

CeB<sub>6</sub>の物性： d-f及びf-f相互作用

東北大・理・物理 青木芳雄、柳瀬章、糟谷忠雄

CeB<sub>6</sub>の磁氣的相互作用に関しては、種々の実験により次の様な特徴を持つ事が考えられる。

1. 常磁性帯磁率の解析によると、交換相互作用はquartet (Γ8) 状態間に反強磁性的に強く働き、doublet (Γ7) 状態間では非常に小さい。
2. 帯磁率の解析、中性子非弾性散乱で観測されるΓ7-Γ8間の拡がった分散、NMRで調べられたII相の性質から、doublet-quartet間で状態をmixする形の交換相互作用も大きい。(Quartet levelは交換相互作用によって400K以上の拡がりを持っている。)
3. 帯磁率から評価される交換相互作用の強さに比べ、磁気転移温度が3Kと小さい事から、相互作用はlong rangeである。

具体的な電子構造を用いて相互作用の計算を行ない、上記の性質を説明する事、加えてCeB<sub>6</sub>の磁氣的相互作用の異方性を明らかにする事が研究の目的である。

RB<sub>6</sub>のf-f相互作用は、伝導5d電子とのd-f相互作用を媒介としたRKKY型の間接交換相互作用と考えられる。d-f相互作用には、クーロン相互作用に起因するd-f Coulomb exchange interactionとd-f mixing interactionの2つが考えられる。ここでは前者についてのみ考える。d-f相互作用の計算では、伝導電子状態は詳しいLaB<sub>6</sub>のバンド計算結果の特徴を採り入れ、eg対称5d状態によるLCAOとし、4f状態は、立方対称結晶場の固有状態(Γ7:doublet, Γ8:quartet)とする。d-f相互作用は、 $\vec{s} \cdot \vec{S}$ 型の等方的交換相互作用、軌道部分からくるクーロン多重極相互作用、スピンと軌道がカップルした形の異方的交換相互作用の3つを考える。

d-f相互作用は次の様な特徴を持つ事が判かった。

1. 等方的交換相互作用は小さく、異方的交換相互作用がその倍以上大きい。
2. クーロン多重極相互作用が殊にquartet状態で大きい。

d-f相互作用による結晶場はdoublet状態を基底状態とする。これはoccupied d状態とquartet状態とのoverlappingが大きい為、quartet状態は、exchangeで得をするが、Coulomb multipoleで損をする。前者よりも後者が大きい事から全体としてquartet状態がdoublet状態に比べてエネルギーが高くなるため

である。d-f相互作用の大きさとしてatomicな値を用いると、点電荷モデルでの結果とは逆転したdoublet基底状態が実現するが、CeB<sub>6</sub>では相互作用がatomicな値よりは小さくなっている事、d-f mixingによるfレベルのシフトを考慮する必要がある事から、直ちにdoublet基底状態という結論は出せない。

次にd-f相互作用の2次過程としてf-f相互作用を計算した。相互作用の方向依存性は、[100]方向でlong rangeであるのに対し、[100]からずれると減衰し、[111]方向ではほとんど働かないという異方性を持つ。相互作用がlong rangeであるという結果は実験からの結果と一致する。また距離依存性については、GdB<sub>6</sub>の場合の交換相互作用の結合定数の計算によって、振動型である事がわかった。このような方向・距離依存性は、バンド構造を反映したものである。

Doubletとquartetとでの異方性についてみると、quartet間でdoublet間に比べて1けた大きな相互作用が働く。これは実験からの結果と一致する。doublet-quartetのmixing typeの相互作用もquartet間の相互作用ほど大きくはないが、効果を持つ。

f-f相互作用の形を調べる為に、d-f相互作用の等方的交換相互作用、異方的交換相互作用、クーロン多重極相互作用の各々の2次過程も計算してみた。その結果、等方的交換相互作用に比べ異方的交換相互作用の方が数倍の大きさを持つことが判かった。異方的交換相互作用によってquartetのantiferro的状态(resonance state)が基底状態となる。クーロン多重極相互作用は異方的交換相互作用よりも大きく、これによつてはquartetの結合状態(モーメントの方向については縮退)が基底状態となる。全体の相互作用の基底状態としては、quartetのferro的状态となるが、これはバンドの異方性を反映したものである。

以上、CeB<sub>6</sub>のf-f相互作用の性質として、doubletとquartetとの異方性、long rangeである事は5dバンドを用いた計算によって示す事ができた。従つてquartet levelのbroadeningも定性的には説明できる。しかし、相互作用の符号等実験とは相反する点もあり、今後d-f mixingによるf-f相互作用と併せて解析する必要がある。