



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	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 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、相対論的效果が無視できなくなる。相対論的效果はスピン・軌道相互作用とスカラー相対論的效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 응용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  $|j=5/2, j_z=5/2\rangle$  の状態を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  $T_c \sim 120$  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<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>~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。