

# 琉球大学学術リポジトリ

## EuX<sub>2</sub>(X=Rh, Ir)の電子構造とフェルミ面

メタデータ	言語: 出版者: 琉球大学理学部 公開日: 2015-04-17 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 渡部, 紘幸, 立津, 慶幸, 眞榮平, 孝裕, Watanabe, Hiroyuki, Tatetsu, Yasutomi, Maehira, Takahiro メールアドレス: 所属:
URL	<a href="http://hdl.handle.net/20.500.12000/30736">http://hdl.handle.net/20.500.12000/30736</a>

# EuX<sub>2</sub>(X=Rh, Ir) の電子構造とフェルミ面

渡部紘幸<sup>1\*</sup>, 立津慶幸<sup>2</sup>, 眞榮平孝裕<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 琉球大学理学部物質地球科学科物理系, <sup>2</sup> 東京大学 大学院理学研究科 物理学専攻

## Electronic structure and Fermi surface of EuX<sub>2</sub>(X=Rh, Ir)

Hiroyuki Watanabe<sup>1\*</sup>, Yasutomi Tatetsu<sup>2</sup>, Takahiro Maehira<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics and Earth Sciences, Faculty of Science, University of the Ryukyus, Nishihara, Okinawa 903-0213, Japan

<sup>2</sup>Department of Physics, Graduate School of Science, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan

### Abstract

We investigated the electronic structures of EuX<sub>2</sub> (X=Rh and Ir) by using the relativistic linear augmented-plane-wave (RLAPW) method with the exchange-correlation potential in the local density approximation. All 4*f* electrons in Eu were assumed to be itinerant, which means that these 4*f* electrons are treated as valence electrons, and the calculation was performed in the paramagnetic phase. Note here that relativity should be taken into account, because of the large atomic numbers of the constituent atoms. We found that the energy bands near the Fermi level are mainly because of the hybridization between the Eu 4*f* and X *d* electrons. These compounds are compensated metals because of having two chemical units in the unit cell. The Fermi surface of EuRh<sub>2</sub> is found to consist of two hole sheets and two electron sheets. The Fermi surface produces many de Haas-van Alphen frequencies in the wide frequency range between 1 MOe and 300 MOe. In addition, we calculated LaRh<sub>2</sub> and LaIr<sub>2</sub> that have the same number of valence electrons of EuRh<sub>2</sub> and EuIr<sub>2</sub>.

## 1 はじめに

希土類化合物は、*f* 電子と伝導電子との相互作用を通して発生する近藤効果と RKKY(Rudermann, Kittel, Kasuya, Yosida) 相互作用の微妙なバランスによって異方的超伝導、複雑な磁気秩序や重い電子系など興味深い物性を示す。希土類化合物の中で、Ce, Sm, Eu, Yb などの原子が含まれる場合、電子を化合物のもう一方の原子に供給して 2 価 (電子 2 個の供給) の状態や 3 価 (電子 3 個の供給) の状態をとることがある。例えば、Eu では 3 価の状態 (Eu<sup>3+</sup>) では 4*f* 軌道に電子が 6 個存在する。ところが Eu の場合、伝導電子から 1 つ 4*f* 軌道に電子が入った 2 価 (4*f* 電子が 7 個) となる場合

(Eu<sup>2+</sup>) も存在する。さらに面白いことに、価数が時間的・空間的に揺動して、2 価と 3 価の中間の値をとるような化合物もあり、これを価数揺動と呼び、特異な物性を示すことから長い研究の歴史がある。

Eu 系の価数揺動の特徴は、価数が強く温度依存することである。Eu<sup>2+</sup> が 7 $\mu_B$  の磁気モーメント ( $J = L - S = 7/2$ ) をもつものに対して、Eu<sup>3+</sup> は非磁性 ( $J = L - S = 0$ ) であり、価数揺動を調べるのによい物質である。ここで *J*, *L*, *S* は全角運動量、軌道角運動量、スピン角運動量である。絶対零度ではエントロピーをゼロにするため、Eu の価数は 3 価に近づく。この価数の温度変化が一次転

\*E-mail: watanabe@phys.u-ryukyu.ac.jp

移的に起こるとき、これを価数転移という。このような価数転移は温度以外に圧力や磁場によっても生じる。価数転移は2種類の価数状態が時間的・空間的に変動している状態から、一方への価数状態への転移であるが、2種類の価数状態が低温で空間的に秩序して、規則的に並ぶことによりエントロピーを下げることがある。これは3*d*電子系では電荷秩序としてよく知られる現象である。3*d*電子系の場合電荷秩序が起こると電子は局在化するので、系は絶縁体になる。これに対して4*f*電子系では、もともと伝導バンドにも多くの電子が存在しているので、価数が秩序化しても金属にとどまっている。

金属の物性は価電子が担っており、価数の変化は物性に大きく影響を与えるため、原子価状態は電子構造を理解するにあたりとても重要である。多くのEu化合物はEuの価数が2価で安定となり、低温で磁気秩序化する。3価のEu化合物に関するフェルミ面の報告は、EuPd<sub>3</sub>のみである [1]。今回、メスバウアーの実験 [2,3] からEuが3価であると報告されているEuRh<sub>2</sub>とEuIr<sub>2</sub>について、そのフェルミ面を理論的な立場から明らかにした。EuRh<sub>2</sub>は、水素吸着によりEuの価数が3価から2価に変化する報告があり [4]、その際、結晶構造は変わらないが体積が40%増加する。PdやThは水素を吸蔵することにより半導体や超伝導体に転移することや、金属中の水素が超伝導臨界温度を上昇させることが知られている。水素吸蔵合金は、水素を高密度に貯蔵・輸送する物質として盛んに研究が行われており、燃料電池車などに応用される。一方、EuIr<sub>2</sub>は、 $T_c=0.2$  Kで超伝導転移を示すことが報告されている [5]。また、参照物質として、同じ結晶構造を持ち、価電子数が3価のEu化合物と等しいLaRh<sub>2</sub>、LaIr<sub>2</sub>の計算を行った。超伝導転移温度は、それぞれLaRh<sub>2</sub>は $T_c=1.67$  K、LaIr<sub>2</sub>は $T_c=0.48$  Kを示すことが報告されている [6,5]。LaRh<sub>2</sub>はde Haas van Alphen(dHvA)効果の測定がなされており、本研究では実験結果との比較も試みた [7]。

図1は、合成に成功したラーベス相構造をもつ、ReRh<sub>2</sub>とReIr<sub>2</sub>(Re:希土類元素)化合物群における格子定数を示す。縦軸が格子定数、横軸が各希土類元素(Re)を表している。ReRh<sub>2</sub>とReIr<sub>2</sub>の格子定数は、CeとEuを除けば原子番号と反比例の関係にあることがわかる。一般に、希土類元素のイ

オン半径はランタニド収縮のため小さくなるため、格子定数は原子番号の増加とともに減少するが、Ce, Eu, Ybのところで異常が見られる。ReRh<sub>2</sub>とReIr<sub>2</sub>についても、同様の関係があると思われる。通常の希土類元素は+3価であるが、Ceは+3価、+4価を、Euは+2価を、Ybは+2価、+3価を取りやすい。それ故、格子定数の異常は希土類元素の酸化状態と密接に関係している。そのため、希土類化合物群における価数の問題を明らかにするために、今回、EuRh<sub>2</sub>とEuIr<sub>2</sub>の電子構造とフェルミ面を理論的な立場から解析を行った。

