

■軌道縮退の大きな系の 磁性と超伝導



多体電子系理論研究グループ

■上田和夫■

物質科学の世界では驚きに満ちた新現象が尽きることなく発見され続けている。今年度発足した多体電子系理論研究グループの主要テーマである超伝導と磁性を例として考えてみよう。超伝導現象は、量子力学が誕生する以前の1911年にカマリング・オネスによって発見されたが、その解明には半世紀近くの年月が必要とされた。1957年にBCS理論が超伝導の基礎理論として提案され、このBCS理論に基づき超伝導の理論体系が急速に整備された。その結果、1970年代に入ると超伝導現象は最も良く理解された多体効果であると考えられるようになっていた。

ところで、金属の電気抵抗は温度を下げるにつれ減少し、超伝導を示さない場合は、やがて不純物や格子欠陥などによって定まる残留抵抗値に落ち着くのが一般的であるが、ある種の金属では、数度くらいの低温で抵抗が極小を示し、再び上昇に転じることがある。この抵抗極小の現象は1930年代から知られていたが、これが金属中の磁性不純物によるものであることは1964年に近藤氏によって明らかにされ、近藤効果と呼ばれるようになった。60年代から70年代にかけて、多くの理論家の努力によって近藤効果はその本質が明らかになり、この方面の研究の焦点は、磁性イオンが一個の場合の近藤効果から磁性イオンが周期的に並んだ場合へと移っていった。後者の場合の典型的な現象は、希土類金属化合物やアクチニド化合物などのf電子系で見られる重い電子系の振舞いである。

BCS理論では超伝導と磁性は基本的に相反する現象と考えられるので、70年代終わりから80年代の前半にかけて、いくつかのf電子系化合物で超伝導が発見

されたのは大変な驚きであった。それ以来、磁性と超伝導の関連は、強く相互作用している電子系、すなわち強相関電子系の基本的テーマとなっている。1986年の銅酸化物超伝導の発見とその後の高温超伝導の研究の進展は、f電子系化合物ばかりでなく遷移金属化合物においても、磁性と超伝導の相関について伝統的なBCS理論の枠組を越えて考えることが必要不可欠であることをはっきり示すことになった。

良く知られているように、銅酸化物高温超伝導は、反強磁性絶縁体である母物質にキャリアを注入することによって実現される。このような相図自身、磁性と超伝導の密接不可分な関係を示唆していると考えられるが、f電子系化合物では両者の関連はもっと直接的に実験的にコントロールすることが出来る。CePd₂Si₂やCeIn₃は常圧では反強磁性を示すが、圧力を印加すると反強磁性相への転移温度が低下する共に、ある圧力以上で超伝導を示すようになる。またUGe₂では、高圧下で強磁性金属から超伝導へと転移する。最近発見されたCeCoIn₅、CeRhIn₅、CeIrIn₅などの物質群も、反強磁性と超伝導の強い相関を示唆している。

原研の先端基礎研究センターで物性理論の研究プロジェクトを発足させるに当たり、上に述べたような物性理論研究の大きな潮流の中で意味のある研究成果を目指したいと考えた。同時に、原研の先端基礎研究センターで行われる理論研究という特徴を生かす必要がある。先端基礎研究センターの発足以来、実験研究グループの研究体制の整備が意欲的になされてきている。とりわけ、原研という立場を生かして、中性子散乱を主とする磁気励起の研究、ウランを中心とするア

クチニド化合物、さらに希土類化合物の結晶育成などでは、我が国はもちろん世界的に見ても高度でユニークな実験グループが存在している。最近、磁気励起を局的に調べる NMR のグループも正式に発足した。従って、f 電子系に関する磁性と超伝導を研究テーマの中心に据えるということは、ごく自然な選択であった。

我々の研究グループは、5 年間の研究プロジェクトを実行する集団として設定されている。その期間に集中的に検討すべき課題として、軌道縮退の効果を取り上げることとした。前々節で取り上げた圧力下で磁性から超伝導への量子相転移を示す f 電子系の例でも、 UGe_2 とその他の物質ではその特徴が大きく異なっている。こうした f 電子系の多様性は何に由来するのかと考えると、f 電子が本来持っている軌道縮退の効果が重要であるに違いない。一個のイオンについていえば、軌道縮退の効果は多くの場合まずスピン・軌道相互作用を考え、さらに結晶場の効果として取り入れることが出来ることは良く知られている。問題は、遍歴性の強い金属の場合はどうか、ということになる。最近、純良単結晶が作成され、ド・ハースーファン・アルフェン効果の実験とバンド計算の結果を比較することによって、フェルミ面の形が明らかになる f 電子系の物質が増えている。いずれの f 電子系も多数のフェルミ面を持っていて、それが特異な現象の背景をなしていると想像される。

