - z_k$ である。

準粒子の重み z_k は、相互作用する粒子のうちで準粒子として記述できる部分の割合を表す。絶対零度の運動量分布を $n_k = \langle a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \rangle$ とすると

$$z_{k_F} = n(\mathbf{k}_F - 0) - n(\mathbf{k}_F + 0) \quad (2.20)$$

の関係がある。つまり、フェルミ面での不連続な跳びが準粒子の重みを表している [図 1]。現象論的なフェルミ液体論は、準粒子が意味を持つようなエネルギー、温度領域でのみ用いることができる。一方、グリーン関数法は、低温、低エネルギー極限でフェルミ液体論を再現できるのであって、現象論が持つような適用限界があるわけではないことに注意しよう^{*6}。

準粒子間の相互作用すなわちランダウパラメータは、2 体グリーン関数に現れる 4 点バーテックス関数 $\Gamma_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'\omega'; q\epsilon)$ と

$$f(\hat{\mathbf{k}}_F\sigma; \hat{\mathbf{k}}'_F\sigma') = z_{k_F}^2 \Gamma_{\sigma\sigma'}(\hat{\mathbf{k}}_F 0, \hat{\mathbf{k}}'_F 0; q\epsilon) \Big|_{|q|/\epsilon \rightarrow 0} \quad (2.21)$$

の関係がある。 $|q|/\epsilon \rightarrow 0$ の極限值を ω 極限という。 ω 極限には直接の物理的意味はないが、ランダウパラメータと関係がある。4 点バーテックスと繋がっている 4 つのグリーン関数から $\sqrt{z_k}$ の重みがかかるので、準粒子の相互作用には $\sqrt{z_k}^4 = z_k^2$ の因子がかかる。一方、 $\epsilon/|q| \rightarrow 0$ の極限は k 極限と呼ばれ、前方散乱振幅 (T 行列) という物理的意味をもつ。 k 極限と ω 極限は積分方程式によって互いに関係づけられる。詳しくは [8] を参照されたい。

^{*6}もちろん、多体系のグリーン関数が厳密に求まる望みは薄いので、用いる近似の適用限界はある。

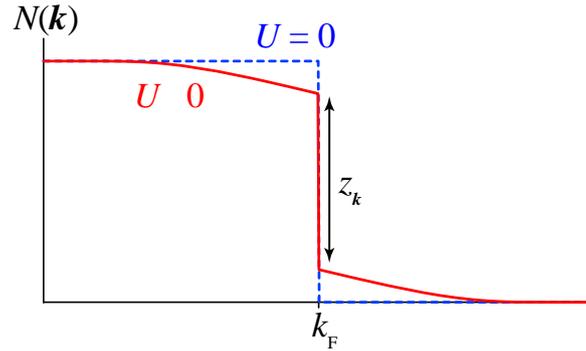
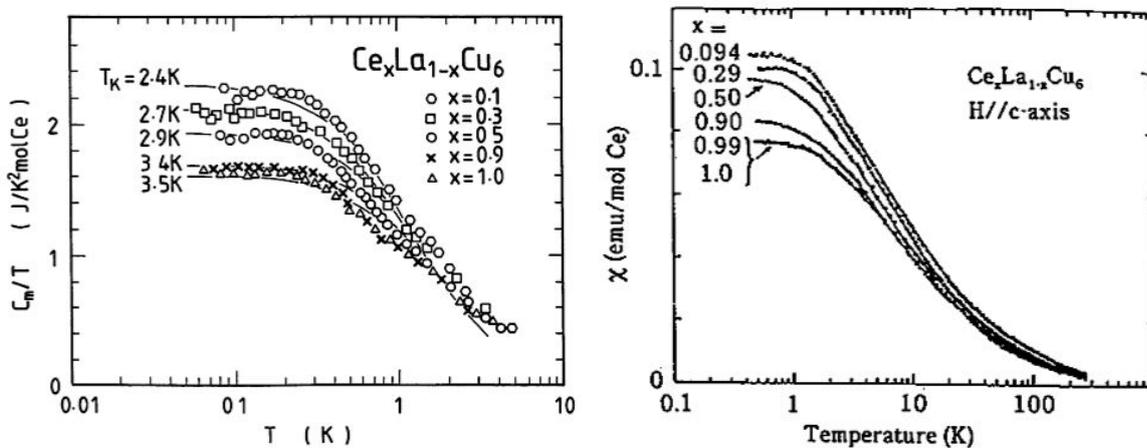


Fig. 1 粒子の運動量分布における不連続性と準粒子の重みとの関係。

Fig. 2 $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ の Ce mol あたりの比熱 (左図) と帯磁率 (右図) の温度依存性 [9,10]。

3. フェルミ液体としての重い電子系

1970年代後半に Ce 化合物や U 化合物で有効質量が千倍にも達する低温比熱が次々と観測され「重い電子系」と呼ばれるようになった。陽子に匹敵するような重い有効質量を示しながらもフェルミ液体的性質を保つこと自体驚きであるが、さらに異常な秩序や超伝導を示す物質が多く、その発見以来活発な研究が続いている。

3.1. 重い電子系の典型的な振る舞い

まずは重い電子系の典型物質 $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ の比熱および帯磁率を見てみよう。図 2 に比熱、帯磁率の温度依存性を示す。 $T < 1 \text{ K}$ の温度領域でフェルミ液体的振る舞いが観測されている。ただし、その値は通常の金属の典型的な値 $\gamma_0 = C_0/T \sim 1 \text{ mJ/mole}\cdot\text{K}^2$ 、 $\chi_0 \sim 10^{-4} \text{ emu/mole}$ に比べておよそ千倍の大きな値をとる。電子密度は普通の金属とそれほど変わらないので、有効質量が約千倍になっている。フェルミエネルギーは $\epsilon_F^* \sim 30 \text{ K}$ 程度と見積もられる。帯磁率は、30 K 以上の広い範囲で Curie 則に従っており、Ce 濃度できれいにスケールしている。このことは、高温で局在した磁気モーメントが単独で揺らいでいることを示している。通常金属では、 $\epsilon_F \sim 10^4 \text{ K}$ 程度で消失しはじめる磁気モーメントが、重い電子

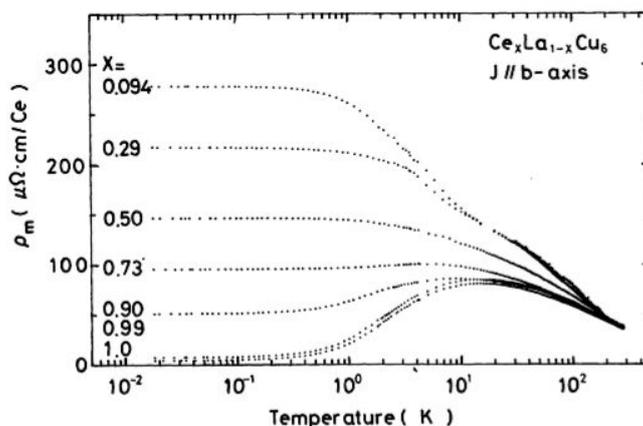


Fig. 3 $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ の Ce mol あたりの電気抵抗の温度依存性 [10]。

系では、強い電子相関のために $\epsilon_F^* \ll \epsilon_F$ まで生き残る。局在磁気モーメントが持つ $R \ln 2$ 程度の大きなエントロピーが ϵ_F^* 以下の温度で急激に消失するため、 $\gamma = (\partial S / \partial T)_V$ の関係から、大きな比熱係数 γ となって現れるのである。

図 3 に $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ の電気抵抗の温度依存性を示す。30 K 以上で x によらずに大体 $-\ln T$ の温度依存性を示している。このような振る舞いは、独立に揺らいでいる局在磁気モーメントによる伝導電子の散乱から生じる「近藤効果」として理解される。低温では $x \ll 1$ のときユニタリティ極限と呼ばれる残留抵抗値に近づく。一方、 $x = 1$ ではいったん増加した電気抵抗は再び減少し金属的な振る舞いを示す。いずれの場合も T^2 に比例して低温極限の値に近づく。比例係数 A もまた通常金属の値 $A \sim 10^{-6} \mu\Omega\cdot\text{cm}/\text{K}^2$ に比べて大きな増大を示す。重い電子系では $A/\gamma^2 \sim 0.4 \times 10^{-6} \mu\Omega\text{cm}(\text{mole}\cdot\text{K}/\text{mJ})^2$ が成立することが知られており Kadowaki-Woods 則^{*7}と呼ばれている [11]。

3.2. 周期的アンダーソン模型のフェルミ液体論 [13]

$\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ で見たような重い電子状態を記述するための最小模型を考えよう。まず、Ce イオンの原子波動関数の特徴について述べる。図 4 左に Ce 原子の電荷密度の動径分布を示す。5s, 5p が最外閉殻でイオン半径を与える。6s, 5d 軌道は伝導電子バンドを構成し、6s, 5d 電子は結晶中を動き回る伝導電子となる。4f 軌道はイオン半径の内側にピークを持ち非常に局在性がよい。しかし、そのすそはイオン半径の外側にはみ出しており伝導電子バンドとわずかな重なりを持つ。図 4 右図は U イオンの場合である。Ce と比べると 5f 電子の局在性はそれほど良くない。このため 5f 電子の価数は変化しやすい。局在性のよい 4f 電子間には、強いクーロン斥力 ($\sim 10\text{eV}$) が働き、また、軌道角運動量が $l = 3$ と大きいためスピン軌道相互作用 ($\sim 3000\text{K}$) の影響も大きい。スピン軌道相互作用によって分裂した全角運動量 $j = 5/2$ の 6 重準位は結晶場によって 3 つのクラマース 2 重項に分裂する。

このような考察の下、f 電子の結晶場基底 2 重項の自由度と伝導電子バンドを取り出したものが周期的

^{*7}最近、軌道縮退も考慮した Grand Kadowaki-Woods 則が提唱されている [12]。ただし、計算で用いられているバンド構造やその縮重度と現実の物質との対応関係に曖昧さが残る。

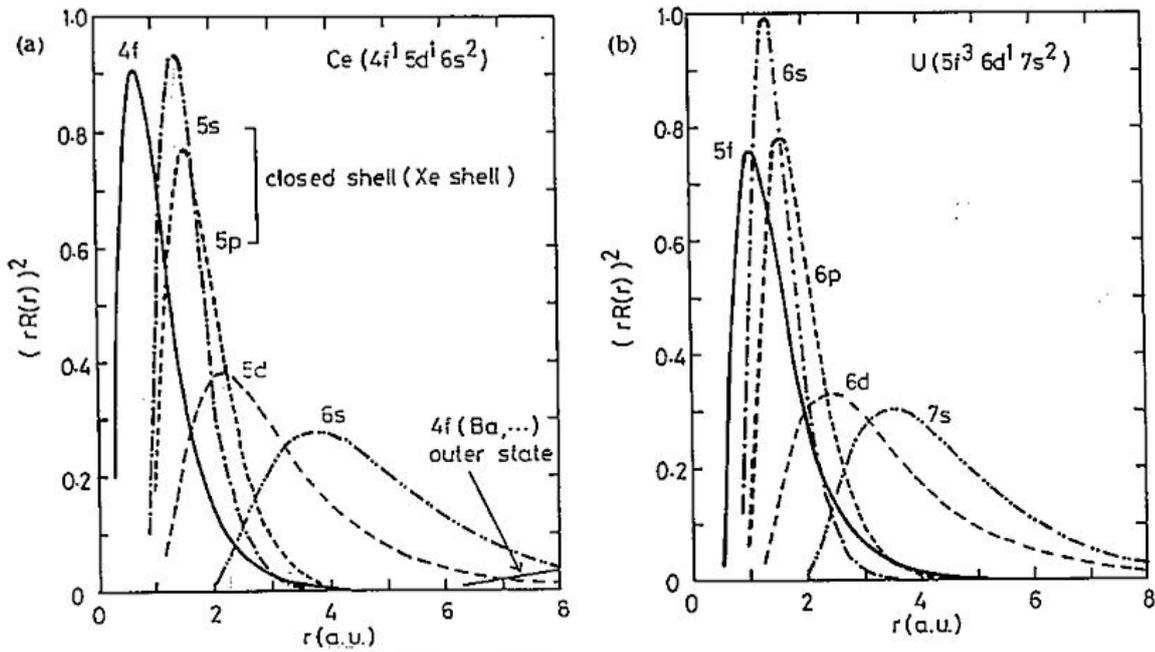


Fig. 4 Ce 原子、U 原子における電荷密度の動径分布 [14].

