



Title	磁性ダイマー吸着系における近藤効果と磁気的相互作用に関する理論的研究
Author(s)	南谷, 英美
Citation	大阪大学, 2010, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/57522">https://hdl.handle.net/11094/57522</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	みなみ たに えみ
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学 位 記 番 号	第 23795 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 工学研究科精密科学・応用物理学専攻
学 位 論 文 名	磁性ダイマー吸着系における近藤効果と磁気的相互作用に関する理論的研究
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 笠井 秀明 (副査) 教 授 小林 慶裕 教 授 菅原 康弘 教 授 赤井 久純(理学研究科)

## 論文内容の要旨

本研究では、金属表面上の磁性ダイマーに注目し、その走査トンネル分光(STS)スペクトルに表れる2不純物近藤効果の影響を、非平衡グリーン関数法ならびに数値くりこみ群を援用した理論的アプローチによって調査した。

第1章では、研究背景を紹介し、本論文の研究目的と構成を述べた。

第2章では、本研究で用いたモデルハミルトニアンにおけるトンネル行列要素の計算方法と、STSスペクトルの非平衡グリーン関数法による計算方法を導いた。

第3章では数値くりこみ群による解析に先立ち、定性的傾向を調査するため磁性原子のd電子に働くクーロン相互作用Uの摂動展開による、STSスペクトル計算結果を述べた。

第4章では磁性ダイマー吸着系におけるSTSスペクトルの変化について数値くりこみ群を援用して計算し調査した。まず、磁性原子間距離が変化すると、Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida(RKKY)相互作用の符号と大きさが変わり、STSスペクトルに現れるピーク形状が変化することが判明した。さらに、ピーク形状の変化の仕方は、磁性原子局在電子状態と金属表面電子状態間の混成 $\Gamma$ の大きさによって変わることを発見した。 $|\Gamma|$ が小さくなると、反強磁性RKKY相互作用が働く場合に、STSスペクトルにディップ形状が現れる。1粒子励起スペクトルとスピニン関関数の計算から、このディップ形状がパリティ分裂と局在スピニン間の反強磁性相間に起因することを明らかにした。また、位相シフトの計算と電子-正孔対称なハミルトニアンに基づく計算の比較から、磁性ダイマー吸着系のSTSスペクトルにおけるピーク幅・ピーク高さの漸次的な変化は、ハミルトニアンに含まれるエネルギーに依存する項による電子-正孔対称性の崩れによって量子臨界点が消失し、近藤領域と反強磁性領域の間がクロスオーバーによってつながれていることに由来することが判明した。

第5章では、磁場下における磁性ダイマー吸着系のSTSスペクトルをComplete Fock Spaceを用いた数値くりこみ群の手法を援用して調査し、RKKY相互作用が強磁性的に働く場合と、反強磁性的に働く場合において、磁場の影響がどのように現れるかを調査した。RKKY相互作用が強磁性的な場合には、有効な近藤温度の低下を反映して、単一磁性原子の場合に比べて著しく小さい磁場によってゼーマン分裂が観測されることが判明した。RKKY相互作用が反強磁性的な場合、 $|\Gamma|$ の大きさによって磁場依存性が変わることが判明した。 $|\Gamma|$ が大きく近藤温度が比較的高い場合には、10T以下の磁場ではほとんど変化がなかった。一方、 $|\Gamma|$ が小さい場合には、磁場の印加に対し

てスペクトル形状は大きく変化した。 $|\Gamma|$ が小さいとき、磁場がない状態ではSTSスペクトルのフェルミレベル近傍にディップが生じているが、外部磁場を印加すると、フェルミレベル近傍にピーク形状が生じる場合がある。それからさらに磁場を大きくすると、ピークは再び分裂した。数値くりこみ群法の計算によって得られたモデルハミルトニアンの固定点並びに位相シフトに関する考察から、磁場の印加によって現れるピーク形状は芳田・近藤1重項の形成を反映していることが判明した。また、単一磁性原子と異なり、磁場印加により近藤効果が強まる原因は、パリティ分裂がゼーマン分裂による局在軌道準位のシフトを打ち消すためであることを示した。

