

論文審査の結果の要旨

氏名 渡部 洋

本論文は6章と付録からなる。第1章はイントロダクションであり、重い電子系のフェルミ面についての最近の実験に言及し、論文の目的、すなわち2次元正方格子上の近藤格子模型と周期的アンダーソン模型の基底状態におけるフェルミ面のトポロジーと反強磁性転移との関係を変分モンテカルロ法により研究することが述べられている。

次に第2章は重い電子系における反強磁性転移とフェルミ面が解説されている。重い電子系と理論モデルの紹介を導入として、近藤効果とRKKY相互作用の競合から出現する量子臨界点に注目している。さらに、代表的な物質における反強磁性転移とフェルミ面についての実験結果がまとめられている。

第3章は本論文で用いられる解析手法の説明である。局在電子を含めたスレーター行列式にGutzwiller射影演算子を作用させた試行関数を採用して、モンテカルロ法による計算方法を記述している。境界条件の詳細は付録で説明されている。

第4章と第5章が本論文の主要な部分である。まず第4章においては、近藤格子模型についての結果がまとめられている。試行関数の選び方の詳細から説明を始め、パラメータの1つとして反強磁性の秩序変数を含めている。伝導電子密度 n_c が1の場合に計算を遂行して、近藤結合 J を変化させたときの反強磁性・常磁性転移点を決定し、秩序変数の臨界指数を $\beta=1/2.7$ と求めた。また、伝導電子の運動量分布を計算して絶縁体となっていることを確認した。

伝導電子密度 n_c が1以下の金属相についての結果が本論文の最も重要な部分である。 J と n_c をパラメータとして変分モンテカルロ法で基底状態

を決定し、常磁性・反強磁性転移に加えて、反強磁性相の中でフェルミ面のトポロジーが変化する転移を発見した。 J が大きな領域は常磁性相であり、フェルミ面はホール的であり、局在スピンの自由度まで含めた「大きなフェルミ面」と呼ばれるものになっている。基底状態エネルギーおよび反強磁性の変分パラメータと秩序変数の J 、 n_c 依存性を解析し、 n_c が0.8以上の時には J を小さくするとともに常磁性相からホール的なフェルミ面をもつ反強磁性相に2次転移することを示した。これは大きなフェルミ面を折り返したものの対応しているが、さらに J を小さくしていくと、電子的なフェルミ面に変化する1次転移が存在することを発見した。この電子的なフェルミ面は伝導電子のみから作られる「小さなフェルミ面」として理解できる。また、電子密度 n_c が0.8より小さい場合には、常磁性相から小さなフェルミ面をもつ反強磁性相に直接1次転移することを明らかにした。また伝導電子の運動量分布に対するGutzwiller射影演算子の影響がほとんどないことが確認された。

第5章では、局在軌道上のクーロン斥力を $U=\infty$ とした周期的アンダーソン模型について前章と同様の解析が行なわれた。近藤結合に対応するパラメータは局在軌道と伝導電子の混成 V である。近藤格子模型の場合と同様に、大きなフェルミ面をもつ常磁性相と大きなフェルミ面の反強磁性相、小さなフェルミ面の反強磁性相の3つの相が出現する。相図のトポロジー、転移の次数も近藤格子模型の結果と一致している。転移の位置は局在軌道のエネルギーレベル E_f によって変化し、 E_f が低い所にあると近藤格子の結果と非常に似ているが、 E_f を0にするに従って、小さなフェルミ面をもつ反強磁性相が大きなフェルミ面の反強磁性相に置き換わっていく。電子の運動量分布がいくつかの場合について計算され、近藤格子模型の場合よりも射影演算子の影響はかなり大きい、フェルミ面の位置そのものはほとんど変化しないと結論された。

第6章はまとめと議論であり、他の理論との比較や実験結果の解釈への

応用の展望がされている。重要な結論としては、局所臨界理論で主張されている小さなフェルミ面をもつ常磁性相が、本研究では発見されなかったということである。

本論文は、重い電子系の中心テーマの1つであるフェルミ面の大きさについて、磁気秩序との相関を変分モンテカルロ法で研究した成果である。常磁性・反強磁性転移に加えて、反強磁性相の中でフェルミ面のサイズとトポロジーの異なる2つの異なる相の間の転移が存在することが初めて明らかにされた。また、電子密度が小さい領域では2つの転移が一致することが示された。これらの発見は、重い電子系の本質の理解に重要な寄与をするとともに、量子臨界点近傍のホール効果などフェルミ面の実験結果の解釈に新しい視点をもたらした。

なお本論文第4章は、小形 正男との共同研究であるが、論文提出者が主体となって数値計算を実行するとともにその結果の分析および検証を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

本論文審査委員会は全員一致で本研究が博士(理学)の学位論文として合格であると判定した。