

|              |  |
|--------------|--|
| Title        | Kondo Screening and Magnetic Ordering - Study of Magnetic Adatoms on a Metal Surface   |
| Author(s)    | Nghiem, Thi Minh Hoa   |
| Citation     | 大阪大学, 2012, 博士論文   |
| Version Type |  |
| URL          | <a href="https://hdl.handle.net/11094/59964">https://hdl.handle.net/11094/59964</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 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed</a> をご参照ください。 |

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

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

Osaka University

【16】

|               |   |
|---------------|---|
| 氏 名           | ニエム ティ ミン ホア<br>Nghiem Thi Minh Hoa   |
| 博士の専攻分野の名称    | 博 士（工学）   |
| 学 位 記 番 号     | 第 2 5 6 3 0 号   |
| 学 位 授 与 年 月 日 | 平成 24 年 9 月 25 日  |
| 学 位 授 与 の 要 件 | 学位規則第 4 条第 1 項該当<br>工学研究科精密科学・応用物理学専攻   |
| 学 位 論 文 名     | Kondo Screening and Magnetic Ordering - Study of Magnetic<br>Adatoms on a Metal Surface<br>(近藤遮蔽と磁気秩序 - 金属表面上の磁性原子に関する研究) |
| 論 文 審 査 委 員   | (主査)<br>教 授 笹井 秀明<br>(副査)<br>教 授 桑原 裕司 准教授 草部 浩一<br>准教授 Wilson Agerico Diño   |

論 文 内 容 の 要 旨

In this work, we introduce our studies of magnetic adatoms on a metal surface to clarify the competition between Kondo screening and magnetic ordering. At single sites of adatoms, the Kondo screening of localized spins by the conduction electrons of the metal surface gives rise to the bound state, which is singlet at the ground state. While the interactions between adatoms, the indirect Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) and the direct exchange interactions, keep the magnetic ordering of the localized spins. The calculated results are carried out by the Quantum Monte Carlo and maximum entropy methods, detailed in the Appendices.

In Chapter 2, the competition between the Kondo screening and the RKKY interaction is studied in the system of two magnetic adatoms on a metal surface. At single sites of adatoms with a negligible RKKY interaction, the spectral densities exhibit the peak structures at the Fermi energy, the Yosida-Kondo resonance, corresponding to the bound state. On the other hand, the difference between the RKKY interactions in a bulk metal and on a metal surface is shown through the spin-spin correlation functions, which positive/negative value corresponds to ferromagnetic/antiferromagnetic (FM/AF) interaction. The oscillation of the RKKY interaction between the FM and AF regimes makes a significant fingerprint on the decrease and increase of the Yosida-Kondo resonance width.

In chapter 3, we consider the system of magnetic trimer on a metal surface to clarify the observation from the experiment. In the system of three magnetic adatoms on a metal surface, the competition between the Kondo screening and the RKKY interaction gives us the dependence of the Yosida-Kondo resonance on the number of nearest magnetic adatom neighbors. More specifically, the width of resonance decreases/increases with an increasing number of neighbors due to the FM/AF-RKKY interaction. In the system of three magnetic

adatoms on a metal surface, where the direct AF exchange interaction is also taken into account, we observe the feature of spectral density at the Fermi level changing drastically and strongly depending on the geometric configuration of three magnetic adatoms on the surface. In the isosceles configuration, the spectral density exhibits a peak structure near the Fermi level, which we attribute to the Yosida-Kondo resonance. In the equilateral configuration, no peak is observed near the Fermi level. This observation suggests the two separate regimes: the Yosida-Kondo dominant regime with the singlet ground state, and the magnetic frustration dominant regime with the degenerate ground state.

In Chapter 4, we clarify the existence of two separate regimes, suggested in Chapter 3. Changing from one regime to another is realized as we gradually switch the geometric configuration from the isosceles triangle to equilateral one. By calculating the spectral density, as well as the magnetic susceptibility for a wide range of temperatures, we prove the existence of the two separate regimes and suggest the critical crossover between these two regimes..