アンダーソン模型である。ハミルトニアンは

$$H = \sum_{k\sigma} \left[\xi_k^{(c)} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + E_f^{(0)} f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + V_k^{(0)} (c_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + \text{h.c.}) \right] + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad n_{i\sigma} = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \quad (3.1)$$

で与えられる*8。 f, c の 2 成分あるのでグリーン関数は行列で与えられる。

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \omega) = \begin{bmatrix} \omega - E_f^{(0)} - \Sigma_f(\mathbf{k}, \omega) & -V_k^{(0)} \\ -V_k^{(0)} & \omega - \xi_k^{(c)} \end{bmatrix}^{-1}, \quad \begin{array}{l} f \text{ 成分} \\ c \text{ 成分} \end{array} \quad (3.2)$$

これより、 f 成分のグリーン関数は

$$G_{ff}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - E_f^{(0)} - \Sigma_f(\mathbf{k}, \omega) + |V_k^{(0)}|^2 / (\omega - \xi_k^{(c)})} \quad (3.3)$$

となる。2.2 節と同様に、自己エネルギーの展開形を代入すれば $\omega \sim 0$ で

$$G_{ff}(\mathbf{k}, \omega) \sim \frac{z}{\omega - E_f + |V_k|^2 / (\omega - \xi_k^{(c)}) + i\gamma_k} \quad (3.4)$$

とあらわせる。ここで、強いクーロン斥力を想定して自己エネルギーの実部の \mathbf{k} 依存性を無視した。

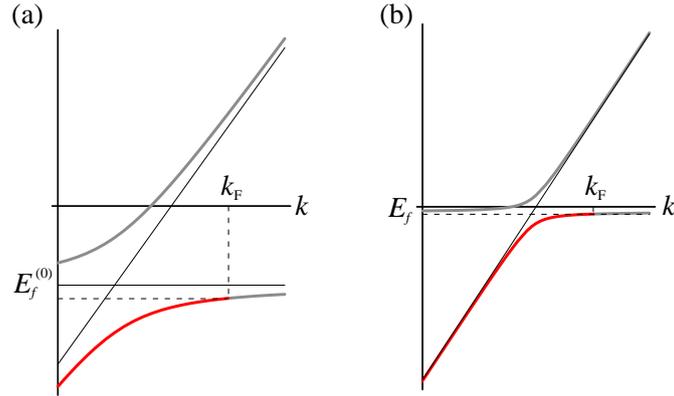
$$z = \left[1 - \frac{\partial \Sigma'_f}{\partial \omega} \right]^{-1}, \quad (3.5a)$$

$$V_k = \sqrt{z} V_k^{(0)}, \quad (3.5b)$$

$$E_f = z \left[E_f^{(0)} + \Sigma'_f(\mathbf{k}, 0) \right], \quad (3.5c)$$

$$\gamma_k = -z \Sigma''_f(\mathbf{k}_F, E_k) \quad (3.5d)$$

*8 $E_f^{(0)}$ も化学ポテンシャル μ から測る。

Fig. 5 (a) $U = 0$ の混成バンド、(b) 準粒子バンド。

である。(3.3) で $\Sigma_f = 0$ とおいた自由電子のグリーン関数と比べると、 f 準位が $E_f^{(0)} \rightarrow E_f$ に、混成強度が $V_k^{(0)} \rightarrow V_k$ と繰り込まれ、有限の幅 γ_k が生じていることが分かる。

準粒子の分散 E_k^\pm は、 γ_k を無視して、 $G_{ff}(\mathbf{k}, \omega)$ の極 ($\det[\hat{G}^{-1}(\mathbf{k}, \omega)] = 0$) より次のように求まる。

$$E_k^\pm = \frac{1}{2} \left[E_f + \xi_k^{(c)} \pm \sqrt{(E_f - \xi_k^{(c)})^2 + 4|V_k|^2} \right] \quad (3.6)$$

図5に自由電子の混成バンドと準粒子バンドの様子を示す。もともと小さい c - f 混成強度が繰り込まれて極端に小さくなるために、フェルミ準位付近の準粒子バンドはほとんど平坦になり重い電子が現れる。繰り込まれた f 準位は、 $U = 0$ の場合の k_F と同じ波数まで電子が詰まるような位置に調節される。準粒子バンドはフェルミ準位近傍だけ意味を持つことに注意しよう。フェルミ準位近傍のほぼ平坦な分散は f 電子の持つ局在性に起因している。このため、準粒子の主要成分は f 電子である。実際、準粒子バンドにおける f の割合は

$$W_k^\pm = \left[1 + \frac{|V_k|^2}{(E_k^\pm - \xi_k^{(c)})^2} \right]^{-1} \quad (3.7)$$

で与えられるが、フェルミ準位では $|V_{k_F}|/\xi_{k_F}^{(c)} \ll 1$ であり、 $W_k^\pm \sim 1$ となる。

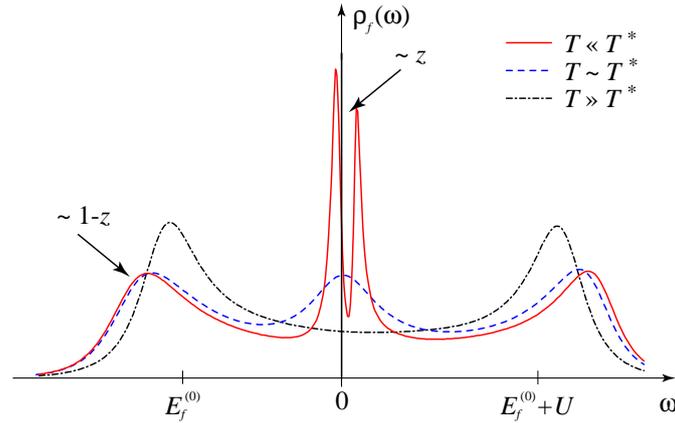
この他、摂動論やワード高橋恒等式を使って、ウィルソン比 $R \equiv (\chi T/C)/(\chi_0 T/C_0)$ が $O(1)$ 程度になること、電気抵抗が低温で T^2 に比例し Kadowaki-Woods 則が成立すること^{*9}などが示されている [13]。

繰り込み因子の定量的な値を求めるためには、自己エネルギーを具体的に計算する必要がある。この目的のために、グッツヴィラー近似 [16,17] やスレーブボゾン法の平均場近似 [18,19,20] などがしばしば用いられる。また、各種物理量を計算するには、4点バーテックス関数を求め、準粒子間相互作用を評価する必要がある。また、繰り込まれたフェルミエネルギーより高いエネルギースケールや温度領域を議論するには、現象論的フェルミ液体論の枠組みを超えた議論が必要なことは言うまでもない。

3.3. 1粒子スペクトルにおける準粒子

フェルミ準位から遠く離れた状態や繰り込まれたフェルミエネルギーより高温の状態を記述するためには、フェルミ液体論は無力である。このような場合に、最も荒い近似として $V_k^{(0)} \sim 0$ としよう。このと

^{*9}Kadowaki-Woods 則の定量的な議論については [15] も参照。

Fig. 6 重い電子系における f 電子の 1 粒子スペクトルとその温度変化の概略図。

き、 c 電子と f 電子は分離し、 f 成分のグリーン関数は厳密に

$$G_{ff\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle}{\omega - E_f^{(0)} + i\delta} + \frac{\langle n_{i-\sigma} \rangle}{\omega - (E_f^{(0)} + U) + i\delta} \quad (3.8)$$

と求まる。自己エネルギーは

$$\Sigma_{f\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = U \langle n_{i-\sigma} \rangle + \frac{U^2 \langle n_{i-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle)}{\omega - (E_f^{(0)} + U) + U \langle n_{i-\sigma} \rangle} \quad (3.9)$$

である。ここで、サイト i の平均 f 電子数は

$$\langle n_{i\sigma} \rangle = \frac{e^{-\beta E_f^{(0)}} + e^{-\beta(2E_f^{(0)} + U)}}{1 + 2e^{-\beta E_f^{(0)}} + e^{-\beta(2E_f^{(0)} + U)}} \quad (3.10)$$

で与えられる。スピン σ の状態密度におけるピークは、 $-\sigma$ スピンの電子がない場合 $\omega = E_f^{(0)}$ に位置し、 $-\sigma$ スピンの電子がいる時は $\omega = E_f^{(0)} + U$ に位置する。実際には $V_{\mathbf{k}}^{(0)}$ が有限なので、これらの準位は $\Delta_0 \equiv \pi \rho_c |V_{\mathbf{k}}^{(0)}|^2$ 程度の幅を持つ (ρ_c は伝導電子の状態密度)。

一方、(3.4) 式を用いて、フェルミ準位近傍のサイトあたりの状態密度 (サイト数 N) を評価すると、 $z \ll 1$ として

$$\rho_f(\omega) \sim \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{z}{2} \left[\delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^+) + \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^-) \right] = z \rho_f^*(\omega) \quad (3.11)$$

となる。準粒子の状態密度 $\rho_f^*(\omega)$ は z^{-1} 程度に増大するが、 f 電子の状態密度 $\rho_f(\omega)$ は z の因子とキャンセルして $U = 0$ の場合と同程度になる。また、全スペクトルのうち準粒子が占める割合は $\int_{-e_F^*}^{e_F^*} d\omega \rho_f(\omega) \sim z$ 程度である。

このように、 f 電子の全スペクトル密度のうち、フェルミ液体として記述される部分は z 程度であり、残りの $1 - z$ 程度の重みは $V_{\mathbf{k}}^{(0)} = 0$ とした局所的な f 電子の状態に起因するものとして理解できる。 f 電子の状態密度とその温度変化の概略を図 6 に示す。 $T \ll T^*$ では $\omega \sim 0$ 付近に重み z の準粒子バンドが形成される。 $T \gg T^*$ では準粒子バンドは消失し、 $\omega \sim E_f^{(0)}$ と $E_f^{(0)} + U$ の局所的な f 状態だけが残る。

4. 近藤効果と繰り込み

「近藤効果」はいろいろな意味で用いられる。もともと 1930 年代はじめに発見された抵抗極小の現象 [21] に対する 1964 年の近藤の理論的解明 [22] に対して「近藤効果」が用いられるようになった。この理論は抵抗極小を解明したが、同時に、この現象の背後にある多体効果の重要性を認識させることとなった。その後の研究で、基底状態は「近藤一重項」という局所的なフェルミ液体で記述されることが明らかになり [23,24,25,26,27]、これを「近藤効果」と呼ぶ場合もある。しかし、Anderson がその著書で強調するように、「近藤効果」のもつ最も重要な意義は、上記 2 つの「近藤効果」を接続する過程にある [28]。前節では重い電子状態のフェルミ液体論について述べたが、高温での局在スピンの振る舞いから降温とともに重い電子系へと移行する過程を理解するには「近藤効果」の理解が欠かせない。本節では、このような視点から「近藤効果」を説明する。