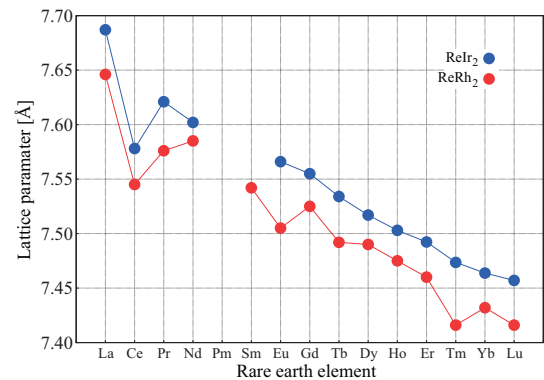


図1: 各希土類元素と格子定数の関係。青色がReIr<sub>2</sub>、赤色がReRh<sub>2</sub>を表す。ここで、Reは希土類元素 [8]。

## 2 計算方法

一般に、希土類化合物のバンド計算では相対論的效果が重要になる。電子の速度を $v$ 、光速を $c$ とすると、水素原子においては $v/c=1/137$ であり、これは無視できるくらい小さい。しかし、原子番号 $Z$ の原子になると、最内殻の電子でその比は $v/c=Z/137$ になる。 $Z=58$ のCeであれば電子の速度は光速の42%となり、これは無視できない大きさとなる。そのような場合の相対論的效果には、エネルギーシフト、遮蔽効果、スピン・軌道相互作用などがある。非相対論的バンド計算にスピン・軌道相互作用を摂動論的に考慮する方法もあるが、これはスピン・軌道相互作用をパラメーターとして与えることになり、第一原理計算ではないという点で不満が残る。そこで本研究では、Dirac方程式に基づく相対論的バンド計算を行う。これにより、スピン・軌道相互作用も含めた相対論的效果が正しく考慮される。バンド計算部分には線形化

された増強平面波法を適用し、交換・相関効果は局所密度近似 (LDA) の範囲で考慮され、1 電子ポテンシャルはマフィン・ティン近似によって決定される。

EuX<sub>2</sub> (X=Rh and Ir) の結晶構造は MgCu<sub>2</sub> ラーベス相構造で空間群は  $Fd\bar{3}m$  である。図 2 と図 3 に、その結晶構造とエネルギー空間での既約 Brillouin 域をそれぞれ示す。また、参照物質の LaX<sub>2</sub> (X=Rh and Ir) も同様の構造をとる。各元素の電子配置を表 1 に示す。ここで [Kr] と [Xe] は、クリプトンとキセノンの電子配置をそれぞれ表す。

各物質の格子定数は、EuRh<sub>2</sub> が 7.505 Å [10], EuIr<sub>2</sub> が 7.566 Å [11], LaRh<sub>2</sub> が 7.646 Å [12], LaIr<sub>2</sub> が 7.687 Å [13] である。この物質群はラーベス相構造をとるため、1つのユニットセル内には 2 分子が含まれている。

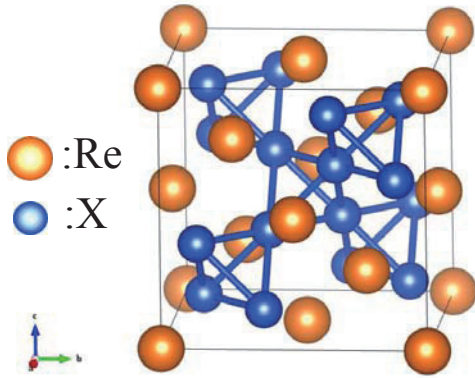


図 2: C15 型 ラーベス相構造. Re は Eu と La, X は Rh と Ir を表している。

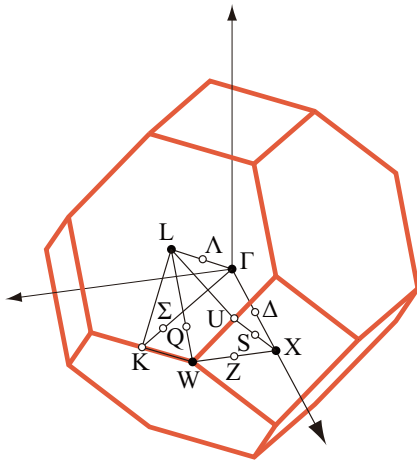


図 3: 既約 Brillouin 域の対称点・対称軸

表 1: 各元素の電子配置. ここで,  $Z$  は原子番号, [Kr] と [Xe] は, クリプトンとキセノンの電子配置をそれぞれ表す。

Atomic number	Rh ( $Z=45$ )	La ( $Z=57$ )	Eu ( $Z=63$ )	Ir ( $Z=77$ )
Electron configuration	[Kr] $4d^8 5s$	[Xe] $5d 6s^2$	[Xe] $4f^7 6s^2$	[Xe] $5d^9$

### 3 計算結果

図 4(a)~(d) に、理論的に導かれた EuRh<sub>2</sub>, EuIr<sub>2</sub>, LaRh<sub>2</sub>, LaIr<sub>2</sub> のエネルギーバンド図を示す。バンド図中の縦軸はエネルギー、横軸は既約 Brillouin 域の対称点と対称軸である。フェルミレベル  $E_F$  は 0.0 Ry で揃えている。なお、1 Ry は 13.6 eV である。各バンドの色は、Rh の  $4d$  電子, Ir の  $5d$  電子の電子成分の割合を示しており、成分が増加するに従い青色から赤色に変化する。4 物質とも Rh と Ir の  $d$  電子成分がフェルミレベル近傍に幅広く存在していることが分かる。図 4(a)EuRh<sub>2</sub> と (b)EuIr<sub>2</sub> は,  $E_F$  近傍に大きく 2 つのグループに分裂したフラットなバンドが存在する。これはスピン・軌道相互作用により Eu の  $4f$  電子成分が  $j=5/2$  と  $j=7/2$  に分裂したものである。(c), (d) から LaRh<sub>2</sub> と LaIr<sub>2</sub> の  $E_F$  を横切るバンドは Rh, Ir の  $d$  的なバンドであることが分かる。4 物質を比較すると、全体的なバンドの形状は Eu の  $4f$  電子によるフラットなバンドを除けばよく似ている。このことから、フェルミ面の形状は  $d$  電子成分が主に形成していることを示唆している。図 5 は, EuRh<sub>2</sub> と EuIr<sub>2</sub> に対するフェルミレベル  $E_F$  近傍を拡大した図である。各バンドの色は, Eu の  $4f$  電子の電子成分の割合を示しており,  $E_F$  を横切るバンドは緑色であることから,  $f$  電子と  $d$  電子がよく混成していることが分かる。図 6(a)~(d) に EuRh<sub>2</sub>, EuIr<sub>2</sub>, LaRh<sub>2</sub>, LaIr<sub>2</sub> の状態密度を示す。エネルギーはフェルミレベル  $E_F$  を基準に 0.0 Ry で揃えている。(a), (b) の  $E_F$  近傍に Eu の  $4f$  電子を起源とする, スピン・軌道相互作用により大きく 2 つのグループに分裂したピークが存在する。EuRh<sub>2</sub>, EuIr<sub>2</sub> は,  $E_F$  上において Eu の  $4f$  電子成分の状態密度が最も多く存在し, LaRh<sub>2</sub> は Rh の  $4d$  電子, LaIr<sub>2</sub> は Ir の  $5d$  電子が多く存在している。 $E_F$  での状態密度  $D(E_F)$  はそれぞれ, 104.71, 71.02, 33.98, 27.95 States/cell Ry を示し, 電子比熱係数の理論値はそれぞれ,  $\gamma_{\text{band}}=9.07, 6.15, 2.94,$

