

重い電子系における遍歴と局在

岡山大学 異分野基礎科学研究所

大槻純也



復習

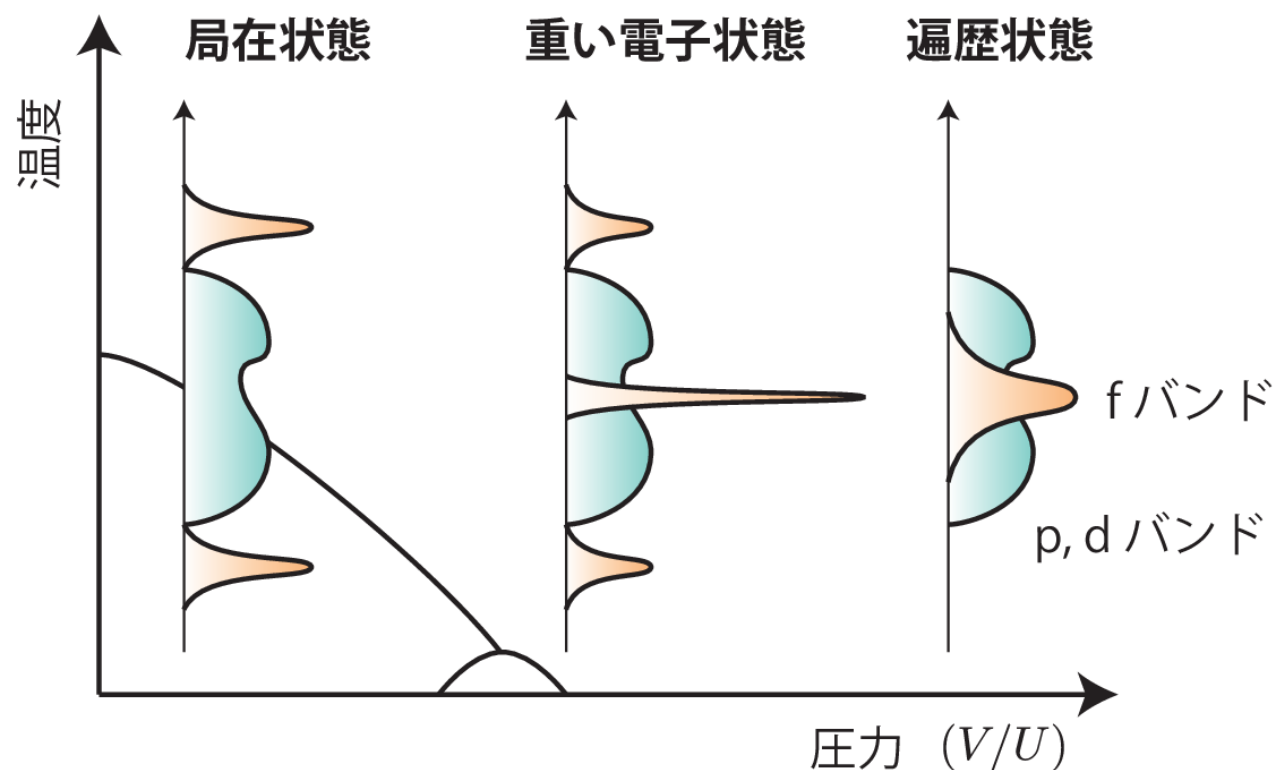
- f電子は...

- U 小では遍歴状態
- U 大では局在状態
- 中間領域で重い電子状態

- 今回考えること

- 遍歴・局在の移り変わりはどこで起こる？
- どうやって定量化するか

(b) f 電子系



f電子の遍歴・局在を観測する方法

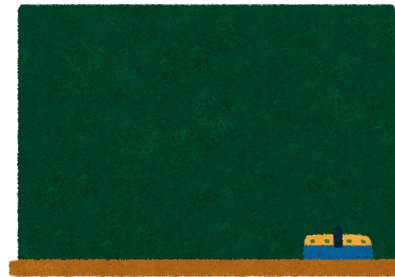
- 帯磁率の温度依存性
- 電気抵抗の温度依存性
- PES, ARPES これで観測できれば一番良いが...
 非占有状態が観測できないので難しい
- 磁化振動（de Haas-van Alphen効果） フェルミ面の直接観測
 低温極限・有限磁場

