

高磁場下の混合原子価希土類化合物の XAS と XMCD の理論

小谷章雄

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 PF

kotani@post.kek.jp

X線吸収 (XAS) とその磁気円二色性 (XMCD) は局所的な電子状態を反映するため、不純物アンダーソン模型 (SIAM) による理論解析が有効である。筆者はこの3・4年間、強磁場下の混合原子価希土類化合物における XMCD の理論を中心課題の一つとして研究している[1-3]。これまでに、磁場誘起価数転移における電子状態変化を SIAM で記述する方法を開発し、 YbInCu_4 の磁場誘起価数転移における Yb $L_{2,3}$ 端吸収 XMCD の解析などをおこなってきた[3]。今回は、この方法を $\text{EuNi}_2(\text{Si}_{0.18}\text{Ge}_{0.82})_2$ の Eu $M_{4,5}$ 端吸収の XMCD に応用した結果を中心に講演する。

$\text{EuNi}_2(\text{Si}_{0.18}\text{Ge}_{0.82})_2$ は 30T 以上の磁場で磁場誘起価数転移を示し、これまでに Eu $L_{2,3}$ 端 XAS, XMCD や磁化測定がなされているが、価数と磁化の磁場依存性に矛盾点があることなど、謎の多い系である。ここではまず、SIAM の基底状態の磁場依存性を求め、価数と磁化を計算する。磁場誘起価数転移が一次転移なので、低磁場相と高磁場相で SIAM のパラメーター（電荷移動エネルギー Δ と混成相互作用 V ）を別々にとる必要がある。混合原子価 Eu^{2+} と Eu^{3+} 成分の磁化、および磁性不純物の磁化を考慮し、それらの総和が実験の磁化曲線を再現するようにパラメーターを設定する。さらに、これと矛盾のないように価数の磁場依存性を計算する。これらの計算結果を検証するため、最近、中村らによって実験が進められている Eu $M_{4,5}$ 端の XAS と XMCD の結果を解析し、理論計算と比較する。実験の XAS からは価数が、また XMCD からはスピンおよび軌道の総和則を用いて Eu^{2+} と Eu^{3+} 成分の磁化を求めることができる。実験は現在も進行中であるが、予備的なデータを用いる範囲内で、計算結果と実験の解析結果はかなりよく一致している。今後、より完全で信頼性の高い実験結果が期待され、本研究は従来のこの系の問題点を一つ一つ解決する確かな情報を発信できるものと考えている。

[1]: A. Kotani, Phys. Rev. B **78**, 195115 (2008).

[2]: A. Kotani, Eur. Phys. J B **72**, 375 (2009).

[3]: A. Kotani, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **181**, 168 (2010).