4.1. アンダーソン模型と局所フェルミ液体

近藤効果の舞台は、少量の磁性不純物を含んだ金属である。このような状況を記述する最も簡単な模型が、1 不純物アンダーソン模型である [29]。

$$H = \sum_{k\sigma} \left[\xi_k^{(c)} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + V_k^{(0)} (c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma + \text{h.c.}) \right] + \sum_{\sigma} E_f^{(0)} f_\sigma^\dagger f_\sigma + U n_\uparrow n_\downarrow, \quad n_\sigma = f_\sigma^\dagger f_\sigma \quad (4.1)$$

1 中心問題なので、波数 k はよい量子数ではない。 f 電子と c 電子の各波数からなる行列を用いてグリーン関数は

$$\hat{G}(\omega) = \begin{bmatrix} \omega - E_f^{(0)} - \Sigma_f(\omega) & -V_{k_1} & -V_{k_2} & -V_{k_3} & \cdots \\ -V_{k_1} & \omega - \xi_{k_1} & 0 & 0 & \cdots \\ -V_{k_2} & 0 & \omega - \xi_{k_2} & 0 & \cdots \\ -V_{k_3} & 0 & 0 & \omega - \xi_{k_3} & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}^{-1}, \quad \begin{array}{l} f \text{ 成分} \\ c(k_1) \text{ 成分} \\ c(k_2) \text{ 成分} \\ c(k_3) \text{ 成分} \\ \vdots \end{array} \quad (4.2)$$

と表せる。これより、 f 電子のグリーン関数は

$$G_{ff}(\omega) = \frac{1}{\omega - E_f^{(0)} - \Sigma_f(\omega) + \Delta^{(0)}(\omega)}, \quad \Delta^{(0)}(\omega) = - \sum_k \frac{|V_k^{(0)}|^2}{\omega - \xi_k^{(c)} + i\delta} \quad (4.3)$$

と求まる。伝導電子のバンド幅が、 ω に比べて十分大きければ、 $\Delta^{(0)}(\omega) \sim i\Delta_0$, $\Delta_0 = \pi\rho_c \langle |V_k^{(0)}|^2 \rangle$ となる。 $\langle \cdots \rangle$ は k についての角度平均である。 $U = 0$ ($\Sigma_f = 0$) でも、 f 準位は伝導電子との混成により有限の幅 Δ_0 を持つ。

まず、 $U = 0, E_f^{(0)} = 0$ の場合を考えよう。この時、 f 準位はフェルミ準位に等しいので、 \uparrow と \downarrow スピンの電子が等確率で存在する。 f 電子のスピンを反転させるためには伝導電子と混成することが必要で、スピン反転に要する時間のスケールが Δ_0^{-1} である。これより速い時間スケール、エネルギーで言えば $T \gg \Delta_0$ では、 \uparrow や \downarrow のスピン状態のスナップショットが見えるだろう。従って、キュリー帯磁率 $\chi \sim \mu_{\text{eff}}^2/T$ が得られる。一方、 Δ_0^{-1} より長い時間スケール、 $T \ll \Delta_0$ 、でみれば、 \uparrow と \downarrow スピンは平均化され、スピンは失われたように見える。この場合パウリ帯磁率 $\chi \sim \mu_{\text{eff}}^2/\Delta_0$ を見ることになる。

U が有限で $E_f^{(0)}$ がフェルミ準位より十分深い位置にあっても、多体効果によって繰り込まれた E_f がフェルミ準位近傍に位置する場合が考えられる。前節同様、自己エネルギーを $\omega = 0$ で展開すれば、 $\omega \sim 0$ で

$$G_{ff}(\omega) = \frac{z}{\omega - E_f + i\Delta'},$$

$$z = \left[1 - \frac{\partial \Sigma'_f}{\partial \omega}\right]^{-1}, \quad E_f = z \left[E_f^{(0)} + \Sigma'_f(0)\right], \quad \Delta = z \left[\Delta_0 - \Sigma''_f(\omega)\right] \quad (4.4)$$

と表される。繰り込まれた f 準位が $E_f \sim 0$ 、スピン反転のエネルギースケールも $\Delta_0 \rightarrow \Delta \ll \Delta_0$ と繰り込まれるとき、 $\omega, T \ll \Delta$ である限り、 \uparrow と \downarrow スピンは平均化され、基底状態ではスピン 1 重項が実現する。 Δ は後ほど述べる近藤温度 T_K に他ならない。また、1 粒子状態密度にはフェルミ準位近傍に鋭い共鳴ピーク (近藤共鳴) が現れる。高温で局在スピンの顕在化している状況から局所フェルミ液体へ移行する過程を理解することが近藤問題の中心課題である。

4.2. 磁気モーメントの発生と揺らぎ

$E_f^{(0)}$ がフェルミ準位より十分深い位置にあり、 $E_f^{(0)} + U$ がフェルミ準位より十分上にあれば、 f 準位を電子が 1 つだけ占有した状況が実現する。このことは、 $V_k^{(0)} = 0$ の場合を考えてみれば容易に分かるだろう。このような状況の下、局在スピンの発生する条件を平均場近似で調べてみよう。相互作用項を $Un_\sigma n_{-\sigma} \rightarrow U\langle n_{-\sigma} \rangle n_\sigma$ とすれば、平均場近似での自己エネルギーは $\Sigma_{f\sigma} = U\langle n_{-\sigma} \rangle$ となる。グリーン関数から f 電子数を $\langle n_\sigma \rangle = \int d\omega f(\omega) \rho_f(\omega)$ によって求めると、平均電子数を決める自己無撞着方程式

$$\langle n_\sigma \rangle = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left[\frac{E_f^{(0)} + U\langle n_{-\sigma} \rangle}{\Delta_0} \right] \quad (4.5)$$

を得る。簡単のため対称条件 $|E_f^{(0)}| = E_f^{(0)} + U$ の場合を考える。このとき、電子ホール対称性があるので、平均 f 電子数 $n = \langle n_\uparrow \rangle + \langle n_\downarrow \rangle$ は 1 に保たれる。平均磁気モーメントを $m = (\langle n_\uparrow \rangle - \langle n_\downarrow \rangle)/2$ とすれば $\langle n_\sigma \rangle = 1/2 + \sigma m$ であり、自己無撞着方程式は $\tan(\pi m) - Um/\Delta_0 = 0$ となる。 Δ_0 はスピンを反転させて消失させる役割を、 U はスピンを顕在化させる役割を果たすので、 $U > U_c = \pi\Delta_0$ で、 $m \neq 0$ の解が安定となり、磁気モーメントが発生することが分かる。この事情は、次の「自由エネルギー」

$$F(m) = -\frac{U_c}{\pi^2} \ln \cos(\pi m) - \frac{U}{2} m^2 \quad (4.6)$$

を考えると分かりやすい^{*10}。 $F(m)$ は、停留点を求める方程式 $dF/dm = 0$ が自己無撞着方程式となるように定義した。 $|m| \ll 1$ として展開すれば

$$F(m)/U_c \sim \frac{1}{2} \left(1 - \frac{U}{U_c}\right) m^2 + \frac{\pi^2}{12} m^4 \quad (4.7)$$

となるので、図 7 に示すように $U > U_c$ で $m \neq 0$ の解が安定化することが分かる。

^{*10}経路積分形式を用いて補助場を導入すれば、フェルミオン自由度を積分して補助場に関するポテンシャルを求めることができる。このポテンシャルが、ここでの「自由エネルギー」に対応する。

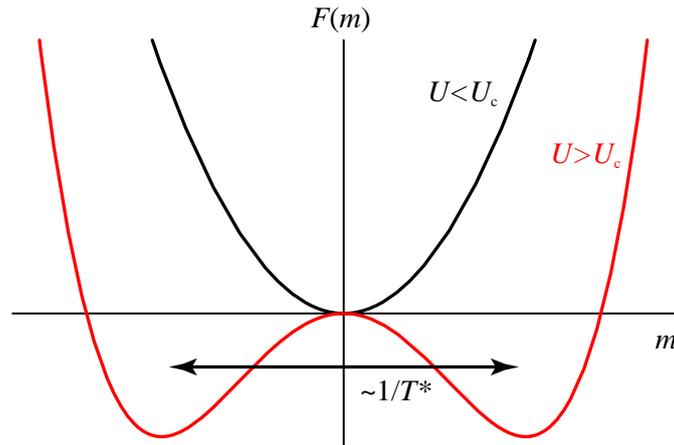


Fig. 7 局在スピン m と「自由エネルギー」の関係。 $U > U_c$ で局在スピンの発生する。発生したスピンは $1/T^*$ の時間スケールでスピンを反転する。

以上は平均場近似の結果であり、平均値 $\langle n_\sigma \rangle$ からの揺らぎを無視している。揺らぎを無視する近似は、揺らぎの特徴的な時間 $1/T^*$ よりも短い時間スケールで正当化される。つまり、平均場近似は T^* より高温の描像を与えるものと理解される。高温で発生した局在スピンは、 $T \ll T^*$ の温度領域では、揺らいでいるスピンの長時間平均に対応して消失してしまう。このような結果を得るためには、平均場近似を超えてスピンの揺らぎを正しく取り扱う必要がある。このような事情を図7に示した。

平均場近似の自己エネルギーは電荷揺らぎの長時間平均によるエネルギーシフトを表す。このとき「繰り込まれた」 f 準位は、 $E_f = E_f^{(0)} + U \langle n_{-\sigma} \rangle = 0$ となりフェルミ準位に一致する。近藤共鳴準位がフェルミ準位近傍に現れるのはこの理由による。

4.3. c - f 交換模型と「元祖」近藤効果

$E_f^{(0)}$ がフェルミ準位より十分深い位置にあり、 $E_f^{(0)} + U$ がフェルミ準位より十分上にあれば、 f 準位を占有する電子数は1に固定して良いだろう。このとき、 f 電子のもつ電荷の自由度は凍結され、スピンの自由度だけが問題となる。 f 電子数を1に固定したヒルベルト空間における有効ハミルトニアンは $V_k^{(0)}$ の2次摂動から導くことができる [30]。計算の詳細は [24]などを参考にしようとして、結果を示すと

$$H = \sum_{k\sigma} \xi_k^{(c)} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k'k} \left[V \sum_{\sigma} c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + J \mathbf{s}(k', k) \cdot \mathbf{S} \right],$$

$$V = \frac{\langle |V_k^{(0)}|^2 \rangle}{2} \left[\frac{1}{|E_f^{(0)}|} - \frac{1}{E_f^{(0)} + U} \right], \quad J = 2 \langle |V_k^{(0)}|^2 \rangle \left[\frac{1}{|E_f^{(0)}|} + \frac{1}{E_f^{(0)} + U} \right] \quad (4.8)$$

