

Title	High Energy Spectroscopic Studies of Ce Compounds
Author(s)	岩崎, 剛之
Citation	
Issue Date	
Text Version	none
URL	http://hdl.handle.net/11094/42455
DOI	
rights	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/repo/ouka/all/>

氏名	岩崎剛之
博士の専攻分野の名称	博士(理学)
学位記番号	第 16303 号
学位授与年月日	平成13年3月23日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 基礎工学研究科物理系専攻
学位論文名	High Energy Spectroscopic Studies of Ce Compounds (Ce化合物の高エネルギー分光による研究)
論文審査委員	(主査) 教授 菅 滋正 (副査) 教授 北岡 良雄 教授 三宅 和正

論文内容の要旨

Ce4f 電子状態は試料の表面領域とバルク領域で大きく異なっていることが知られている。そこで、 $CeMX$ ($M=Pd, Pt, X=P, As, Sb$) の表面電子状態とバルク電子状態を2種類の共鳴光電子分光を用いて観測した。その結果に対して、理論計算を用いて定量的に解析を行い、これらの試料の Ce4f スペクトルを再現した。バルクと表面と違いが、混成前の Ce4f エネルギー位置のシフトによることを明らかにした。さらに、これらの試料の電子状態を定量的に理解することに成功し、 $CePdX$ においては、Ce4f は p-d 混成の反結合状態のうち、深い束縛エネルギー側の構造と良く混成しているのに対し、 $CePtX$ においては、Ce4f は p-d 混成の反結合状態のうち、浅い束縛エネルギー側の構造と良く混成していることを明らかにした。またこの解析から、平均混成強度は必ずしも Ce4f スペクトル形状を再現せず、定量的な議論には混成強度のエネルギー依存性を考慮する必要性のあることがわかった。

次に、非占有状態の Ce4f 電子状態を理解するために、3種類の逆光電子分光測定を近藤温度の異なる3つの Ce 化合物、 $CeRu_2, CeRu_2Si_2, CePtP$ に対して行った。光電子分光(占有状態側)の結果とは対照的に、非占有 Ce4f スペクトルは表面とバルクにおいて明らかな違いが観測されなかった。その理由は、f 電子間クーロン相互作用 U_f がほとんど影響を与えない光電子分光終状態と異なり、逆光電子分光の終状態においては大きな U_f によって、相対的に表面・バルク間の 4f レベルのシフトが隠されるために、スペクトルには表面依存性がはっきりと観測されなかったと考えられる。さらに、Ce4f スペクトルに対し、全多重項を考慮した計算を行った。我々は、不純物アンダーソンモデルを用いて定性的にこれらの化合物の Ce4f スペクトルを再現することに成功した。しかし、 $CeRu_2$ に関しては、バンド計算でも十分にスペクトルを説明できることも分かり、 $CeRu_2$ のような強く混成した系においてはバンド描像も十分に適用できることが分かった。

論文審査の結果の要旨

Ce 化合物では表面領域とバルク領域では Ce4f 電子状態が大きく異なっていることが知られている。そこで、 $CeMX$ ($M=Pd, Pt, X=P, As, Sb$) の表面電子状態とバルク電子状態を2種類の電子分光法を用いて観測したのが本論文の主要な骨子である。実験結果に対して、理論計算を用いて定量的に解析を行い、これらの試料の Ce4f ス

ペクトルを議論している。

その結果バルクと表面のスペクトルの違いが、混成前の Ce4f 準位のエネルギー位置のシフトによることを明らかにしている。さらに、これらの試料の電子状態を定量的に理解することに成功し、CePdX においては、Ce4f は p-d 混成の反結合状態のうち、深い束縛エネルギー側の構造と良く混成しているのに対し、CePtX においては、Ce4f は p-d 混成の反結合状態のうち、浅い束縛エネルギー側の構造と良く混成していることも明らかにした。またこれらの解析から、平均混成強度は必ずしも Ce4f スペクトル形状を再現せず、定量的な議論のためには混成強度のエネルギー依存性を考慮する必要性のあることも明らかにしている。

次に、非占有状態の Ce4f 電子状態を理解するために、3 種類の逆光電子分光測定を近藤温度の異なる 3 つの Ce 化合物、CeRu₂、CeRu₂Si₂、CePtP に対して行った。光電子分光（占有状態側）の結果とは対照的に、非占有 Ce4f スペクトルは表面とバルクにおいて明らかな違いが観測されなかった。その理由は、f 電子間クーロン相互作用 U_f がほとんど影響を与えない光電子分光終状態と異なり、逆光電子分光の終状態においては大きな U_f によって、相対的に表面・バルク間の 4f レベルのシフトが隠されるために、スペクトルには表面依存性がはっきりと観測されないと考えられることを提案している。さらに、Ce4f スペクトルに対し、全多重項を考慮した計算を行った。

これら Ce 化合物の多くについては不純物アンダーソンモデルを用いて定性的に Ce4f スペクトルを再現することに成功している。しかし近藤温度の高い CeRu₂ に関しては、バンド計算でも十分にスペクトルを説明できることも分かり、CeRu₂ のような強く混成した系においては不純物アンダーソンモデルの適用に限界があることを明らかにしている。