

# 物性セミナーのお知らせ

7月の物性セミナーを下記要領で行います。御参集ください。

日時： 7月20日（木）午後3時00分

場所：神戸大学 理学部Z棟302室

講師：酒井 治教授（首都大学東京）

講演題目：強相関4f電子系に対する第一原理動的平均場理論バンド計算の試み

**要旨：** 近年、強く相互作用する電子系に対しても第一原理的なバンド計算を進める目的のもと、動的平均場理論に基礎をおいた手法の開発が進められている。しかし、4f電子系に対する適用には、様々な難問があり、未だ試みの段階を越えていない。動的平均場理論では、バンド電子の相関効果が「有効混成」を持つ不純物アンダーソンモデルの動的励起を求めることに置き換えられる。現実的は4f系にたいし、結晶場励起やスピン軌道相互作用分裂と近藤効果の競合を取りれて動的励起を求める信頼できる手段の無いことが困難のもとである。

我々は、 $f_1 \rightarrow f_0, f_2$ 価数揺動に伴う交換相互作用プロセスや結晶場励起等との競合を正しく取り入れることの出来る近似解法（NCA $f_2$ vcと呼ぶ）を開発し、バンド計算に組み入れることを進めている。本講演では、Ceプニクタイト（CeY, Y=Bi, Sb, As, P, N）の光電スペクトルについての計算結果を示す。この物質は、光電スペクトルにフェルミエネルギーから約0.3eVと3.5eVの束縛エネルギーをもつ2重ピーク構造をもち、また、半金属でありながら、価数揺動にともなう様々な異常磁性を示す物質として知られる。光電ピークのY依存性、結晶場励起の温度依存から見た磁性など、動的平均場計算の結果と問題点について現状の報告をしたい。

場所等に関する情報は <http://www.phys.sci.kobe-u.ac.jp/butsusemi.html> まで

お問い合わせ等は 物性セミナー世話人 大久保晋 (078-803-5654) [sokubo@kobe-u.ac.jp](mailto:sokubo@kobe-u.ac.jp)