となる。ここで、混成相互作用の \mathbf{k} 依存性をその角度平均で置き換え、 $\xi_k^{(c)}$ を U や $E_f^{(0)}$ に比べて無視した。 \mathbf{S} は f 電子のスピン演算子、 $\mathbf{s}(k', k) = \sum_{\sigma'\sigma} c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma'\sigma} / 2$ は伝導電子のスピン演算子である。対称条件 $|E_f^{(0)}| = E_f^{(0)} + U$ の場合、 $V = 0$ 、 $J = 8 \langle |V_k^{(0)}|^2 \rangle / U > 0$ である。この有効模型を(反強磁性的な) c - f 交換模型と呼ぶ。

さて、 c - f 交換模型に基づいて、「元祖」近藤効果について説明する。磁性不純物を少量含む金属における電気抵抗の典型的な振る舞いを図8に示す。降温とともに電気抵抗は減少し、その後 $-\ln T$ 的に増大し

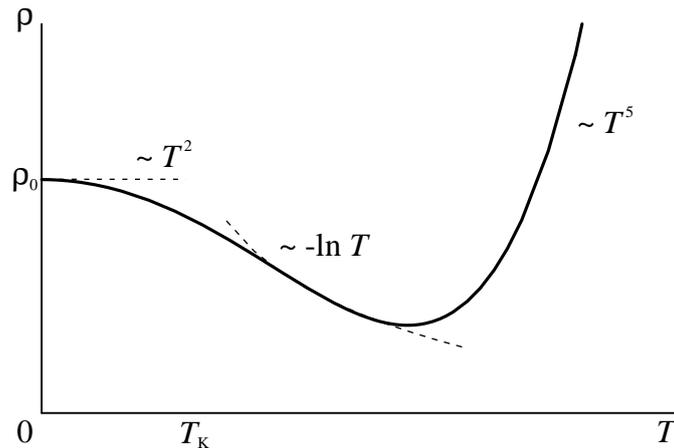
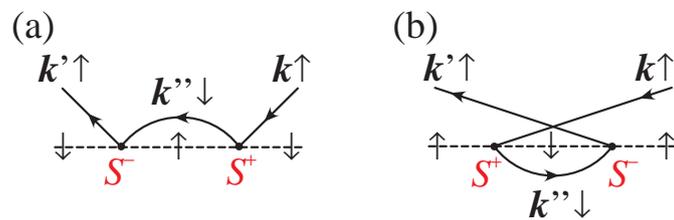


Fig. 8 電気抵抗極小現象の典型的振る舞い。

Fig. 9 $-\ln T$ 依存性を与える散乱の2次過程。

で低温極限で残留抵抗値 ρ_0 に T^2 的に近づく。高温の T^5 の振る舞いは格子振動による散乱から生じる電気抵抗と理解される。 $-\ln T$ 的な増大の原因が30年間謎であったわけである。

c - f 交換模型を用いて電子の散乱振幅 $T(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ を計算すると、 J について最低次のボルン近似では $T(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = J$ となり、温度に依存しない。近藤は、 J の2次過程(第2ボルン近似)において $-\ln T$ 依存性を与える散乱過程を見出した [22]。そのような散乱過程の一部を図9に示す。それぞれの散乱振幅は

$$T_a(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \left\langle \mathbf{k}' \uparrow \left| \sum_{\mathbf{k}''} \frac{\left(\frac{J}{2} S^- c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''\downarrow}\right) \left(\frac{J}{2} S^+ c_{\mathbf{k}''\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}\right)}{-|\xi_{\mathbf{k}''}^{(c)}|} \right| \mathbf{k} \uparrow \right\rangle \quad (4.9a)$$

$$T_b(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \left\langle \mathbf{k}' \uparrow \left| \sum_{\mathbf{k}''} \frac{\left(\frac{J}{2} S^+ c_{\mathbf{k}''\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}\right) \left(\frac{J}{2} S^- c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''\downarrow}\right)}{|\xi_{\mathbf{k}''}^{(c)}|} \right| \mathbf{k} \uparrow \right\rangle \quad (4.9b)$$

となる。両方の寄与を合わせると

$$T_{a+b}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{J^2}{4} [S^+, S^-] \sum_{\mathbf{k}''} \frac{\langle c_{\mathbf{k}''\downarrow} c_{\mathbf{k}''\downarrow}^\dagger \rangle}{|\xi_{\mathbf{k}''}^{(c)}|} = \frac{J^2}{4} [S^+, S^-] \rho_c \ln \left(\frac{D}{T} \right) \quad (4.10)$$

となり $-\ln(T/D)$ 項が得られる ($2D$ は伝導電子のバンド幅)。(i) f 電子のスピンの内部自由度を持つ量子スピンであること、(ii) 散乱の中間過程で他の電子の分布(フェルミ分布)が関与すること、(iii) フェルミ準位近傍に温度 T 程度で励起される連続的な電子状態があること、によって対数項が生じていることが分かる。一般のスピン S の場合について、第2ボルン近似での電気抵抗の表式を与えておく [24]。

$$\rho(T) = \rho_B \left[1 + 2\rho_c J \ln \left(\frac{D}{T} \right) \right] \quad (4.11)$$

ここで、 $\rho_B = \rho_s[\rho(\pi\rho_c J/2)]^2 S(S+1)$ はボルン近似による電気抵抗値である。 $\rho_s = 4\pi/ne^2k_F$ は s 波散乱から生じる最大の電気抵抗で、ユニタリティ極限の抵抗値と呼ばれる。

第2ボルン近似によって電気抵抗における $-\ln(T/D)$ 項の起源は理解された。しかしながら、 $\rho_c J \ll 1$ であっても対数項のために降温とともに2次項の寄与が増大し、 J に関する摂動論は破綻する。第2ボルン近似の結果は、最低次のボルン近似の表式において $J \rightarrow J_{\text{eff}}(T) = J[1 + \rho_c J \ln(D/T)]$ とすれば得られることに注意すれば、近藤温度

$$T_K = D \exp[-1/\rho_c J] \quad (4.12)$$

と呼ばれる温度で $\rho_c J \ln(D/T) = 1$ となり、高次項の寄与を考慮する必要があることが分かる。Abrikosov は高次項の中で最も発散の強い項だけを考慮して、

$$J_{\text{eff}}(T) = \frac{J}{1 - \rho_c J \ln(D/T)} \quad (4.13)$$

の結果を得た [31]。有効交換相互作用 $J_{\text{eff}}(T)$ は $T = T_K$ で発散し、局在スピンと伝導電子がスピン1重項を作って消失することを示唆している。このような物理的解釈から芳田らは基底1重項の理論を展開した [23,24]。それによると、局在スピンは $\xi \sim v_F/T_K$ 程度の広がりを持った伝導電子のスピン偏極によって遮蔽されて一重項を形成する。

以上では、 $J > 0$ の反強磁性的な交換相互作用を考えた。 $J < 0$ の強磁性的な交換相互作用の場合、 $T \rightarrow 0$ で $J_{\text{eff}}(T) \rightarrow 0$ となって、局在スピンは低温極限で自由スピンとして振る舞うという結論が得られる^{*11}。

4.4. スケーリングによる解釈

前節で見たように、最低次の結果において J の代わりに温度に依存する有効相互作用 $J_{\text{eff}}(T)$ を用いれば、高次摂動の結果が得られる。このような見方を最初に指摘したのは Anderson である [32]。これを示すために、いわゆる"poor man's scaling"と呼ばれる方法を紹介しよう。この方法では、伝導電子のバンド幅を $D \rightarrow D_{\text{eff}} = D - dD$ に変化させた時、散乱の中間状態に現れる高エネルギー過程 ($D - dD < |\xi_k^{(c)}| < D$) を消去して、バンド幅 D_{eff} の系の有効相互作用を求める。

散乱の T 行列は

$$T(\omega) = J + JG_0T(\omega) \quad (4.14)$$

のダイソン方程式を満たす。 $G_0 = \sum_n |n\rangle\langle n|/(\omega - E_n)$ は中間状態のグリーン関数である。フェルミ準位近傍の外部エネルギー $\omega \ll D$ を考え、グリーン関数における中間状態 $|n\rangle$ を低エネルギー状態に制限 (G_0^{low} と表す) した時

$$T(\omega) = J_{\text{eff}}(D_{\text{eff}}) + J_{\text{eff}}(D_{\text{eff}})G_0^{\text{low}}T(\omega) \quad (4.15)$$

となるように $J_{\text{eff}}(D_{\text{eff}})$ を求める。 dD を微小量として、中間状態の電子のエネルギーが $D - dD < |\xi_k^{(c)}| < D$ のものを G_0^{high} 、 $|\xi_k^{(c)}| < D - dD$ のものを G_0^{low} と表せば

$$T(\omega) = J + JG_0T(\omega) = J + JG_0^{\text{low}}T(\omega) + JG_0^{\text{high}}T(\omega)$$

^{*11}ただし、温度依存性には $1/\ln(D/T)$ の弱い異常が残る。

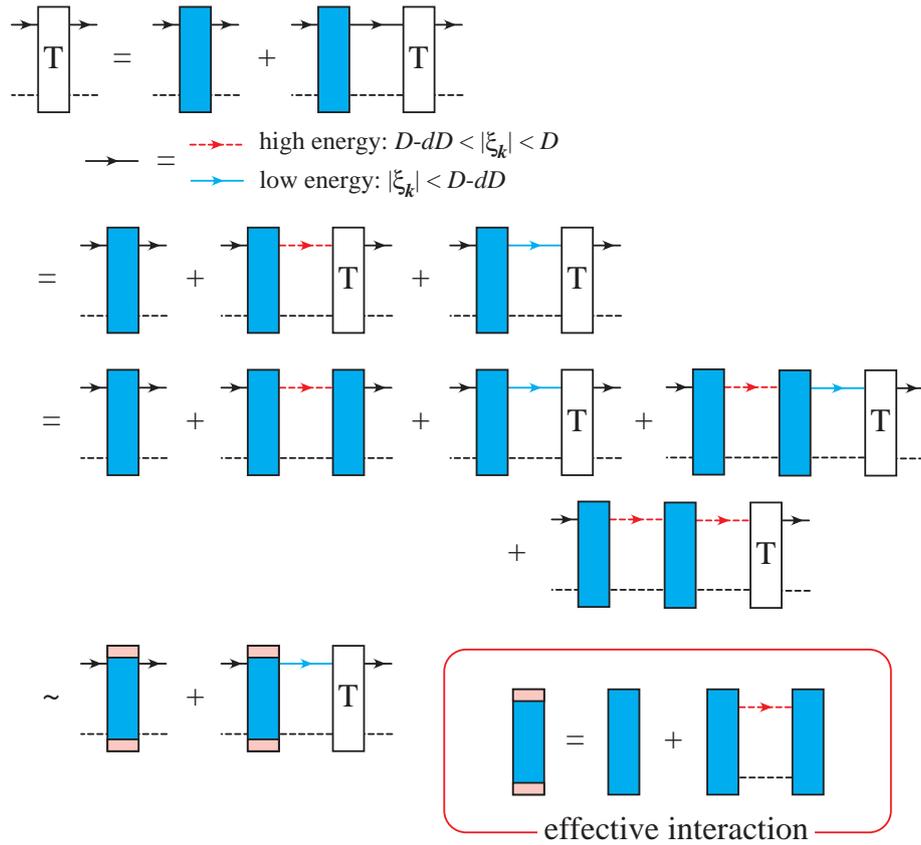


Fig. 10 "poor man's scaling"の図解的説明。

$$\begin{aligned}
&= [J + JG_0^{\text{high}}J] + [J + JG_0^{\text{high}}J] G_0^{\text{low}}T(\omega) + JG_0^{\text{high}}JG_0^{\text{high}}T(\omega) \\
&= J_{\text{eff}} + J_{\text{eff}}G_0^{\text{low}}T(\omega) + JG_0^{\text{high}}JG_0^{\text{high}}T(\omega), \quad J_{\text{eff}} \equiv J + JG_0^{\text{high}}J
\end{aligned} \tag{4.16}$$

