

| | |
|--------------|--|
| Title | Theoretical Study on Electronic Bandstructure of Ferromagnetic Ce Compounds |
| Author(s) | 山内, 邦彦 |
| Citation | 大阪大学, 2005, 博士論文 |
| Version Type | |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/45645 |
| 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"〉 大阪大学の博士論文について <a>〉 をご参照ください。 |

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

| | |
|------------|--|
| 氏名 | やま　　うち　　くに　　ひこ 山　　内　　邦　　彦 |
| 博士の専攻分野の名称 | 博　士（理　学） |
| 学位記番号 | 第　19188　号 |
| 学位授与年月日 | 平成17年3月25日 |
| 学位授与の要件 | 学位規則第4条第1項該当 理学研究科物理学専攻 |
| 学位論文名 | Theoretical Study on Electronic Bandstructure of Ferromagnetic Ce Compounds (強磁性 Ce 化合物の電子状態の理論的研究) |
| 論文審査委員 | (主査) 教授 吉田　　博 (副査) 教授 播磨 尚朝　　教授 赤井 久純　　教授 野末 泰夫 教授 大貫 惇睦　　助教授 摂待 力生 |

論 文 内 容 の 要 旨

本研究では、L(S)DA+ U 法を用いた電子状態計算を行ない、強磁性相の CeSb および CeRh₃B₂ の電子状態およびフェルミ面を明らかにした。その際、強い相関を示す強磁性体の計算に有用である、スピン・軌道相互作用および LSDA+ U 法による有効クーロンポテンシャルの両方を従来の FLAPW 法に取り入れた新しい計算手法を開発し、その妥当性を議論した。

Ce のように原子番号が大きい元素の電子状態を考える場合には、相対論的効果が無視できなくなる。相対論的効果はスピン・軌道相互作用とスカラー相対論的効果に分けて考えられるが、前者によって生じるスピン・軌道分裂の大きさは、4*f*電子系においては結晶場分裂の大きさに比べて一桁大きく、基底状態を考える上で重要になる。スピン・軌道相互作用は、Koelling-Harmon の表式に従い、再変分法で自己無撞着に取り入れて、時間反転対称性が破れた磁性体の計算にも適用できるようにした。

また、4*f*電子系では、*f*電子が局在しているか遍歴しているかが重要な問題になる。従来の局所密度近似 (LDA) を用いた計算では、*f*電子が遍歴的とみなせる非磁性化合物に应用が限られていた。局在電子を取り扱うためには、ハートリー・フォック的な近似を用いた LSDA+ U 法による計算を行なう必要がある。実験結果をよく説明するような *f*電子の占有状態をフェルミ準位より下におき、LSDA+ U 法を用いて自己無撞着な計算を行なう方法を用いた。ここで、*f*電子には軌道の自由度があるため、スピン・軌道相互作用と結晶場を考慮に入れなければならない。

CeSb は少ないキャリア数をもつ近藤物質であるが、きわめて複雑な磁気相図をもつことが知られている。ドハース・ファンアルフェン (dHvA) 効果の実験結果が得られている強磁性相に注目し、電子状態計算を行なった。本研究で開発した LSDA+ U 法によって得られたフェルミ面の計算結果では、*f*電子の占有状態を $|j=5/2, j_z=5/2\rangle$ の状態とった結果が実験結果をよく再現することが分かった。この結果は、以前になされた、異方的な混成相互作用を取り入れた *p-f*混成モデルによる計算結果とも一致している。

CeRh₃B₂ は、六方晶の結晶構造をもち、Ce 化合物の中では最高の $T_c \sim 120$ K という強磁性転移温度を示す。また、磁化測定の結果によると、その飽和磁気モーメントは $0.45 \mu_B$ と小さく、*c* 面内を向いていることが分かっている。本研究では、量子化軸を *c* 面内にとり、結晶構造を底心格子として計算を行なった。dHvA 効果の実験結果を比

較的よく再現する計算例では、 f 電子の占有状態が f 電子間の混成による大きな分散を示すバンドをもっており、 c 面に小さな磁気モーメントの期待値をもつことが示された。この計算結果は、この系のフェルミ面を説明する初めての理論的解釈を与えた。

論文審査の結果の要旨

本研究では、 $L(S)DA+U$ 法を用いた電子状態計算を行ない、強磁性相の $CeSb$ および $CeRh_3B_2$ の電子状態およびフェルミ面を明らかにした。その際、強い相関を示す強磁性体の計算に有用である、スピン・軌道相互作用および $LSDA+U$ 法による有効クーロンポテンシャルの両方を従来の $FLAPW$ 法に取り入れた新しい計算手法を開発し、その妥当性を議論した。

Ce のように原子番号が大きい元素の電子状態を考える場合には、相対論的効果が無視できなくなる。相対論的効果はスピン・軌道相互作用とスカラー相対論的効果に分けて考えられるが、前者によって生じるスピン・軌道分裂の大きさは、 $4f$ 電子系においては結晶場分裂の大きさに比べて一桁大きく、基底状態を考える上で重要になる。スピン・軌道相互作用は、 $Koelling-Harmon$ の表式に従い、再変分法で自己無撞着に取り入れて、時間反転対称性が破れた磁性体の計算にも適用できるようにした。また、 $4f$ 電子系では、 f 電子が局在しているか遍歴しているかが重要な問題になる。従来の局所密度近似(LDA)を用いた計算では、 f 電子が遍歴的とみなせる非磁性化合物に应用が限られていた。局在電子を取り扱うためには、ハートリー・フォック的な近似を用いた $LSDA+U$ 法による計算を行なう必要がある。実験結果をよく説明するような f 電子の占有状態をフェルミ準位より下におき、 $LSDA+U$ 法を用いて自己無撞着な計算を行なう方法を用いた。ここで、 f 電子には軌道の自由度があるため、スピン・軌道相互作用と結晶場を考慮に入れなければならない。

$CeSb$ は少ないキャリア数をもつ近藤物質であるが、きわめて複雑な磁気相図をもつことが知られている。ドハース・ファンアルフェン($dHvA$)効果の実験結果が得られている強磁性相に注目し、電子状態計算を行なった。本研究で開発した $LSDA+U$ 法によって得られたフェルミ面の計算結果では、 f 電子の占有状態を $|j=5/2, j_z=5/2\rangle$ の状態にとった結果が実験結果をよく再現することが分かった。この結果は、以前になされた、異方的な混成相互作用を取り入れた $p-f$ 混成モデルによる計算結果とも一致している。

$CeRh_3B_2$ は、六方晶の結晶構造をもち、 Ce 化合物の中では最高の $T_c\sim 120\text{ K}$ という強磁性転移温度を示す。また、磁化測定の結果によると、その飽和磁気モーメントは $0.45\mu_B$ と小さく、 c 面内を向いていることが分かっている。本研究では、量子化軸を c 面内にとり、結晶構造を底心格子として計算を行なった。 $dHvA$ 効果の実験結果を比較的よく再現する計算例では、 f 電子の占有状態が f 電子間の混成による大きな分散を示すバンドをもっており、 c 面内に小さな磁気モーメントの期待値をもつことが示された。この計算結果は、この系のフェルミ面を説明する初めての理論的解釈を与えた。

よって、本論文は、博士(理学)の学位論文として十分価値あるものと認める。