

研究課題 (テーマ)		正方対称四面体構造がもつ新奇電子状態	
研究者	所属学科等	職	氏名
代表者	教養教育センター	准教授	三本啓輔
分担者			
研究結果の概要			
<p>希土類正方晶化合物 <math>\text{CeCoSi}</math> は比熱, 磁化率から 9.5 K で反強磁性秩序を示すことが明らかにされている。さらに, 静水圧力下における磁化や電気抵抗の測定が行われ, 常圧下で 10 K 程度で示す未知の相転移が 1.5 GPa で 40 K にも増大することが最近, 明らかにされた。La 置換効果などから Ce がもつ局在した 4f 電子が寄与した圧力により増強された反強四極子秩序の可能性が示唆されている。また比熱から見積もった電子比熱係数は <math>\text{LaCoSi}</math> のものと近い値を示すことから, その起源は Co の 3d によるものと考えられ, 4f 電子はほとんど局在していると考えられる。Ce<sup>3+</sup> の正方晶結晶場は 3 つのクラマース二重項により形成され, 基底状態のクラマース二重項は自由度として磁気双極子のみをもつので未知の相転移の起源を説明することはできない。<math>\text{CeCoSi}</math> は空間群 <math>P4/nmm</math> の正方晶化合物であり, <math>\text{CoSi}_4</math> 四面体で構成される層と Ce で構成される層が交互に重なった 2 次元的な結晶構造を有している。Ce サイトの点群は空間反転対称性が破れた <math>C_{4v}</math> であることから, Co の 3d 電子との混成による奇パリティ多極子秩序が大きな相転移温度をもたらすのではないかと期待されている。</p> <p>そこで, 本研究は低温物性において支配的であると考えられる Ce<sup>3+</sup> の 4f 電子の結晶場状態を詳細に明らかにすることにした。Schottky 比熱やほとんど等方的なふるまいの磁化率を再現するような Ce<sup>3+</sup> の結晶場を求めると, <math>\Gamma_7</math> (0 K) - <math>\Gamma_6</math> (~ 100 K) - <math>\Gamma_7</math> (&gt; 200 K) のような 3 つのクラマース二重項で構成されるものや, <math>\Gamma_7</math> 基底と 150 K ほどに <math>\Gamma_6</math> と <math>\Gamma_7</math> が擬縮退した立方晶場に近いものが候補として挙げられることが分かった。立方晶場の下では, x 軸, y 軸, z 軸方向の磁化率は等価なふるまいを示すため, 後者は自然に思える状態である。他方, 前者は 3 つのクラマース二重項がそれぞれ分裂しているため, 単純な理解では説明できない。圧力印加により結晶場準位のエネルギー・ギャップが変動することで, 電気四極子などの電気多極子が誘起され発現したと考えられる。</p> <p>そこで, 上記の結晶場に対して多極子感受率を求めたところ, 電気四極子 <math>O_{xy}</math> と電気 16 極子 <math>H_6</math> が顕著なふるまいを示すことが分かった。弾性定数 <math>C</math> の温度依存性を測定したときに, 低温で <math>C_{66}</math> が減少すれば電気四極子 <math>O_{xy}</math>, <math>(C_{11} - C_{12})/2</math> が減少すれば電気 16 極子が系に支配的だと言える。超音波実験により <math>\text{CeCoSi}</math> の弾性定数の測定が望まれる。</p>			
今後の展開			
<p>本物質の異常な物性の解明には Ce の 4f 電子と Co の 3d 電子が混成した電子状態を求める必要があるため, クーロン相互作用も考慮した多体計算を行う。また, 局所的に空間反転対称性を消失した空間群という特徴を持つため, 外場と物理量の交差相関による新しい物性応答の期待があるので, 応力印加による磁性の制御など応用の可能性を調べる。</p>			