

遷移金属・希土類化合物における希土類 L 吸収端 MCD の温度変化

基礎物理学講座 41417126 片山 晴生

ラーベス相化合物 $R\text{Fe}_2$ (R :希土類) は、 $R4f$ 電子と $\text{Fe}3d$ 電子との相互作用によって様々な磁性を示すことが知られている。これらの磁性を理解するためには、 $R4f$ 電子と $\text{Fe}3d$ 電子との相互作用を媒介する $R5d$ 電子のスピンの軌道分極を調べることが重要である。希土類 L 吸収端 ($2p \rightarrow 5d$) の磁気円二色性 (MCD: Magnetic Circular Dichroism) スペクトルは、 $5d$ 電子の磁気情報を他の殻と区別して得るための最も有効な手段である。また、MCD スペクトルの温度変化は $R\text{Fe}_2$ の磁性を反映してそのスペクトルのピーク強度を変化させるが、 ErFe_2 の L_2 吸収端ではフェルミ準位付近で正のピークが温度の上昇によって強度を増すという異常な実験結果 [1] がある。本論文ではこの MCD スペクトルが $R\text{Fe}_2$ の磁性の温度による変化をどのように反映するかを数値計算による実験スペクトルの再現により解析し、遷移金属希土類化合物の磁性の理解を深めることを目的とする。

本論文では、 $R5d$ 軌道の分極に寄与するのは、 $R5d - R4f$ 交換相互作用と $R5d - \text{Fe}3d$ 軌道間混成の二つであるとしたモデルを用いる。 $R5d$ 軌道、 $\text{Fe}3d$ 軌道のバンド的性格は tight-binding 近似により取り入れ、さらに電気双極子遷移行列要素の増大効果と双極子遷移のプレッジ領域に表れる電気四重極遷移の寄与も考慮して計算を行った。

$\text{ErFe}_2 L_2$ 吸収端のフェルミ準位付近のピーク強度が温度の上昇によって強くなるのは、(1) $\text{Fe}3d$ の寄与と $\text{Er}4f$ の寄与とが異符号になっているエネルギー領域では、それぞれの寄与が大きくても打ち消しあうため MCD スペクトルの強度は小さい。(2) 温度の上昇によって $\text{Er}4f$ モーメントの方が $\text{Fe}3d$ モーメントより早く減少し、MCD スペクトルへの寄与もより早く減少する。(3) 打ち消されていた $\text{Fe}3d$ の寄与が現れ、ピークの強度が増加すると考えることができる。

本論文では、 L 吸収端 MCD の温度変化を再現することにより、系の磁性が MCD スペクトルにどのように反映されているかをより明確にすることができた。また、藤原らによってなされた計算結果 [2] と比較することにより、平均場として取り入れている $R5d - R4f$ 相互作用が特に重要な役割を果たしていることがわかった。

[1] Christine Giorgetti and Elisabeth Dartyge : Phys. Rev. B 70 (2004) 035105.

[2] 藤原敦志: 修士論文

(岡山大学大学院自然科学研究科、2004年3月)

