

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	このひろし	所属	資格
	河野 洋志	物理学専攻	COEフェロー・博士(4年・3年・ <u>2年</u> ・1年)
研究課題	40文字以内で記入すること。 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		
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	<u>有</u> ・無

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。
	<p>f電子は一般に局在性が強いと考えられるが、実際は物質によって遍歴描像が合う物と、局在描像が合う物がある。この違いは近藤効果とRKKY相互作用の競合によるもので、この原因を微視的な立場から解明することはf電子系における重要な課題である。</p> <p>本研究の目的は、近藤効果とRKKY相互作用の競合を実際のバンド構造のもとで理論的に解明することである。本研究では特にスピン分極に着目する。スピン分極は偏極中性子散乱実験などで測定可能であり、f電子の状態と混成効果を反映するため、局在性・遍歴性を混成効果と相関効果という微視的な要素から理解する上で有用である。</p> <p>次の研究目的を設定することで、問題の解明に取り組む。</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) バンド構造を取り入れた有効モデルの導出 局在性・遍歴性の違いはバンド構造の違いによって生じる。そのため、実際の物質のバンド構造を取り入れたモデルが必要である。そこで本研究では第一原理計算を元に有効モデルを導出する。</li> <li>2) 混成効果に基づいた相関効果の計算 バンド構造と相互作用が物理量に与える影響を調べるためには、相互作用の強弱によらず統一的に系の状態を解くことが必要である。そこで、本研究では変分モンテカルロ法を用いたモデルを解き、物理量の計算を行う。</li> </ol> <p>以上1), 2)を遍歴・局在描像が成立する双方の物質に対して適用することで、f電子の遍歴性と局在性がスピン分極に与える影響を微視的な立場から解明することを目指す。</p>
研究計画	<p>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。</p> <p>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> <p>本研究の目的は、近藤効果とRKKY相互作用の競合を実際のバンド構造のもとで理論的に解明することである。</p> <p>このための研究計画として以下の項目を挙げる。この1), 2)を局在性の強い物質 CeBe や CeAl<sub>2</sub> 等と遍歴的な取り扱いがよい物質 CeSn<sub>3</sub> などについて対比的に行い、また実験との比較を行うことで 問題の解決を図って行く。</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) バンド構造を取り入れた有効モデルの導出 電子相関の無い状態でのバンド構造を求めるために、相関効果を考慮しない局所密度近似(LDA)の範囲で LMTO 法を用いたバンド計算を行う。Tight-Binding LMTO 法を用いることで、第1原理計算から Anderson モデルを求める。</li> <li>2) 変分モンテカルロ法を用いた相関効果の計算 1)によって得られた有効モデルを解き物理量を計算する。特にf電子の相関効果によって、伝導電子のスピン分極および、f電子の磁気モーメント分布がどのように変化するかという点に着目する。 本研究ではこのための手法として 変分モンテカルロ法を用いる。1)で得られた電子状態から変分関数を決定し、相関効果の計算を行う。この際、軌道縮退があるため変分パラメータの数が大きくなり、従来の手法では計算が難しい。そこでパラメータの最適化部分を改良した最適化モンテカルロ法を用いる。こうして得られた電子状態から、バンド構造と相互作用が物理量に与える影響を見る。</li> <li>3) 国際学会での成果発表 これまでの成果発表と、最新研究情報の収集のために2004年7月にドイツ Karlsruhe で行われる国際学会へ参加する。このための旅費を申請する。</li> </ol>