と変形できる。 $G_0^{\text{high}} \sim \rho_c dD/D$ であり、最後の項 ($O(dD/D)^2$) を高次の微小量として無視すれば

$$J_{\text{eff}}(D - dD) = J_{\text{eff}}(D) + J_{\text{eff}}^2(D) \frac{\rho_c dD}{D} \Rightarrow \frac{dJ_{\text{eff}}(D)}{d \ln D} = -\rho_c J_{\text{eff}}^2(D) \tag{4.17}$$

の微分方程式 (one-loop のスケーリング方程式という) を得る^{*12}。図 10 に"poor man's scaling"の図解的説明をあげておく。バンド幅 $2D$ の時 $J_{\text{eff}}(D) = J$ の境界条件でこれを解いて、 $D_{\text{eff}} = T$ とすれば

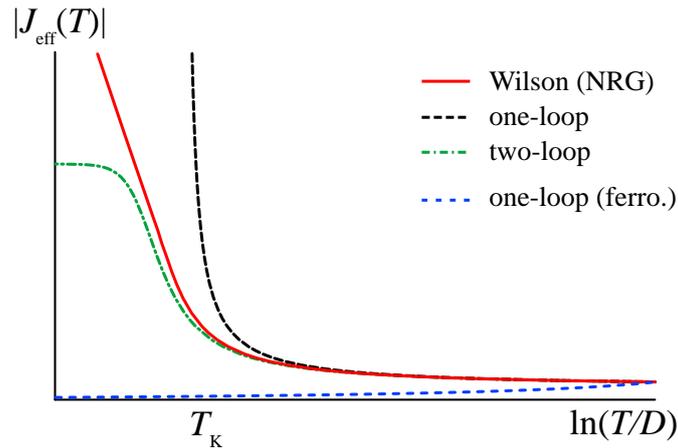
$$J_{\text{eff}}(T) = \frac{J}{1 - \rho_c J \ln(D/T)} \tag{4.18}$$

を得る。この結果は、最強発散項を集めた摂動論の結果 (4.13) と一致する。こうして、温度 T での物理量は、繰り込まれた有効相互作用 $J_{\text{eff}}(T)$ を用いて得られるという解釈が可能となる。

Poor man's scaling の次の次数 (two-loop) の場合のスケーリング方程式は

$$\frac{dJ_{\text{eff}}(D)}{d \ln D} = -\rho_c J_{\text{eff}}^2(D) + \frac{n_c}{2} \rho_c^2 J_{\text{eff}}^3(D) \tag{4.19}$$

^{*12}ここでの取り扱いには交換相互作用の係数についての議論である。より一般的な取り扱いについては [33,34] を参照されたい。

Fig. 11 有効相互作用 $J_{\text{eff}}(T)$ の温度依存性。

と求められている [35,36]。後の議論の便宜上、伝導電子の散乱チャンネル数 n_c を導入した。本節の議論では $n_c = 1$ である。これを解くと

$$\ln\left(\frac{T}{D}\right) = \frac{1}{\rho_c J_{\text{eff}}(T)} - \frac{1}{\rho_c J} + \frac{n_c}{2} \ln\left[\frac{(2/n_c - \rho_c J_{\text{eff}}(T))J}{(2/n_c - J)J_{\text{eff}}(T)}\right] \quad (4.20)$$

となる。この解は、第2発散項を集めた摂動論の結果に対応する。 $\rho_c J_{\text{eff}}(T_K) = 1$ によって近藤温度を定義すれば、

$$T_K = \sqrt{n_c \rho_c J / 2D} \exp[-1/\rho_c J] \quad (4.21)$$

となり、最強発散項の近似で求めた T_K より因子 $\sqrt{n_c \rho_c J / 2}$ だけ小さくなる^{*13}。この近似では、 $T \rightarrow 0$ で $\rho_c J_{\text{eff}} \rightarrow 2/n_c = 2$ と有限の値に留まる。いずれの近似にせよ、 $\rho_c J \sim 1$ となって J に関する摂動論的な取り扱いが破綻するので T_K 程度の温度領域より低温の結果は信用できない^{*14}。すべての温度領域で正しい結果は、ウィルソンによる数値繰り込み群法 (NRG) によって得られた [25,26]。各近似による有効相互作用の振る舞いを図 11 にまとめておく。

Wilson は、アンダーソンのスケーリングの考え方を発展させて繰り込み群の概念を生み出した [25]。アンダーソンのスケーリングでは、高エネルギーの状態を消去して有効相互作用を導出するが、このような状態の消去に加えて状態空間の再規格化を行うことで、繰り込み群変換を定義した。こうして有効相互作用で表されるモデルの性質を、繰り込み群変換に対する固定点として整理し、固定点の安定性や固定点近傍の物理量を有効演算子、無効演算子などで特徴づけることが可能となった。詳しくは文献 [37,38]などを参照されたい。

近藤問題に対する数値繰り込み群を用いたウィルソンの理論では、ウィルソン比 R が J によらず $R = 2$ となること、物理量の温度変化が T/T_K によってスケールされること、低エネルギー励起を記述する有効ハミルトニアンがアンダーソン模型と同型であること、が示されている。代表的な物理量の温度依存性を図 12 に示す。近藤温度 T_K を境にして降温とともに磁気モーメントは消失していく。電気抵抗は

^{*13}絶対零度の帯磁率 $\chi(0)$ が求まるならば、最も正確な T_K の定義は $\chi(0) = \mu_B^2/T_K$ である。

^{*14} T_K の表式を見ると分かるように、 $J = 0$ が特異点になっている。ただし、後で見るように $n_c \gg 1$ の場合には、すべての温度領域で $\rho_c J_{\text{eff}}(T) \ll 1$ であり、摂動論の結果が信用できる場合がある。

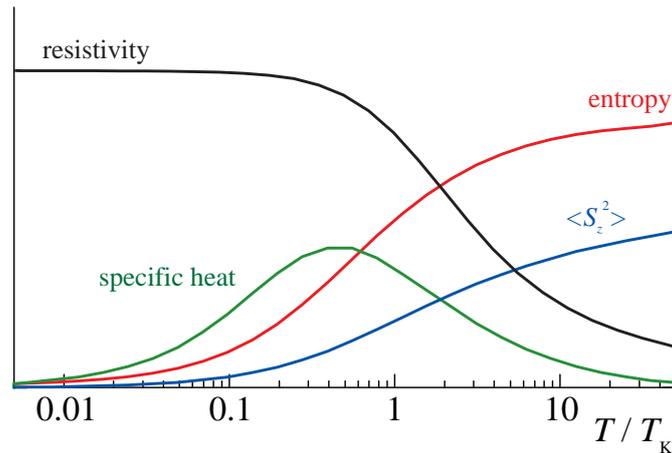


Fig. 12 c - f 交換模型のさまざまな物理量の温度依存性。

$-\ln(T/D)$ の増大ののち T^2 的にユリタリティ極限の残留抵抗値に近づく。局在スピンの持つエントロピーの消失によって、比熱は $T_K/3$ あたりにピークをもつ。

基底状態は局所フェルミ液体であることが示されたが、アンダーソン模型と異なり c - f 交換模型に対するフェルミ液体論の構成法は自明ではない。Nozières は、不純物による散乱問題で最も重要な物理量であるフェルミ準位の散乱の位相シフトに着目して局所フェルミ液体論を展開し、ウィルソンによって示された低温の結果に加えて、電気抵抗の T^2 依存性を導いた [27,33]。

現在では、ベーテ仮説に基づく厳密解によって種々の熱力学量が求まっている [24,37,39]。特にアンダーソン模型の厳密解は、さまざまな物理量が U の解析関数で表されることを示しており [40]、フェルミ液体論の核心である断熱接続の考え方が完全に証明された数少ない例となっている。また、Non-Crossing Approximation (NCA) [41]、NRG [42,43,44] やモンテカルロ法 [45,46] などの数値計算を用いた動的物理量の計算手法も整備されており、共形場理論 [47] による動的物理量の指数の解析的な表式も求まっている。

4.5. アンダーソン模型から見た近藤効果

アンダーソン模型に基づく局所電子相関の問題 (近藤問題) の概観図を図 13 に示す。Anderson は平均場理論で局在モーメントが発生する条件を求めた。しかし、実際にはスピンは絶えず反転しているので $\langle S \rangle = 0$ である。すなわち 0 次元で相転移は起こらない。局在モーメント発生条件は、むしろ $\langle S^2 \rangle \sim S(S+1)$ となる目安を与えると理解する方がよい。 $U/\pi\Delta_0 \gg 1$ では電荷の自由度は凍結し、正準変換から得られる c - f 交換模型が有効模型となる。 $\rho_c J \ll 1$ であるから J に関する低次の摂動論が有効と思われるが、降温とともにスピンの揺らぎが対数的に増大し、摂動論は T_K 程度のエネルギースケールで破綻する。非摂動的な取り扱いによってはじめて近藤 1 重項という正しい基底状態に辿り着くことができる。 c - f 交換模型は $T \ll U$ である限りアンダーソン模型の有効模型であるから、両者の模型の基底状態が一致するのは必然である。

アンダーソン模型の基底状態は、 U に関する断熱接続性が保証されているのでフェルミ液体論に基づいて 1 重項となることが容易に分かる。基底状態の描像や形式的な摂動論による厳密な関係式を用いた議論

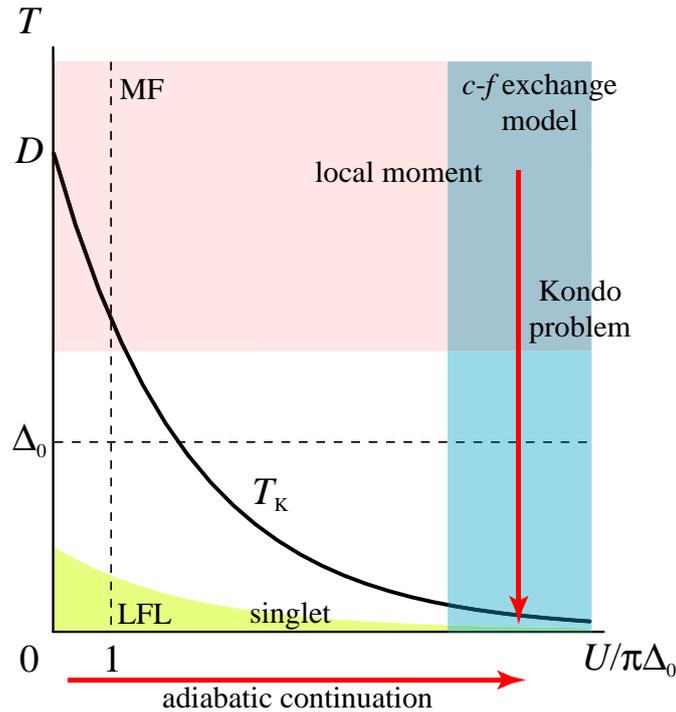


Fig. 13 アンダーソン模型からみた近藤問題。

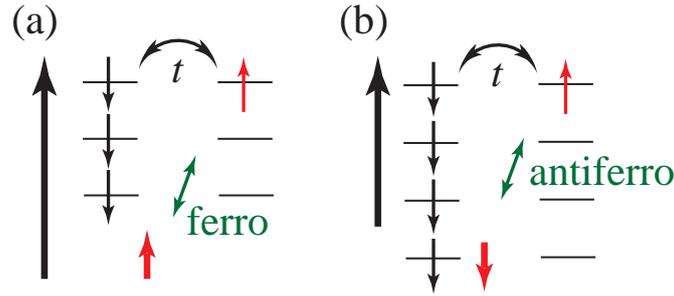
において、断熱接続の考え方の有用性は明らかである。しかしながら、定量的な議論を行うためには、具体的に摂動項を計算する必要がある。アンダーソン模型では対称条件の場合に限り U に関する摂動の収束がよいことが知られている。一般には対称条件は成立しないので、低次の摂動論に基づいて定量的な議論を行うことは難しい。このことは、系の特徴的なエネルギーが U の増大と共に、 U から $J \sim \Delta_0/\rho_c U$ へと移り変わることもからも伺える。フェルミ液体論という概念の適用範囲は非常に広いが、定量的議論における低次の摂動論の適用範囲は限られていることに注意されたい。

