

Title	Strongly correlated electronic structures of Ce-based heavy fermion systems probed by polarization-dependent X-ray electron spectroscopy
Author(s)	中谷, 泰博
Citation	大阪大学, 2018, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/69626">https://hdl.handle.net/11094/69626</a>
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

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

Osaka University

## 論文内容の要旨

氏 名 ( 中谷 泰博 )	
論文題名	Strongly correlated electronic structures of Ce-based heavy fermion systems probed by polarization-dependent X-ray electron spectroscopy (偏光依存X線電子分光を用いた Ce 系重い電子系の強相関電子構造の研究)
論文内容の要旨	
<p>重い電子系化合物の中でも <math>4f^1</math> 配置の Ce 化合物は、磁性と超伝導の競合など多彩な物性を示し、強相関 <math>4f</math> 電子系化合物の物性理解に適した物質群である。この系では局在的な <math>4f</math> 電子が伝導電子とわずかに混成し、その混成強度の違いが物性を支配する。本研究では、異方的な磁性、電子比熱の増大、超伝導を示す <math>\text{CeNi}_2\text{Ge}_2</math> を中心に取り上げる。電子構造の観点から混成を理解するために、様々な X線電子分光を適用した。</p> <p>共鳴光電子分光の結果をバンド計算と比較した結果、結晶場分裂に基づく <math>4f</math> 軌道対称性が考慮されていないバンド理論では <math>\text{CeNi}_2\text{Ge}_2</math> の電子構造を理解できないことが分かった。そこで、電子の対称性まで踏み込んで議論を行うために、内殻光吸収スペクトルの線二色性を測定し、イオンモデル計算と比較する事で、<math>4f</math> 結晶場描像を決定した。これと磁気円二色性により証拠を得た <math>4f</math> 電子の磁性への寄与を合わせ、結晶場描像をもとに帯磁率の異方性を説明することができた。さらに、内殻光電子スペクトルの線二色性から、<math>4f</math> 電荷分布が結晶構造の Ge サイトに向いていることが判明した。</p> <p>一方で、伝導電子から混成を理解するために、<math>\text{CeNi}_2\text{Ge}_2</math> と <math>4f^0</math> 配置の参照物質 <math>\text{LaNi}_2\text{Ge}_2</math> に対し角度分解光電子分光を行い、両者の電子状態を比較した。その結果、混成により電子状態が変化するバンドと変化しないバンドが存在する事が分かった。<math>\text{LaNi}_2\text{Ge}_2</math> のバンド計算により伝導電子バンドの軌道成分を分解した結果、電子状態が変化するバンドにのみ Ge の寄与があることが分かった。これは、Ce の <math>4f</math> 電荷分布が Ge サイトに向いていることと対応する。さらに、有効質量と電子密度が大きくなる heavy spot も観測され、電子比熱の増大が説明できる。Heavy spot 同士を結ぶ波数ベクトルはスピン揺らぎと対応していることから、この物質の超伝導はスピン揺らぎによって媒介され、heavy spot が重要な役割を果たす可能性が高いといえる。</p> <p>本研究によって、<math>\text{CeNi}_2\text{Ge}_2</math> を対象として電子状態から物性を理解する研究手法を確立できた。本手法は他の Ce 化合物にも適用可能である。</p>	

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( 中谷 泰博 )			
	(職)	氏 名	
論文審査担当者	主 査	教 授	関山 明
	副 査	教 授	藤本 聡
	副 査	教 授	清水 克哉

## 論文審査の結果の要旨

Ceなど希土類イオンを含み4f軌道が閉殻ではない化合物では局在性の強い4f軌道と価電子帯との混成効果によって重い電子状態、磁気秩序、それらの競合状態としての量子臨界現象が見られ非従来型超伝導も観測されている。これらの現象の起源を解明する上で4f電子および混成相手の電子物性を理解することは重要であり様々な研究が行われているものの運動量分解した電子構造や4f軌道対称性を直接的に決定することは困難であった。

本学位論文では、重い電子状態および低温で超伝導を示すことから量子臨界点近傍に位置すると思われるCeNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>を対象として従来実験が困難であった偏光制御硬X線励起角度分解内殻光電子分光および軟X線3次元角度分解光電子分光を行った。従来よりCe化合物においては4f電子状態が表面とバルクで大きく異なることが知られており、本学位論文で扱われている実験手法はいずれもバルク感応性が高いという特徴がある。前者の実験から得られた角度分解Ce 3d内殻光電子スペクトルの線二色性を理論計算によって解析することで局在的な占有4f軌道がGeイオンの方向を向いたΓ<sub>7</sub>状態にあることが直接的に示されたが、これは現時点では他の実験では決定が困難である。また軟X線角度分解光電子分光をCeNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>および占有4f軌道の存在しないLaNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>の両者に対して同じ条件で行うことで4f軌道との混成効果で変化するバンドの特定に成功した。この結果をバンド計算の結果と比較すると変化するバンドにはGe p軌道の寄与があることが明らかになり、上記の占有4f軌道対称性とよく整合する。さらにはCeNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>でみられる重い電子状態が波数空間内の特定の箇所(Heavy spot)でのみ観測され、このHeavy spot同士を結ぶベクトルがスピン揺らぎのそれとよく対応することを発見した。これはCeNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>の超伝導がスピン揺らぎに起因することを示唆する重要な結果である。

以上のように、本学位論文ではこれまで解明が困難だったCeNi<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>の重い電子状態および超伝導の起源について直接的かつ重要な知見を与えており、博士(理学)の学位論文として価値のあるものと認める。