

Title	AuCu <sub>3</sub> 型ウラン化合物の電子エネルギーバンド構造(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)	長谷川, 彰
Citation	物性研究 (1984), 42(6): 30-31
Issue Date	1984-09-20
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/91432">http://hdl.handle.net/2433/91432</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

## AuCu<sub>3</sub>型ウラン化合物の電子エネルギーバンド構造

新潟大教養 長谷川 彰

ウランUとIV族元素X(=Si, Ge, Sn, Pb)の作る化合物UX<sub>3</sub>は、AuCu<sub>3</sub>型結晶構造をもつ。これらの化合物については、次のような実験がある。

(1) SiからPbへ下るにつれて、格子定数は大きくなる:

$$USi_3: 4.035 \text{ \AA}, \quad UGe_3: 4.206 \text{ \AA}, \quad USn_3: 4.626 \text{ \AA}, \quad UPb_3: 4.792 \text{ \AA}.$$

(2) 電子比熱の温度係数 $\gamma$ も同じ傾向をもつ:

$$USi_3: 14.0, \quad UGe_3: 20.4, \quad USn_3: 170. \quad (\text{単位 } mJ/mole \cdot K^2)$$

これらの絶対値は、同じ構造をもつLa化合物に比べて極めて大きい。

$$LaSn_3: 2.74, \quad LaPb_3: 3.25.$$

(3) 常磁性帯磁率 $\chi$ も同じ傾向をもつ:

$$USi_3: 700, \quad UGe_3: 1300, \quad USn_3: 1883. \quad (\text{単位 } 10^6 \text{ emu/mole})$$

(4) dHvA効果の実験によれば、UGe<sub>3</sub>のフェルミ面は、自由電子質量 $m_0$ の4倍程度のサイクロトロン有効質量 $m_H^*$ をもつ。2つの等方的な面と、 $m_H^* \approx m_0 \sim 2m_0$ 程度の、tetragonal対称をもつ面から成っている。

以上の実験結果は、少くとも軽いIV族元素の化合物においては、5f電子が狭いバンドを作っていることを示唆しているように思われる。LSD近似に基づくバンド理論によってこれらの化合物のフェルミ面、 $m_H^*$ ,  $\gamma$ , 結合機構がどこまで説明されるか調べたい。ここでは、予備的な計算結果を報告する。

図1.(a)-(d)に、フェルミエネルギー近傍のバンド構造の計算結果を示す(相対論的エネルギーシフトを考慮に入れたが、スピン軌道相互作用は入っていない)。5fバンドは、X-pバンドと強く混っており、その影響は広い範囲( $\sim 0.4 Ryd$ )に及んでいる。5fバンドの幅は、SiからPbへ下るにつれて狭くなる。すべての化合物に共通して、第8, 第9バンドから作られる、かなり等方的な関いた2つのホール・フェルミ面がR点のまわりに存在する。第10バンドの電子面は、化合物によって違う。UGe<sub>3</sub>においては、M点のまわりに電子面があり、定性的に実験と一致する。2つのホール面の $m_H^*$ は、どちらも $3m_0 \sim 4m_0$ であり実験と定量的によく一致している。

しかし、電子比熱の実験結果を定量的に説明するためには、状態密度は小さすぎ、多体効果によるenhancement因子が必要である。

今後、スピン軌道相互作用を考慮に入れたバンド計算、フェルミ面の詳しい解析、 $m_H^*$ や5fバンドの状態密度の詳しい計算を行い、5fバンドの性質を明らかにしてゆきたい。

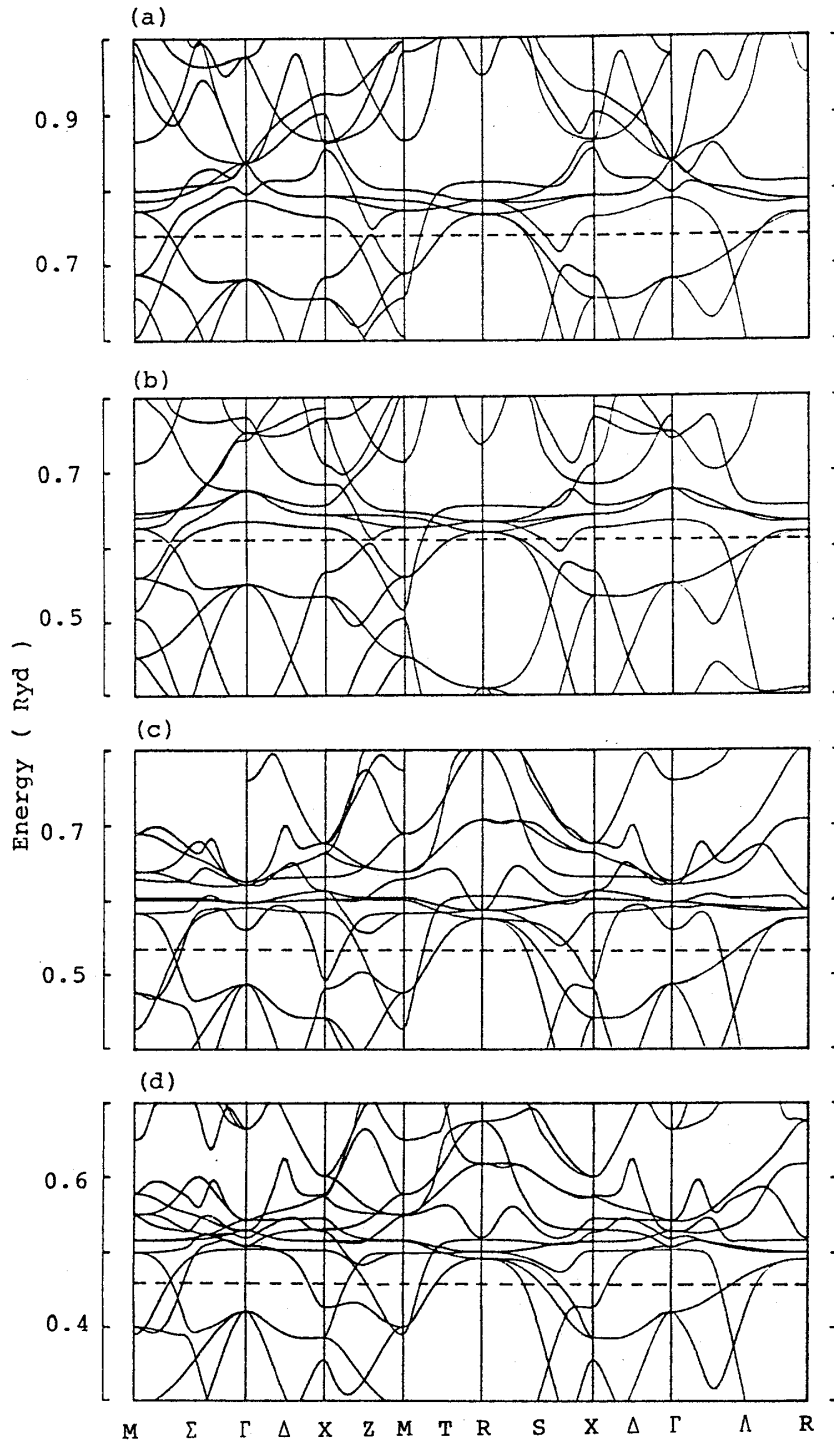


図1. LSD 近似の交換・相関相互作用に基づく、フエルミ・エネルギー  
 近傍の APW エネルギー・バンド構造。  
 (a)  $USi_3$ , (b)  $UGe_3$ , (c)  $USn_3$ , (d)  $UPb_3$ .