

# 多極子秩序の微視的理論

日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター 久保勝規

原子における電子の軌道状態は、原子の球対称性のために縮退を持つ。例えば、 $f$  軌道はスピン自由度を含めれば 14 重に縮退している。しかし、結晶中では周りのイオンからの静電ポテンシャルなどのため、対称性が球対称から低下し電子の軌道状態に関する縮退は解ける。そのため、十分低温ではスピンの自由度のみを考慮すれば良いことが多い。この残された自由度であるスピン自由度によって引き起こされる多彩な磁性現象は我々の興味を引いてきた。一方、立方晶のように対称性が高い物質系では軌道縮退が残り、軌道自由度がその物性に大きな影響を与える場合がある。その軌道自由度のある系は近年盛んに研究され、特に軌道縮退が自発的に解ける軌道秩序転移は、 $d$  電子系や  $f$  電子系について精力的に調べられてきた。

最近では軌道自由度のある  $f$  電子系において、通常の磁気秩序や軌道秩序とは異なる秩序状態の可能性が議論されている。それは八極子や十六極子などの多極子の秩序である。 $f$  電子系では強いスピン・軌道相互作用のために、電子状態をスピン状態と軌道状態に分けて記述するのは困難であり、良い量子数となる全角運動量一定の状態空間を記述する必要がある。その全角運動量一定の状態を系統的に分類するには、多極子の自由度を用いるのが便利である。双極子（二極子）の秩序は通常の磁気秩序であり、電荷分布の異方性を記述する四極子の秩序は通常の軌道秩序である。さらに高次の多極子である八極子は、磁気モーメント分布の異方性を記述するものである。この八極子の秩序が  $Ce_xLa_{1-x}B_6$  や  $NpO_2$  で実現していると考えられている。最近では  $PrRu_4P_{12}$  に対して、さらに高次の十六極子の秩序の可能性も議論されている。このような多極子秩序の起源を理解するためには、現象論に留まらず微視的な理論を構築する必要がある、最近そのような試みも行われるようになった。

本講演では、そのような多極子秩序の微視的理論を紹介する。具体的には以下の内容を予定している。

- 各イオンにおける  $f$  電子状態の記述方法（近似方法）： $LS$  結合描像と  $j-j$  結合描像
- 多極子モーメント
- $j-j$  結合描像を用いた多極子相互作用の導出方法と導かれる多極子秩序状態
- $PrRu_4P_{12}$  の十六極子秩序