ラッティンジャーの定理

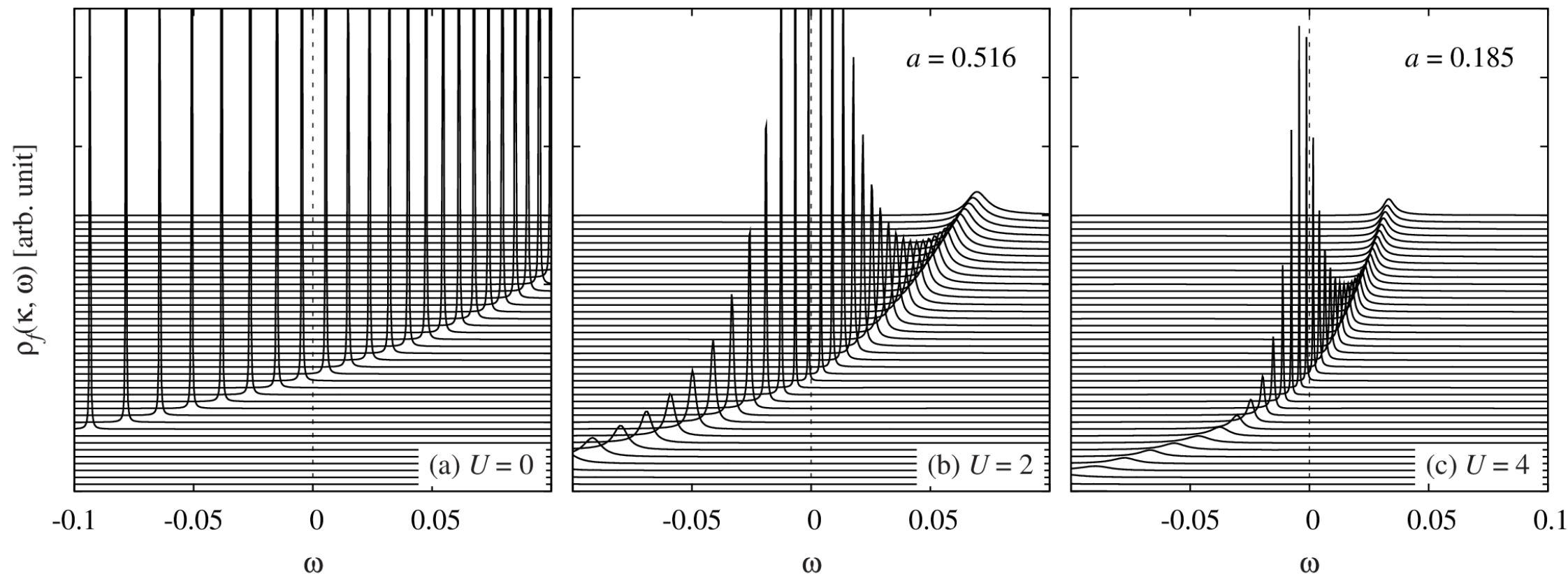
相互作用があっても...

1. 運動量分布 $n(k)$ に不連続が存在する（フェルミ面がある）
2. フェルミ面が囲む体積(フェルミ体積) Ω_{FS} は不変

$$\Omega_{\text{FS}} = 2 \int_{\text{FS}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = n_{\text{band}}$$