2.42 mJ/K<sup>2</sup>·mol となる。また、LaRh<sub>2</sub> は実験での電子比熱係数が  $\gamma_{\text{exp}}=3.7$  mJ/K<sup>2</sup>·mol であると報告されており [14], 多体効果の大きさを表す質量増強因子は、 $\lambda = \gamma_{\text{exp}}/\gamma_{\text{band}} - 1 = 0.26$  となる。

図 4 中、 $E_F$  を横切るバンドの本数はフェルミ面の枚数と対応しており、EuRh<sub>2</sub> が下から数えて 25~28 番目の 4 本、EuIr<sub>2</sub> が 27, 28 番目の 2 本、LaRh<sub>2</sub> が 20~22 番目の 3 本、LaIr<sub>2</sub> が 21, 22 番目の 2 本である。図 7 は、相対論的バンド計算により導かれた EuRh<sub>2</sub> フェルミ面である。図 7(a) の band 25 のフェルミ面は、 $\Lambda$  軸上の小さなホール面である。図 7(b), (c) は band 26, 27 から形成されるホール面で、少し歪んだ球状をしている。図 7(b) は、 $\Gamma$  点を中心に中空になっている。図 7(c) は、band 28 の電子面で、X 点を中心に  $\Gamma$  点に向かって突起がある形状をしており、W 点で隣の Brillouin 域と連結している。〈100〉軸方向に開軌道は存在しない。キャリアー数は、ホール面と電子面で等しく補償された金属である。

図 8 は EuIr<sub>2</sub> のフェルミ面で、(a)band 27 のホール面は、Brillouin 域と同じ 14 面体形状で 〈100〉軸方向にくぼんだ形状をしている。図 8(b) は、band 28 から形成される連結した電子面と L 点を中心とした細い葉巻状のフェルミ面が存在する。〈100〉軸方向のフェルミ面の連結が細いため理論の立場からは開軌道は存在しないが、連結が太くなれば開軌道が存在する可能性はある。キャリアー数は、ホール面と電子面で等しく補償された金属である。

図 9 は LaRh<sub>2</sub> のフェルミ面で、(a)band 20 のホール面は、〈100〉軸方向に窓の開いた形状で、(b)band 21 は歪んだ球状のホール面、(c)band 22 は W 点で連結した電子面である。ゾーンからゾーンへ連結しているため 〈100〉軸方向に開軌道の可能性があるが、解析結果からは存在しない。キャリアー数は、ホール面と電子面で等しく補償された金属である。

図 10 に LaIr<sub>2</sub> のフェルミ面を示す。LaIr<sub>2</sub> のフェルミ面は、図 8 の EuIr<sub>2</sub> のフェルミ面とよく似ていて、(a)band 21 のホール面は、Brillouin 域と同じ 14 面体形状で 〈100〉軸方向にくぼんだ形状をしている。(b)band 22 の電子面は W 点で連結した連結した電子面である。〈100〉軸方向に開軌道が存在しないが、W 点での連結が細いため微妙である。キャリアー数は、ホール面と電子面で等しく補償された金属である。

フェルミ面の体積を表す、Brillouin 域内でのキャリアー数を表 2 に示す。理論計算の結果から、各物質のキャリアー数についてホール面と電子面の和が一致しており、これらの物質は補償された金属である。

4 物質のフェルミ面を比べると非常によく似た形状をしていることが分かる。これは、バンド図のところでもコメントしたように、フェルミレベル近傍には多くの *d* 電子成分が存在しフェルミ面の大まかな形状を形成してしまう。Eu の *f* 電子成分が存在する場合でも、大きなスピン・軌道相互作用により軌道分裂した中間をフェルミレベルが通るため、フェルミ面の基本的な形状は *d* 電子成分が決めてしまうことに起因する。Eu の *f* 電子成分は、*d* 電子成分で形成されたフェルミ面上に薄く覆い被さるような分布する。

図 11, 図 12 に EuX<sub>2</sub> と LaX<sub>2</sub> の dHvA 効果の解析結果をそれぞれ示す。各ブランチの起源を右のフェルミ面上に描いている。4 つの物質に共通するブランチは、3 種類ある。1 つめは、EuX<sub>2</sub> の band 27, LaX<sub>2</sub> の band 21 の  $\Gamma$  点中心の球状のフェルミ面で、振動数が  $4\sim 6 \times 10^7$  Oe 付近につながったブランチ (青いライン)。2 つめは、連結したフェルミ面の  $\Gamma$  点中心が起源の振動数が  $10 \times 10^7$  Oe より大きい 〈100〉軸方向に存在するブランチで、角度が数度ずれると見えなくなってしまう。3 つめは、連結したフェルミ面の連結部分 (W 点) が起源の 〈100〉を中心とした下向きに弧を描くようなブランチである。また、特徴的なブランチは、EuRh<sub>2</sub>, LaRh<sub>2</sub> のように連結したフェルミ面の連結部分が大きいと 〈100〉方向以外にも振動数が  $10 \times 10^7$  Oe より大きいブランチ (EuRh<sub>2</sub> における j, k, LaRh<sub>2</sub> における m, n) が存在し、下向きに弧を描くようなブランチが 〈100〉から 〈110〉に向かう途中で途切れることである。LaRh<sub>2</sub> については、dHvA 振動の実験結果が報告されており、今回行った理論解析の結果、実験により得られた dHvA 振動を合理的に説明することができる。

理論的に導かれた各物質の有効質量を表 3~6 に示す。連結しているフェルミ面の  $\Gamma$  点中心の大きなブランチのように、複雑な形状をしているブランチは有効質量も重くなっている。

## 4 まとめ

Eu が+3 価の状態として, EuRh<sub>2</sub>, EuIr<sub>2</sub> の電子構造を相対論的バンド計算法により明らかにした. EuRh<sub>2</sub> と EuIr<sub>2</sub> のバンド図から  $E_F$  近傍に 4f 電子によるフラットなバンドが存在し,  $E_F$  を横切るバンドは, Eu の 4f 電子と Rh, Ir の d 電子がよく混成していた. 参照物質である LaRh<sub>2</sub> と LaIr<sub>2</sub> の  $E_F$  を横切るバンドは, Rh, Ir の d 的なバンドであることがわかった.  $E_F$  近傍のバンド構造は 4 物質ともよく似ていることを確認した. また, 状態密度から EuRh<sub>2</sub> と EuIr<sub>2</sub> の  $E_F$  近傍に Eu の 4f 電子からくる大きなピークが存在し,  $E_F$  には Eu の 4f 電子, LaRh<sub>2</sub> と LaIr<sub>2</sub> の  $E_F$  には, Rh, Ir の d 電子が多く存在していることを確認した. 電子比熱係数  $\gamma_{\text{band}}$  は EuRh<sub>2</sub> と EuIr<sub>2</sub> がそれぞれ 9.07, 6.15 mJ/K<sup>2</sup>·mol と通常金属よりは少し大きな値を示し, LaRh<sub>2</sub> と LaIr<sub>2</sub> は 2.94, 2.42 mJ/K<sup>2</sup>·mol と通常金属程度の大きさであった. Rh と Ir の価電子の成分は Rh は 4d<sup>8</sup> 5s, Ir は 5d<sup>9</sup> と異なるがフェルミ面の形状はよく似ており, 4 物質ともに連結したフェルミ面が存在していることを確認した.

