

周期アンダーソンモデルの磁性相における リフシッツ転移

原子力機構先端研 久保勝規

Lifshitz transitions in magnetic phases of the periodic Anderson model

Advanced Science Research Center, JAEA Katsunori Kubo

金属を特徴付ける重要な要素のひとつにフェルミ面がある。例えば、フェルミ面の形状はその金属の伝導特性に關与する。一般的に、磁気転移などの相転移によって、このフェルミ面の形状は変化しうる。一方、フェルミ面の形状の変化そのものが相転移を特徴付ける場合があることを、リフシッツが指摘した [1]。現在では UGe₂ などの *f* 電子系の磁性相でそのようなリフシッツ転移が起きているのではないかという議論がされている。*f* 電子系でリフシッツ転移の候補が多い理由は、特徴的なエネルギースケールが小さくなっているため、比較的容易に状態を変化させることができるためではないかと考えられる。

このような *f* 電子系の磁性相でのリフシッツ転移は、理論的にも多くの研究がなされている。ただし、それらのほとんどは強磁性状態か反強磁性状態のどちらかに仮定した研究であった。そこで、本研究では変分モンテカルロ法を用いて、強磁性状態と反強磁性状態を同一の枠組みで取り扱い、これらの磁性相内で起こるリフシッツ転移を統一的に理解することを試みた [2]。

本研究では *f* 電子系を記述する典型的なモデルである周期アンダーソンモデルを考える。そのハミルトニアンは次の式で与えられる。

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_f n_{fi\sigma} - V \sum_{k\sigma} (f_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma}) + U \sum_i n_{fi\uparrow} n_{fi\downarrow}.$$

ここで ϵ_k は伝導電子の運動エネルギー、 ϵ_f は *f* 電子のエネルギー準位、 V は伝導電子と *f* 電子の間の混成行列要素、 U は *f* 電子間のクーロン相互作用。 $c_{k\sigma}$ 、 $f_{k\sigma}$ はそれぞれ波数 k でスピン σ を持つ伝導電子と *f* 電子の消滅演算子。 $n_{fi\sigma}$ はサイト i でスピン σ を持つ *f* 電子の数演算子である。本研究では結晶格子は正方格子とし、伝導電子については最近接のサイト間の跳び移り積分のみを考え、 $\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$ とする。ここで格子定数を 1 とした。また、格子サイズは 12×12 で計算を行った。

本研究では次のような変分波動関数を用いる。

$$|\psi\rangle = P|\phi\rangle.$$

ここで、 $P = \prod_i [1 - (1 - g)n_{fi\uparrow}n_{fi\downarrow}]$ であり、 g は変分パラメーターである。 $|\phi\rangle$ は一体の波動関数で、常磁性、反強磁性、強磁性状態に対する平均場的な波動関数を考える。この一体波動関数も変分パラメーターを含んでいる。それぞれの磁性状態に対して、モンテカルロ法によってエネルギーを計算し、エネルギーが最低になる変分パラメーターを決める。

まず、ハーフフィルド (1 サイトあたりの電子数 $n = 2$) の近傍、 $n = 1.917$ での計算結果を示す。この電子数では、エネルギーの比較の結果、反強磁性状態が広いパラメーターの範囲で、基底状態になることがわかった。図 1 に反強磁性モーメントの *f* 準位依存性を示す。*f* 準位が浅い場合には常磁性状態になっていて、*f* 準位を下げていくと反強磁性状態