また、フェルミ液体論では仮想的な「自由電子系」が発点として必要である。実際の物質の理解には U 依存性よりも T 依存性が重要となることが多い。図 13 から分かるように、温度依存性を議論するには「近藤問題」の理解が不可欠である。系の低エネルギー状態の理解にはフェルミ液体論が有用なのはもちろんであるが、フェルミ液体論が有効な温度領域は U とともに狭くなることに注意すべきである。

4.6. マルチチャンネル近藤効果と四極子近藤効果

前節までに近藤問題の基底状態は局在スピンと伝導電子からなるスピン 1 重項状態であることが分かった。スピン 1 重項は、軌道数とスピンの大きさの等しい繰り込まれた c - f 混成軌道に \uparrow と \downarrow スピンの電子を詰めることで作られる。では、スピン S に対して伝導電子の散乱チャンネルが n_c 個ある場合に何が起ころうか。Nozières と Blandin は n_c チャンネル近藤模型

$$H = \sum_{m=1}^{n_c} \left[\sum_{k\sigma} \xi_k^{(c)} c_{km\sigma}^\dagger c_{km\sigma} + J \sum_{k'k} s_m(k', k) \cdot S \right] \quad (4.22)$$

Fig. 14 強結合固定点における摂動過程: (a) $n_c < 2S$, (b) $n_c > 2S$.

を用いてこの問題を議論した [48]。ここで、 $\mathbf{s}_m(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \sum_{\sigma'\sigma} c_{\mathbf{k}'m\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}m\sigma}$ は m チャンネルの伝導電子スピンを表す^{*15}。かれらは、スケーリング理論に基づき、系の低温特性が n_c と S の値によって異なることを予想した。すなわち、完全遮蔽が起こるのは $n_c = 2S$ の場合だけであり、 $n_c < 2S$ では不完全遮蔽 (underscreening)、 $n_c > 2S$ では過剰遮蔽 (overscreening) が起こる。不完全遮蔽の場合、自由な伝導電子と大きさ $S' = S - n_c/2$ のスピンの強磁性的に弱く結合しているモデルで低温物性が記述される。一方、過剰遮蔽の場合、系の熱力学量や電気抵抗が特徴的なエネルギー T^* を用いて

$$C(T)/T, \chi(T) \propto \begin{cases} \ln(T^*/T) & n_c = 2 \\ (T/T^*)^{-(n_c-2)/(n_c+2)} & n_c > 2 \end{cases}, \quad \rho(T) - \rho_0 = \alpha(T/T^*)^{2/(n_c+2)} \quad (4.23)$$

と非フェルミ液体的なベキ依存性を示し、 $T = 0$ での残留エントロピーが

$$S(0) = \ln \frac{\sin[(2S+1)\pi/(n_c+2)]}{\sin[\pi/(n_c+2)]} \neq 0 \quad (4.24)$$

となることが分かっている [47,49,50,51,52,53]。

なぜ非フェルミ液体になるのか、ここでは、Nozières らが行った直感的な議論を紹介する [48]。以下では、 $J > 0$ の場合のみを考える。前節で見たように J に関する最強発散項を集める近似によると、 n_c や S の値によらず低温で $\rho_c J_{\text{eff}}(T) \gg 1$ となり、局在スピンは伝導電子によって可能な限り遮蔽される。このような状況で図 14 に表したような周辺サイトへの遷移 t を摂動として考える。

まず、不完全遮蔽 $n_c < 2S$ の場合 [図 14(a)] には、遮蔽しきれずに局在スピン S' が残る。遷移 t の 2 次過程を考えると、残留スピン S' と周りの伝導電子の間には、強磁性的な交換相互作用が働くことが分かる。強磁性的な相互作用はスケーリングによって低温で $\rho_c J(\text{ferro.}) \rightarrow 0$ となる。従って、伝導電子と局在スピン S' が強磁性的に弱く相互作用するモデルで低エネルギー状態が記述される。

一方、過剰遮蔽 $n_c > 2S$ の場合、同様な摂動 t を考えると図 14(b) のように、伝導電子と過剰スピン S' の間には反強磁性的な相互作用が働くことになる。この反強磁性相互作用は過剰遮蔽状態を緩和する、すなわち、 $\rho_c J_{\text{eff}}(T)$ を減少させる。こうして、 $\rho_c J_{\text{eff}}(T) \rightarrow 0$ の弱結合固定点でも $\rho_c J_{\text{eff}}(T) \rightarrow \infty$ の強結合固定点でもない、非自明な有効相互作用 $\rho_c J_{\text{eff}}(T) = \rho_c J^*$ によって系の状態が記述されることになる。有限の有効相互作用が残るため、系はもはや自由な準粒子では記述できず非フェルミ液体となる。実際、前

^{*15}伝導電子の n_c 個のスピン状態を $|\uparrow\downarrow\uparrow\cdots\downarrow\rangle$ などと表す時、局在スピンによる一回の散乱によって、 $|\uparrow\uparrow\uparrow\cdots\downarrow\rangle$ のように、ある一つのスピン状態だけが変化する。他のスピン状態に影響をおよぼすことなくスピン状態を変化させることのできる最小単位を散乱チャンネルと呼ぶ。

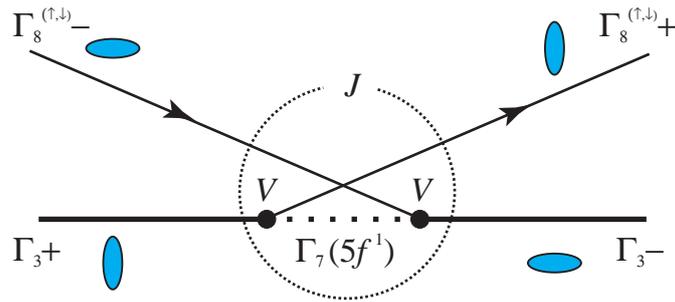


Fig. 15 擬スピンを反転する過程。V は c - f 混成を、楕円は四極子 (擬スピン) の形状を表す。

節で求めた第 2 発散項まで取り込んだスケーリング方程式 ($S = 1/2$)

$$\frac{dJ_{\text{eff}}(D)}{d \ln D} = -\rho_c J_{\text{eff}}^2(D) + \frac{n_c}{2} \rho_c^2 J_{\text{eff}}^3(D) \quad (4.25)$$

より、低温極限で $\rho_c J_{\text{eff}}(T) \rightarrow 2/n_c = \rho_c J^*$ に近づくことが示される。 $n_c \gg 1$ では、すべての温度領域で $\rho_c J_{\text{eff}}(T) \ll 1$ が満たされるので、摂動論に基づくスケーリングの議論は妥当であり、 $J^* \neq 0$ の非自明な固定点が得られる。

さて、マルチチャンネル近藤模型によって記述されるような物質は実際あるのだろうか。2つの可能性が指摘されている。1つは乱れたポテンシャルを持つガラスや2重井戸型のポテンシャルで記述される局所電子格子相互作用系に代表される2準位系 (two-level systems) である [53,54]。もう1つは、 UBe_{13} を念頭に Cox によって提唱された四極子近藤効果である [55]。Cox の議論を簡単に紹介しよう。 U^{4+} イオンは $5f^2$ 電子配置をとり、その基底多重項は全角運動量 $J = 4$ の状態である。立方結晶場によって分裂した結晶場のうち、 Γ_3 の非クラマース2重項が結晶場基底状態となっていると仮定する。また、価数の異なる電子配置の中で $5f^1$ または $5f^3$ の2重項 Γ_7 が最もエネルギー的に近いとしよう。このとき、電荷揺らぎ $\Gamma_3(5f^2) \leftrightarrow (\Gamma_7(5f^1/5f^3), c)$ において放出または吸収される c 電子の対称性は、群論的な考察から Γ_8 部分波に限られる。このような仮想的な電荷揺らぎを介した散乱で、 Γ_3 のもつ四極子モーメントの値が変化するので、四極子近藤効果と名付けられた。 Γ_8 部分波の伝導電子は四極子モーメントに加えてスピンの自由度を持つ。時間反転対称性から \uparrow と \downarrow スピンの伝導電子は等価に散乱されるため、2チャンネル近藤模型が実現する。四極子の2状態を擬スピン \pm で表せば、擬スピンを反転する過程は図 15 のように表せる。上の例で明らかなように、基底結晶場 $\Gamma_g(f^n)$ 、励起結晶場 $\Gamma_{\text{ex}}(f^{n\pm 1})$ と伝導電子の部分波 Γ_c の直積 $\Gamma_g \otimes \Gamma_{\text{ex}} \otimes \Gamma_c$ が恒等表現 Γ_1 を含めば、交換相互作用の行列要素は有限に残る。このような選択則を表 1 にまとめておく [53,56]。

以上が Cox による説明であるが、選択則が結晶場励起の限られた状態 Γ_{ex} に依存していて条件が厳しすぎると思われる^{*16}。より適用範囲の広い群論的な考察をしてみよう [34]。 Γ_3 の結晶場基底で活性となる多極子モーメントは既約分解

$$\Gamma_3 \otimes \Gamma_3 = \Gamma_{1g} \oplus \Gamma_{2u} \oplus \Gamma_{3g} \quad (4.26)$$

より、 Γ_{2u} 型の八極子と Γ_{3g} 型の四極子であることが分かる。ここで、 $g(u)$ は多極子モーメントが時間反

^{*16}文献 [57] の議論も参照されたい。

イオン	基底配置	点群	Γ_g	Γ_{ex}	Γ_c
U^{4+}	$5f^2(J=4)$	Cubic(O)	$\Gamma_3(E)$	Γ_7	$\Gamma_8(= \Gamma_3 \otimes \Gamma_7)$
U^{4+}	$5f^2(J=4)$	Hexagonal(D_6)	$\Gamma_5(E_1)$	Γ_7	$\Gamma_7 \oplus \Gamma_9$
				Γ_8	$\Gamma_8 \oplus \Gamma_9$
				Γ_9	$\Gamma_7 \oplus \Gamma_8$
			$\Gamma_6(E_2)$	Γ_7	$\Gamma_8 \oplus \Gamma_9$
				Γ_8	$\Gamma_7 \oplus \Gamma_9$
				Γ_9	$\Gamma_7 \oplus \Gamma_8$
U^{4+}	$5f^2(J=4)$	Tetragonal(D_4)	$\Gamma_5(E)$	Γ_6/Γ_7	$\Gamma_6 \oplus \Gamma_7$
Ce^{3+}	$4f^1(J=5/2)$	Cubic(O)	Γ_7	Γ_3	Γ_8
Ce^{3+}	$4f^1(J=5/2)$	Hexagonal(D_6)	Γ_9	Γ_5/Γ_6	$\Gamma_6 \oplus \Gamma_7$