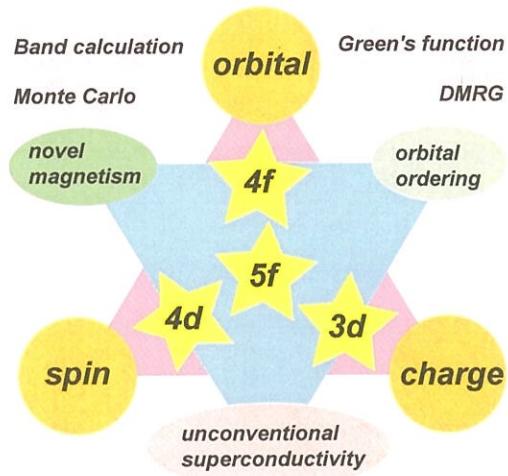
一般に強相関電子系では、その多体問題を取り扱う必然性からモデルをなるべく単純化する必要があり、軌道縮退については多くの場合無視して理論研究がなされてきた。こうした事情は遷移金属化合物についても同様である。幸い、銅酸化物高温超伝導体では、单一バンドへの単純化は良い近似になっているが、巨大磁気抵抗を示すマンガン酸化物では軌道縮退が本質的に重要であり、電荷・軌道秩序と磁性との相関が重要な概念となって盛んに議論されている。遷移金属化合物、f 電子系を問わず、軌道縮退の効果が研究の焦点として多くの研究者によって意識されているというのが、最近の潮流ということが出来よう。

理論研究を展開するに当たっては、広い視野を持つことが新しい発展を生むことにつながる場合が多い。ウランなどアクチニドの 5f 電子の空間的広がりは、遷移金属の 3d、4d 電子と希土類金属の 4f 電子との中間

にあることは良く知られおり、5f 電子を攻めるために、遷移金属と希土類金属を含めて広く問題を検討することは、単なる教訓を越えた実質的戦略としての意義を持っている。この研究プロジェクトではそれらを広く見渡し、軌道縮退の大きな系における磁性と超伝導について、新しい理論的概念を導くような研究を進めたいと思っている。

その際の研究方法としては、バンド計算などによる電子構造の知識に基づき、本質的な自由度を反映した多体電子モデルを構築するところからはじめる。良く知られたモデルの理論的研究、必要があれば我々も当然そうしたモデルを研究する場合もあるが、それのみに終始するような態度は先端基礎研究センターのプロジェクトには馴染まないと考えている。こうして構成した多体電子モデルに対しては、モデルの性格に応じて種々の解析的手法や、厳密対角化、密度行列繰り返群、あるいは量子モンテカルロシミュレーションなどの計算物理的手法を駆使してそのモデルの性質を明らかにしていきたいと思っている。図は以上のような概念をまとめたものである。

重要な理論的概念は、その現象を示す典型物質の徹底的研究を通して形成された例が多い。我々の研究プロジェクトは、軌道縮退の大きな系における磁性と超伝導に対し、実験家と協力して典型物質を発掘し、その解析を通して理論的新概念へと導くことを目標とし



多体電子系理論研究グループの
プロジェクトの概念図

ている。こうした目標および手法から明らかなように、先端基礎研究センター内外の実験・理論グループとの密接な協力が当研究プロジェクトの遂行には必要不可欠である。現在、先端基礎研究センターでは国際シンポジウムの開催などの国際化を一つの旗印に掲げているが、我々の研究プロジェクトの推進は必然的に国際共同研究の性格を帯びると考えられる。センターの各実験グループとの協力はもちろん、センターの国際化という意味でも、このグループが貢献できることを念願している。

我々の研究グループは比較的小さなグループである。特に出発したばかりの現時点では、フルタイムで研究に従事している研究者は三人という小さな所帯である。規模の割に目標が高すぎるのではないかと心配する声が聞こえてきそうである。しかし、理論研究においては小さなグループであることが直ちに決定的ハンディであるとは限らない。山椒は小粒でもピリリと辛いという。幸い、我々のグループには才能と熱意のある若手研究者が集まってくれた。先端基礎研究センターの山椒を目指したいと思う。