The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	High Energy Spectroscopic Studies of Ce Compounds
Author(s)	岩崎, 剛之
Citation	大阪大学, 2001, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/42455
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

【70】

氏　　名	岩崎剛之（いわさきたけし）
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、Ce*MX*（*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、CePd*X*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_{ff}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_{ff}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、バンド計算でも充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充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、$CeRu_2$、$CeRu_2Si_2$、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_{ff} 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_{ff} 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 $CeRu_2$ に関しては、バンド計算でも充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。