

12. 近藤格子の遮蔽効果

北大・理 大 川 房 義

§ 1. 序

近藤格子系の Ce 化合物, たとえば CeCu_2Si_2 , CeCu_6 等では強い電子相関効果により, 有効質量が電子質量の 200 倍以上にも達する準粒子が観測されている。この重い準粒子のことを重い電子とも呼び, これらの系を重い電子系と呼ぶ。これらの重い電子系では, 不純物をそれほど含まなくてきれいな結晶とおもえるのに大きな残留抵抗を示すものが多い。また低温での大きな正の磁気抵抗も多く, 多くの系で観測されている。不純物の存在する重い電子系 (近藤格子系) での上記の 2 つの輸送現象を理論的に考えるためには, まず結晶格子の乱れを重い電子がどの様に感じるのか, すなわち遮蔽効果を調べる必要がある。

また CeCu_2Si_2 では, 一重項状態であるがフェルミ面上で線に沿ってエネルギーギャップの消えている超伝導状態が実現している (異方的 s 対称超伝導)¹⁾。したがって超伝導を実現している主たる引力の機構に対してはフォノンという可能性が高い。ここでも重い電子系の遮蔽効果が問題になる。重い電子はフォノンによって揺さぶられた格子サイトのイオンポテンシャルをどの様に感じるのか。

たとえば Razafimandimby らは, 近藤体積崩壊機構により重い電子はフォノンによる格子の乱れを強く感じ, 大きな電子間引力が可能であると議論している²⁾。すなわち, フォノンによる体積の収縮・膨張は近藤温度, 近藤状態を大きく揺さぶることにより準粒子を大きく揺さぶる。その結果, 大きな電子・格子相互作用が得られるというものである。彼らの得た結果は, 遮蔽効果というよりはむしろ近藤効果による電子・格子相互作用の増幅効果と言うべきかもしれない。

また一方で, 重い電子はフェルミ液体論の従来の言葉でいえば, f 電子間に働く強いクーロン相互作用によって実現している有効質量の大きな準粒子, すなわち重い準粒子といえる。さきに述べたように, 準粒子の有効質量は電子質量の 200 倍にも達することがある。したがって準粒子の状態密度は非常に高く, この系では遮蔽効果も非常に大きいのでは, という推論も可能である。

2 つの全く反対の結論を導く議論から, 結局, まず強い電子相関によってできた重い準粒子の性質を明らかにし, それから遮蔽効果を議論する必要があることがわかる。(後で議論する

ように、上記の2つの遮蔽効果についての議論は誤りであることがわかる。) そこで、重い電子の起源から議論を始めよう。

§ 2. フェルミ液体論³⁾

重い電子系を理解するにはランダウのフェルミ液体論が便利である。ここではランダウ理論の微視的理論であるラッティンジャー理論を応用する。すなわち、電子相関は非常に強いが、系は正常フェルミ液体に留まると仮定する。この仮定は現実の重い電子系が正常フェルミ液体であることにより正当化される。

この理論枠組みで残された問題はフェルミ液体パラメーターをいかに計算するかということになる。ここでは第2の仮定としてフェルミ液体パラメーターはシングル f サイト系のそれで良く近似できるとする。実験結果を見てみると、この仮定はCe化合物の近藤格子系では良い近似と期待できる。

$$\Sigma_{\sigma}(i\varepsilon; H) = \Sigma_{\sigma}(0; H) + i\chi\varepsilon + \dots, \quad (1)$$

ここで、 $\Sigma_{\sigma}(0; H)$ は mixing energy Δ と σ スピンを持つ f 電子数のサイト当りの数 $n_{f\sigma}$ を用い、フリーデル総和則で次の式で与えられる。

$$\varepsilon_f - \frac{1}{2} \sigma g \mu_B H + \Sigma_{\sigma}(0; H) - \mu = \Delta \tan \left[\pi \left(\frac{1}{2} - n_{f\sigma} \right) \right], \quad (2)$$