本研究の解析結果が正しいかどうかは, 今後の実験結果が待たれる. 今後, 行われる実験の参考になれば幸いである.

## 参考文献

- [1] A. Nakamura, T. Takeuchi, H. Harima, M. Hedo, T. Nakama, and Y. Ōnuki : Journal of the Physical Society of Japan 83, 053708 (2014).
- [2] E. R. Bauminger, I. Felner, D. Froindlich, D. Levron, I. Nowik, S. Ofer and R. Yanovsky : J. Phys. Colloques 35 , C6-61-C6-70 (1974).
- [3] J. W. C. De Vries, R. C. Thiel and K. H. J. Buschow : Physica 124B 291-298 (1984).
- [4] K. H. J. Buschow, R. L. Cohen and K. W. West : J. Appl. Phys., Vol. 48, No. 12 (1977).
- [5] B. T. Matthias, Z. Fisk, J. L. Smith, Phys. Lett. A 72, 257 (1979).
- [6] S. Pauline, R. Asokamani, G. Subramoniam and S. Mathi Jaya : Solid State Communications, Vol. 83, No. 3, pp.235-240 (1992).
- [7] H. Sugawara, N. Nagai, K. A. Albessard, T. Yamazaki, J. Itoh, K. Satoh and Y. Ōnuki : Physica B 186-188 162-164 (1993).
- [8] 渡部紘幸 : 修士論文 (2015).
- [9] K. A. Gschneidner, R. Boom and F. R. De Boer : J. Less-Common Met., 41 283 (1975).
- [10] A. Iandelli and A. Palenzona : Rev. Chim. Miner., 20, 449-455 (1983).
- [11] K. H. J. Buschow : Rep. Prog. Phys., Vol. 42, pp.1373 (1979).
- [12] S. Pauline, R. Asokamani, G. Subramoniam and S. Mathi Jaya : State Communication, Vol.83, No.3, pp.235 (1992).
- [13] Z. Blazina, R. C. Mohanty, A. Raman : Z. Metallkd. : Vol. 80, 192-196 (1989).
- [14] M. Higuchi and A. Hasegawa : Journal of the Physical Society of Japan, Vol.63, No.8, 3014 (1994).

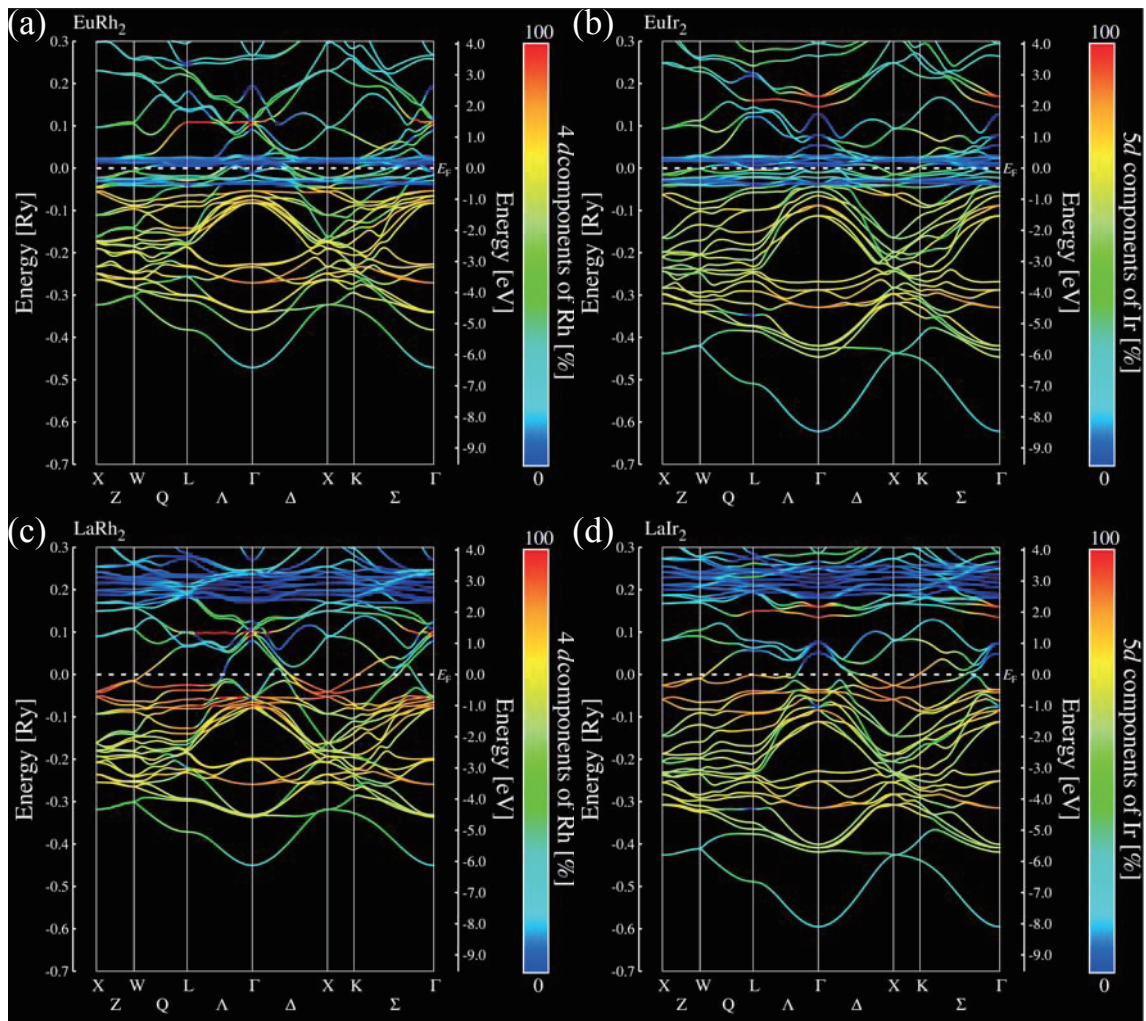


図 4: 相対論的バンド計算により導かれた  $\text{ReX}_2$  のバンド図. (a)~(d) は, それぞれ  $\text{EuRh}_2$ ,  $\text{EuIr}_2$ ,  $\text{LaRh}_2$ ,  $\text{LaIr}_2$  である. 縦軸はエネルギー, 横軸は既約 Brillouin 域の対称点・対称軸を表す. フェルミエネルギー  $E_F$  は点線, 縦軸のエネルギー範囲は  $-0.7 \sim 0.3 \text{ Ry}$  である. 各バンドの色は Rh の  $4d$  電子成分, Ir の  $5d$  電子成分の割合を表し, 成分が増加するに従い青色から赤色に変化する.

