

東北大学大学院理学研究科物理学専攻・数学専攻・天文学専攻

21世紀 COE 拠点形成プログラム

「物質階層融合科学の構築」

平成15年度リサーチ・アシスタント (RA) 研究報告書

| | |
|---|--------------------|
| 氏名 | 櫻井 玄弥 |
| 学籍番号 | |
| 専攻 | 東北大学大学院理学研究科 物理学専攻 |
| 学年 | 博士課程後期3年の課程 2年 |
| 指導教官 | 倉本義夫 |
| 研究題目 | 希土類ホウ化物における磁気構造の理論 |
| I. 研究発表 (学術雑誌に15年度中に発表または掲載決定したもの、および15年度中の学会等での本人の発表) | |
| 1. Multipolar Interactions in the Anderson Lattice with Orbital Degeneracy Gen'ya SAKURAI and Yoshio KURAMOTO: J. Phys. Soc. Jpn. 73 (2004) 225-238. | |
| 2. 軌道縮退アンダーソン格子モデルにおける多極子相互作用と波数依存性 櫻井玄弥、倉本義夫 第59回日本物理学会年次大会 2004年3月27日 27pXA-7 [但し発表予定] | |

II. 研究活動結果の概要

CeB₆の多極子秩序を微視的に理解する為、我々は既に軌道縮退アンダーソン格子モデルから f^2 Hund 則基底状態と f^0 の中間状態を考慮して、有効ハミルトニアンを微視的に導出し、多極子相互作用を計算した [研究発表1]。更に多極子相互作用の長距離性を考慮して波数依存性を導出し、CeB₆ の秩序構造との関係を研究した。

Ce³⁺ の Γ_8 結晶場基底状態は四重に縮退しており、各状態間の遷移は 10 個の時間反転奇の演算子と 5 個の時間反転偶の演算子で記述できる。サイト間の多極子相互作用には異なる既約表現同士の積も含まれる。そこで同じ時間反転対称性を持つ演算子の積を考え、 $10 \times 10, 5 \times 5$ 行列を対角化する。なお [研究発表1] では簡単のために同じ既約表現の積を議論した。

モデルとして、バンド波動関数を平面波と置き、単位胞に伝導電子が 1 個ある事に対応して大きな 1 つの Fermi 球を考える。 f 電子は伝導電子とスカラー V で混成し、中間状態としては各サイトで f^0 と f^2 Hund 則基底状態を考える。すると (a) f^0-f^0 , (b) f^0-f^2 , (c) f^2-f^2 という中間状態の組が考えられる。例として (a) の場合の多極子相互作用の波数依存性を図に示す。横軸は波数、縦軸は無次元化した多極子相互作用を Fourier 変換した量であり、最小値を持つ波数が秩序しやすい波数に対応する。

時間反転奇の演算子に関しては、 Γ 点近傍に極小があり、固有ベクトルには Γ_{4u1} 対称性の成分が多く含まれている。これは不整合な強磁性秩序を示すと考えられる。また対応した波数における特異的挙動は Kohn 異常によるものと理解できる。更にこれは、最近接サイト間に強磁性的相互作用がある事とも対応している。一方時間反転偶の演算子に関しては、R 点に極小があり G 型反強四極子秩序を起こしやすいと考えられる。しかし、固有ベクトルの分析から Γ_5 型ではなく Γ_3 型四極子が秩序しやすい事が分かった。これは、最近接サイト間の相互作用とは異なっており、RKKY 相互作用の長距離性を反映した結果である。

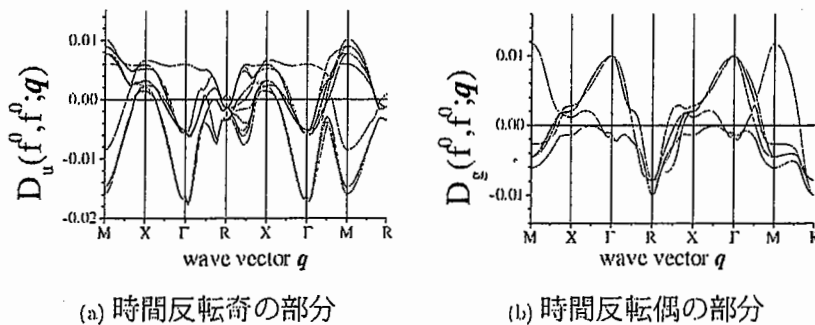


図 1: 多極子相互作用の波数依存性 (32³ サイトでの計算)