In Chapter 5, we summarize the understanding of competition between the Kondo screening and the magnetic ordering in the systems of a dimer and a trimer on a metal surface. Also, we give an outlook into the fundamental studies related to our study here.

## 論文審査の結果の要旨

本論文は、磁性原子が複数吸着した常磁性金属表面系の電子状態、および、磁気秩序について量子モンテカルロ法を援用して研究したものである。これらの研究は、近藤スクリーニングと磁気秩序の競合を明らかにすることを目的としている。吸着原子の単一サイトでは、芳田・近藤一重項状態が形成され、そこでは吸着磁性原子の局在スピンは、金属表面の伝導電子により遮蔽される。一方、吸着原子の局在スピン間に働く Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) 相互作用、および、直接交換相互作用は、局在スピンの磁気秩序を保持する方向に働く。本論文の結果は、競合による系の振舞いを明らかにし、新たな物理現象を示唆するものである。

より具体的には、本論文では、以下の結論を得ている。

- (1) まず、二不純物近藤系に相当する、金属表面上に二つの磁性吸着原子がある系において、近藤スクリーニングと RKKY 相互作用の競合を調べている。吸着原子間距離が大きく RKKY 相互作用が無視できるとき、吸着原子の単一サイトにおけるスペクトル密度は、Fermi エネルギー近傍にピーク構造 (Yosida-Kondo resonance) を示すことを確認し、吸着原子間距離が狭まるにつれ、RKKY 相互作用の強度が無視できなくなると、強磁性 (FM) 領域と反強磁性 (AF) 領域との間で振動する RKKY 相互作用が、Yosida-Kondo resonance のピーク幅を FM 領域で狭め、AF 領域で広げること、および、磁化率に大きく影響することを明らかにした。
- 次に二原子吸着系に関する上記研究を拡張して、三原子吸着系に関する研究に取り組んでいる。この系は、三不純物近藤系に相当するものであり、これまで、ほとんど研究が行われていなかった。
- (2) 三原子吸着系では、近藤スクリーニングと RKKY 相互作用の競合によって、Yosida-Kondo resonance が、RKKY 相互作用の強度と符号 (FM/AF) に依存するだけでなく、最隣接の磁性吸着原子の数に応じて Yosida-Kondo resonance のピーク幅の上記変化量が増減する。
- (3) 三原子吸着系において RKKY 相互作用に加え、反強磁性の直接交換相互作用を考慮すると、表面上の磁性吸着三原子の成す幾何学的構造が変化することに伴って、Fermi エネルギー近傍のスペクトル密度の特性が大きく変化する。正三角形の頂点に吸着原子が配置される構造では、スペクトル密度の Fermi エネルギー近傍にピーク構造は見られない。それに対し、対称性を崩し、二等辺三角形の頂点に吸着原子が配置される構造では、Fermi エネルギー近傍に、Yosida-Kondo resonance に由来したピーク構造が形成される。これらの結果は、縮退した基底状態を持つ magnetic frustration dominant regime と、一重項状態を伴う Yosida-Kondo dominant regime の2つの領域があることを示唆している。
- (4) これら2つの領域の間の転移は、正三角形から二等辺三角形への幾何学的構造の対称性を崩す連続的な変化によ

り、実現される。広い範囲の温度領域で、スペクトル密度および磁化率を計算した結果から、(3)で述べた、二領域の存在が証明された。さらに、これら2つの領域の間での臨界的なクロスオーバー、という新たな現象が観測された。

以上のように、本論文は複数の磁性原子が吸着した常磁性金属表面系で観測される、二不純物および三不純物近藤系に関する本質的な知見を示すものであり、本論文で得られた理論は、走査型トンネル顕微鏡観察等を用いた実験結果と整合していることから、実験の裏付けを十分に得ているものであると示唆されており、優れた理論的成果であると認識される。よって、本論文は博士論文として価値があるものと認める。