

ふりがな	みつもと けいすけ
氏名	三本 啓輔
学位	博士(理学)
学位記番号	新大院博(理)第281号
学位授与の日付	平成20年3月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
博士論文名	動的平均場理論による周期的アンダーソン・ホルスタイン模型の研究 —カゴ状物質におけるラットリングと重い電子状態—

論文審査委員	主査	教授	大野	義章
	副査	教授	小林	迪助
	副査	教授	家富	洋
	副査	教授	後藤	輝孝
	副査	教授	合田	正毅
	副査	教授	山田	裕
	副査	准教授	根本	祐一

博士論文の要旨

最近、充填スクッテルダイト化合物やクラスレート化合物、 β パイロクロア酸化物などのカゴ状物質において、カゴに内包されたゲスト原子が示す非調和性の強い局所振動(ラットリング)が誘起する異常物性が注目を集めている。充填スクッテルダイト化合物 $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$ やクラスレート化合物 $\text{Ce}_3\text{Pd}_{20}\text{Ge}_6$ などの異常な弾性分散とソフト化、充填スクッテルダイト化合物 $\text{SmOs}_4\text{Sb}_{12}$ の磁場に対して異常に強い重い電子状態、 β パイロクロア酸化物 KOs_2O_6 の強結合超伝導などがその例である。ゲスト原子の局所フォノン(カゴの音響フォノン)を強く散乱し、弾性異常や熱伝導率の抑制を導く。一方、局所フォノンと伝導電子の相互作用は、強結合超伝導や磁場に依存しない重い電子の起源となる。さらに、希土類元素を含む充填スクッテルダイト化合物などでは、f電子間の強いクーロン相互作用の効果も重要な役割を果たす。これらに加えて、局所振動の非調和性は局所フォノン間の相互作用(基準座標に関する2n次の非調和項は局所フォノン間のn体相互作用)の効果として記述される。従って、カゴ状物質は、電子-電子相互作用、電子-フォノン相互作用、フォノン-フォノン相互作用の3種の相互作用効果を同時に含む複雑な量子多体系であり、このような複雑な量子多体効果がカゴ状物質の様々な異常物性の起源となると考えられる。

本論文は、電子-電子相互作用、電子-フォノン相互作用、フォノン-フォノン相互作用の3種の相互作用による複雑な量子多体効果を同時に且つコンシステントに取り扱うことの出来る理論的手法—動的平均場理論—を用いて、カゴ状物質の基本模型である周期的アンダーソン・ホルスタイン模型における電子-フォノン複合系の量子状態を明らかにした。また、得られた量子状態に基づいてラットリングが誘起する弾性異常や重い電子状態などの異常物性について論じた。まず第1章の序論では、ラットリングを示す充填スクッテルダイト化合物 $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$ や β パイロクロア酸化物 KOs_2O_6 の異常物性について説明され、これまでの電子-フォノン強結合系に対する理論とその問題点、さらに本研究の目的が述べられた。次に第2章では、本論文で用いられる動的平均場理論について、特に本研究で重要となる電子-フォノン結合系に対するこの手法の拡張に関して詳細に説明された。第3章では、カゴに内包されたゲスト原子の局所振動とカゴ上の伝導電子との電子-フォノン相互作用が導出され、局所フォノンの非調和性も考慮された

カゴ状物質のモデルハミルトニアンが導出された。このモデルハミルトニアンを、数値的厳密対角化法および動的平均場理論を用いて解いた結果、電子-フォノン相互作用の強結合効果によってゲスト原子が感じる有効ポテンシャルがセンターとオフセンターの両方に極小値をもつ on+off center 型となることを明らかにした。さらに、この on+off center 型ポテンシャルに基づいて四極子感受率や確率密度分布の温度依存性を求め、充填スクッテルダイト化合物 $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$ の超音波実験で観測されていた弾性定数の周波数依存性 (off center 型を示唆する結果) と中性子回折実験で観測されていたゲスト原子の分布関数 (on center 型を示唆する結果) を共に矛盾無く説明する結果が得られた。第4章では、ゲスト原子が希土類元素の場合に重要となる f 電子の四極子揺らぎと動的ヤーンテラーフォノンが結合した効果を含む拡張周期的アンダーソン模型を動的平均場理論により調べられた。f 電子間のクーロン相互作用と f 電子-フォノン相互作用の効果が協力することによって、ヤーンテラーフォノンの異常なソフト化を伴った重い電子状態が実現することを明らかにした。これは、充填スクッテルダイト化合物 $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$ の超音波実験で観測されている Pr^{3+} の結晶場状態のみでは説明できない超伝導転移温度まで続く異常な弾性ソフト化の起源を考える上で重要な結果であると考えられる。最後に、第5章では本論文のまとめと、カゴ状物質の実験結果や過去の理論研究との比較などに関して議論が行われている。

審査結果の要旨

本論文は、カゴ状物質におけるラットリングと重い電子状態に対する電子-フォノン相互作用の役割を明らかにすると共に、電子間相互作用、電子-フォノン相互作用、フォノン-フォノン相互作用 (フォノンの非調和性) の3つの相互作用を同時に且つコンシステントに取り扱うことのできる計算手法の開発を行い、強相関・強結合領域における電子-フォノン結合系の量子状態の定量的な計算を初めて行った意義があり、電子-フォノン結合系の基礎理論の構築に対しても大きな寄与を果たしたと考えられる。

以上によって、本論文が博士論文 (理学) として十分値するものと判断した。