

論文要旨

論文題目: f 電子系の電子状態とフェルミ面に関する理論的研究

本研究では、立方晶系 f 電子系化合物の電子構造の解明を目的とした。具体的な物質として、 YbSn_3 、 YbPb_3 、 AnRh_3 (An: Th, U, Np, Pu)、 AnSn_3 (An: Th, U, Np, Pu) をターゲットとした。

希土類元素やアクチノイド元素を含む化合物のいくつかは強相関電子系と呼ばれる物質群を形成し、その新奇的な物性解明は近年の物性物理学の主要なテーマの一つとなっている。バンド理論による電子構造の解明は、f 電子の本性と物性解明へ向けて基礎的な役割を果たすものと期待できる。

f 電子系化合物のバンド計算方法として、私は、相対論的な補強された平面波法 (RAPW 法) を線形化して、新しいバンド計算法 (RLAPW 法) を開発した。新しい RLAPW 法は、基底関数の補強法に特徴があり、線形化をしない通常の方法 (RAPW 法) に伴う計算上の困難はすべて取り除かれる。

実際、過去に行った研究ではこのバンド計算方法を用いて、強相関電子系に属する希土類化合物 (4f 電子系) の電子構造とフェルミ面を計算した。ド・ハース-ファン・アルフェン (dHvA) 効果、光電子分光などの実験との詳細な比較検討を行い、フェルミ面の形状を明らかにすることに成功した。本研究においては、常磁性物質である 2 価の希土類化合物 YbSn_3 、 YbPb_3 に対して、相対論的バンド計算を適用し、これらの電子構造の解明を行った。両物質に対しては、純良単結晶育成が成功しており、dHvA 効果の角度依存の測定が行われている。本研究において得られた理論結果は、過去に行われた dHvA 効果の結果を合理的に説明したことから、 YbSn_3 と YbPb_3 の電子状態を明らかにすることができた。また、同様の結晶構造を持ち、実験的に 2 価が示唆されている EuSn_3 、 EuPb_3 の dHvA 効果の実験結果と、 YbSn_3 、 YbPb_3 の dHvA 効果の理論計算の結果は非常によく似た角度依存を示すことから、両物質の電子構造は似ており、2 価の状態であることがバンド計算の立場からも理解された。

他方、アクチノイド化合物における 5f 電子については、バンド描像の適用範囲が十分には確立されていない。その確立を目指す第一段階として、常磁性状態を仮定した、 AnRh_3 (An: Th, U, Np, Pu, Am)、 AnSn_3 (An=Th, U, Np, Pu) の電子構造を明らかにした。

AnRh_3 (An: Th, U, Np, Pu, Am) においては、Rh の 4d 電子と An の 5f 電子の混成が非常に強く、フェルミレベル近傍で幅の広いバンドを形成することが理解された。この結果、この物質群では 5f 電子は遍歴電子と見なし得ることが明らかとなった。この結果の検証のため、 URh_3 のフェルミ面の詳細な解析を行い、 URh_3 の dHvA 効果の角度依存の実験結果と比較を行った。理論と実験の一致は非常に良く、5f 電子の遍歴性を確かめることができた。また、フェルミ面が連結していることから、開軌道の存在が示唆されたため、開軌道が得られる可能性のある磁場範囲を求めた。

AnSn_3 (An=Th, U, Np, Pu) は、その周辺物質を含め過去に広く研究されている。特に USi_3 、 UGe_3 、 NpGe_3 に対する過去の実験・理論データとの電子構造の比較は、この物質群における 5f 電子の系統的な理解が得られると考えたため、電子構造から得られる多くの物理量を詳細に照らし合わせた。独自に開発したフェルミ面上の f 電子成分分布の可視化技術から、An の 5f 電子と Sn の 5p 成分がフェルミレベル近傍で良く混成し、5f 電子が遍歴している描像が理解された。


本研究は、相対論的バンド計算が、重い電子系化合物の電子状態を理解する手段として有効であることを示したうえ、これまでに明らかにされていなかった物質の電子構造を明らかにすることができた。特に、超ウラン系にまで範囲を広げて研究したことにより、5f 電子の振る舞いを幅広く見ることができたと考える。


2013 年 2 月 22 日

琉球大学大学院

理工学研究科長 殿

論文審査委員

主査 氏 名 眞榮平 孝裕 


副査 氏 名 辺 工 正 人 

副査 氏 名 山 上 浩 志 

学位（博士）論文審査及び最終試験終了報告書

学位（博士）の申請に対し、学位論文の審査及び最終試験を終了したので、下記のとおり報告します。

記

申 請 者	専攻名 生産エネルギー工学 氏名 立津 慶幸 学籍番号 
指 導 教 官 名	眞榮平 孝裕
成 績 評 価	学位論文 <u>合格</u> 不合格 最終試験 <u>合格</u> 不合格
論 文 題 目	f 電子系の電子状態とフェルミ面に関する理論的研究

