

Title	バンド計算の4fレベル(コメント)(IV. バンド計算,価数揺動状態の総合的研究,科研費研究会報告)
Author(s)	播磨, 尚朝; 柳瀬, 章; 糟谷, 忠雄
Citation	物性研究 (1984), 42(6): 32-32
Issue Date	1984-09-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/91431
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

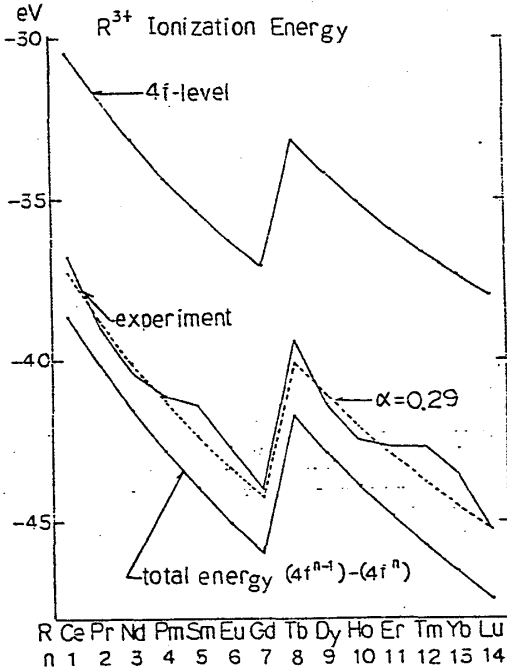
バンド計算の4fレベル (コメント)

東北大理、阪府大総合^A 播磨 尚朝, 柳瀬 章^A, 糠谷 忠雄

YbB₁₂の価数振動状態を研究する目的で、その参照系として、LuB₁₂のバンド計算を行った。計算によると、Lu サイトによく局在した4f準位が、フェルミ準位下1eV程度に存在しており、フェルミ準位でのサイクロトロン質量や、比熱の γ 値を2割程度大きくしていることが解る。一方、X.P.S.によると、4f準位は、フェルミ準位より7.7eVであり、計算と大きく違い。また、実験による比熱の γ 値は、 $2.77 \pm 0.36 \text{ mJ/molK}^2$ でありフォノンの効果を考えると、計算値の 2.85 mJ/molK^2 は少し大き過ぎると思われる。これも4f準位は、計算では浅く出ていることを示唆している。

Lu サイトのf成分の波動関数の形を見ると、結晶中に拡がらずに、よく局在しており原子的な状態を保っていることがわかる。そこで、稀土類原子の+3価のイオン化エネルギー ϵ を調べた結果を図に示す。LuB₁₂のLuは、結晶中では+3価である。図には、光吸収の実験から得られた値と、4fレベル、即ち、4fのエネルギー固有値、及び、全エネルギーの差の値を示してある。計算は、バンド計算のマフィンティン球内の計算と基本的に同じ方法で、局所密度汎関数法を用い、スピンを考慮して行なった。相対論の効果も取り入れてあるが、スピン軌道相互作用は落とした。

4fレベルは、実験値と大きく違い、密度汎関数法で正しく与えられると主張している全エネルギーの差も、実験値とのよい一致はみられない。バンド計算において、4fレベルが浅く出るのは、原子において浅く出るのだから、むしろ当然と言える。



この違いの原因は、いろいろ考えられるが、ここでは、4f電子の電子密度の空間的変動が大きく、クーロン相互作用の自己エネルギーを、交換エネルギーが完全に打ち消していないと考えて、f成分のポテンシャルだけ、次のように変形させる、

$$V_f(r) = V_0(r) - \alpha \int \{n_f(r') / |r-r'|\} dr'$$

$V_0(r)$; 局所密度汎関数法による一体ポテンシャル

$n_f(r)$; 4f電子一個分の電子密度

α が自己エネルギーを、どの位打ち消してやるかのパラメータとなる。このようにポテンシャルを置き直しても、波動関数の直交性は角度部分で保たれている。 $\alpha \neq 0$ とすると、4fレベルが下がるにつれて、波動関数の形も変わるが、他の電子は、その

影響をあまり受けない。Lu³⁺では、 $\alpha = 0.29$ で、4fレベルは実験値と一致する。同じ α で計算した4fレベルの値を図に点線で示した。よく一致している。

同じ方法で、バンド計算を行なう準備を、現在進めている。いずれにしても、4fが占有された状態は、従来の局所密度理論では、正しく記述されているとは言えず、何らかの工夫が必要であると思われる。