

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 CeSn_3 と CeB_6 のバンド計算の結果を発表した。つぎ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あつかっている。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いつつ弱いつつと種々あるが、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非依存性を持つている。
- ③ CeSn_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できていることの証拠と考えられる。
(fig. 1, fig. 2)
- ④ 比熱の状態密度は計算結果の 2 倍以上、 CeSn_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 分り。

最近 Jarlberg, Freeman, Koelling は CeAl_2 のバンドを LMTO 法で同様の計算を行い¹⁾ 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 分り多く、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 CeSn_3 と CeB_6 のバンド計算をブリリユアンゾーン対称性の悪い点での計算を追加してフェルミ面での状態の 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、場所によってどのようにかわるか？ を調べてみた。 CeSn_3 では (fig 1) (fig 2) に示したフェルミ面ではほとんど一様で $0.5 \sim 0.6$ 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・過渡性金属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 に CeSn_3 と CeB_6 の状態密度と、その中の f 成分を載せている。状態密度の構造は f 状態による高リ密度の場所の違いをのぞけば LaSn_3 と LaB_6 のそれとほとんど同じである。

CeSn_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 LaSn_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 に示すようにこの物質ではバンドの下の方まで 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ているとみたほうがよい。この場合も 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、スピン密度だけでなく、軌道角運動量も生かしたようにバンド計算ができるようにして調べてみたいと考えている。

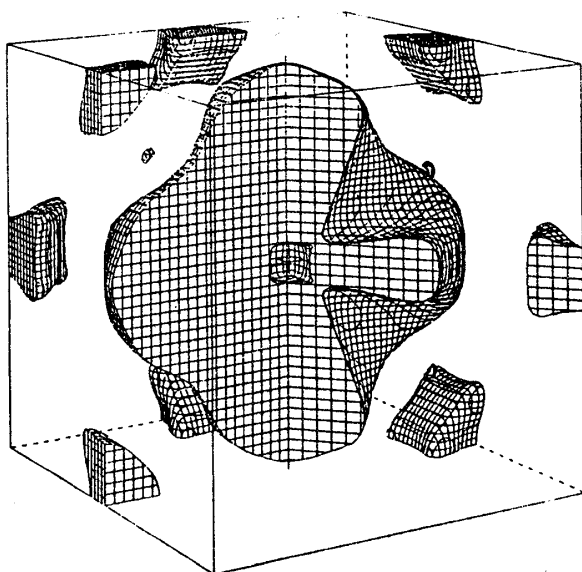


fig. 1 CeSn_3 の電子 Fermi 面
中心が P 点、角が R 点、P 点
を中心とし $\langle 111 \rangle$ 方向が深く
切れこんだ Fermi 面と、M 点
を中心にした 梳状の面とが
ある。

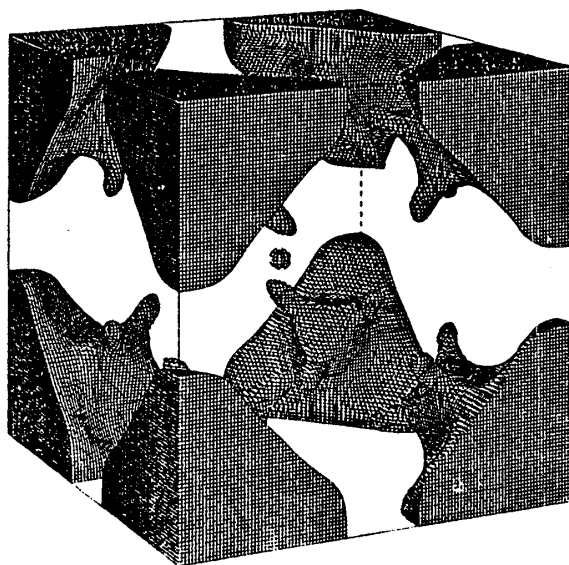


fig. 2 CeSn_3 の正孔 Fermi 面
R 点を中心とし、 $\langle 111 \rangle$ 方向
にのびた面と P 点を中心
にした少し長いサイコロ状の面
とがある。

