

p-19

Ce 化合物の電子構造とフェルミ面

新潟大学大学院自然科学研究科 眞榮平孝裕

希土類（原子番号 57 の La から始まる 15 の元素）化合物の中には「強相関伝導系」と呼ばれる物質群があり、重い電子系、価数揺動系、複雑な磁気秩序、異方的超伝導など、とても特異で多彩な物性を示します。そのため研究者の興味も高く、世界的にも盛んに研究されています。そのような異常物性の起源が、4f 電子を中心とした強い電子間相互作用によることは明らかです。そこで、起源解明においてもっとも基本となる物質、Ce 化合物についての研究が、早急かつ重要な課題となります。そしてその解明には、バンド理論の果たす基礎的役割が大きく期待されます。しかし、結晶内電子の多体効果を忠実に定式化することは容易なことではありません。そこで多体効果に対しては単純化した近似として、局所密度近似を基礎とする相対論的バンド理論を用いて、Ce 化合物の電子構造を定量的に計算しています。

さて、金属の最も重要な特徴の一つにフェルミ面と呼ばれるものがあります。フェルミ面は、結晶構造と電子密度の違いに従って、それぞれ独特なフェルミ面をもっています。金属の特性である電気や熱などの高い伝導度、金属的光沢（光の反射）等に見られる金属の輸送的性質や光学的性質は、フェルミ面の形状や大きさに支配されています。従って、フェルミ面を決定することは金属の電子物性を理解する上で極めて重要なこととなります。

さて、これらの化合物の電子状態（フェルミ面）を調べるための強力な実験手段の1つとして、de Haas-van Alphen(dHvA)効果の測定があります。ここでバンド理論との対応ですが、これまでの研究結果により、dHvA 効果の実験結果は、電子間相互作用に強く依存するサイクロトロン有効質量の大きさを別にすれば、バンド理論の枠内で合理的にうまく説明されることが明らかにされています。つまり、フェルミ面の形状に関して、バンド理論が十分有効であることを意味しています。

そこで今回の発表では、いくつかの Ce 化合物の電子構造と、フェルミ面における極値断面積の詳細な解析結果を発表します。また、その結果から dHvA 効果による実験結果の説明を行います。以下に今回発表する物質名と、内容を示します。

(1) α -Ce の電子構造とフェルミ面。

Ce は温度と圧力の状態により、反強磁性、超伝導など様々な物性を示し、その相図は少なくとも 5 相の存在が知られています[1]。電子比熱係数は $12.8\text{mJ/K}^2\text{mol}$ であり、価数揺動系に属します。バンド計算により導いたフェルミ面と、今後行われる dHvA 効果の実験に対する示唆を報告します。

(2) CeSn_3 の電子構造とフェルミ面。

この物質は価数揺動系に属し、磁気秩序はありません。低温における電子比熱係数は $53\text{mJ/K}^2\text{mol}$ であり、アルカリ金属の約 25 倍もあります。その電子構造とフェルミ面、また dHvA 効果の起源の説明を行います。

ここで、エネルギーバンド構造の計算は、相対論的線形化 Augmented Plane Wave(APW)法[2,3]、遍歴電子モデル、局所密度近似(LDA)に基づく交換・相関ポテンシャル、マフィンティン近似に基づいて定量的に行われています。

これらの研究は、樋口雅彦助手（東北大理）、長谷川彰教授（新潟大理）との共同で行われました。

[1] K. A. Gschneidner Jr. And L. Eyring: in *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*, Vol. 1, eds D. C. Koskenmaki and K. A. Gschneidner Jr. (North-Holland, Amsterdam, 1978) Chapt. 4, p.341.

[2] M. Higuchi and A. Hasegawa: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 830.

[3] T. Takeda: J. Phys. F: Metal Phys. **9** (1979) 661.