

## フェルミ面の自動計測システム

田中 絢

フェルミ面とは、波数ベクトル空間( $k$  空間ともいう)において、エネルギーがフェルミエネルギーである等エネルギー曲面のことをいい、金属の電氣的性質、磁氣的性質に関係している。絶対零度では、フェルミエネルギー以下のバンド構造には電子が詰まっている。ここに電場を加えたり、温度上昇が起きると、フェルミ面を形成している電子がエネルギーを受け取り、上部の空きバンドに移動することで、フェルミ面の形状は変化する。金属の自由電子モデルではフェルミ面は球形となるが、実際のフェルミ面は球形からずれた形をしており、特に遷移金属では複雑な形状を示す。このように、フェルミ面の形状、フェルミ面近傍の電子の状態を知ることは、金属の物性研究において大変重要であり、理論や実験を通して数多くの研究がなされてきた。

フェルミ面を実験的に求める方法の一つに、ドハース・ファンアルフェン効果というものがある。これは、低温、高磁場の条件のもとで観測される金属の磁気モーメント  $M$  と印加磁場の強さ  $H$  の比  $M/H$  が振動することをいう。この振動の周期は、フェルミ面の極値断面積に比例しており、印加磁場の方向を変化させることでフェルミ面の形状を推測することができる。しかし、この情報だけではフェルミ面の形状の構築は容易ではない。フェルミ面の実験と理論は相補的な関係となっており、より正確なフェルミ面を導き出すために比較検討することが必要不可欠と言える。そこで、理論結果と実験結果を容易に比較できるシステムを構築し、作業時間の短縮等による研究者支援を目的とした。今回はエネルギーバンド計算の結果からフェルミ面を作成し、フェルミ面の各方向の極値断面積を求めて、ドハース・ファンアルフェングラフを自動で作成することを目標にした。

本システムは、単純立方格子(sc)に対応しており、本論文では、実際の  $\text{TiNi}$  のバンド計算結果を用いて、システムの動作を確認した。表示においては、フェルミ面の立体表示、ドハース・ファンアルフェングラフ、任意の方向の断面積推移グラフ、極大値断面図、任意の断面図、各断面積表示を可能にした。フェルミエネルギーの値、視点位置、任意の磁場方向の指定、任意の切断面の指定の操作はすべて、ウィンドウ上のボタンで行う。

バンド計算データからドハース・ファンアルフェングラフ、極大値の断面図などが自動表示できるようになった事で、研究者の労力を大きく削減することが可能になった。しかし、今後の課題として、本システムではホールフェルミ面にしか対応していないので、電子フェルミ面にも対応した切り替えを組み込む必要がある。また、体心立方格子、面心立方格子、六方最密格子などの他の結晶構造にも対応させるための拡張も望まれる。更に、実験結果もグラフ上に自動で重ね合わせ、理論結果と容易に比較することが出来るようになれば、本システムの有用性が増し、より効率的なシステムになると思われる。

(指導教員 松本紳)