

Ce化合物のバンド計算

東北大学理学部 柳瀬 章

価数揺動状態との関連に興味を持たれている Ce 化合物の中で CeB_6 と $CeSn_3$ のバンド計算を現在すすめている。Local Density 近似 (L.D.A) で Potential を Self consistent に定める APW法で計算している。

$CeSn_3$

Fig. 1 に広い Energy 範囲でみたバンド構造を示す。Energy の単位は Ryd. E_F とした線が Fermi level である。A. Hasegawa の $LaSn_3$ ¹⁾ の計算結果と E_F の位置と f-band の位置を別にすれば殆んど同じである。

Fig. 2 は E_F の近くの拡大図である。p-f 混成の結果かなり大きな s 依存性を持っている。R 点を中心にしたホールと GA(P) 点を中心にした大きな電子面がある。この面積は最近発表された²⁾ α , H. V. A の結果とよく一致している。質量は大体自由電子質量と計算され実験の $1/5 \sim 1/8$ である。

CeB_6

Fig. 3 は E_F の近くの拡大図である。R 点を中心にしたホール面と GA(P) 点を中心にした二枚の電子面を持っている。電子面の一つが Σ 軸 (GAM) で大きな質量を持つ他は $CeSn_3$ のバンドとよく似ている。

$CeSn_3$ も CeB_6 も R 点の近くの大きな領域で f バンドは殆んど混成を示さない。又どちらにも P 点, M 点で特に強い混成がみえる。価数揺動の問題には p-f 混成が重要な役割をはたすと考えられているが、この計算はその s 依存性が非常に強いことを示している。³⁾ 物に則した議論をするのには、この点は重要な意味を持っていると考える。