審査要旨（2000 字以内）

最終試験として、2 月 22 日に、45 分の論文発表の後 15 分の質疑応答を行い、その後審査委員会を開催した。審査委員会では、まず主査から当該論文について、研究の目的、研究手段、解析結果および議論について説明があった。

本論文は、立方晶系 f 電子系化合物の電子構造の解明を目的としている。具体的な物質として、 YbSn_3 , YbPb_3 , AnRh_3 (An: Th, U, Np, Pu, Am), AnSn_3 (An: Th, U, Np, Pu) を選びその特異な物性を明らかにした。本論文は、全 7 章から構成されている。

本論文の第 1 章では、希土類元素やアクチノイド元素を含む化合物のいくつかは強相関電子系と呼ばれる物質群を形成し、その新奇な物性解明は近年の物性物理学の主要なテーマの一つとなっていること、バンド理論による電子構造の解明は、f 電子の本性と物性解明へ向けて基礎的な役割

(次頁へ続く)

審査要旨

を果たすものと期待できることなど、研究の背景と目的についてまとめられている。続く第2章では、f電子系化合物のバンド計算方法として、相対論的な補強された平面波法 (RAPW 法) を線形化して、新しいバンド計算法 (RLAPW 法) を開発し、それについてまとめられている。新しい RLAPW 法は、基底関数の補強法に特徴があり、線形化をしない通常の方法 (RAPW 法) に伴う計算上の困難はすべて取り除かれる。実際、過去に行った研究ではこのバンド計算方法を用いて、強相関電子系に属する希土類化合物 (4f 電子系) の電子構造とフェルミ面を計算した。ド・ハース-ファン・アルフェン (dHvA) 効果、光電子分光などの実験との詳細な比較検討を行い、フェルミ面の形状を明らかにすることに成功した。第3章では、dHvA 効果についてまとめられている。第4章では、常磁性物質である2価の希土類化合物 YbSn_3 , YbPb_3 に対して、相対論的バンド計算を適用し、これらの電子構造の解明を行った。両物質に対しては、純良単結晶育成が成功しており、dHvA 効果の角度依存の測定が行われている。本研究において得られた理論結果は、過去に行われた dHvA 効果の結果を合理的に説明したことから、 YbSn_3 と YbPb_3 の電子状態を明らかにすることができた。また、同様の結晶構造を持ち、実験的に2価が示唆されている EuSn_3 , EuPb_3 の dHvA 効果の実験結果と、 YbSn_3 , YbPb_3 の dHvA 効果の理論計算の結果は非常によく似た角度依存を示すことから、両物質の電子構造は似ており、2価の状態であることがバンド計算の立場からも理解された。アクチナイド化合物における 5f 電子については、バンド描像の適用範囲が十分には確立されていない。その確立を目指す第一段階として、常磁性状態を仮定した、 AnRh_3 (An: Th, U, Np, Pu, Am), AnSn_3 (An=Th, U, Np, Pu) の電子構造を明らかにした。第4章では、 AnRh_3 (An: Th, U, Np, Pu, Am) においては、Rh の 4d 電子と An の 5f 電子の混成が非常に強く、フェルミレベル近傍で幅の広いバンドを形成することが理解された。この結果、この物質群では 5f 電子は遍歴電子と見なし得ることが明らかとなった。この結果の検証のため、 URh_3 のフェルミ面の詳細な解析を行い、 URh_3 の dHvA 効果の角度依存の実験結果と比較を行った。理論と実験の一致は非常に良く、5f 電子の遍歴性を確かめることができた。また、フェルミ面が連結していることから、開軌道の存在が示唆されたため、開軌道が得られる可能性のある磁場範囲を明らかにした。第6章では、 AnSn_3 (An=Th, U, Np, Pu) は、その周辺物質を含め過去に広く研究されている。特に USi_3 , UGe_3 , NpGe_3 に対する過去の実験・理論データとの電子構造の比較は、この物質群における 5f 電子の系統的な理解が得られると考えたため、電子構造から得られる多くの物理量を詳細に照らし合わせた。独自に開発したフェルミ面上の f 電子成分分布の可視化技術から、An の 5f 電子と Sn の 5p 成分がフェルミレベル近傍で良く混成し、5f 電子が遍歴している描像が理解された。最後に第7章では、本研究で得られた結果に対して、総括的な考察がなされている。

以上のように、本論文は、相対論的バンド計算が、重い電子系化合物の電子状態を理解する手段として有効であることを示したうえ、これまでに明らかにされていなかった物質の電子構造を明らかにしている。特に、超ウラン系にまで範囲を広げて研究したことにより、5f 電子の振る舞いを幅広く見ることができたと考える。したがって、本研究結果が学術的に価値があり、提出された学位論文は博士の学位論文に相当するものと判断し、学位論文の審査を合格とする。また、論文発表会における発表ならびに質疑応答において、申請者は専門分野および関連分野の十分な知識ならびに琉球大学大学院理工学研究科博士後期課程修了者として十分な研究能力を有していることが確認できたので最終試験を合格とする。