

YB₁₂のバンド構造

東北大理, 大阪府立大総合科学*

播磨 尚朝, 柳瀬 章*, 糟谷 忠雄

YB₁₂のバンド計算は、SmB₆とよく似た性質を示すYbB₁₂の価数振動状態を研究する上で重要である。YB₁₂は、YbB₁₂と同じ結晶構造を持つ。立方八面体の頂点に位置する12個のBoronを1つの原子と見なすと、NaCl型の結晶構造である。

計算は、Local Spin Density 近似(L.S.D.A)を用いたAPW法で Potentialを Self consistentにするまで行なっている。相対論的效果は、Koelling と Harmon (1977)による方法で取り入れてある。Spin-Orbit Interactionは落としてある。

計算されたバンド構造(Fig.)から、金属的であることが知られる。B₁₂は-2価, Yは+3価の状態が存在している。伝導電子は1個であり、従って、MB₁₂でMが+2価の状態を結晶を作ると、半導体あるいは半金属になることが予想される。YbB₁₂の場合、帯磁率から求められたYbの価数は+2.75価であり、抵抗は半導体的振舞を示すことが知られている。

Fermi energy (Fig.でE_Fとした点線)にかかる bandは、2つの状態があるが、characterのE(k)依存性はほぼ同じである。E(k)=E_Fの近傍で、Yのdが20%, fが数%, Bのpが40%程度であり、E(k) ≤ E_Fでは、Yのdが増え、YのfとBのpが共に減り、E(k) > E_Fになると、その逆の傾向がある。

なお、この計算は、柳瀬、長谷川西氏によるプログラムを用いて行なった。

Figure. YB₁₂のバンド構造

