

7. LAPW 法による CsCl 構造の LaAg および CeAg のバンド計算

藤 原 博 之

Ce 化合物をはじめ f 電子を持つ系では、通常の金属と違うさまざまな特性が報告されている。その一つに、電子比熱係数 γ が非常に大きくなるということがあげられる。この γ により求めた電子の有効質量は、自由電子の質量の $10^2 \sim 10^3$ 倍になるような物質も知られている。

今回、我々は希土類と銀の合金である CeAg と、また、比較のために自由原子の状態で 4f 電子をもたない LaAg についてバンド計算を試みた。一般に希土類と銀の合金は室温で CsCl 構造をとることが知られている。しかし、低温(約 15 K)で両者とも構造相転移をおこし、立方晶から対称性の低い正方晶になる。また、CeAg はさらに低温(5.5 K)で強磁性転移をおこす。本研究では、求めたバンド構造と実験との対応を調べた。

計算は LAPW 法をもちい、局所密度近似のもとで行なった。ポテンシャルはマフィンティン近似を用いた。まず、LaAg のバンド構造を求めた。この結果は、すでに発表されているものとほぼ同じ結果であるが、我々は 4f レベルまで考慮に入れた結果、 Γ 点で二重縮退している d バンドがフェルミレベルよりも高くなった。これは、リジット・バンドの近似においては、 $\text{LaAg}_{1-x}\text{In}_x$ の構造相転移温度の X 依存性を良く説明する。つぎに CeAg のバンドを求めた。この結果、 Γ 点で d バンドは f バンドの上に来てしまい $\text{CeAg}_{1-x}\text{In}_x$ の相転移を説明できない。よって、この系では、1 電子ポテンシャルで近似できない、f 電子と伝導電子の相互作用が重要な役割を果たしているものと思われる。

○関西学院大学大学院理学研究科物理学専攻

- | | |
|--|-------|
| 1. SbSI の相転移に関する研究 | 根来 陽一 |
| 2. AlAs 上の NiAl 単結晶薄膜の MBE 成長 | 湯田 真次 |
| 3. CdTe-ZnTe 混晶系の物性 | 小柴 隆志 |
| 4. 蛋白質の構造要素 $\beta \alpha \beta$ の特徴
ーアミノ酸側鎖の排除体積の効果についてー | 山田 逸樹 |
| 5. 部分ペプチド鎖の二次構造形成能と蛋白質の折りたたみ反応 | 藤原 啓郎 |