周期アンダーソン模型のARPESスペクトル

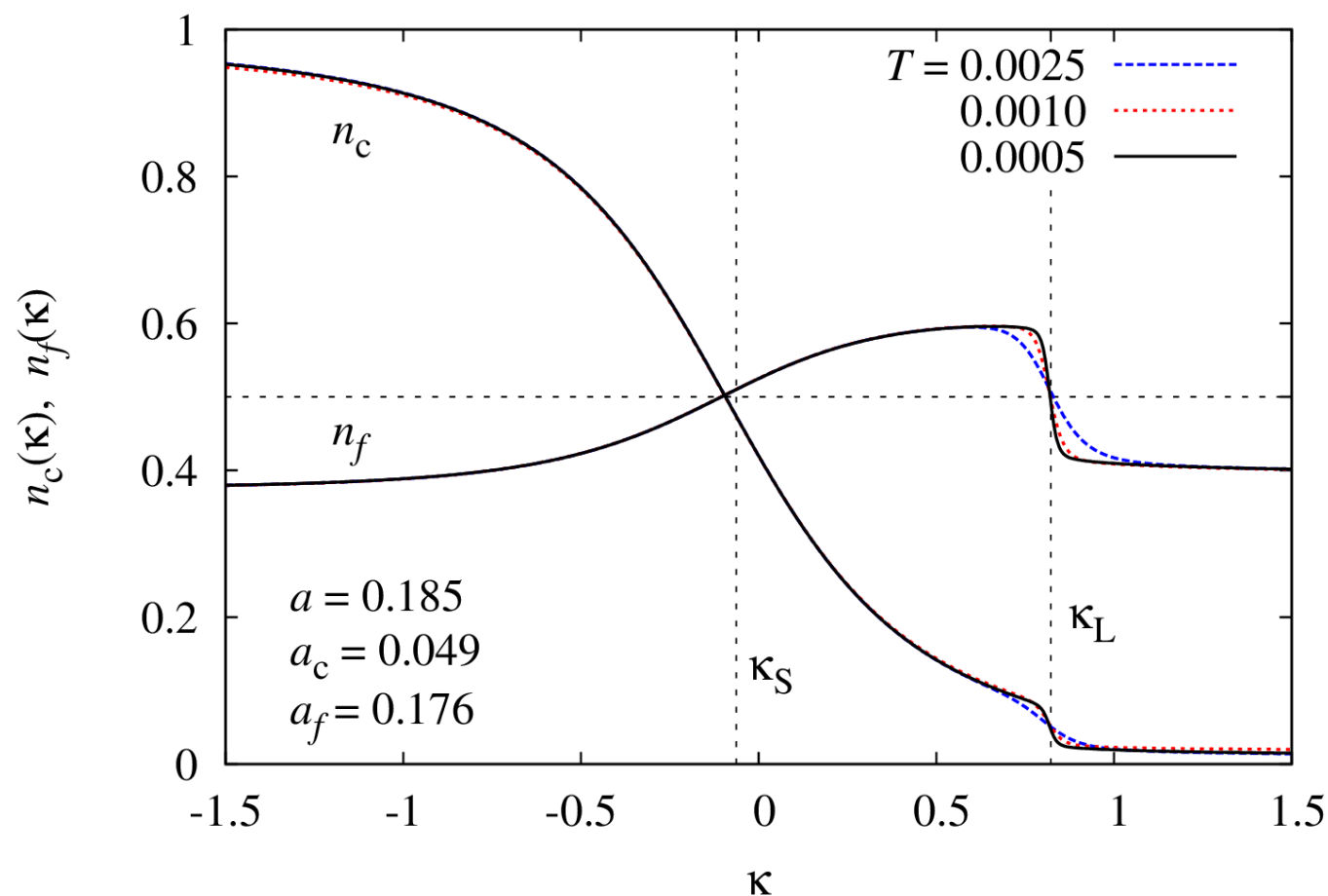


バンド幅が狭くなるが
フェルミ波数は変わらない。

動的平均場法で計算

詳細は「重い電子系における近藤効果と磁気秩序」を参照

周期アンダーソン模型の運動量分布



Z_f ちいさい不連続
(繰り込み因子 ≤ 1)

