

4f バンド について

大阪府立大学 総合科学部 柳瀬 章

前回の飯坂の研究会では $CeSm_3$ と CeB_6 のバンド計算の結果を発表した。ついでに昨秋の京都の国際会議には $CeRh_3$ と $CeIn_3$ の結果を併せて報告した。これらの計算は局所密度近似を用いた自己無電着にポテンシャルを定める方法で Ce の 4f 状態を過渡状態としておこなった。結果を要約すると次のようである。

- ① 4f 状態と他のバンド的な状態との混成は強弱の弱り強と種々あるが、この強弱は、その物質での 4f の局在、過渡性により相違を持つている。
- ② 4f と他の状態との混成は強い波数依存性を持つている。
- ③ $CeSm_3$ の計算で得られたフェルミ面の形は de-Haas の実験で与えられたフェルミ面の形とより一致を示し、"4f-band" がこの物質で実際に起こっていることの証拠と考えられた。(fig. 1, fig. 2)
- ④ 比熱の状態密度は計算結果の 2 倍以上、 $CeSm_3$ の de-Haas の有効質量で計算値の 4~6 倍である。
- ⑤ APW の計算に用いた、マフィンティン球内の f 成分の量は、La-化合物のそれより約 1/10 分である。

最近 Jarlberg, Freeman, Koelling は $CeAl_2$ のバンドを LMT0 法で同様の計算を行って自己無電着に基き 4f 電子の数は $CeAl_2$ のそれより 1 度 1/10 分多くなると、強磁性状態は不安定だが、反強磁性状態は安定で磁気モーメント $0.88 \mu_B$ をあたえてを報告している。この値は実験で観測された spin modulation の最大振幅 $0.89 \mu_B$ とより一致を示している。

1) Neutron Conf. in Grenoble OCT (1982)

我々は $CeSm_3$ と CeB_6 のバンド計算をブリリユアンゾーン内の対称性の悪い点での計算を追加してフェルミ面内の状態の f 成分が、物質によりどのようにかわるか？ 又フェルミ面の上での状態の性格が、場所によりどのようにかわるか？ を調べてみた。 $CeSm_3$ では (fig 1) (fig 2) に示したフェルミ面がほとんど一様で $0.5 \sim 0.6$ の割合で f 成分を含んでいる。 CeB_6 ではこの値が $0.7 \sim 0.8$ となり、局在性・適正性のちがいをよく反映している。又 $CeRh_3$ の予備的な結果は $0.2 \sim 0.4$ となっていた。fig 3 と fig 4 は $CeSm_3$ と CeB_6 の状態密度と、その中の f 成分を併せて示している。状態密度の構造は f 状態による高リ密度の場所の差をのぞけば $LaSm_3$ と LaB_6 のそれとほとんど同じである。

$CeSm_3$ でフェルミレベル以下の f 成分の積分値を計算すると 1.150 となる。Hasegawa が $LaSm_3$ であたえた値 0.15 を引くと 1.00 になる。 CeB_6 で同様な計算をすると 1.71 となる。これは fig. 4 に示すように f の割合ではバンドの下の方ほど f 成分を持つためである。この部分の f 成分は f が混成しているというよりは平面波の f 成分が B_6 の 8 面体構造を反映して強くできているとみたほうがよい。この場合 LaB_6 のそれを引くと 1.0 となる。

現在 $CePd_3$ のバンド計算を進めている。この物質では格子定数の温度変化が大きく、混成の大きさはこの格子定数の変化がどの程度かわるかに興味を持っている。

この $CePd_3$ を含めて局在性を強く持った物質の電子状態が局所密度近似を用いたバンド計算でどのまで記述できるか、スピン密度がゼロなく、軌道角運動量を生かしたようにバンド計算ができればよいと調べてみたいかと考えている。

