

電子ガスに埋め込まれた単一陽子系における近藤共鳴状態の出現

Emergence of a Kondo-Resonance State in the Proton-Embedded electron gas

吉澤香奈子¹、前園涼²、高田康民¹

K. Yoshizawa¹, R. Maezono², and Y. Takada²

東大物性研¹、北陸先端大・情報科学²

Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo, Kashiwa 277-8581

電子ガス中の1原子系は原子核の電荷 Z と電子密度を表す r_s の2つのパラメータで記述される[1,2]。 $Z \ll 1$ では一様密度の電子ガス系から出発した線形応答理論で厳密解が得られる。そして、遍歴電子による誘電遮蔽が起こって原子核の周りに電子は局在しないし、スピン偏極もない。反対に、 $Z \gg 1$ では電子が原子核に束縛されて局在化する。そして、 r_s も大きくなると、当該原子（不飽和殻の原子ではその負イオン）が希薄電子ガス中にほぼ独立して存在する描像になる。しかし、中間領域の Z や r_s では、近藤効果で問題になるスピン偏極や近藤共鳴状態の可能性も含めて、その詳細は不明である。

今回、我々はこの中間領域を詳しく定量的に調べるために、 Z は1の陽子に固定して、 r_s だけを広範囲にわたって変化させ、local density approximation (LDA) と diffusion Monte Carlo (DMC) の計算を行った。この場合、 r_s が小さい高密度領域では水素陽イオン H^+ の誘電遮蔽状態、それが大きい低密度電子ガス中では陽子はその周りにシングレットの電子対が局在した水素負イオン H^- になることは分かっているので、この転移は直接的なものか、あるいは、中間に何らかの別の状態を経るものかが問題になる。また、この転移が起こる r_s の値は何か、そして、その転移は鋭いものか、クロスオーバー的なものか明らかにしたい。

この陽子周辺の電子の束縛状況を詳しく調べるために、無限系で伝導電子を陽子の周りで部分波展開し、その s 波成分の位相のずれ $\delta(k)$ を波数 k の関数として求めた。その LDA での結果では、 $r_s=1.75$ で $\delta(0)$ が正（引力的）から負（斥力的）に突然に変化すること、そして、同時に $\delta(0) - \delta(\infty) = \pi$ を見いだしたが、これはレビンソンの定理から束縛状態が1つできたことを意味する。この束縛状態ができると、遍歴電子の散乱状態はこれに直交するための斥力を感じて $\delta(k)$ が負になるのである。さらに r_s を大きくしていくと、斥力が徐々に弱められ連続的に引力に変わり、ついに $r_s=13.8$ でもう一度引力から斥力に急に変わると同時に $\delta(0) - \delta(\infty) = 2\pi$ となる。これは2つ目の束縛状態の出現を意味する。すなわち、 H^- の形成である。この鋭い2つの転移点の存在は DMC でも確かめられたが、転移する r_s の値は $1.75 \rightarrow 2.4$ 、 $13.8 \rightarrow 11.5$ と変化する。この DMC では $2.4 < r_s < 11.5$ (LDA では $1.75 < r_s < 13.8$) で出現する中間状態では電子は1個しか束縛されないが、スピン分極は空間のどの点でも見られない[3]。これは、上向き（下向き）スピンの電子が束縛された場合、下向き（上向き）スピンの伝導電子で近藤遮蔽されたことを意味するので、この中間状態は「近藤共鳴状態」と同定されることがわかった。なお、この計算は基底状態 ($T=0$) で行ったが、この中間状態にある系を近藤温度を超える有限温度で観測すると、いろいろな物性に近藤効果特有の振る舞いが見られることが予想される。

[1] C. O. Almbladh, U. von Barth, Z. D. Popovic, and M. J. Stott, Phys. Rev. B **14**, 2250 (1976).

[2] E. Zaremba, L. M. Sander, H. B. Shore, and J. H. Rose, J. Phys. F: Met. Phys. **7**, 1763 (1977).

[3] V. U. Nazarov, C. S. Kim, and Y. Takada, Phys. Rev. B **72**, 233205 (2005).