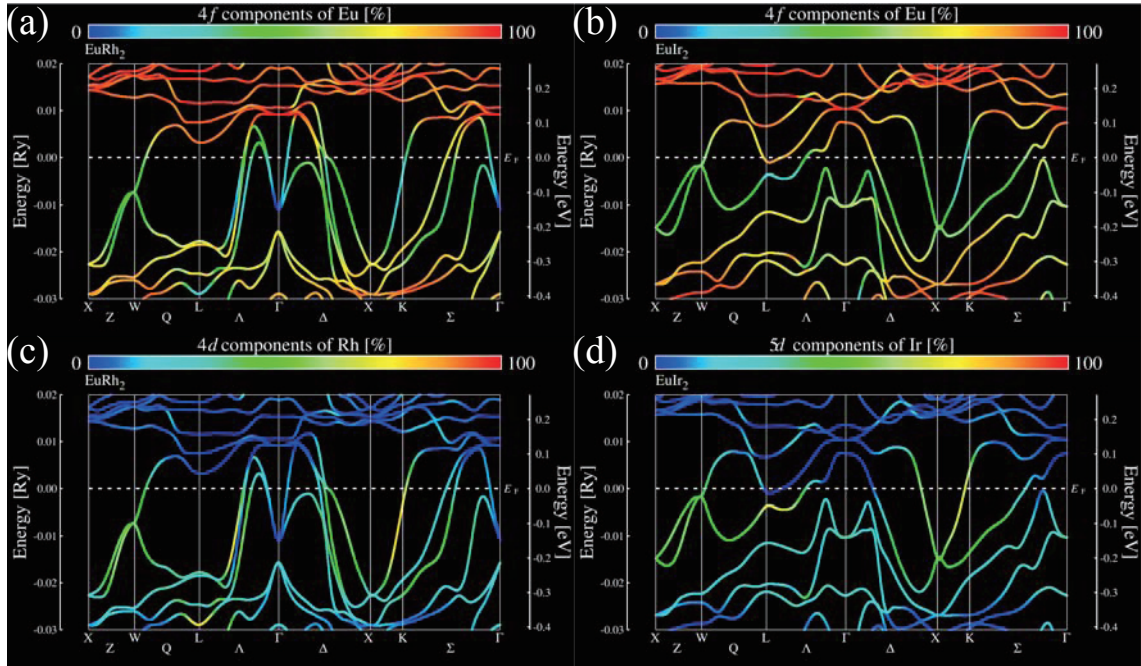


図 5: EuRh<sub>2</sub> と EuIr<sub>2</sub> に対するフェルミレベル近傍のバンド図で、縦軸はエネルギー、横軸は既約 Brillouin 域の対称点・対称軸を表す。フェルミレベル  $E_F$  は点線、縦軸のエネルギー範囲は  $-0.03 \sim 0.02 \text{ Ry}$  である。(a), (c) は EuRh<sub>2</sub>, (b), (d) は EuIr<sub>2</sub> である。バンドの色は (a), (b) が Eu の 4f 電子成分, (c), (d) が Rh, Ir の 4d, 5d 電子成分の割合を表す。各電子成分が増加するに従い青色から赤色に変化する。

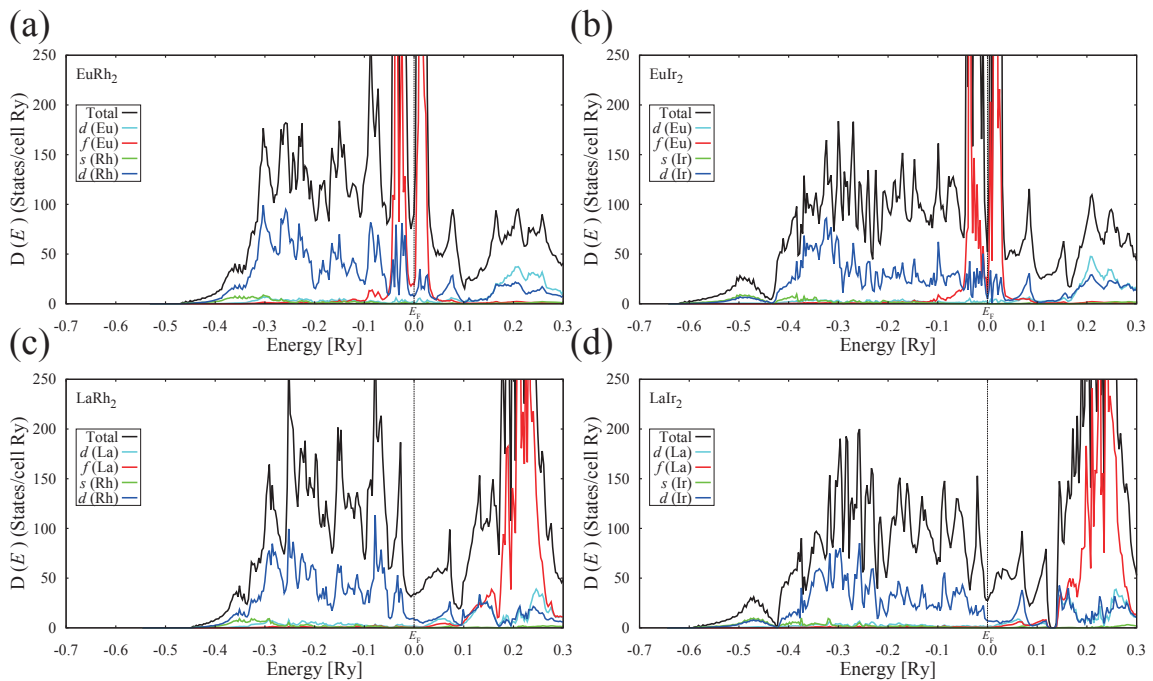


図 6: (a) EuRh<sub>2</sub>, (b) EuIr<sub>2</sub>, (c) LaRh<sub>2</sub>, (d) LaIr<sub>2</sub> の電子状態密度図。縦軸は状態密度、横軸はエネルギーで、エネルギー範囲は  $-0.7 \sim 0.3 \text{ Ry}$  である。黒線は全状態密度、それぞれの色は各電子成分ごとの状態密度を表す。なお、フェルミエネルギー  $E_F$  を  $0.0 \text{ Ry}$  で揃えている。