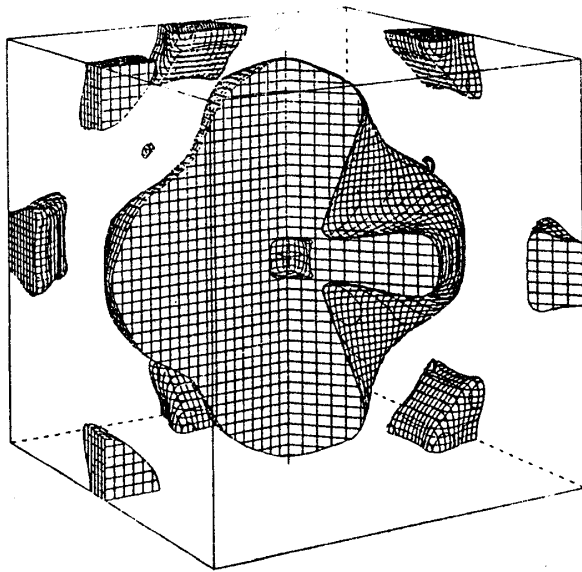


fig. 1 CeSm_3 の電子 Fermi 面
中心が P 点、角が R 点、P 点
を中心とし $\langle 1,1,1 \rangle$ 方向が深く
切れこんだ Fermi 面と、M 点
を中心とした梳状の面とが
ある。

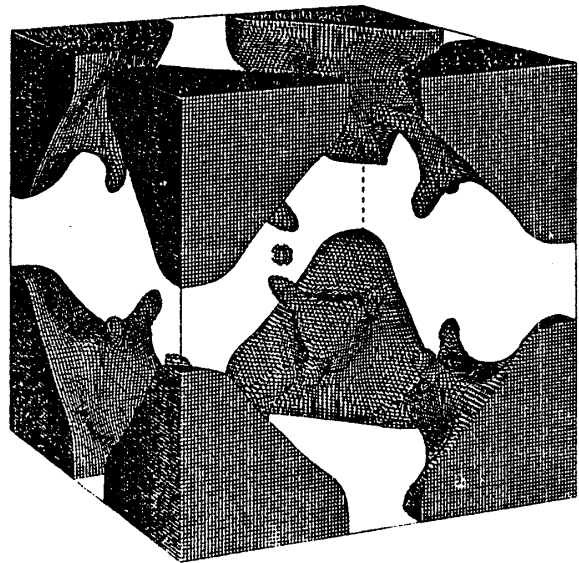


fig. 2 CeSm_3 の正孔 Fermi 面
R 点を中心とし、 $\langle 111 \rangle$ 方向
にのびた面と P 点を中心
にした少々のサイコロ状の面
とがある。