Table. 1 U^{4+}, Ce^{3+} イオンに対する四重極近藤模型が実現する基底、励起及び伝導電子の状態

転に対して偶 (奇) の性質を持つことを表す。一方、伝導電子の部分波がもつ多極子モーメントは

$$\Gamma_7 \otimes \Gamma_7 = \Gamma_{1g} \oplus \Gamma_{4u}, \quad \Gamma_8 \otimes \Gamma_8 = \Gamma_{1g} \oplus \Gamma_{2u} \oplus \Gamma_{3g} \oplus 2\Gamma_{4u} \oplus \Gamma_{5g} \oplus \Gamma_{5u} \quad (4.27)$$

と既約分解されることから、 Γ_7 部分波では Γ_{4u} 型の双極子、 Γ_8 部分波では Γ_{5g} 型の四極子や Γ_{5u} 型の八極子などであることが分かる。交換相互作用は O_h 群の対称操作に対してスカラーでなければならないので、同じ対称性の多極子モーメントだけが結合する。従って、 Γ_3 基底結晶場では、伝導電子のうちの Γ_8 部分波だけが結合する。四極子交換相互作用のうちの 1 成分は実は四極子ではなく Γ_{2u} 型八極子のイジング的な相互作用であることに注意しよう。数値繰り込み群を用いた計算では、擬スピン空間で異方的な相互作用でも、降温とともに回転対称性を回復することが示されている [58]。このことは、仮に Ising 型八極子相互作用がなくても、降温とともに有効的な八極子相互作用が発生することを意味する。

ここで、非フェルミ液体的な振る舞いがアンダーソン模型の立場とどう関連するかという純理論的な疑問点について述べておこう。前節で見たように、通常の近藤問題の基底状態は局所フェルミ液体であり、このことはアンダーソン模型に立てば U に関する断熱接続の考えから容易に理解される。不純物問題では相転移はあり得ないからである。では、マルチチャンネル近藤問題では、どうして非フェルミ液体となるのだろうか。上で見たように、四極子近藤模型が実現するような状況では、単純な斥力 U だけでなく結晶場準位を生み出す複雑な局所多体相互作用が存在する。このような多体相互作用すべてを断熱的に導入すると基底状態の準位交差が生じることがあり、この時点で断熱接続の仮定が破綻する [57, 59, 60]。これが非フェルミ液体が現れる理由である。

2 チャンネル近藤効果の実現していると考えられている物質は現在のところ見つかっていない。1990 年代後半には $Th_{1-x}U_xRu_2Si_2$ ($x < 0.07$) で 2 チャンネル近藤効果の可能性が議論された [61]。2 チャンネル近藤効果で期待される残留エントロピー $S(0) = (1/2) \ln 2$ はチャンネルの対称性を破るような摂動によって放出されるはずである [62]。外部磁場によってチャンネル対称性を破る実験が行われたが、放出されたエントロピーは期待される値より大幅に小さいものであった [63]。こうした結果を踏まえ、非

フェルミ液体的な振る舞いは、2チャンネル近藤効果ではなく、結晶場1重項と近藤1重項の競合によって生じているという理論が提案されている [64]。詳しく述べる余裕はないが、2チャンネル近藤模型と2不純物近藤模型の非フェルミ液体的な振る舞いは同じユニバーサリティクラスに属する。詳しくは文献 [65,66,67,68,69] を参照されたい。

4.7. 局所電子格子相互作用系における「近藤効果」

最後に、充填スクッテルダイトにおけるラトリングと関連する話題として、局所的な電子格子相互作用が強い系について考察しよう。この問題の基本ハミルトニアンは伝導電子と相互作用するアインシュタインフォノンからなる。この模型は相互作用の取り扱いが少し面倒なので、類似の物理を含むホルスタイン模型

$$H = \sum_{k\sigma} \xi_k^{(c)} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + H_{\text{ph}} + H_{\text{int}},$$

$$H_{\text{ph}} = \sum_i \frac{p_i^2}{2M} + \frac{M}{2} \omega_0^2 x_i^2, \quad H_{\text{int}} = \sum_i v x_i \sum_\sigma \left(n_{i\sigma} - \frac{1}{2} \right) \quad (4.28)$$

を考える。平均電子数密度は $\langle n_i \rangle = 1$ とする。ここで、 x_i は分極を表すフォノンの一般化座標と考えるべきである。もし x_i がフォノンの座標であれば、 $x_i \rightarrow -x_i$ に対して系は不変であるから、電子格子相互作用に x_i の奇数次項はあらわれないからである。

電子格子相互作用を強めていくと、フォノンの有効ポテンシャルが2重井戸型となることは次のような考察から理解できる。まず、無次元化した「座標」 φ_i と特徴的なエネルギー U_{eff} を次のように導入する。

$$\varphi_i = \frac{M\omega_0^2}{v} x_i, \quad U_{\text{eff}} = \frac{v^2}{M\omega_0^2} \quad (4.29)$$

定数項を無視すれば

$$H_{\text{ph}} + H_{\text{int}} = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2M} + H_{\text{pot}}^{(i)} \right], \quad H_{\text{pot}}^{(i)} = \frac{1}{2} U_{\text{eff}} [\varphi_i + (n_i - 1)]^2 \quad (4.30)$$

と書き直せる。仮に伝導電子のダイナミクスを無視してフォノンだけに着目すれば、フォノンの有効ポテンシャルは $H_{\text{pot}}^{(i)}$ で表される。電子格子相互作用 v (U_{eff}) がフォノンの運動エネルギーに比べて大きい極限では、フォノンのポテンシャルエネルギーを下げるために、各サイトで $n_i \sim 0$ または 2 の状況が実現する。エネルギーの利得は U_{eff} 程度である。このとき、フォノンの有効ポテンシャルは $\varphi_i \sim \pm 1$ に極小を持つ2重井戸型となり、フォノンは電子と強く結合してバイポーラロン状態を形成する。各サイトで $\langle (n_i - \langle n_i \rangle)^2 \rangle \sim 1$ と評価され、電荷の揺らぎが発達していることが分かる。このような局所的電荷揺らぎは、電荷密度波や超伝導転移を引き起こす原因となる。一方、 v が小さい時はフォノンの運動エネルギー項がより重要で $n_i \sim 1$ となることが期待される。この場合は通常の調和ポテンシャルが実現する。有効ポテンシャルの振る舞いを図16に示す。

こうした事情は、近藤問題で議論した図7の場合と明らかな類似性がある。近藤問題での局在スピンの発生が2重井戸型ポテンシャルの発生に対応する。この問題でもやはり $n_i \sim 0, 2$ の状態はスナップショットであり、低温では普通の近藤効果と同様、2重井戸間の量子トンネリングが重要となる。トンネ

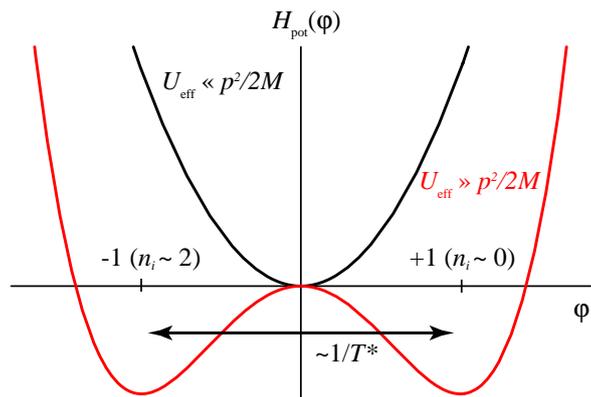


Fig. 16 局所電子格子相互作用の強さとフォノンの有効ポテンシャル。

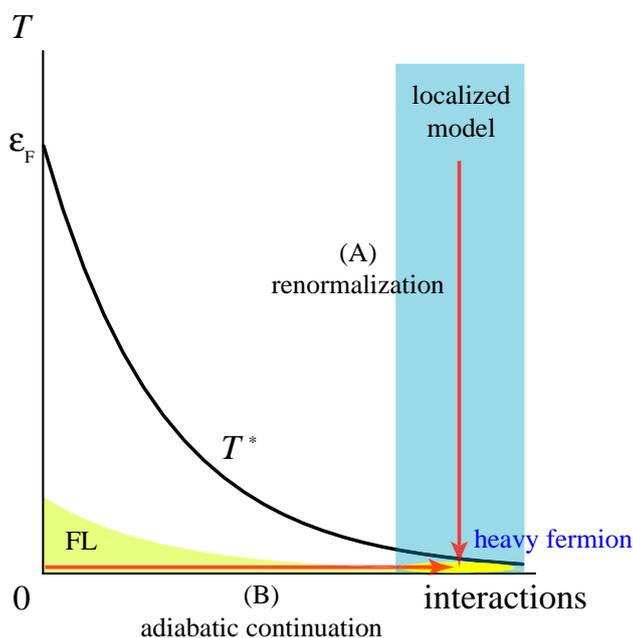


Fig. 17 重い電子系の理解に向けてのアプローチ。

リングの特徴的な周波数が近藤温度に対応する。量子トンネリングの結果、フォノンの基底状態は二つの井戸にまたがる全対称な波動関数となる。2重井戸型ポテンシャルの発生によってフォノンの「位置」の自由度が増大し、そのエントロピーが量子トンネリングの周波数より低温で放出されるため重い電子が出現すると期待される。このような類似性は、スケーリングや数値繰り込み群 [70,71]、さらに動的平均場近似 [72,73,74] によって確かめられている。

5. おわりに

本稿では、現象論的なフェルミ液体論からはじめて、重い電子系のフェルミ液体状態について述べた。次に、高温で局在スピンの発生した状態から局所フェルミ液体へと移り変わる近藤効果について説明した。また、局所非フェルミ液体へ移行するマルチチャンネル近藤効果や局所電子格子問題における近藤効果について述べた。

では、1 不純物問題ではなく磁性イオンが格子を組んだ重い電子系を議論するためにどのようなアプローチを取ればよいだろうか。図 17 に代表的な 2 つのアプローチを示す。(A) では、局所的な多体相互作用を適切に取り込んだモデルを出発点として重い電子状態が形成される過程を議論する。(B) では、断熱接続に基づいてあらゆる多体相互作用がゼロの状態からフェルミ液体論を展開する。具体的な手法として、(A) では、動的平均場近似 (DMFT) [75,76] やそれを拡張した手法 [77,78,79,80] などが代表としてあげられる。一方、(B) では、多体相互作用に関する摂動論や揺らぎ交換近似 (FLEX) [81] などの弱相関的な手法やスレーブボソン平均場法 [18,19,20,82]、グッツヴィラー近似 [16,17,83] などがある。

