



Title	Theory of Locally Correlated Systems
Author(s)	松浦, 弘泰
Citation	大阪大学, 2010, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/54269">https://hdl.handle.net/11094/54269</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">https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed</a> 大阪大学の博士論文について

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

【75】

氏 名	松 浦 弘 泰
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学 位 記 番 号	第 23896 号
学 位 授 与 年 月 日	平成 22 年 3 月 23 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 基礎工学研究科物質創成専攻
学 位 論 文 名	Theory of Locally Correlated Systems (局所的相関系の理論)
論 文 審 査 委 員	(主査) 教授 三宅 和正 (副査) 教授 関山 明 教授 吉田 博

#### 論 文 内 容 の 要 旨

現在の物質科学の発展に不可欠である近藤効果や磁性発現機構は、局所相関が本質的である。これらの発展や新たな現象の機構解明は重要な問題となっている。本論文では、この局所相関が重要視される 3 つの事柄について研究した。

##### 1. 近藤効果に関連した現象

反強磁性金属中の磁性不純物の基底状態を数値くりこみ群を用いて議論した。結果、スピン分極した近藤-芳田一重項状態が基底状態になることを示した。また、磁場やクーロン相互作用の制御により、スピン分極のない近藤-芳田一重項の基底状態が現れ得ることも示した。

充填スッテルダイト化合物、 $\text{SmOs}_4\text{Sb}_{12}$ において観測された Sm イオン価数の温度変化の原因が、イオンの

非調和的運動と伝導電子の局所相関であることを、二準位近藤模型に基づいて摂動論的くりこみ群の方法により明らかにした。また、二準位近藤模型には、イジング型の新しい固定点があることを示した。

### 2. $\pi-d$ 系強磁性体の磁性発現機構の解明

一次元強磁性体、 $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ と常温強磁性体、 $V(TCNE)_x$  ( $x \sim 2$ ) の磁性発現機構をクラスター模型の数値対角化により議論した。結果、 $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ では、 $V$ のイオン価数により強磁性発現機構が異なることを示した。 $V(TCNE)_x$ では、非結合性分子軌道を占有する電子が強磁性を担うことを示した。また、強束縛近似を用いたバンド構造の考察により、 $V(TCNE)_x$ のフェルミ準位には平坦バンドを起源とした大きな状態密度が存在することを明らかにし、磁性発現機構として金森理論が適当であることを提案した。

### 3. シリコン(Si)中の原子空孔の電子状態

Si結晶の弾性定数は低温においてキュリー的温度依存性を示すが、その原因是孤立した原子空孔の電子状態が縮退を持つことである。その基底状態の縮退に関して、Siの $sp^3$ 軌道から成るダングリングボンドから構成されるクラスター模型を用い議論した。結果、基底状態は軌道とスピンの自由度に起因する多重縮退があり、スピン軌道相互作用を考慮すると、実験で観測される弾性定数の磁場依存性が理解できることを示した。

## 論文審査の結果の要旨

局所相関効果を考慮した物理的な理解は、現在の物質科学の発展に不可欠である。近藤効果や磁性発現は、局所相関の重要性を示唆する例であり、これらの機構解明は重要な問題である。本論文では、この局所相関が重要となる3つの事柄が研究された。

### 1) 近藤効果に関連した問題。

#### A. 反強磁性金属中の近藤効果の数値くりこみ群による研究

反強磁性金属中の磁性不純物の基底状態を数値くりこみ群を用いて議論し、スピン分極した近藤-芳田一重項状態が基底状態になることを示した。また、外部磁場やイオン上の電子間のクーロン相互作用の制御により、スピン分極のない近藤-芳田一重項の基底状態が現れることを示した。

#### B. 二準位近藤模型によるイオン価数の温度依存性の理論

充填スケッタルダイト化合物、 $SmOs_8Sb_{12}$ において $Sm$ イオン価数の温度変化が観測されている。その原因がイオンの非調和的運動と伝導電子の局所相関であることを、二準位近藤模型に基づいて議論した。摂動論的くりこみ群の方法を用いた解析の結果、近藤温度付近で $f$ -電子のイオン価数に顕著な温度変化が現れることを示した。

#### C. 伝導電子のスピン自由度を含む二準位近藤模型の新奇固定点の発見

伝導電子のスピン自由度を含んだ二準位近藤模型の固定点には、従来知られていた2チャンネル近藤模型の固定点以外に、“イジング型”的新奇固定点が存在することを、摂動論的くりこみ群の方法により示した。

### 2) $\pi-d$ 系強磁性体の磁性発現機構の解明

#### A. 一次元強磁性体、 $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ の磁性発現機構の解明

一次元強磁性体 $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ の磁性発現機構を解明するために、クラスター模型の数値対角化を行った。その結果、 $V$ のイオン価数により強磁性発現機構が異なることを示した。

#### B. 常温強磁性体 $V(TCNE)_x$ ( $x \sim 2$ ) の磁性発現機構の理論：隠れた平坦バンドの役割

常温強磁性体  $V(TCNE)_x$  ( $x \sim 2$ ) の磁性発現機構をクラスター模型の数値対角化により議論した。その結果、非結合性分子軌道を占有する電子が強磁性を担うことを示した。また、強束縛近似を用いたバンド構造の考察により、 $V(TCNE)_x$ のフェルミ準位には「平坦バンド」を起源とする非常にシャープで巨大な状態密度が存在することを明らかにし、磁性発現機構として「金森機構」が適当であることを提案した。

### 3) シリコン中の原子空孔の電子状態と弾性定数の温度・磁場依存性の理論

シリコン結晶の弾性定数は低温においてキュリー的温度依存性を示すが、その原因是孤立した原子空孔の電子状態が縮退を持つことである。純粋なシリコンと微量にホウ素を含むシリコンの場合の各々の基底状態の縮退に関して、シリコンの $sp^3$ 軌道から成るダングリングボンドから構成されるクラスター模型を用い議論した。その結果、基底状態は軌道とスピンの自由度に起因する多重縮退があり、スピン軌道相互作用を考慮すると、実験で観測される弾性定数の磁場依存性が理解できることを示した。

これらの結果は「局所相関が重要な役割を演じる系の物理」に対しても新しい知見を加えるものであり、

博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。