

CeNiSn の電子構造

柳澤 淳一

金属間化合物 CeNiSn は、 $Pnma$ の空間群を持つ。この化合物は価数揺動系であり⁽¹⁾、また、電気抵抗の温度変化にアクチベーション型の変化が見られることから、フェルミ・レベルの近くに小さなエネルギー・ギャップを持つことが予測されている⁽²⁾。本研究では、この化合物の電子状態の計算を行い、実験との対応について調べる。計算には局所密度近似を用い、結晶のポテンシャルにはマフィン・ティン近似を行う。

最初に、スピン-軌道相互作用以外の相対論的な効果もとりに入れた線形 APW 法を用いてこの化合物のエネルギー・バンドを計算した。その結果、フェルミ・レベルで三枚のバンドの重なりが見られた。これらのバンドの重なりは、スピン-軌道相互作用のエネルギーの程度である。また、結晶の対称性も考慮に入れると、この化合物がエネルギー・ギャップを持つ可能性があることがわかったので、この相互作用を考慮して議論することが必要になってくる。そこで、現在得られているスピン-軌道相互作用もとりに入れてない場合の固有値と固有関数とを用いて、この相互作用を摂動的にとり入れることを試みた。

計算の結果、スピン-軌道相互作用によって分裂すべき準位の分裂は見られたが、それらの分裂の幅も含めて、エネルギーの変化は多くても数 mRyd. 程度にしかならなかった。そのため、バンド構造にはあまり大きな変化を与えない。これらの値は、たとえば $CePd_3$ のスピン-軌道相互作用を含めたバンド計算で報告されている⁽³⁾ Ce の 4f バンドの分裂の幅が約 20 mRyd. であるのに比べ、不自然に小さいように思われる。作成した計算機のプログラムには今のところまちがいはみつかっていないが、すでに結果のわかっている上記の $CePd_3$ について同じ計算をするなどしてチェックし、再検討することが今後の課題である。

(1) R. V. Skolozdra, O. É. Koretskaya and Yu. K. Gorelenko : *Inorganic Materials* 20 (1984) 604.

(2) T. Takabatake, Y. Nakazawa and M. Ishikawa : *Jpn. J. Appl. Phys.* 26 (1987) Suppl. 26-3, p. 547.

(3) A. Hasegawa and A. Yanase : *J. Phys. Soc. Jpn.* 56 (1987) 3990.