χ は $U \rightarrow \infty$ の場合の摂動計算の結果を使う。 $n_f = n_{f\uparrow} + n_{f\downarrow} \rightarrow 1$ の極限では

$$\chi = \frac{\pi^2}{8} \frac{1}{1 - n_f}, \quad (3)$$

ここでは f 電子のセルフエネルギーの波数依存性は無視されている。しかし f 電子と伝導電子との小さな混成で比較的重いバンドができる。この比較的重い電子は電子相関効果のためさらに重くなる。この理論では χ が電子相関による質量の増幅を表す。 $U \rightarrow 0$ では χ は1であることが示せる。電子相関の強い場合は近藤効果のために χ は大きくなっていて、たとえば、 $n_f = 0.9$ では $\chi \sim 10$ である。したがってシングル f サイトの物理像で重い電子は理解できる。すなわち、電荷揺動の自由度は抑圧されていて、主に近藤効果によるスピン揺動が重い準粒子、重い電子を造っているといえる。

§ 3. 残留抵抗⁴⁾

ここでは静的な散乱体のみを仮定する。すなわち周期的アンダーソン模型をとり、乱雑さと

研究会報告

しては f 準位の深さ ($\delta \varepsilon_f$), 混成の大きさ (δV), 伝導電子の準位の深さ (δv) の3つを考える。上記のフェルミ液体論を応用すると, 現実の問題になる乱雑さは, 電子相関効果により繰り込まれた f 準位の深さ (δE_f), 混成の大きさ (δV), 伝導電子の準位の深さ (δv) の3つに置き換わる。ここで繰り込まれた i サイトの f 準位の深さは, 式 (2) より i サイトで σ スピンを持つ f 電子数 $n_{f\sigma}$ を用い

$$E_{f\sigma i} - \mu = \Delta_i \tan \left[\pi \left(\frac{1}{2} - n_{f\sigma i} \right) \right], \quad (4)$$

と与えられる。ここで Δ_i は i サイトの mixing energy である。この乱雑さには f 電子数をととして裸の f 準位の乱雑さが効くばかりでなく, 混成と伝導帯の乱雑さも効いている。

静的散乱体に限ったので伝導率の計算は簡単である。さらに乱雑さをサイト表示で対角的なものに限れば CPA を適用することも可能である。定性的な結果としては3つの乱雑さのうち1つでも

$$\delta V / V = O(1), \quad \delta v / D = O(1), \quad \delta E_f / \Delta = O(1)$$

を満足すれば, 各不純物サイトあたりユニタリー極限に近い残留抵抗が存在する。ここで D は伝導帯の幅である。

近藤格子系で磁場の存在しない場合は, 各サイトの f 電子数は $1/2$ に近いので, 繰り込まれた f 準位の位置はフェルミ準位の位置にピン止めされている。したがって繰り込まれた f 準位の深さの乱雑さは小さく, 残留抵抗の原因になりえない。

§ 4. 正の磁気抵抗⁴⁾

磁場が存在する場合は, 繰り込まれた f 準位の深さは (4) 式によって磁場に依存する。この時注意しなければならないことは, 各サイトでスピン σ をもつ f 電子の数は各サイトの帯磁率にしたがい $1/2$ からずれる。裸の f 準位の深さ, 混成の大きさ, 伝導電子の準位の深さに乱雑さがあれば, 各サイトの近藤温度も乱雑になっていると思われる。帯磁率は近藤温度に反比例するから f 電子の数の $1/2$ からのずれは近藤温度の乱雑さを反映してサイト毎に乱雑である。(4) 式より繰り込まれた f 準位の深さの乱雑さは

$$\delta E_f = \Delta \cdot \frac{\delta T_K}{T_K} \cdot \frac{g \mu_B H}{k_B T_K}, \quad (5)$$

と計算できる。

繰り込まれた f 準位の深さの乱雑さが mixing energy Δ 程度になると大きな残留抵抗が期

待できることは前節で議論した。また一方で近藤温度は体積に敏感であることが実験的に確かめられている。したがって、各 f サイトの環境の乱雑さにより $\delta T_K / T_K = O(1)$ 程度の近藤温度の乱雑さは現実の系で十分期待できる。結局、近藤格子の重い電子系では $g \mu_B H / k_B T_K = O(1)$ 程度の磁場で十分観測できる、磁場の自乗に比例した大きな正の磁気抵抗が期待できる。

