

論文審査の結果の要旨

氏名 檜原 太一

希土類やアクチノイドを含む金属化合物では、「重い電子」と呼ばれる有効質量の大きい金属状態が実現する場合がある。このうち、f 軌道に 1 個の電子を持つ Ce 化合物の重い電子系状態は近藤効果によって理解され、理論模型としては一軌道の周期アンダーソン模型で議論できる。一方、f 軌道に 2 個の電子を持つ U や Pr を含む (f^2 系) 重い電子化合物の場合には、結晶場基底状態が磁性状態以外に、一重項や非クラマース二重項を取り得るなど多様性を有するために未解明の点が多い。 f^2 系の重い電子状態を記述する理論模型としては、多軌道周期アンダーソン模型が有効と考えられるが、その解析は容易ではなく、系統的な研究がこれまで進んでいなかった。本論文は、近年、一般的な多軌道系に適用されつつある回転不変スレーブボソン法を多軌道周期アンダーソン模型に初めて適用し、鞍点近似に基づき幾つかの基底状態について議論したものである。本論文は 5 章から構成されている。

第 1 章は本論文の背景として、重い電子系の理論に関する従来の見解や本研究で対象とする f^2 系重い電子化合物の例として立方晶 UBe_{13} および六方晶 UPt_3 の実験結果について述べられている。

第 2 章では、多軌道周期アンダーソン模型の有効ハミルトニアンの導出について述べられている。本論文では局在状態として、立方晶 Γ_1 一重項および六方晶 Γ_4 一重項の 2 種類の基底状態について解析を行っている。これらはそれぞれ UBe_{13} および UPt_3 の結晶場基底状態として期待されているものである。

第 3 章では、スレーブボソン法についての先行研究およびその問題点と、それを解決する回転不変な形式化について述べられている。ハバード模型や周期アンダーソン模型など強相関電子系を扱う理論では、電子間斥力項の存在が解析を困難にしている。スレーブボソン法は電子を補助的なフェルミオンとボソンを用いて表現することによって、二体の相互作用を形式的に一体型に書き換える手法である。ヒルベルト空間を広げたことにより非物理的状态を含むため適切な拘束条件の元で解く必要があるが、強相関系を解析する有力な手段の 1 つとして期待されている。先行研究では、Kotliar と Ruckenstein によって改良されたスレーブボソン法 (KRSB 法) が一軌道アンダーソン模型やハバード模型について用いられた。しかし KRSB 法は回転不変な形式でないために、多軌道系に適用できないという問題があった。後に Lechermann らによって、回転不変な形式のスレーブボソン法 (RISB 法) が開発され、多軌道のハバード模型へ

適用された。本論文では RISB 法を多軌道周期アンダーソン模型へ初めて適用した点が評価される。第 3 章ではその定式化および鞍点近似について説明している。

第 4 章では、RISB 法による三軌道周期アンダーソン模型の解析結果について述べている。1 例目は f^2 の局所基底状態が立方晶 Γ_1 一重項の場合で、先行研究では不純物アンダーソン模型による解析があり、基底状態はパラメータによって 3 つの領域：結晶場 Γ_1 一重項 (I 相)、近藤一重項 (II 相)、および Γ_4 三重項 (III 相) に分けられると報告された。本論文の解析によると、I 相と II 相については同様な結果であるが、III 相は局在した Γ_4 三重項ではなく、 Γ_8 軌道を電子が半分占有した遍歴状態であることがわかった。また f^2 の電子配置近傍では重い電子状態が現れないことも明らかにした。UBe₁₃ の重い電子状態を説明するには至っていないが、RISB 法で取り入れられていない揺らぎの効果で理解できる可能性を述べている。

2 例目は六方晶 Γ_4 一重項の場合である。先行研究では KRSB 法による解析があり、六方晶の 3 つの軌道 Γ_7 、 Γ_8 、 Γ_9 のうち Γ_9 軌道が質量増大に寄与していないことが指摘された。ただし KRSB 法は多軌道模型で正しくないため、本論文で RISB 法による解析を行った。その結果、 f^2 の電子配置近傍では主に Γ_7 と Γ_8 軌道が重い電子に寄与し、 Γ_9 軌道は軽い状態にあることが確認された。この結果は、第一原理計算に基づく UPt₃ の超伝導の先行研究において Γ_9 軌道の強磁性揺らぎが超伝導を引き起こすという結論を覆す可能性があるが、 $\Gamma_7\Gamma_8$ 軌道による超伝導機構の解明およびそれが UPt₃ の超伝導を説明しうるかどうかは未解決の問題であり、鞍点近似を越えた解析が今後必要であることを述べている。

第 5 章では本論文の結論と今後の研究の展望が述べられている。

以上のように、本論文は重い電子系の理論的解析手法を発展させ、具体的な計算によってその有効性を示したものであり、審査委員一同、学位論文として相応しいと判断する。なお、本論文の第 4 章の一部は三宅和正氏および鶴田篤史氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって解析を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断した。したがって博士 (理学) の学位を授与できると認める。