Z_c

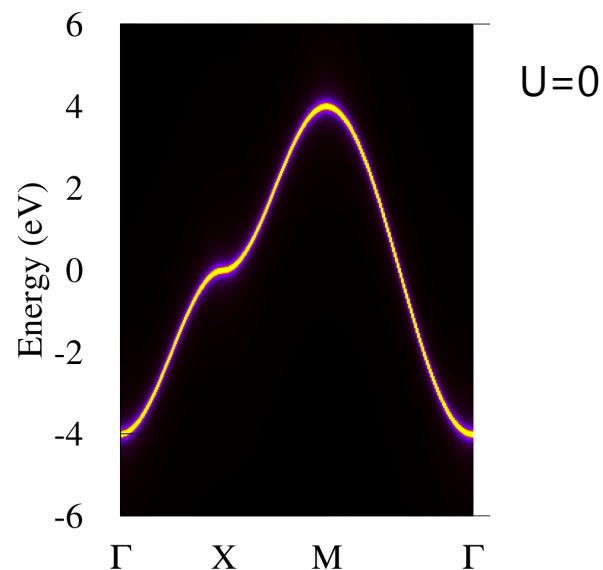
動的平均場法で計算

詳細は「重い電子系における近藤効果と磁気秩序」を参照

例外：モット絶縁体

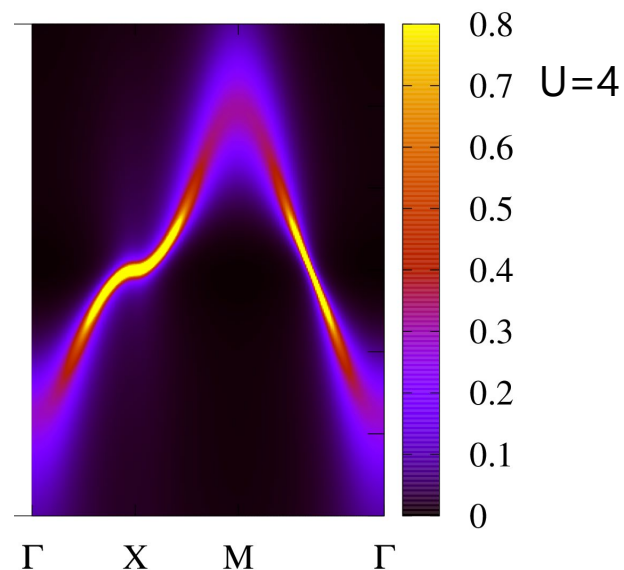
ARPESスペクトル

相互作用なし
フェルミ気体



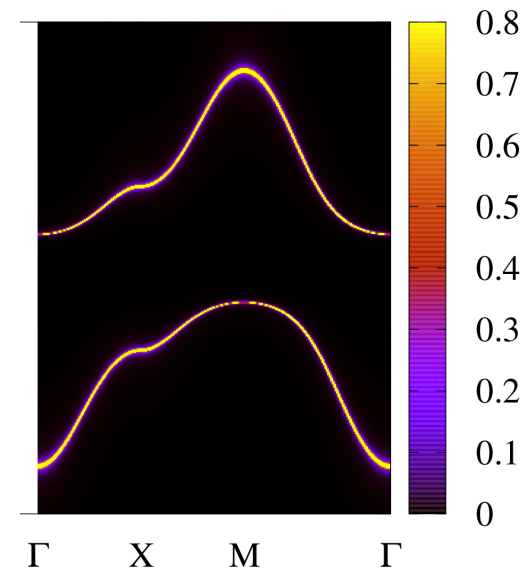
$$\Omega_{FS}=1$$

相互作用あり
フェルミ液体



$$\Omega_{FS}=1$$

相互作用あり
モット絶縁体



$$\Omega_{FS}=0$$

U=4
Hubbard-I近似
($U \gg W$ では正しい)