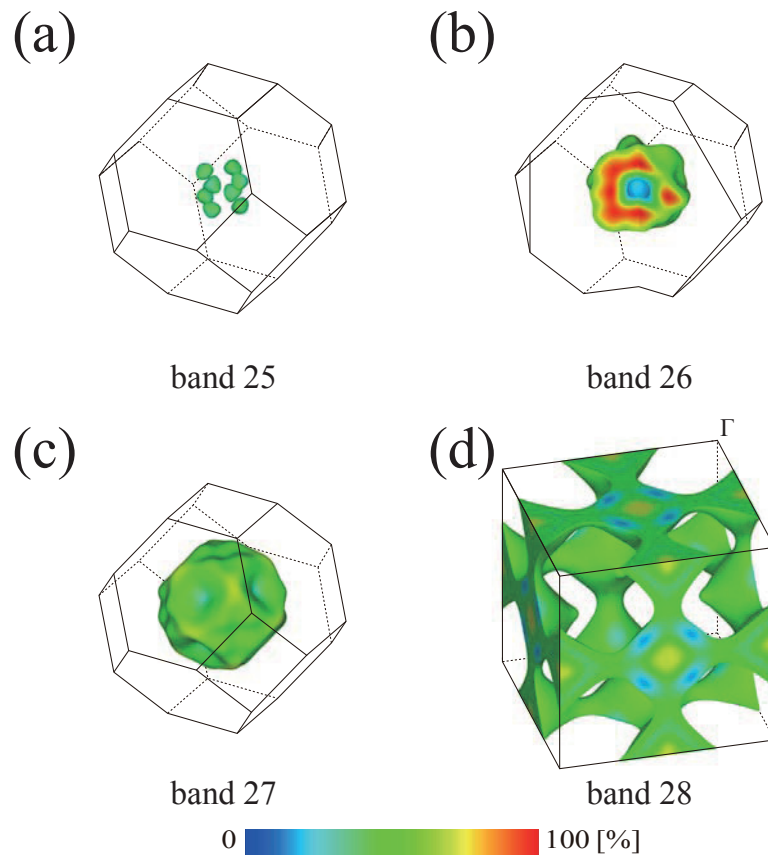


図 7:  $\text{EuRh}_2$  のフェルミ面. 中心点は  $\Gamma$  点である. (a), (b), (c) は band 25~27 によるホール面であり, (d) は band 28 による電子面である. (b) は Brillouin 域を  $3/8$  切り取っており, (d) は Brillouin 域を拡張して描画している. 色の違いは Eu の  $4f$  電子成分の割合を示している.

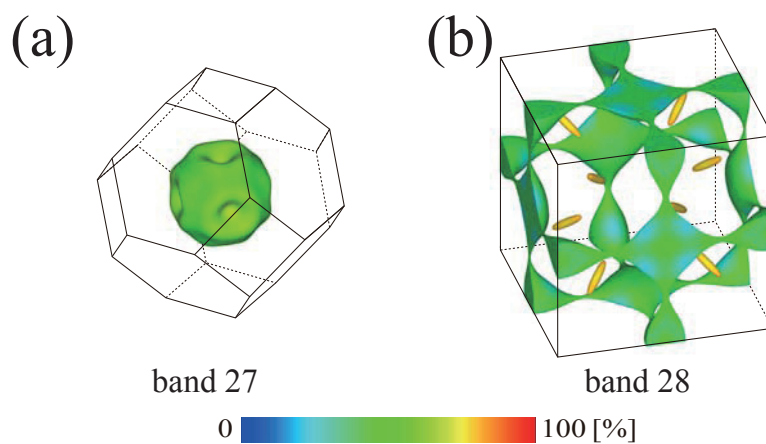


図 8:  $\text{EuIr}_2$  のフェルミ面. 中心点は  $\Gamma$  点である. (a) は band 27 によるホール面であり, (b) は band 28 による電子面である. (b) は Brillouin 域を拡張して描画している. 色の違いは Eu の  $4f$  電子成分の割合を示している.

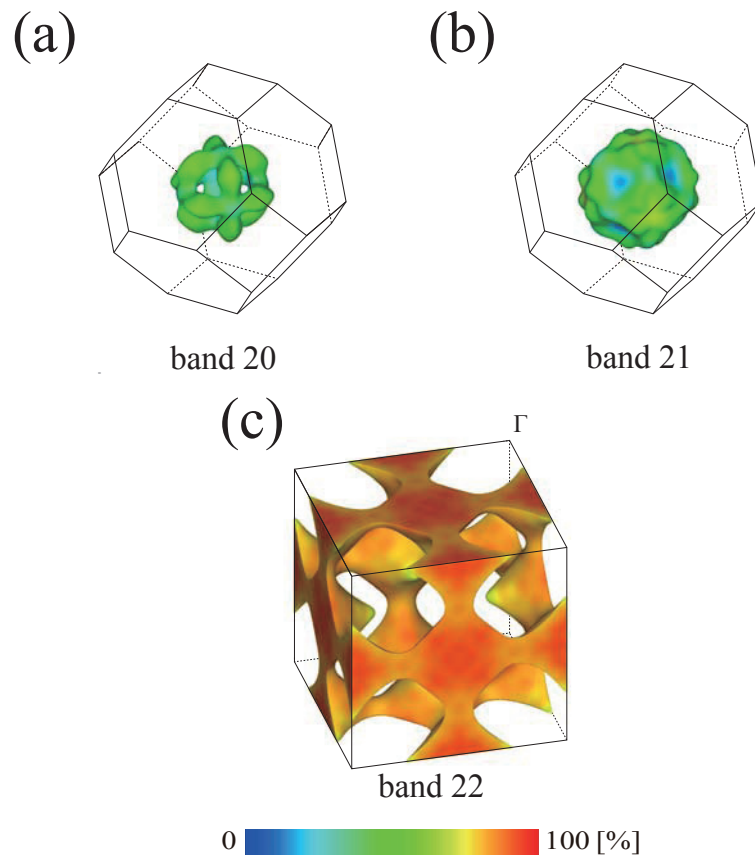


図 9: LaRh<sub>2</sub> のフェルミ面. 中心点は $\Gamma$ 点である. (a), (b) は band 20, 21 によるホール面であり, (c) は band 22 による電子面である. (c) は Brillouin 域を拡張して描画している. 色の違いは Rh の 4*d* 電子成分の割合を示している.

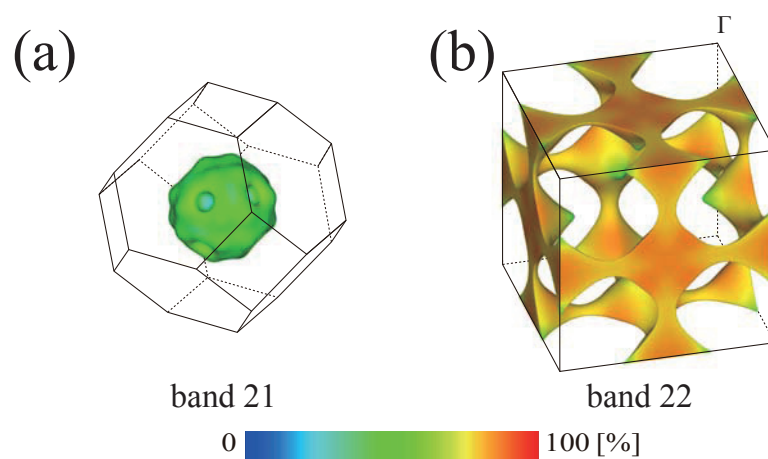


図 10: LaIr<sub>2</sub> のフェルミ面. 中心点は $\Gamma$ 点である. (a) は band 21 によるホール面, (b) は band 22 による電子面である. (b) は Brillouin 域を拡張して描画している. 色の違いは Ir の 5*f* 電子成分の割合を示している.

