

# 強相関電子系における現実的なバンド構造を反映した有効モデルの構築とその解析

Construction of effective model with Realistic Electronic Structure for Strongly Correlated Electron Systems and its analysis

プロジェクト代表者：今井 剛樹 (理工学研究科・物質科学部門・助教)  
Yoshiki Imai (Department of Physics, Research Associate)

高温超伝導や近藤効果の舞台である遷移金属酸化物および希土類化合物などに代表される強相関電子系では、特に低エネルギー領域での多体効果が物性に大きな影響を与えていることが認識されてきている。そのためハバード模型等の簡単な格子フェルミオン模型を用いた解析により多体効果の影響に対する定性的な理解が進んだ一方で、解析に用いられた模型が現実的な物質と比較して極めて簡略化されているため定量的な物性評価が困難であった。

このような背景のもと、本研究では第一原理計算に基づく手法および多体電子論的手法のそれぞれの長所を取り入れた手法を用いることにより、強相関電子系の定量的な解析を電子レベルのミクロスコピックな観点から試みた。得られた結果は実験結果を再現するものであり、現実物質を記述する有効モデルの構築に一定の成果を収めたと考えている。以下その具体的な成果について述べる。

## 1. 充填スクッテルダイト化合物 $\text{CeOs}_4\text{Sb}_{12}$ の異常温度 - 磁場相図の解析

論文題名：Anomalous magnetic phase diagram in low-carrier two-band systems and possible application to  $\text{CeOs}_4\text{Sb}_{12}$

掲載紙：Physical Review B **95** (2007) 176405

著者：Y. Imai and T. Saso

論文題名: Anomalous phase-diagram of filled skutterudite  $\text{CeOs}_4\text{Sb}_{12}$  under external magnetic field

掲載紙：Journal of Magnetism and Magnetic Materials **310** (2007) 243

著者：Y. Imai, K. Sakurazawa, and T. Saso

希土類化合物の一群である充填スクッテルダイト化合物  $\text{CeOs}_4\text{Sb}_{12}$  は極低温でスピ密度波 (SDW) 相が出現し、その金属 - SDW 相境界が磁場印加とともに高温側にシフトしていくことが報告されており、その起源について関心が寄せられている。

本研究ではスクッテルダイト化合物  $\text{CeOs}_4\text{Sb}_{12}$  について第一原理計算を参照して有効格子フェルミオン模型を構築し、低エネルギー領域における多体効果に対して乱雑位相近似を用いて解析することにより、その異常な相図の起源の解明を試みた。またこの異常な絶縁体 - 金属転移の出現する一般的な条件について考察を行った。その結果フェルミ面のネスティングが良く、かつその近傍の状態密度の磁場による変化が極めて大きいとき、電子相関効果が磁場印加に伴い高温側にシフトするような相境界をもつ磁気秩序を出現させることを明らかにした。(左図) またその起源がフェルミレベル付近の状態密度の構造と強く関連していることを示した。

## 2. 遷移金属化合物に対する物性評価手法の構築

論文題名: Ground State Properties and Optical Conductivity of the Transition Metal Oxide  $\text{Sr}_2\text{VO}_4$

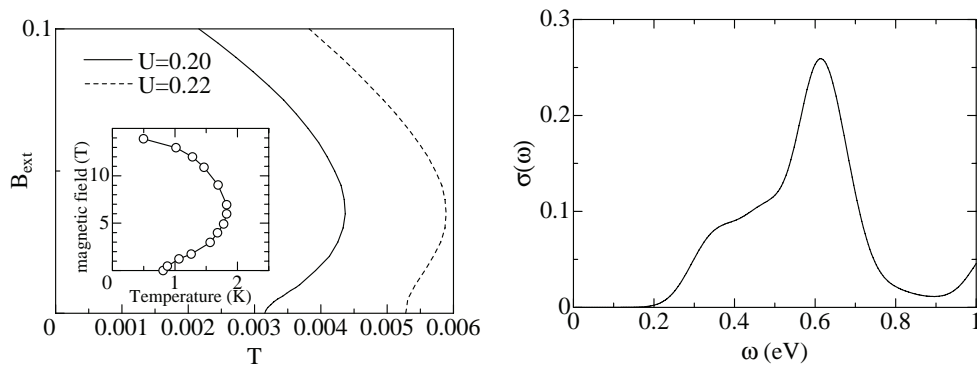
掲載紙: Journal of the Physical Society of Japan **75** (2006) 094713

著者: Y. Imai and M. Imada

遷移金属化合物  $\text{Sr}_2\text{VO}_4$  は実験結果では非常に小さなエネルギーギャップをもつ反強磁性絶縁体であることが報告されている一方、局所密度近似 (LDA) では常磁性金属、またハートリーフォック近似 (HFA) では強磁性絶縁体を予測し、実験と理論の不一致がこれまで見られていた。

本研究では密度汎関数法および経路積分くりこみ群法を用いて遷移金属化合物を念頭においた強相関電子系の理論的解析手法の開発を試み、上記の  $\text{Sr}_2\text{VO}_4$  の物性評価を行うことにより本手法の有効性の確認を行った。まず、第一原理的な手法である LDA を用いて詳細なバンド構造を決定し、LDA+U 法や GW 近似を用いてクーロン相互作用の見積り、さらにその高エネルギー領域からのバンド分散への影響を考慮することにより第一原理的に有効格子フェルミオンモデルを構築した。さらに多体効果の極めて重要な低エネルギー領域を、多体効果の揺らぎをより正確に取り込める経路積分くりこみ群法 (PIRG) で評価した。その結果、HFA で欠落していた多体効果の揺らぎによって  $\text{Sr}_2\text{VO}_4$  は反強磁性絶縁体状態が基底状態として実現することを明らかにし、そこでは複雑なスピン - 軌道秩序構造が出現することを予測した。さらに金属 - 絶縁体転移の近傍にあることも示した。また光学伝導率も実験結果で報告されていたショルダー構造を非常に良く再現している。(右図)

従来手法とは異なり、今回得られた結果は実験結果と矛盾しないものであり、本研究で開発した密度汎関数法と経路積分くりこみ群法をハイブリッドした解析手法の有効性を強く表していると考えている。



左図: 金属 - SDW 相図。挿入図は実験結果。右図:  $\text{Sr}_2\text{VO}_4$  の光学伝導率。