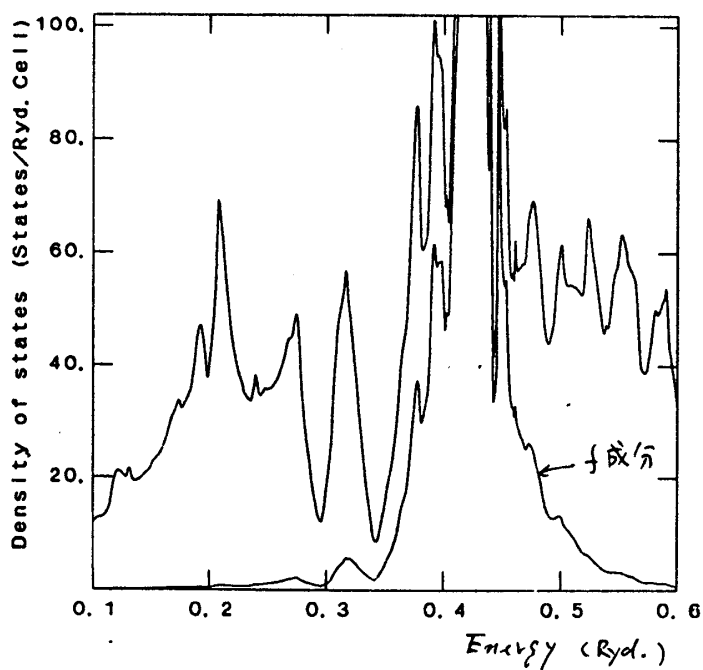


fig. 3 CeSn_3 の状態密度
と f 成分

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

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 LaSn_3 にもあるもの
で、f 成分には Peak
がみられる。

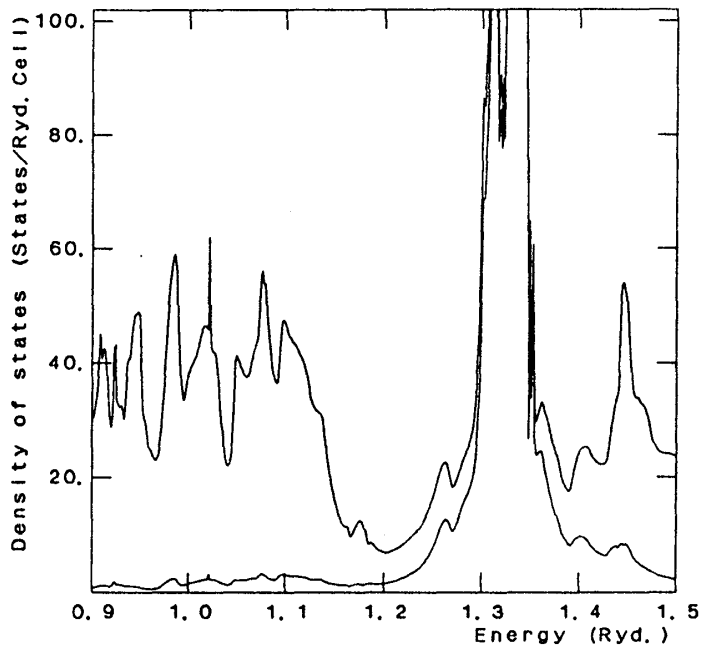


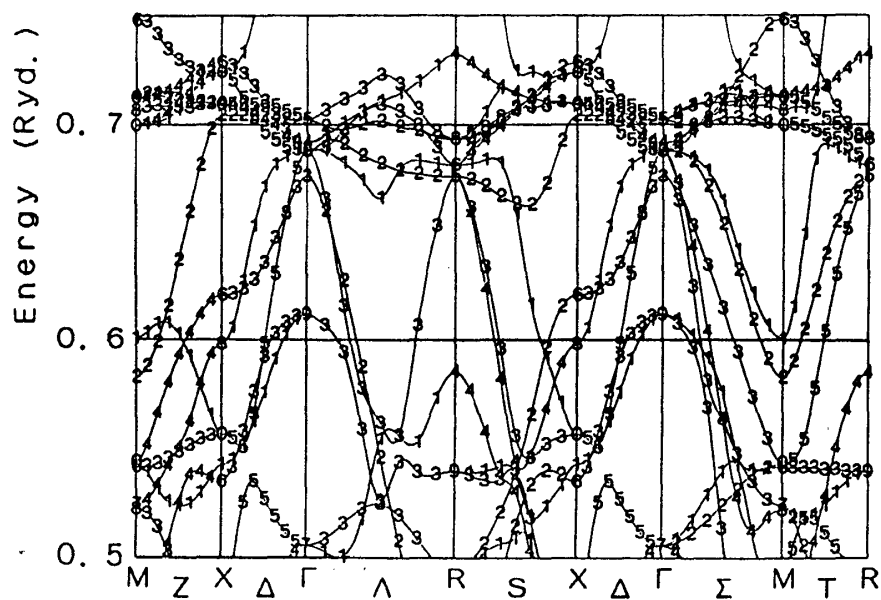
fig. 4 CeB₆の状態密度

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, 5p 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。