ここに示した計算は柳瀬・長谷川・中西・浅野がライブラリープログラムとして開発とすすめている A.P.W プログラムを使用して行なった。

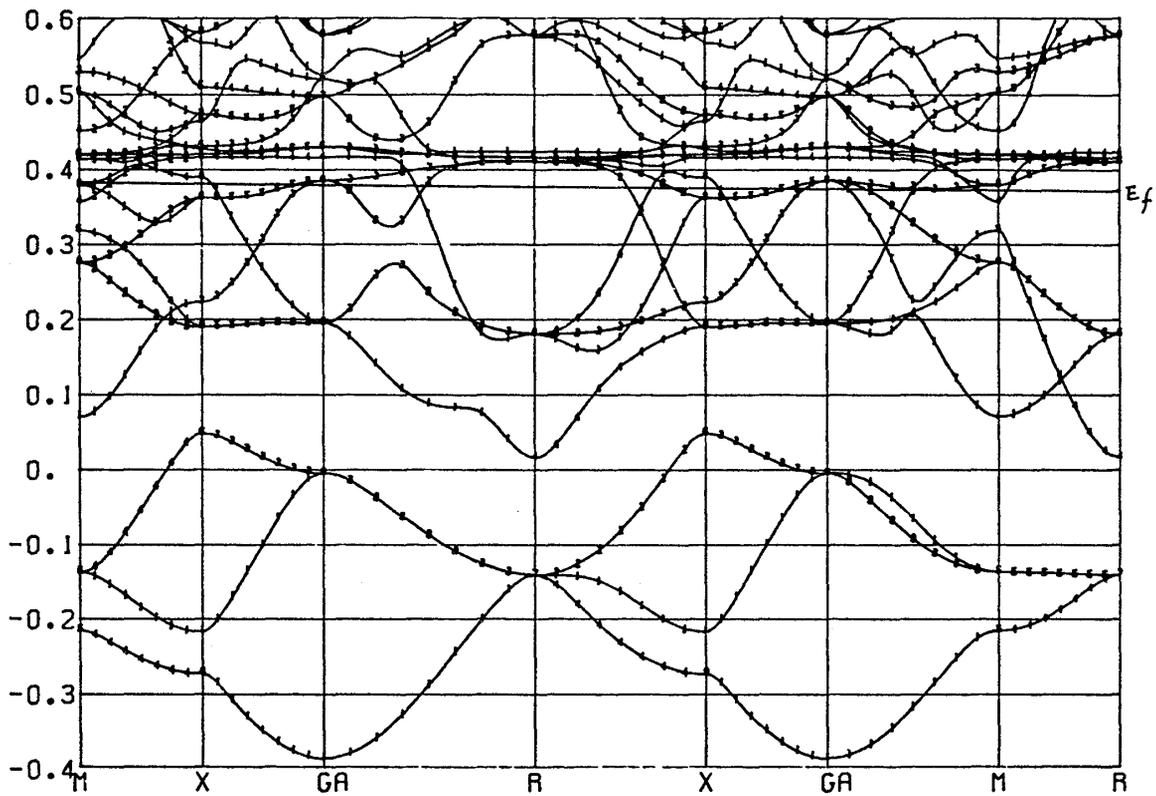


Fig. 1. CeSn₃ のバンド構造

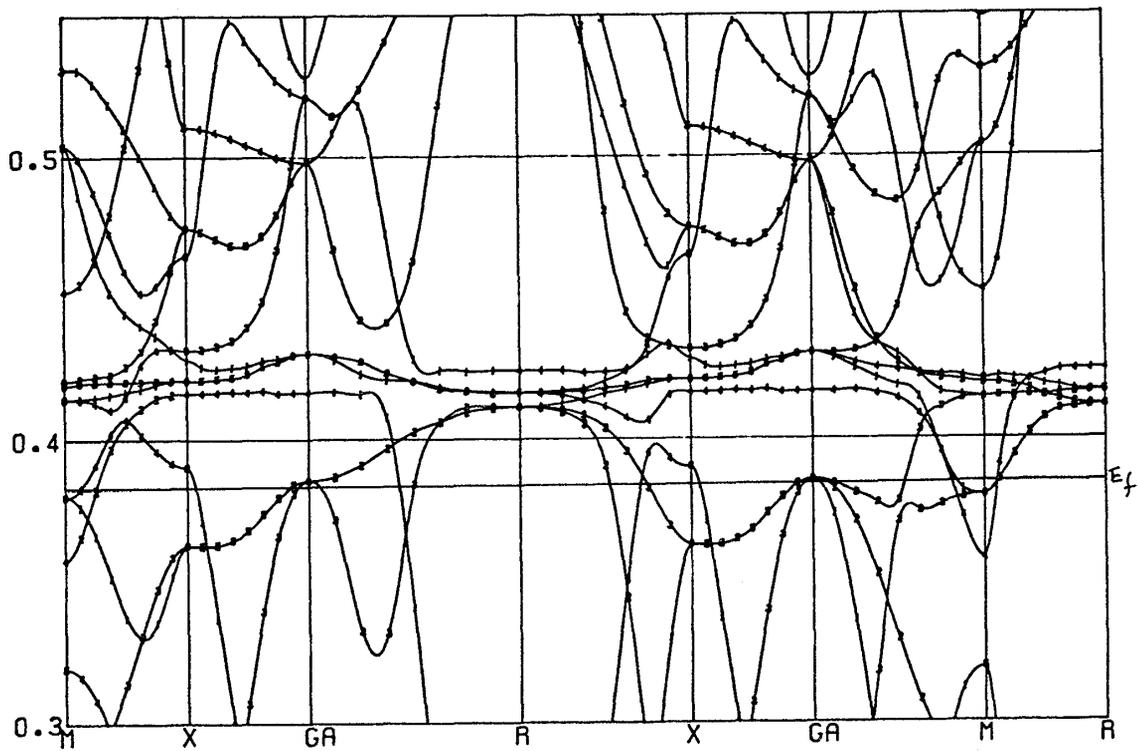


Fig.2. CeSn₃ のバンド構造 (E_fの近く)

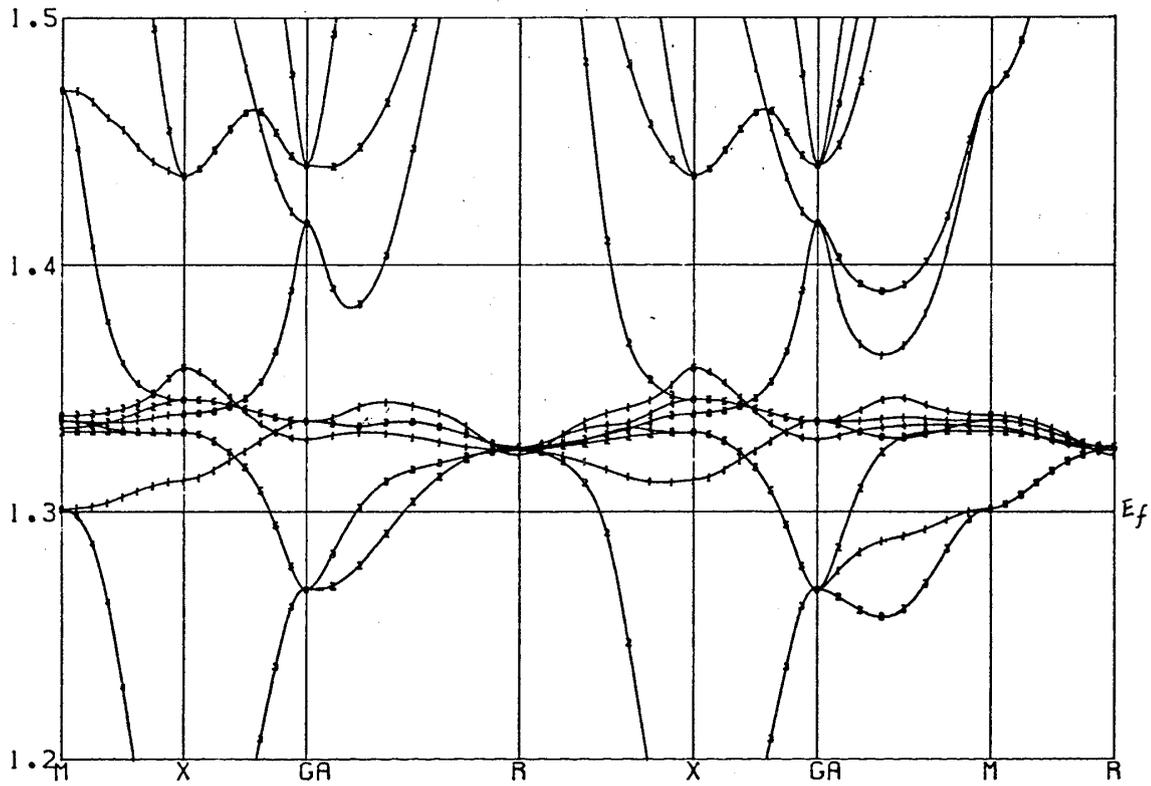


Fig.3. CeB_6 のバンド構造

- 1) A. Hasegawa, J. Phys. Soc. Japan 50 (1981) 3313.
- 2) W.R. Jahanson, G.W. Crabtree, A.S. Edelstein, O.D. McMasters, Phys. Rev. Lett. 46 (1981) 504.
- 3) A. Yanase, A. Hasegawa, "Electron Correlation and Magnetism in Narrow-Band Systems" Ed. T. Moriya, Springer-Verlag, p.230 (1981).