OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Theory on Soft X-Ray Magnetic Dichroism of Rare Earth and Ttansition Metal Compounds
Author(s)	今田, 真
Citation	大阪大学, 1991, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3058253
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【 1 】

氏名	今田 真（いまだ しん）
博士の専攻分野の名称	博士（理学）
学位記番号	第 9907 号
学位授与年月日	平成 3 年 9 月 30 日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科 物理学専攻
学位論文名	Theory on Soft X-Ray Magnetic Dichroism of Rare Earth and Transition Metal Compounds （希土類及び遷移金属化合物の軟X線磁気二色性の理論）
論文審査委員	（主査） 教授 邑瀬 和生 （副査） 教授 櫛田 孝司　教授 大坪 久夫　教授 斎藤 基彦 教授 金森順次郎　助教授 城 健男

論文内容の要旨

磁気二色性は，磁気秩序に起因して，光吸収などのスペクトルが入射光の偏光に依存する現象である。希土類元素や遷移元素の，軟X線を用いた内殻スペクトルの磁気二色性は，4fや3d 電子の軌道角運動量やスピンの状態をよく反映することが期待される。本研究では，強磁性体の研究に重要で最近実験が可能になったものの，理論的研究がほとんどされていない内殻光吸収（XAS）の磁気円二色性（円偏光による二色性：MCD）に重点をおいて，これと磁気状態の関係を明らかにし，実験結果に解釈を与える。

全希土類の3価イオンについて，3dや4d内殻電子を4f軌道に励起するXASのMCD を計算した結果，4f電子状態を敏感に反映する多重項構造が得られた。3dXASでは，内殻軌道の強いスピン－軌道相互作用のために，偏光によってできる内殻ホールと4f電子の組が軌道角運動量だけでなくスピンの偏極を持っていることから，MCDは4f軌道の軌道角運動量とスピンの状態を非常に分かりやすく反映している。また，4dXASのMCDの主な特徴は，内殻ホールと4f電子の間の静電相互作用によって説明できる。さらに最近得られたGdの3d及び4dXASのMCDは，我々の計算とよく一致している一方，実験の際に試料の磁化が十分飽和していないことを示している。

遷移元素のXASでは，Coの2pから3dへのXASを取上げる。まず，結晶場が強いために抑えられている軌道角運動量が，スピン－軌道相互作用によって多少誘起される際のMCDの変化を明らかにした。さらに，Coフェライト中のCoについて，一軸異方性のための電子状態の比較的細かい変化が特に低温でMCDに敏感に現れることを示し，最近得られた実験結果からCoの磁気モーメントに対するスピンと軌道角運動量の寄与を見積った。

最後に，磁気モーメントが主にスピンによっている場合と，主に軌道角運動量によっている場合の各々について，内殻光電子放出（XPS）のMCDの特徴を調べた。前者の例としてd^8状態の遷移元素イオンの2pXPSを計算し，強磁性Feについての実験を説明した。後者の例としては，$Ce^{3+}(4f^1)$イオンの3dXPSを計算した。両者とも，MCDの特徴は，光励起によってできる内殻ホールと3dまたは4f電子の間の静電相互作用によって説明できる。また，XPSで，光源として円偏光を使うとともに光電子のスピンまで測定することで，さらに磁気的な電子状態についての情報が得られることを指摘した。

論文審査の結果の要旨

シンクロトロン放射光源の利用によるX線領域の光吸収，光電子放出の研究が近年広く行われるようになっているが，最近円偏光の利用が可能になった。今田君の論文の内容は，希土類元素，鉄属等の遷移元素の強磁性化合物について，軟X線領域の光吸収および電子放出の円偏光の方向依存性（磁気2色性）の理論的研究であって，妥当なモデルについての計算結果と実験結果との詳細な比較から系の電子状態について定量的な情報を引き出すための基礎理論を構築することを目的としている。

論文は，まづ希土類元素について，化合物の種類によらない光吸収の磁気2色性の一般論を展開している。この場合結晶中の周囲の影響を表す結晶場が4f電子の状態にあまり大きい影響を与えないので，このような一般論が可能である。3d→4fと4d→4fの二つの場合について詳細に論じ，それらの間の相違も明快に示していて，今後の実験解析の指針を与えている。またGdの場合にはすでに実験結果があるが，計算との一致は非常によい。次に鉄属等の遷移金属化合物の典型的な例としてCoフェライト（$CoFe_2O_4$）の2p→3d光吸収の磁気2色性を詳細に論じている。この場合は，結晶場，スピン軌道相互作用，電子間相互作用すべてを同時に考慮することが必要で，化合物の種類によって相違が大きい。磁気2色性にとっては軌道角運動量がquenchされていないことが重要であって，Coフェライトの場合はその典型的な例の一つである。またこの場合すでに実験データが存在することも，この場合の解析を取り上げた理由である。温度変化も考慮した詳細な解析の結果，室温では吸収スペクトルは3回対称性の結晶場の大きさにあまり依存しないが，より低温ではその依存性が顕著に現れる等今後の実験に指針を与える結論を得ている。なお室温での計算結果は実験データの大体の様子をよく再現している。このほか金属鉄等について光電子放出での磁気2色性についても論じ，磁気2色性が強磁性体の電子状態を研究するための有力な手段であることを示している。

今田君の研究は，最近の実験研究の発展に対応したもので，磁気2色性について詳細な理論解析を初めて与えたものである。現在まで得られた実験データの意味するところを解明し，今後の実験の解析および条件の選択に指針を与えるもので，その意義は大きい。結論として，論文の内容は博士（理学）の学位論文として十分なものであることを認める。