

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	河野 洋志
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 1年
指導教官	倉本 義夫
研究題目	f電子系における相関効果と磁気モーメント分布の理論研究
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)	
口頭発表	
河野 洋志 , 倉本 義夫	
「CeB <sub>6</sub> の X 線散乱と秩序変数の擬連続対称性」	
2004年物理学会春季, 九州大学 (福岡市), 2004年3月	
投稿論文	
1. Theory of X-Ray scattering from CeB <sub>6</sub> - Effects of Quasi-Continuous Symmetry of the Order Parameter- Hiroshi N. KONO, Katsunori KUBO and Yoshio KURAMOTO J. Phys. Soc. Jpn. 投稿準備中	

## II. 研究活動結果の概要

CeB<sub>6</sub>の軌道秩序の機構解明を目的に研究を行った。特に放射光 X 線によって新たに得られた観測結果と多極子モーメントとの関係に着目して研究を行った。

6月にSpring-8にて理研の勝又グループとの研究打ち合わせを行った。実験サイドから、軌道秩序の生じる温度・磁場領域でこれまで予想されていなかった散乱強度の変化が報告され[1]、この観測結果と軌道秩序の関係について議論を行った。この変化は軌道秩序が生じている温度・磁場領域で観測されていることから、この振る舞いを理論的に解明することは軌道秩序の機構解明を行う上で重要であると考えられる。

軌道秩序下のX線散乱強度の振る舞いを考えるために、まずCeB<sub>6</sub>の相図を再現する有効多極子モデルを導入し、平均場理論を用いて解いた。この際III相で起こる磁気構造を擬双極子相互作用[2]を取り入れることで再現した。この結果、CeB<sub>6</sub>の秩序変数を考える上で擬連続対称性が重要であることが分かった。擬連続対称性と秩序変数は次のような関係を持つ。

- 1) II相無磁場の状態に対して磁場を印加すると擬連続対称性は破れ、一つの秩序変数が選ばれる。そのため秩序変数は磁場によって回転するように見える。
- 2) II相無磁場から温度を下げていくとIII相の磁気秩序に伴って擬連続対称性は消失する。その結果秩序変数には、結晶の対称性による3つの縮退だけ残る。

以上の平均場理論の解析にもとづいて X 線散乱強度の計算を行った。この結果、擬連続対称性を考慮することで、観測結果をほぼ説明できることを明らかにできた。この結果に関して現在論文を投稿準備中である。また、3月に九州大学で行われる物理学会でも発表する予定である。

また、微視的な立場から電子相関を理解するための研究を進めた。バンド計算の結果を元に相関効果の計算を行うことを目指し、10月には東京都立大にて金田教授の指導のもとLMTO法によるバンド計算の技術習得を行った。また11月には、東京都立大で行われたスクッテルダイトの研究会に参加し、ここでの議論を元にLaFe<sub>4</sub>P<sub>12</sub>に対するバンド計算を行った。この結果定性的なバンド構造を再現することができた。しかし、Fermi面近傍のバンドは平面波的な成分を多く持つため、原子球近似の範囲の計算は伝導バンドの一部を再現できなかった。より詳細なフェルミ面の情報を得るためにはFull-Potential LMTOを用いる必要があると考えられる。12月には、京都で行われたスクッテルダイトの理論勉強会に参加し、充填スクッテルダイトに対する理論的手法について議論を行った。

[1] Y. Tanaka *et al.*: Proc. Int. Conf. on Polarized Neutrons and Synchrotron X-Rays for Magnetism (to be published in Physica B).

[2] H. Kusunose and Y. Kuramoto: J. Phys. Soc. Jpn. 70 (2002) 1751.