電子が消えた = 局在した

f電子系の場合

f電子が局在していたらf電子数は Ω_{FS} に含まれない

遍歴： $\Omega_{FS} = n_c + n_f$

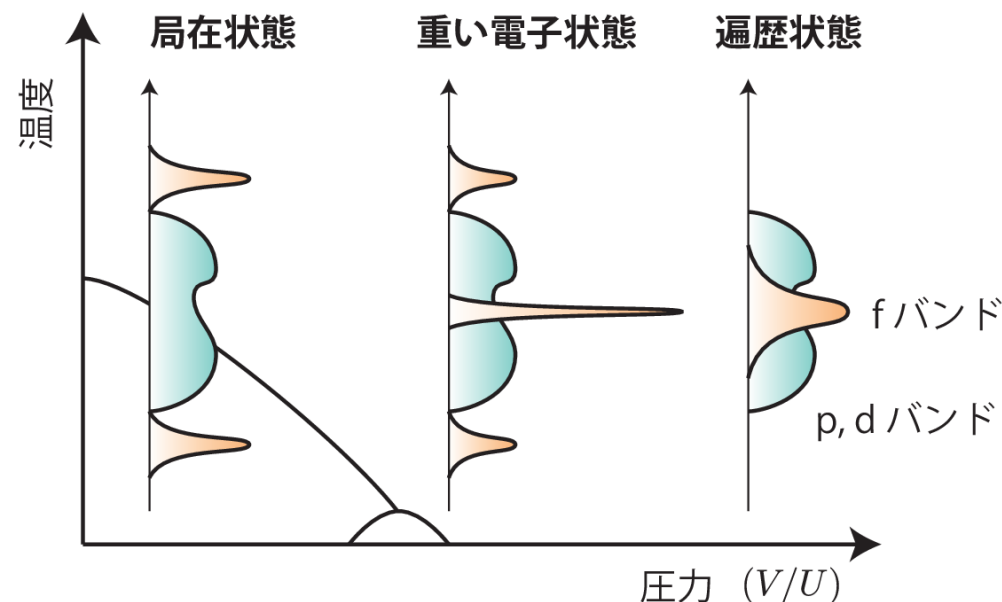
大きいフェルミ面

局在： $\Omega_{FS} = n_c$

小さいフェルミ面

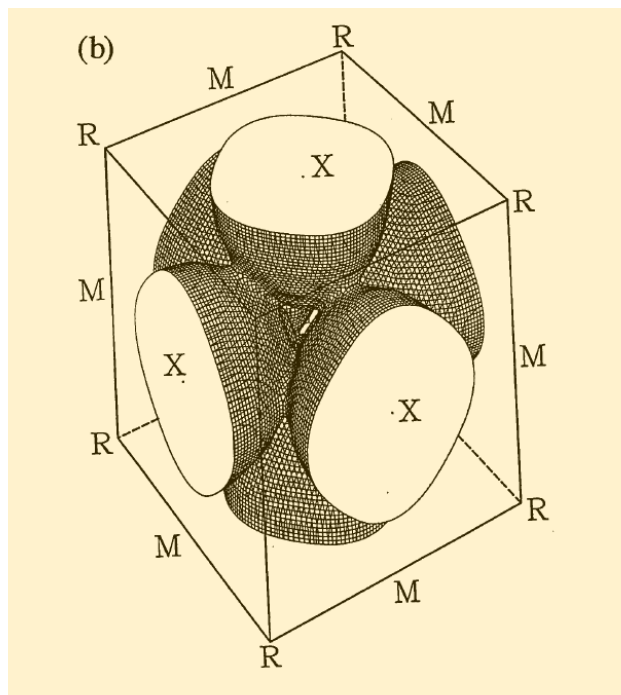
f電子に注目するとモット絶縁体のようなもの
CeをLaで置き換えた化合物のフェルミ面が観測される

