

氏名	松 山 広 志
授与した学位	博 士
専攻分野の名称	理 学
学位授与番号	博甲第1735号
学位授与の日付	平成10年3月25日
学位授与の要件	自然科学研究科物質科学専攻 (学位規則第4条第1項該当)
学位論文題目	希土類化合物におけるL吸収端磁気円二色性の理論的研究
論文審査委員	教授 原田 勲 教授 田中 基之 教授 山崎比登志 教授 山下 信彦 教授 藤井 道一

学 位 論 文 内 容 の 要 旨

本論文では、長い間解釈が混乱しその解決が待たれていた、希土類化合物の L_2 , L_3 吸収端磁気円二色性 (MCXD) の問題を、新しい MCXD 機構の提案とその機構による具体的な MCXD スペクトルの再現を通して解決することを試みる。実験スペクトルとして $RE_2Fe_{14}B$ ($RE = Pr \sim Yb$) に対するものを主に参照したが、希土類元素がどのような環境 (合金、化合物) でも MCXD スペクトルの特徴は同じであることから、解析には固体効果を無視し、希土類イオンを三価の自由イオンとして扱った。

まず、MCXD の問題を直観的に解釈するため、一体近似をもとにした簡単なモデルを用いて MCXD スペクトルを計算した。そこでは、電気双極子遷移に直接関与する $5d$ 電子に最も重要な影響を与える原子内 $4f$ - $5d$ 交換相互作用が、単に $5d$ 状態を偏極するばかりでなく、新しい機構として、 $5d$ 状態の動径関数がスピンや軌道に依存して変化する事を要請する。この事により、各希土類イオンの $4f$ 状態の変化が MCXD スペクトルに反映し、全ての希土類イオンに対する実験結果が正しく再現されることを示した。

次に、新しい $4f$ - $5d$ 交換相互作用の役割とともに多体効果を取り入れたモデルを用いて、MCXD スペクトルを定量的に再現した。その際、 $2p \rightarrow 4f$ の電気四重極遷移の計算を atomic モデルに基づいて電気双極子遷移の計算とは独立に行い、最後にそれらのスペクトルを重ね合わせ、プレ吸収端も含めた MCXD スペクトルの再現を試み、全希土類化合物についてほぼ満足出来る結果を得た。

以上のことから、本論文の提案が正しいものであり、従って二次の光学過程など他の過程でもこの機構が検証されることを期待する。

論文審査結果の要旨

最近著しい進歩を見せるシンクロトロン放射光技術は、広い意味の光による磁性体の研究に新しい側面を拓き、実験及び理論両面から活発に研究されている。本論文では、希土類イオンにおける L_2 , L_3 吸収端の磁気円二色性(MCXD)の問題を理論的に研究した。

希土類化合物における L_2 , L_3 吸収端は、主に希土類イオンの内殻 $2p$ から最外殻 $5d$ 軌道への電気双極子遷移に相当する。MCXD は内殻 $2p$ 正孔のスピン軌道相互作用による分裂と原子内相互作用である $4f$ ・ $5d$ 交換相互作用による $5d$ 軌道のスピン分極により起きるものと考えられる。ところが、このような考えに基づいた計算は、多くの希土類化合物における L_2 , L_3 吸収端の MCXD スペクトルを正しく再現しない。

本論文では、これらの吸収端において重要な $4f$ ・ $5d$ 交換相互作用の役割として従来の (1) 不完全 $4f$ 殻による $5d$ 軌道の分極と共に、新しく (2) 局在する $4f$ 電子とより有効な交換相互作用を行うため、 $5d$ 軌道を収縮させるという役割を考慮することにより、MCXD スペクトル及び積分強度の実験結果を正しく再現することに成功した。さらに、低エネルギー側に小さいけれど無視できない電気四重極遷移による吸収が存在することを明らかにした。このような新しい機構の発見は、この分野の研究者に強いインパクトを与え、更なる実験を促すと共に上記光学過程が関与する 2 次過程などの実験にも重要な指針を与えるであろう。以上のように、本研究はこの研究分野に重要な寄与をしたと認められる。

本論文の内容、論文発表会、参考論文を総合的に審査した結果、本論文は博士学位論文に値するものと認定する。