第6章では総括を行い、今後の展望について述べた。

### 論文審査の結果の要旨

金属表面上の磁性原子の局在スピンは、表面の伝導電子と相互作用し、近藤効果と Ruderman- Kittel- Kasuya- Yosida (RKKY) 相互作用の影響を受ける。近藤効果は局在スピンを遮蔽するように働くが、RKKY 相互作用は局在スピン間に磁気的秩序を形成する。これらの競合は、金属表面上のナノ構造の磁性に大きく影響する。本論文では、金属表面上の磁性ダイマーに注目し、近藤効果と RKKY 相互作用の影響が、走査トンネル分光 (scanning tunneling spectroscopy : STS) スペクトルにどのように現れるかに注目している。主に、数値くりこみ群法を援用した理論的アプローチによって、STS スペクトルに現れる変化を調査し、その要因を理解することを目的としている。本論文における主な成果を要約すると以下の通りである。

- 1) 金属表面上の磁性ダイマーにおける STS スペクトルの理論式を、ハイゼンベルグの運動方程式並びに、Keldysh グリーン関数法を援用して導いている。
- 2) 磁性ダイマー吸着系における STS スペクトルの変化について数値くりこみ群法を援用して計算し調査している。まず、磁性原子間距離が変化すると、STS スペクトルのフェルミレベル近傍に現れるピーク形状が変化することが示されている。スピン相関関数の計算から、この変化は RKKY 相互作用の符号と大きさが変わることに由来することが指摘されている。さらに、ピーク形状の変化の仕方は、磁性原子局在電子状態と金属表面電子状態間の混成の大きさ  $\Gamma$  によって変わることが示されている。 $\Gamma$  が小さくなると、反強磁性 RKKY 相互作用が働く場合に、フェルミレベル近傍にピーク形状ではなくディップ形状が現れる。1 粒子励起スペクトルとスピン相関関数の計算から、このディップ形状がパリティ分裂と局在スピン間の反強磁性相関に起因することが指摘されている。また、位相シフトの計算と電子-正孔対称性ハミルトニアンに基づく計算の比較から、磁性ダイマー吸着系の STS スペクトルにおけるピーク幅・ピーク高さの漸次的な変化は、ハミルトニアンに含まれるエネルギーに依存する項による電子-正孔対称性の崩れによって量子臨界点が消失し、近藤領域と反強磁性領域の間がクロスオーバーによってつながれていることに由来することが明らかにされている。
- 3) 磁場下における磁性ダイマー吸着系の STS スペクトルを Complete Fock Space を用いた数値くりこみ群法を援用して調査している。RKKY 相互作用が強磁性的に働く場合と、反強磁性的に働く場合において、磁場の影響がどのように現れるかを調べている。RKKY 相互作用が強磁性的に働く場合には、有効な近藤温度の低下を反映し、単一磁性原子の場合に比べて著しく小さい磁場によってフェルミレベル近傍のピーク形状にゼーマン分裂が現れることが示されている。一方、RKKY 相互作用が反強磁性的に働く場合、 $\Gamma$  の値によって磁場依存性が変わることが示されている。 $\Gamma$  が大きく近藤温度が比較的高い場合には、10T 以下の磁場ではほとんど変化がない。しかし、 $\Gamma$  が小さい場合には、磁場の印加に対してスペクトル形状は大きく変化する。

$\Gamma$  が小さい場合、磁場がない状態では STS スペクトルのフェルミレベル近傍にディップが生じているが、外部磁場を印加すると、フェルミレベル近傍にピーク形状が生じる場合がある。さらに磁場を大きくすると、ピークは再び分裂する。数値くりこみ群法の計算によって得られたモデルハミルトニアンの固定点並びに位相シフトに関する考察から、磁場の印加によって現れるピーク形状は芳田・近藤1重項の形成を反映していることが指摘されている。また、単一磁性原子と異なり、磁場印加により近藤効果が強まる原因は、パリティ分裂がゼーマン分裂による局在軌道準位のシフトを打ち消すためであることが示されている。

以上のように、本論文は実験で得られる金属表面上の磁性ダイマーの STS スペクトルが近藤効果と RKKY 相互作用の影響により、どのように変化するかという点に関して数値くりこみ群法を援用し理論的研究を行っている。得られた知見は表面ナノ構造の磁性に関する基礎的な面のみならず、応用の面でも有益な知見を得ており、応用物理学、特に物性物理学に寄与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。