§ 5. フォノンを媒介にした引力⁵⁾

近藤格子系では同一サイトの f 電子間には強いクーロン斥力が働く。同一サイトの f 電子間にそれに打ち勝つほどの引力が働くとは考えにくいので、全体として同一サイトの f 電子間の相互作用は斥力にならざるを得ない。したがって、超伝導が可能になるためには隣接 f 電子間に引力が働くことが考えられる。隣接 f 電子間に引力が働けば、その引力が同一サイトの f 電子間の斥力に負けていても、異方的 s 対称超伝導はきれいな系においては可能である。しかしこの場合の異方的 s 対称超伝導は不純物により容易に破壊される。異方的 s 対称超伝導が不純物により破壊されないためには引力が斥力に打ち勝つ必要がある。現実の系がなにがしかの不純物を含んでいることを考えると、異方的 s 対称超伝導が実現するためには斥力に打ち勝つ程の強い引力の存在が不可欠である。

Razafimandimby らは § 1 で述べたように近藤体積崩壊の機構を提案している。しかし、これは少しおかしい点もある。近藤状態あるいは近藤温度を揺さぶるということは、スピン揺動を揺さぶるにすぎず、超伝導で問題になる電荷揺動とはあまり関係がないからである。事実、Razafimandimby らの計算した項は静的・長波長極限で消えることが示せる。

静的・長波長極限での電子・格子相互作用の計算には、周期的アンダーソン模型では不十分で、電子間に e^2 / r に比例したクーロン力が働く事を陽に含む必要がある。ワードの恒等式と電気的中性の条件を考えることにより、静的・長波長極限の電子・格子相互作用は厳密に計算できる。しかし、その相互作用は小さい。

クーパー対の形成には、運動量の位相空間で使える体積の大小の問題により、長波長のフォノンよりは $|\mathbf{q}| \sim k_f$ (フェルミ波数) 程度の短波長のフォノンが重要である。この程度の波数のフォノンによる電子・格子相互作用には、2つの遮蔽効果が問題になる。1つは、トマス・フェルミ型の長距離クーロン力による遮蔽である。重い電子系は、非常に大きな準粒子の状態密度を持つが、それがそのまま遮蔽に効くわけではないことはフェルミ液体論ですぐ示せる。むしろ、電荷の susceptibility は近藤効果により抑圧されていて、この型の遮蔽効果は小さい。

研究会報告

近藤効果による遮蔽は、この系で重要である。この結果は、Razafimandimby らの近藤効果により電子・格子相互作用が増幅されるという指摘にたいして、むしろ近藤効果は電子・格子相互作用を小さくするという事で、結果としては全く逆である。

ここでは、近藤効果による遮蔽があっても、近藤温度がそれほど低くなく（すなわち、遮蔽効果が小さい）、また f イオンの回りの配位子が複雑で、いろいろなモードのフォノンが利用できる場合には、引力が同一サイトの斥力に打ち勝てる場合もあることを示した。

参考文献

- 1) F. J. Ohkawa and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 4344.
- 2) H. Razafimandimby, P. Fulde and J. Keller, Z. Phys. **B54** (1984) 111.
- 3) F. J. Ohkawa, J. Phys. Soc. Jpn. **53** (1984) 1389.
- 4) F. J. Ohkawa, J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 2527.
- 5) F. J. Ohkawa, submitted to J. Phys. Soc. Jpn.

13. Ce 不純物による磁気抵抗 — 結晶場分裂を考慮した場合

東理大・理工 半澤 克郎, 芳田 奎
京大・基研 山田 耕作

高密度近藤系の Ce 化合物 (CeAl_3 , CeCu_2Si_2 等), および, その合金 (Ce を La などで置換したもの) の電気抵抗・磁気抵抗を議論する目的で, Ce イオンの結晶場分裂を考慮した場合の $s-f$ 交換相互作用による (基底状態における) 磁気抵抗の定式化と計算を行なう。

ハミルトニアンは,

$$H = H_c + H_f + H_{ex} \quad (1)$$

ここで, H_c は伝導電子のエネルギーである。 H_f は, Ce イオンの $4f$ 電子のエネルギーであって, スピン-軌道相互作用, 結晶場, 外部磁場によるゼーマン・エネルギーを考慮して, 全体を対角化した表示をとる。その固有状態を区別する添字を M とする。 $s-f$ 交換相互作用は次の様にとる。