表 2:  $\text{EuRh}_2$ ,  $\text{EuIr}_2$ ,  $\text{LaRh}_2$ ,  $\text{LaIr}_2$  のキャリア数

band number	band 25	band 26	band 27	band 28
$\text{EuRh}_2$	0.01 holes/cell	0.10 holes/cell	0.24 holes/cell	0.35 electrons/cell
$\text{EuIr}_2$	-	-	0.12 holes/cell	0.12 electrons/cell
band number	band 20	band 21	band 22	
$\text{LaRh}_2$	-	0.05 holes/cell	0.21 holes/cell	0.26 electrons/cell
$\text{LaIr}_2$	-	-	0.15 holes/cell	0.15 electrons/cell

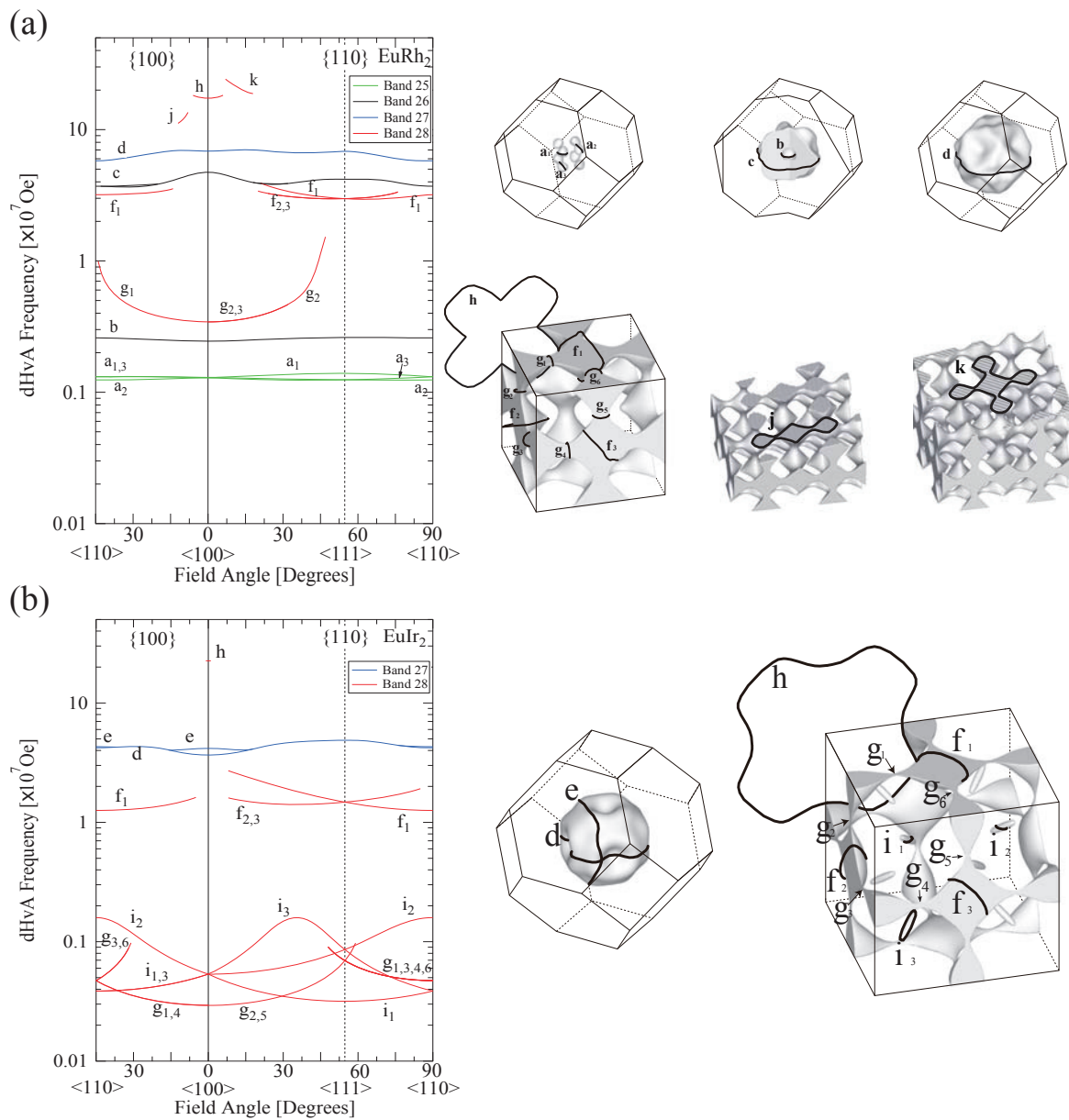


図 11: (a)  $\text{EuRh}_2$ , (b)  $\text{EuIr}_2$  に対する理論的に導いた dHvA 角度依存の図である。縦軸は印加磁場に対する振動数で極値断面積に対応し、横軸は磁場をかける対称性の高い方向を表す。縦軸は 0.01~50.0 Oe の対数スケールで表している。併せて、主要な極値をフェルミ面上に描画してある。

