

平成16年度COE特別研究奨励費研究計画調書

(ふりがな) 氏 名	さくらい げんや 櫻井玄弥	所 属 物理学 専攻	資 格 COEフェロー・博士 (4年・ <u>3年</u> ・2年・1年)
研究課題	40文字以内で記入すること。 f電子系の多極子相互作用と秩序構造の理論		
研究指導者	職 名	氏 名	15年度奨励費採択の有無
	教授	倉本義夫	有 ・ <u>無</u>

研究目的	募集要領の趣旨に沿った目的を箇条書きで具体的に記入すること。
	<ol style="list-style-type: none"> 1. RB_6系と RB_2C_2系(R=希土類元素)に対して、既に得られている Band 計算を tight binding 近似し、Fermi 面と多極子秩序構造との関連を調べる。 2. アクチナイド化合物 UO_2, NpO_2 は絶縁体であり、それぞれ反強磁性、反強八極子秩序を示すと信じられている。その秩序の違いを酸素イオンを介した超交換相互作用を計算し、5f 殻の現実的電子構造の効果を分析する。
研究計画	研究経費との関連も含めて、何をどこまで明らかにしようとするかがわかるように焦点を絞り、箇条書きで記入すること。 また、設備備品費又は旅費が90%を超える場合は、研究計画の特殊性ないし特殊事情について記入すること。
	<p>我々は既に伝導電子に関して自由電子分散を仮定して、f電子間の多極子相互作用を計算した。その結果を比較的球状に近い Fermi 面を持っている CeB_2C_2 に適用すると、長周期の磁気秩序を安定化し、実験と比較的良好一致を示す事がわかった。</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 以上の成果を SCES'04 にて発表する。 2. 伝導電子についてより現実的なバンドを tight binding 近似し、軌道自由度がある場合にはどのような多極子が秩序しやすいのか調べる。この計算には数ギガ B 程度のメモリを要する。 <p>5f 殻の現実的電子構造を、coefficient of fractional parentage を考慮して取り込み、秩序変数の違いを分析する。この計算には高速、高精度の計算機を要する。</p>