



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	<a href="https://hdl.handle.net/11094/45645">https://hdl.handle.net/11094/45645</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">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

氏名	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CeRh<sub>3</sub>B<sub>2</sub>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、スピノ・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ノ・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ノ・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。スピノ・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応用が限られていた。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、スピノ・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>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<sub>3</sub>B<sub>2</sub>は、六方晶の結晶構造をもち、Ce化合物の中では最高のT<sub>c</sub>~120K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0.45μ<sub>B</sub>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。

### 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<sub>3</sub>B<sub>2</sub>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応用が限られていた。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 $|j_z=5/2, j_z=5/2\rangle$ 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<sub>3</sub>B<sub>2</sub>は、六方晶の結晶構造をもち、Ce化合物の中では最高のT<sub>c</sub>~120K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。