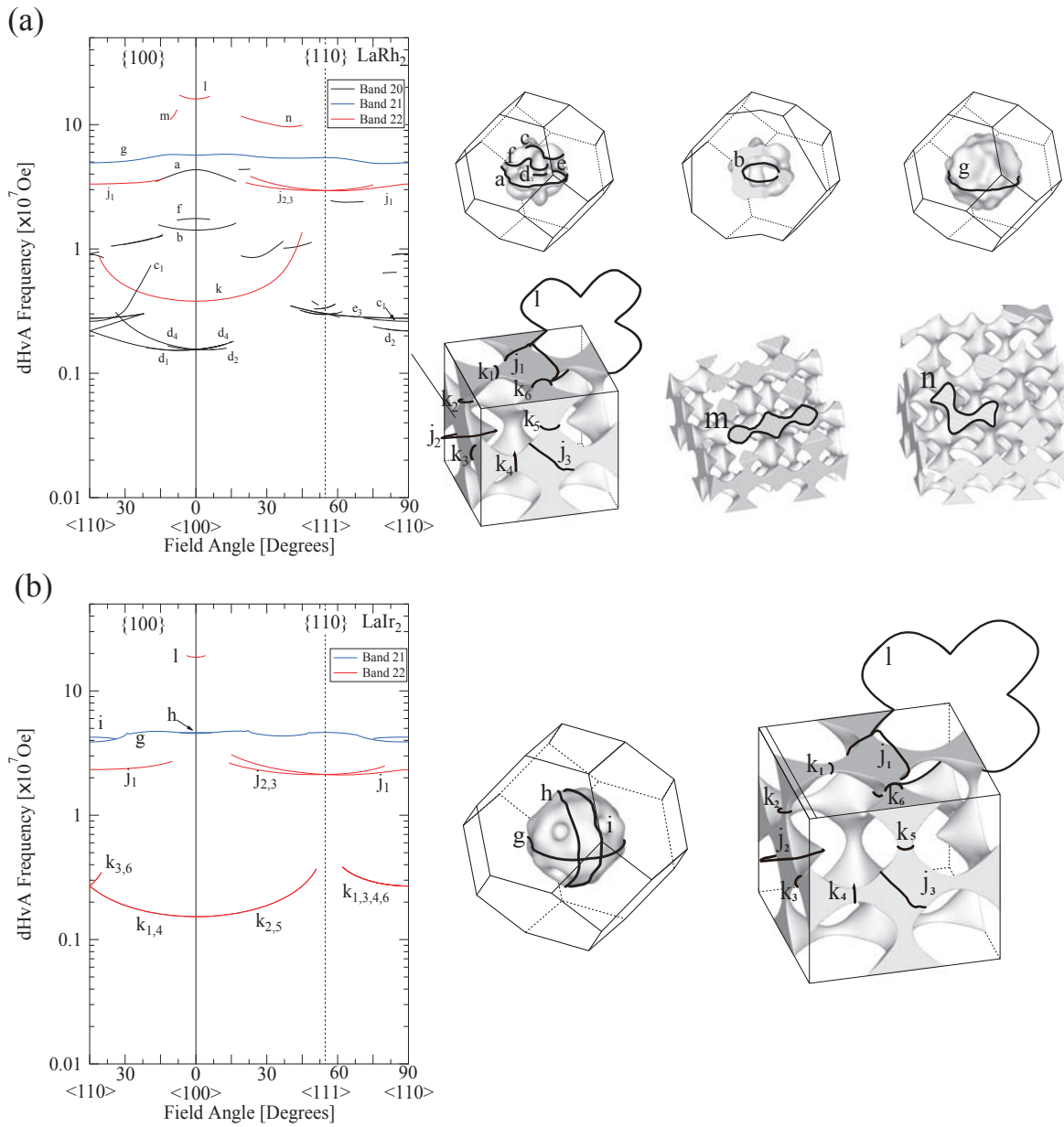


図 12: (a) LaRh<sub>2</sub>, (b) LaIr<sub>2</sub> に対する理論的に導いた dHvA 角度依存の図である。縦軸は印加磁場に対する振動数で極値断面積に対応し、横軸は磁場をかける対称性の高い方向を表す。縦軸は 0.01~50.0 Oe の対数スケールで表している。併せて、主要な極値をフェルミ面上に描画してある。

表 3: 理論的に導いた  $\text{EuRh}_2$  の dHvA 振動  $F$  とサイクロトロン有効質量  $m_{\text{band}}^*$ . 対称性の高い  $\langle 100 \rangle$  軸,  $\langle 110 \rangle$  軸,  $\langle 111 \rangle$  軸について表している.

	$\langle 100 \rangle$		$\langle 110 \rangle$		$\langle 111 \rangle$	
	$F (\times 10^7 \text{ Oe})$	$m_{\text{band}}^* (m_0)$	$F$	$m_{\text{band}}^*$	$F$	$m_{\text{band}}^*$
a <sub>1</sub>	0.13	0.52	0.13	0.54	0.14	0.61
a <sub>2</sub>	0.13	0.52	0.12	0.48	0.12	0.48
a <sub>3</sub>	0.13	0.52	0.13	0.54	0.12	0.48
b	0.25	0.32	0.26	0.32	0.26	0.32
c	4.73	1.39	3.70	1.39	4.19	1.74
d	6.86	2.48	5.78	2.48	6.83	3.20
f <sub>1</sub>	-	-	3.19	2.32	2.98	1.95
f <sub>2</sub>	-	-	-	-	2.98	1.95
f <sub>3</sub>	-	-	-	-	2.98	1.95
g <sub>1</sub>	4.16	4.78	4.30	4.78	-	-
g <sub>2</sub>	-	-	-	-	-	-
g <sub>3</sub>	4.16	4.78	4.30	4.78	-	-
h	17.34	7.20	-	-	-	-

表 4: 理論的に導いた  $\text{EuIr}_2$  の dHvA 振動  $F$  とサイクロトロン有効質量  $m_{\text{band}}^*$ . 対称性の高い  $\langle 100 \rangle$  軸,  $\langle 110 \rangle$  軸,  $\langle 111 \rangle$  軸について表している.

	$\langle 100 \rangle$		$\langle 110 \rangle$		$\langle 111 \rangle$	
	$F (\times 10^7 \text{ Oe})$	$m_{\text{band}}^* (m_0)$	$F$	$m_{\text{band}}^*$	$F$	$m_{\text{band}}^*$
d	3.66	4.64	4.21	4.84	4.87	5.23
e	4.16	4.78	4.30	4.78	-	-
f <sub>1</sub>	-	-	1.26	1.25	1.47	1.47
f <sub>2</sub>	-	-	-	-	1.47	1.47
f <sub>3</sub>	-	-	-	-	1.47	1.47
g <sub>1</sub>	0.029	0.38	0.05	0.62	0.07	0.96
g <sub>2</sub>	0.029	0.38	-	-	0.07	0.96
g <sub>3</sub>	-	-	0.05	0.62	0.07	0.96
h	22.53	7.22	-	-	-	-
i <sub>1</sub>	0.053	0.71	0.04	0.50	0.03	0.41
i <sub>2</sub>	0.053	0.71	0.16	2.28	0.09	1.21
i <sub>3</sub>	0.053	0.71	0.04	0.50	0.09	1.21

表 5: 理論的に導いた LaRh<sub>2</sub> の dHvA 振動  $F$  とサイクロトロン有効質量  $m_{\text{band}}$ . 対称性の高い  $\langle 100 \rangle$  軸,  $\langle 110 \rangle$  軸,  $\langle 111 \rangle$  軸について表している.

	$\langle 100 \rangle$		$\langle 110 \rangle$		$\langle 111 \rangle$	
	$F$ ( $\times 10^7$ Oe)	$m_{\text{band}}^*$ ( $m_0$ )	$F$	$m_{\text{band}}^*$	$F$	$m_{\text{band}}^*$
a	4.34	0.87	-	-	-	-
b	1.42	0.39	-	-	-	-
c	-	-	0.29	0.23	-	-
d	0.16	0.18	0.22	0.22	-	-
e	-	-	0.28	0.19	-	-
f	1.76	0.94	-	-	-	-
g	5.67	1.01	4.93	0.86	5.43	1.01
j <sub>1</sub>	-	-	3.33	0.93	2.95	0.87
j <sub>2</sub>	-	-	-	-	2.95	0.87
j <sub>3</sub>	-	-	-	-	2.95	0.87
k <sub>1</sub>	0.38	0.38	-	-	-	-
k <sub>2</sub>	0.38	0.38	-	-	-	-
l	16.08	2.85	-	-	-	-

表 6: 理論的に導いた LaIr<sub>2</sub> の dHvA 振動  $F$  とサイクロトロン有効質量  $m_{\text{band}}$ . 対称性の高い  $\langle 100 \rangle$  軸,  $\langle 110 \rangle$  軸,  $\langle 111 \rangle$  軸について表している.

	$\langle 100 \rangle$		$\langle 110 \rangle$		$\langle 111 \rangle$	
	$F$ ( $\times 10^7$ Oe)	$m_{\text{band}}^*$ ( $m_0$ )	$F$	$m_{\text{band}}^*$	$F$	$m_{\text{band}}^*$
g	4.55	1.18	-	2.12	3.89	1.61
h	4.63	1.28	-	-	-	-
i	-	-	4.24	2.06	-	-
j <sub>1</sub>	-	-	2.33	1.54	2.12	0.87
j <sub>2</sub>	-	-	-	-	2.13	0.87
j <sub>3</sub>	-	-	-	-	2.13	0.87
k <sub>1</sub>	0.15	0.21	-	-	0.27	0.43
k <sub>2</sub>	0.15	0.21	-	-	-	-
k <sub>3</sub>	-	-	-	-	0.27	0.43
k <sub>4</sub>	0.15	0.21	-	-	0.27	0.43
k <sub>5</sub>	0.15	0.21	-	-	-	-
k <sub>6</sub>	-	-	-	-	0.26	0.43
l	18.65	4.23	-	-	-	-