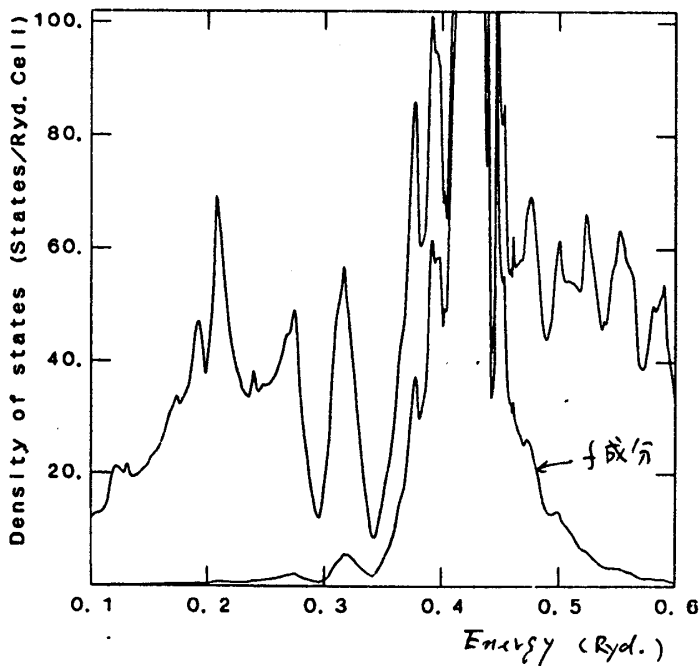


fig. 3 CeSm_3 の状態密度
と f 成分

$$E_f = 0.3887 \text{ Ryd}$$

E_f での状態密度は

$$80.2 \text{ States/Ryd. Cell}$$

0.3 Ryd の少し上の構
造は LaSm_3 にもあるの
で、f 成分には Peak
が加えられる。

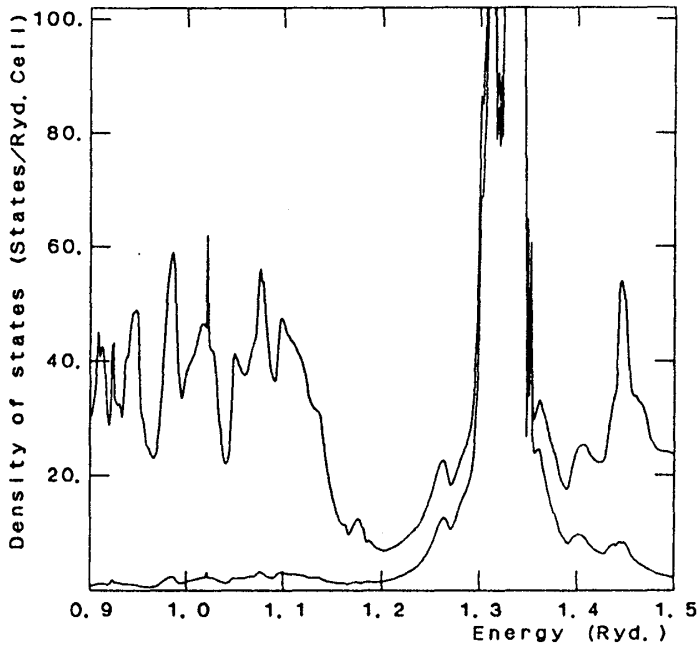
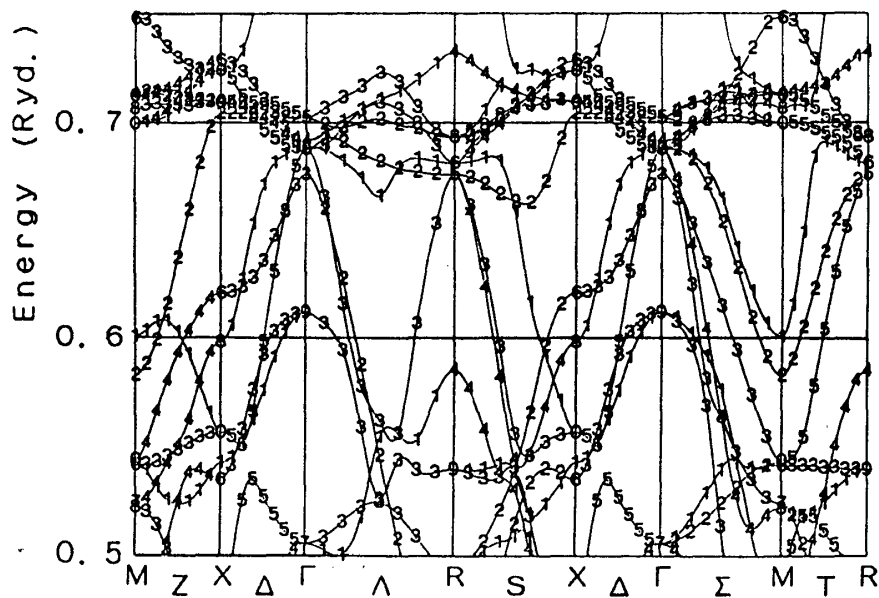


fig. 4 CeB₆の状態密度
 と f 成分

$$E_f = 1.301 \text{ Ryd}$$

E_f の状態密度は

$$83.2 \text{ states/Ryd. Cell}$$



附図 CeRh₃のバンド構造 $E_f = 0.64 \text{ Ryd}$, Rhの4d, P軌道との強い混成で E_f 近くは状態密度の谷間になっている。