(b) f電子系



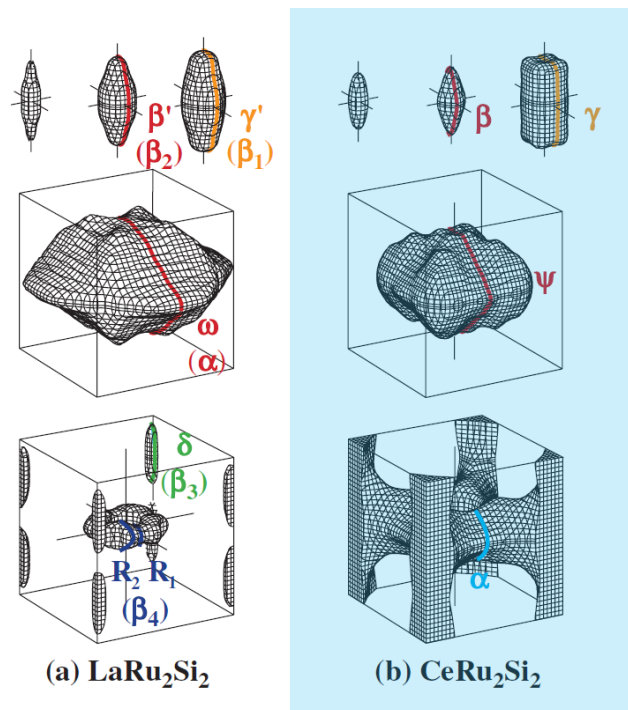
f電子系化合物のフェルミ面の例

CeB_6



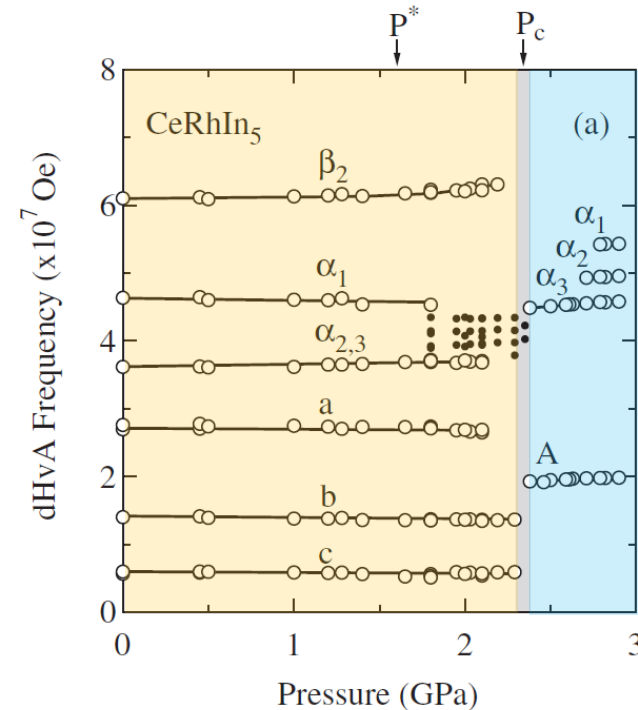
Onuki et al., J. Phys. Soc. Jpn. 58, 3698 (1989)
Kasuya, Harima, J. Phys. Soc. Jpn. 65, 1898 (1996)

CeRu_2Si_2



Yamagami, Hasegawa J. Phys. Soc. Jpn. 61, 2388 (1992)
Matsumoto et al., J. Phys. Soc. Jpn. 79, 083706 (2010)

CeRhIn_5



Shishido et al., J. Phys. Soc. Jpn. 74, 1103 (2005)

LaB_6 と類似
→4f電子の寄与はない

LaRu_2Si_2 とは大きく異なる
→4f電子が遍歴

圧力で不連続に変化
→遍歴・局在の転移

大きい・小さいに関するいろいろ

- 常磁性であれば、 $T=0$ では必ず大きいフェルミ面
- $T>0$ の場合、常磁性であっても小さいフェルミ面になってもよい（厳密にはフェルミ面とは呼ばないが）
- 磁場を強くすると、小さいフェルミ面に転移する
- 反強磁性などの秩序状態では、小さいフェルミ面の場合もある

エネルギーバンドがフェルミ準位をまたぐ・またがない
の変化をリフシツツ転移と呼ぶ
通常の熱力学的な相転移とは区別される