

Slater による $X\alpha$ 法を用い, α を 1 とした。このポテンシャルを用いて, エネルギーバンドを計算する際に, 計算する永年方程式の次元を下げるだけではなく, 系統的な計算を可能にすること等から, 群論によって結晶の対称性を考慮に入れた。以上の方法で得られた結果と最近 Baroni 等によってなされた Gaussian OPW 法を用いた計算等による比較を行った。定性的には, Conduction band は most free-electron like, Valence band は Core-like であり, エネルギーバンドの sequence は一致しているが, 定量的には違いがある。また, 固体 Ne で行った方法の Te 結晶への適用についても考察を試みた。

2. 重い電子系の低温における有効相互作用の理論的研究

吉 田 忠 広

平均場からのゆらぎをボゾン場として扱うのに, 従来の汎関数積分法によらず, 密度演算子のボゾン場表現を使った。これは, 汎関数法によるとボゾンのスカラー場以外にフェルミオン間相互作用が扱えていないのに対し, 摂動論を組み立てることができ, 摂動展開でフェルミオン相互作用として重要な RKKY 相互作用も合わせ取り扱えるからである。

まず, 格子コクラン-シュリーファー模型に f 電子数の束縛からの僅かなゆらぎを許すハミルトニアンから出発し平均場の解を導いた。温度が近藤温度 T_K 以下になると, 近藤効果で重い準粒子状態の混成バンドが形成され, バンド幅が T_K 程度になる。ハミルトニアンの残された項のゆらぎが, 準粒子間の相互作用として働く。これには, 局在 f と伝導 c の一体になった重い電子の密度ゆらぎによる Kondo boson と束縛場の λ boson があり, またもとの局在 f 電子に対しては RKKY 相互作用が λ boson と絡んで enhance される効果があることが判った。得られた結果は Kondo boson のゆらぎによる準粒子間相互作用は引力的, λ boson のそれは大きく斥力的な $\vec{q}$ (波数) 依存性があり, これらは tight binding 伝導バンドに対して $\vec{q}$ の方向依存性, 充満電子数依存性が大きく, バンドの形にもよる。合計のボゾン場の斥力は RKKY 相互作用の引力と競争して, 重い電子のゆらぎによる増大のために後者が, 一旦は近藤効果で負けても, 重い電子状態の中では勝って磁気相の形成が可能になる場合やその反対の場合があることが分った。