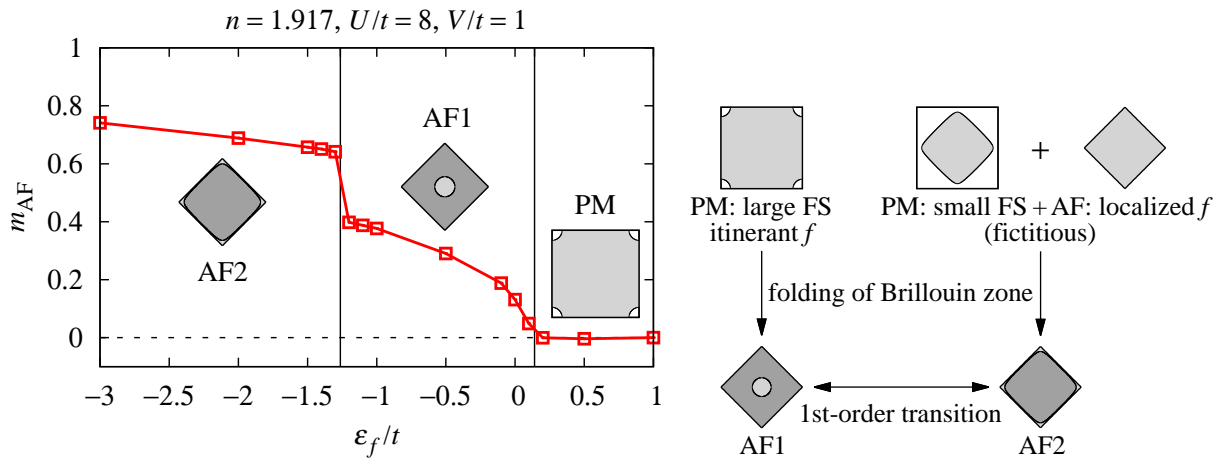


図 1: 反強磁性モーメント m_{AF} の f 準位依存性。反強磁性相内で 1 次転移を起こし、それに伴ってフェルミ面が変化している (リフシッツ転移)。

AF1 が現れる。さらに f 準位を下げると、1 次転移を起こし別の反強磁性相 AF2 が現れる。これら二つの反強磁性相では、対称性は変わらないがフェルミ面の形状が異なっており、この相転移はリフシッツ転移になっていることがわかる。

さらに、このリフシッツ転移点近傍で、どのようなエネルギーの利得があるかを詳細に調べた結果、AF1 から AF2 への転移では伝導電子と f の混成が弱まり、 f 電子がより局在化することがわかった。つまり、この反強磁性相内のリフシッツ転移は f 電子の遍歴-局在転移とみなすこともできる。

フェルミ面の変化を理解するために、図 2 に反強磁性状態でのフェルミ面を示す。まず、AF1 のフェルミ面は、常磁性状態での伝導電子と f 電子からなる大きなフェルミ面を、反強磁性秩序の周期によるブリルアンゾーンの折りたたみに合わせて、単純に折りたためば得られることがわかる。つまり、AF1 のフェルミ面は遍歴的な f 電子の描像から自然に理解できる。一方、AF2 のフェルミ面はより局在的な f 電子の状態からの方が理解しやすい。仮に完全に局在化した f 電子が反強磁性的に秩序を起こし、残りの電子数を持つ伝導電子が小さなフェルミ面を形成しているとして、それらを組み合わせると、AF2 と同じ形のフェルミ面を得ることができる。つまり、AF2 では f 電子はより局在化しているとみなせる。ただし、実際には伝導電子と f 電子は完全に分離しているわけではなく、混じり合った状態で AF2 のフェルミ面は形成されている。

このようなフェルミ面の形状の議論からも、AF1-AF2 のリフシッツ転移は f 電子の遍歴-局在転移として理解できることがわかる。

我々はハーフフィールドから離れた $n = 1.5$ の場合についても同様に調べた。その結果、この電子数では強磁性状態が実現することがわかった。さらにこの強磁性相内でのリフシッツ転移も、反強磁性相内の場合と同様に、 f 電子の遍歴-局在転移として理解できることがわかった。

講演では、有効質量や相転移点でのエネルギーの利得など、より詳細な計算結果も紹介する。

[1] I. M. Lifshitz, Sov. Phys. JETP **11**, 1130 (1960).

[2] K. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 094702 (2015).