



Title	Theoretical Study on Electronic Structure and Electric Field Gradient by FLAPW Method : Application to f-electron System and Layered Oxide
Author(s)	別役, 潔
Citation	大阪大学, 1999, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/41484">https://hdl.handle.net/11094/41484</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed</a> 大阪大学の博士論文について <a href="#">ご参照ください</a> 。

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名	別 役	きよし 潔
博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)	
学 位 記 番 号	第 1 4 7 5 6 号	
学 位 授 与 年 月 日	平成11年 3 月 25 日	
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第4条第1項該当 基礎工学研究科物理系専攻	
学 位 論 文 名	Theoretical Study on Electronic structure and Electric Field Gradient by FLAPW Method — Application to <i>f</i> -electron System and Layered Oxide — (FLAPW 法による電子構造と電場勾配の理論的研究 — <i>f</i> 電子系と層状酸化物への適用 —)	
論 文 審 査 委 員	(主査)	
	教 授 吉 田 博	
	(副査)	
	教 授 北 岡 良 雄	教 授 鈴 木 直 助 教 授 播 磨 尚 朝

## 論 文 内 容 の 要 旨

以下本文記載

本論文では、現在最も信頼性の高い第一原理電子状態計算法の一つであるフルポテンシャル線形化補強平面波 (FLAPW) 法を用いて、強相関係である *f* 電子系および層状酸化物の電子構造と電場勾配の理論的な研究を行なった。局所密度近似を用いた FLAPW 法による計算で、従来は定量的な計算が困難であった電場勾配が定量的に扱え、実験と良い一致を示すことが示された。電場勾配の計算と実験との比較により、強相関係における物性のより深い理解のために一電子近似の電子状態計算による電場勾配の計算方法を確立することが重要であることが示された。本論文の構成は以下に示す通りである。

第1章は諸言であり、研究の背景と従来の電場勾配の計算の問題点について述べた。

第2章では、計算の基礎となる密度汎関数法と局所密度近似および、FLAPW 法と電場勾配の計算方法の説明と、電場勾配の  $\kappa$  点サンプリング数依存性について記されている。

第3章では、 $\text{LaIn}_3$  と高圧相  $\text{CeIn}_3$  に対して計算を行なった。理論計算による電場勾配は実験と良い一致を示した。 $\text{La}$  および  $\text{Ce}$  の 4 *f* 電子は  $\text{In}$  位置の電場勾配には大きく寄与しないことから、高圧相  $\text{CeIn}_3$  では電場勾配の大きな変化は観測されないと結論された。

第4章では、立方晶ラーベス相化合物の計算を行なった。電場勾配の理論値は、 $\text{LaAl}_2$  と  $\text{CeRu}_2$  では実験値とよい一致を示した。 $\text{YCo}_2$  と  $\text{CeCo}_2$  では、両者の定性的には違いを説明できたが、 $\text{CeCo}_2$  の計算値は実験値との定量的な不一致が残った。この原因は  $\kappa$  点サンプリング数だけでは説明できないことが示された。

第5章では、層状酸化物の  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  と  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  に対して計算を適用した。理論計算による電場勾配は  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  については2種類の O 位置については、実験と良い一致を示したが、 $\text{Ru}$  位置については問題が残った。 $\text{La}_2\text{CuO}_4$  では、 $\text{La}$  および2種類の O 位置では良く実験と一致しているが、 $\text{Cu}$  位置では大きさが実験の半分程度となった。この不一致は実験がホールドープした試料を用いていることが原因であることが示された。

第6章では、 $\text{UCoAl}$  に対して計算を行なった。理論計算による電場勾配は  $\text{Co}$  位置と  $\text{Al}$  位置とも実験と良い一致を示し、とくに実験で観測される二種類の  $\text{Co}$  位置の大きく異なる電場勾配の起源を説明できることが示された。

第7章で本研究の結果をまとめた。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は、現在最も信頼性の高い第一原理電子状態計算法の一つであるフルポテンシャル線形化補強平面波 (FLAPW) 法を用いて、強相関係である f 電子系および層状酸化物の電子構造と電場勾配の予言・解明に関する理論的な研究を行なったものである。その結果、局所密度近似を用いた FLAPW 法による計算で、従来は定量的な計算が困難であった電場勾配が定量的に予言でき、しかも、実験と良い一致を示すことが示された。電場勾配の理論計算と実験との比較により、強相関電子系における物性のより深い理解のために一電子近似の電子状態計算による電場勾配の計算方法を確立することが重要であることが示された。また、FLAPW 法による電場勾配の計算では、電場勾配の k 点サンプリング数依存性に注意を払う必要が指摘され、 $\text{LaIn}_3$  と高圧相  $\text{CeIn}_3$  に対して、理論計算による電場勾配は実験と良い一致がえられている。立方晶ラーベス相化合物である  $\text{LaAl}_2$  と  $\text{CeRu}_2$  について、電場勾配の理論値は、実験値とよい一致を示している。さらに、層状酸化物の  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  と  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  に対しても計算を適用し、理論計算による電場勾配は  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  については 2 種類の O 位置については、実験と良い一致を示したが、Ru 位置については問題が残った。 $\text{La}_2\text{CuO}_4$  では、La および 2 種類の O 位置では良く実験と一致しているが、Cu 位置では大きさが実験の半分程度となった。この不一致は実験がホールドープした試料を用いていることが原因であることが示された。さらに、 $\text{UCoAl}$  に対して計算を行ない、理論計算による電場勾配は Co 位置と Al 位置とも実験と良い一致を示し、とくに実験で観測される二種類の Co 位置の大きく異なる電場勾配の起源を説明できることが示された。

このように、本論文は、経験的パラメータ (実験データ) を一切もちいないで、原子番号だけを入力パラメータとして、現実物質の電子状態を第一原理から計算し、核磁気共鳴法により測定される電場勾配やフェミル面の電子構造を定量的に予言・解明したものである。よって博士 (理学) の学位論文として価値のあるものと認める。