



|              |                                                                                                                                                 |
|--------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Title        | 強相関電子系の熱力学的性質に関する理論的研究                                                                                                                          |
| Author(s)    | 臼杵, 達哉                                                                                                                                          |
| Citation     | 大阪大学, 1991, 博士論文                                                                                                                                |
| Version Type |                                                                                                                                                 |
| URL          | <a href="https://hdl.handle.net/11094/37263">https://hdl.handle.net/11094/37263</a>                                                             |
| rights       |                                                                                                                                                 |
| Note         | 著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。 |

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

|         |                                                                                 |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------|
| 氏名・（本籍） | うす　　き　　たつ　　や<br>臼　　杵　　達　　哉                                                      |
| 学位の種類   | 工　　学　　博　　士                                                                      |
| 学位記番号   | 第　　9 7 3 9　　号                                                                   |
| 学位授与の日付 | 平成 3 年 3 月 26 日                                                                 |
| 学位授与の要件 | 工学研究科 応用物理学専攻<br>学位規則第 5 条第 1 項該当                                               |
| 学位論文題目  | 強相関電子系の熱力学的性質に関する理論的研究                                                          |
| 論文審査委員  | (主査)<br>教授 興地 斐男　　教授 志水 隆一　　教授 樹下 行三<br>教授 南 茂夫　　教授 一岡 芳樹　　教授 豊田 順一<br>教授 後藤 誠一 |

## 論文内容の要旨

本論文は、強相関電子系の熱力学的性質に関する研究結果をまとめたものであり、5章で構成されている。

第1章（序論）では、従来の研究を概観し、本論文の意義と目的について述べている。

第2章では、本論文で用いた電子系の多体問題を厳密に取り扱う手法の一つであるペーテ仮説法についての概説を行っている。そして、基底状態について今までに明らかにされた結果の整理をしている。また、有限温度への拡張に関して、その手法を概説し具体的な表式の説明も行っている。

第3章では、1次元系のハバードモデルを対象として、厳密解を用いて熱力学的物理量を調べている。特に、電子数が half-filling 付近（モット絶縁体付近）の振舞いに注目した計算を行っている。まず、絶対零度での電荷感受率の表式を求め、数値計算を行っている。その結果、電子数が half-filling に近づくにしたがい、多体効果によって電荷感受率は発散的に増大することを示している。このような振舞いは帯磁率などのスピン自由度に関連した物理量にはみられず、電荷の自由度に関連した物理量に独特のものであることを指摘している。また、比熱係数についても電荷感受率と同様な振舞いがみられ、このような結果を踏まえて有限温度における熱力学的物理量の計算を行っている。具体的な物理量としては、帯磁率、電荷感受率及び比熱を対象とし、電荷の自由度とスピンの自由度に関わる励起を区別して、厳密解を用いて数値的に計算している。その結果、電荷の自由度に関わる励起は half-filling 付近で顕著な電子数依存性を示し、多くの低励起状態が存在することを見いだしている。

第4章では、結晶場を考慮して「重い電子系」の代表的物質である、Ce化合物の磁氣的性質を調べている。モデルとしてアンダーソンモデルを用い、厳密解を援用して計算している。特に、六方対称場と

正方対称場の場合について、磁化の結晶場依存性を調べている。その結果、結晶場分裂が大きくなるにつれて多体効果が強く現れ、磁化には結晶場に起因した異方性や特徴的な振舞いが現れることを明らかにしている。さらに、 $\text{CeAl}_3$  や  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  を対象とした実際の化合物に関する計算を行い、4 f 電子に働く結晶場効果を考慮することにより、定量的な説明を帯磁率、比熱係数及び磁化曲線などの物理量について行っている。

第5章（結論）では、本研究で得られた結果を総括している。

## 論文審査の結果の要旨

電子間クーロン相互作用を取り入れた計算をより正確にしなければ物質の示す超伝導現象、磁気現象を理解することはできない。特に、高温超伝導物質の発見により、低次元系での多体論的な電子の振舞いをより正確に調べる必要が生じている。しかしながら、その理論的な取り扱い是一般の系では非常に困難である。

本論文はこのような背景のもとに、厳密解が得られている1次元ハバードモデルと、内部自由度を持つ不純物を記述しているアンダーソンモデルを用いて、多体論的な立場からそれらの系の電子相関効果について議論している。得られた結果を要約すると以下の通りである。

- 1) 構造をもつ1次元電子系のハバードモデルでは、電子数が half-filling に近いとき大きな電荷揺動が生じ、その結果、電荷感受率は異常に増大し、電子比熱係数も異常に大きくなる。これは電子相関と結晶構造とが結び付いて起こったもので、2次元正方格子でも同様なことが起こることが期待され、これらの物理量に局所的電子相関効果を正確に取り入れることの大切さを示している。
- 2) 局所的電子相関効果の結晶場依存性について厳密解を用いて調べた結果、電子相関効果は結晶場により大きな影響を受けることを指摘し、さらに、Ce化合物の帯磁率、比熱等の物理量の定量的な計算を行い実験結果をよく説明している。

以上のように、本論文は結晶構造と結びついた電子相関効果のより正確な計算の必要性を指摘し、さらに、実際の系での定量的な物理量の計算を行い実験結果との一致を示すなど応用物理学、特に物性工学に貢献するところが大きい。よって、本論文は博士論文として価値あるものと認める。