(A) のアプローチでは、有効媒質中の不純物問題や少数クラスター問題を厳密に解く必要があり、膨大な計算量が必要となる。また、少し複雑なモデルに対してあらゆる温度域で有効な手法が未整備である。さらに長距離の揺らぎをどのようにして取り込むかという問題がある。しかし、出発点となるモデルが構築しやすい、高温の局所的な振る舞いから低温での重い電子状態まで、実験と関連した物理量の温度変化が議論できるという利点がある。(B) のアプローチでは、事実上、繰り込まれたフェルミエネルギー T^* より十分低温の議論に限られるが、 T^* は種々のパラメータに依存し評価が難しいため近似の適用限界がはっきりしない。揺らぎ交換近似では、インコヒーレント部分が失われてしまい準粒子の重みが正しく評価できないため強相関電子系の議論には不向きである。特に、局在スピンはインコヒーレント部分によって記述されるので、これが失われた手法ではキュリー・ワイス則が記述できず、磁気 (多極子) 転移の議論には不適當である。 $z \ll 1$ の状況を扱う代わりに、繰り込まれた量として小さい U とバンド幅を用いる簡便法もしばしば用いられるが、 $T \ll T^*$ でない限り、 z は温度変化し、従って、準粒子間相互作用も温度変化することにも注意が必要である。低次の摂動計算はインコヒーレント部分もある程度記述できるが、 f^2 の結晶場 1 重項など特殊な局所状態を記述するのは難しいと思われる。しかし、これらの手法は比較的計算量が少なく、複雑なバンド構造、特にフェルミ面の特徴を考慮できるという利点がある。また、摂動論に基づく厳密な関係式は相互作用の大きさによらず常に有用である。それぞれのアプローチの特徴をよく理解し、その利点を生かして欠点を克服することで着実な発展が期待できるだろう。

本稿で取り扱ったテーマは長い研究の歴史があり、その解明に携わった当事者達による優れた解説、教科書が沢山出回っている。本稿では、それぞれの問題において最も重要だと考えられる点に絞って要点を述べるよう努めたが、著者の力量不足から至るところで舌足らずとなった。また、本稿の話題と関連の深い量子臨界点近傍の物理 [84,85,86] や斥力に起因する超伝導 [87,88,89,90] などには全く触れることができなかった。この拙文が優れた文献にあたる際の案内役にでもなれば幸いである。

最後に、「スクッテルダイト若手夏の学校」を企画して頂いた諸先生方、実際の運営を担当して下さい、三宅厚志、服部一匡、大槻純也、菊地大輔、正木了、中井祐介の諸氏に感謝致します。

References

- [1] L.D. Landau: Soviet Phys. JETP **3** (1957) 920; L.D. Landau: *ibid.* **5** (1957) 101.
- [2] P. Nozières and D. Pines: *The Theory of Quantum Liquids* (Benjamin 1965).
- [3] A.J. Leggett: 物性研究 6,7 月号 (1974).
- [4] J.M. Luttinger: Phys. Rev. **119** (1960) 1153.
- [5] 三宅和正: 固体物理 **33** (1998) 285.
- [6] 斯波弘行: 「電子相関の物理」(岩波、2001) 第 6 章。
- [7] T. Giamarchi: *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford Univ. Press, 2004).
- [8] A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov and I.E. Dzyaloshinskii: *Method of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Dover, 1965).
- [9] K. Satoh, T. Fujita, Y. Maeno, Y. Ōnuki and T. Komatsubara: J. Phys. Soc. Jpn. **58** (1989) 1012.
- [10] A. Sumiyama, Y. Oda, H. Nagano, Y. Ōnuki, K. Shibusaki and T. Komatsubara: J. Phys. Soc. Jpn. **58** (1986) 1294.
- [11] K. Kadowaki and S.B. Woods: Solid State Commun. **58** (1986) 507.
- [12] H. Kontani: J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004) 515.
- [13] K. Yamada and K. Yosida: Prog. Theor. Phys. **76** (1986) 621; K. Yamada, K. Yosida and K. Hanzawa: Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 108 (1992) 141; 芳田奎: 日本物理学会誌 **41** (1986) 626; K. Yamada: *Electron Correlation in Metals* (Cambridge 2004) Chap. 7, 8.
- [14] 糟谷忠雄: 日本物理学会誌 **42** (1987) 722.
- [15] K. Miyake, T. Matsuura and C.M. Varma: Solid State Commun. **71** (1989) 1149.
- [16] T.M. Rice and K. Ueda: Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 995; T.M. Rice and K. Ueda: Phys. Rev. **B34** (1986) 6420.
- [17] M.C. Gutzwiller: Phys. Rev. **137** (1965) A1762; D. Vollhardt: Rev. Mod. Phys. **56** (1984) 99.
- [18] N. Read and D.M. Newns: J. Phys. **C16** (1983) 3273; D.M. Newns and N. Read: Adv. Phys. **36** (1987) 799.
- [19] G. Kotliar and A.E. Ruckenstein: Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 1362.
- [20] T.Li, P. Wölfle and P.J. Hirschfeld: Phys. Rev. **B40** (1989) 6817.
- [21] W.J. de Haas, J. de Boer and G.J. van den Berg: Physica **1** (1933/34) 1115.
- [22] J. Kondo: Prog. Theor. Phys. **32** (1964) 37.
- [23] K. Yosida: Phys. Rev. **147** (1966) 223; Prog. Theor. Phys. **36** (1966) 875.
- [24] 芳田奎: 磁性 (岩波、1991).
- [25] K. Wilson: Rev. Mod. Phys. **47** (1975) 773.
- [26] H.R. Krishna-Murthy, J.W. Wilkins and K.G. Wilson: Phys. Rev. **B21** (1980) 1003; **21** (1980) 1044.
- [27] P. Nozières: J. Low Temp. Phys. **17** (1974) 31.
- [28] P.W. Anderson: *Basic Notions of Condensed Matter Physics* (Benjamin 1984) Chap. 5.
- [29] P.W. Anderson: Phys. Rev. **124** (1961) 41.

- [30] J.R. Schrieffer and P.A. Wolff: Phys. Rev. **149** (1966) 491.
- [31] A.A. Abrikosov: Physics **2** (1965) 5.
- [32] P.W. Anderson: J. Phys. **C3** (1970) 2436.
- [33] P. Nozières: J. Physique **39** (1978) 1117.
- [34] H. Kusunose and Y. Kuramoto: Phys. Rev. B **59** (1999) 1902.
- [35] M. Fowler and A. Zawadovski: Solid State Commun. **9** (1971) 471.
- [36] A.A. Abrikosov and A.A. Migdal: J. Low Temp. Phys. **3** (1970) 519.
- [37] A.C. Hewson: *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge 1993) Chaps. 4, 6.
- [38] S.-K. Ma: *Modern Theory of Critical Phenomena* (Addison-Wesley, 1976) Chap. 5.
- [39] V.T. Rajan: Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 308.
- [40] V. Zlatić and B. Horvatić: Phys. Rev. **B28** (1983) 6904.
- [41] Y. Kuramoto and Y. Kitaoka: *Dynamics of Heavy Electrons* (Oxford Univ. Press, 2000).
- [42] O. Sakai, Y. Shimizu and T. Kasuya: J. Phys. Soc. Jpn. **58** (1989) 3666.
- [43] T.A. Costi, A.C. Hewson and V. Zlatić: J. Phys. Condens. Matter **6** (1994) 2519.
- [44] R. Bulla, A.C. Hewson and Th. Pruschke: J. Phys. Condens. Matter **10** (1998) 8365.
- [45] J.E. Hirsch and R.M. Fye: Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 2521.
- [46] P. Werner, A. Comanac, L.D. Medici and A.J. Millis: Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 076405; P. Werner and A.J. Millis: cond-mat/0607136.
- [47] I. Affleck: Acta Phys. Polon. **B26** (1995) 1869.
- [48] P. Nozières and A. Blandin: J. Physique **41** (1980) 193.
- [49] A.M. Tsel'ick and P.B. Wiegmann: J. Stat. Phys. **38** (1985) 125.
- [50] P.D. Sacramento and P. Schlottman: Phys. Rev. Lett. **142** (1989) 245.
- [51] O. Sakai, Y. Shimizu and N. Kaneko: Physica **B186-188** (1993) 323.
- [52] D.L. Cox and A. Ruckenstein: Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1613.
- [53] D.L. Cox and A. Zawadowski: Adv. Phys. **47** (1998) 599.
- [54] A. Muramatsu and F. Guinea: Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 2337.
- [55] D.L. Cox: Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 1240.
- [56] D.L. Cox: Physica **B186-188** (1993) 312.
- [57] M. Koga and H. Shiba: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 4345; **65** (1996) 3007.
- [58] H.B. Pang and D.L. Cox: Phys. Rev. **B44** (1991) 9454.
- [59] O. Sakai, S. Suzuki and Y. Shimizu: Solid State Commun. **101** (1997) 791.
- [60] H. Kusunose: J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 61.
- [61] H. Amitsuka *et al.*: Physica **B186-188** (1993) 337; J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 736; Physica **B230-232** (1997) 613.
- [62] S. Yotsuhashi and H. Maebashi: J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002) 1705.
- [63] H. Amitsuka, K. Kuwahara, M. Yokoyama, K. Tenya, T. Sakakibara, M. Mihalik and A.A. Menovský: Physica **B 281-282** (2000) 326.

- [64] S. Yotsuhashi, K. Miyake and H. Kusunose: J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002) 389.
- [65] B.A. Jones, C. M. Varma and J. W. Wilkins: Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 125.
- [66] B.A. Jones and C. M. Varma: Phys. Rev. **B40** (1989) 324.
- [67] O. Sakai and Y. Shimizu: J. Phys. Soc. Jpn. **61** (1992) 2333.
- [68] I. Affleck and A.W.W. Ludwig: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 1046.
- [69] I. Affleck, A.W.W. Ludwig and B.A. Jones: Phys. Rev. **B52** (1995) 9528.
- [70] H. Kusunose and K. Miyake: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3032.
- [71] S. Yotsuhashi, M. Kojima, H. Kusunose and K. Miyake: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 49.
- [72] J.K. Freericks, M. Jarrell and D.J. Scalapino: Phys. Rev. **B48** (1993) 6302; J.K. Freericks and M. Jarrell: Phys. Rev. **B50** (1994) 6939.
- [73] D. Meyer, A.C. Hewson and R. Bulla: Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 196401.
- [74] K. Mitsumoto and Y. Ōno: Physica C **426-431** (2005) 330.
- [75] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth and M.J. Rozenberg: Rev. Mod. Phys. **68** (1996) 13.
- [76] A. Georges: cond-mat/0403123.
- [77] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke and M.H. Hettler: Rev. Mod. Phys. **77** (2005) 1027.
- [78] H. Kusunose: J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 054713.
- [79] A. Toschi, A.A. Katanin and K. Held: cond-mat/0603100.
- [80] C. Slezak, M. Jarrell, Th. Maier and J. Deisz: cond-mat/0603421.
- [81] N.E. Bickers and D.J. Scalapino: Ann. Phys. (N.Y.) **193** (1989) 206; N.E. Bickers and S.R. White: Phys. Rev. **B43** (1991) 8044.
- [82] H. Kusunose and H. Ikeda: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 405.
- [83] R. Shiina: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 3267.
- [84] A.J. Millis: Phys. Rev. B **48** (1993) 7183.
- [85] T. Moriya and T. Takimoto: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 960; T. Moriya: *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism* (Springer, 1985).
- [86] S. Sachdev: *Quantum Phase Transitions* (Cambridge, 2000).
- [87] M. Sigrist and K. Ueda: Rev. Mod. Phys. **63** (1991) 239.
- [88] T. Moriya and K. Ueda: Adv. Phys. **49**(2000) 555.
- [89] Y. Yanase, T. Jujo, T. Nomura, H. Ikeda, T. Hotta and K. Yamada: Phys. Rep. **387** (2003) 1.
- [90] D. Manske: *Theory of Unconventional Superconductors* (Springer, 2004).