

(別紙様式1)

平成15年度東北大学21世紀COE特別研究奨励費 研究活動結果報告書

21世紀COE拠点リーダー

鈴木 厚人 殿

(ふりがな) 氏 名	こうの ひろし	所 属	資格 (いずれかを囲む)
	河野 洋志	物理学 専攻	COE フェロー・博士課程
研究課題名	f 電子系における第一原理計算を用いた相関効果の理論研究		
研究指導者	所 属 部 局	職 名	氏 名
	大学院理学研究科	教授	倉本 義夫

## 研究活動結果の概要

研究計画調書に記載した研究目的及び実施計画に対し、その結果・実績について具体的に記載すること。

CeB<sub>6</sub> の軌道秩序の機構解明を目的に研究を行った。研究計画調書で示した微視的な立場に立った研究と、最近新しく報告された実験事実を元にした巨視的な立場から軌道秩序の機構解明に取り組んだ。

最近、これまで予想されていなかった散乱強度の変化が軌道秩序の生じる温度・磁場領域で報告された[1]。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。そこで、この実験結果に対する理論研究に重点をおき研究を行った。

軌道秩序下のX線散乱強度の振る舞いを考えるために、次の手順で研究を行った。1) CeB<sub>6</sub> の相図を再現する有効多極子モデルを導入する。2) 平均場理論を用いて相図を得る。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の関係は次の様にまとめられる。

i) 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。

ii) 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。

3) 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。この結果観測結果をほぼ説明できることを明らかにした。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。

バンド計算から有効モデルを決定するための手法として、一般的にバンド計算の結果をTight-Bind(TB)近似を用いた結果と一致するようにパラメータを決定するフィッティングが行われる。しかしこの方法はパラメータの決定に任意性が多く十分とはいえない。そこで本研究では第一原理的にパラメータを決定できるTB-LMTO法を採用した[3]。現在このプログラムを東京都立大の酒井教授から提供していただきプログラムを元に開発中である。

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。

[1] Y. Tanaka *et al.*: Physica B 345 (1985) 78-81.

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

[3] O. K. Andersen: Phys. Rev. B 34 (1986) 5253.

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