

Ce化合物のX P 法におけるフェルミ準位近傍のピークの起源

東北大、工 佐久間昭正

Ce化合物におけるf電子の束縛エネルギー及び準位幅の決定は、その物性研究において重要と思われた。その直接的な観測手段としてX P 法、U P 法、そして最近の共鳴光電子分光が用いられる。しかしながら、これらの実験から得られるスペクトルには、フェルミ準位直下0.2~0.5 eV付近と、2~3 eV程度下にそれぞれ同程度の強度をもつピークが認められ、このf電子に起因するものかか問題となる。これは特にCe金属における $\gamma + \alpha$ 相転移の機構の解明において無視できない問題である。これら2つのピークは共鳴光電子スペクトルにおいても現れ、しかも共に共鳴的に増大を示すことから、このf電子の放出に関与するものと考えることが出来る。そこで、本稿では、f光電子放出において、一体近似では説明できない終状態相互作用を考慮することにより、これら2つのピークの起源について説明を試みる。

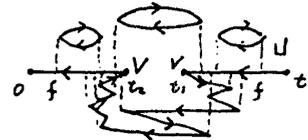
モレルハミルトニアンを以下のように設定する。

$$H = \sum_k \epsilon_k n_k + \epsilon_f n_f + V \sum_k (a_k^\dagger a_f + a_f^\dagger a_k) + U \sum_k a_k^\dagger a_k (1 - n_f), \quad (\epsilon_f < 0, U < 0) \quad (1)$$

第4項まではスピンを無視したAndersonハミルトニアンであり、第4項はf空孔と伝導電子のCoulomb相互作用である。ここでf準位はフェルミ海の深いところにある($| \epsilon_f | \gg \pi \rho_f V^2$)とし、始状態においては $\langle n_f \rangle = 1$ と仮定する。f光電子スペクトルは

$$I_f(\epsilon_k - \omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega - \epsilon_k)t} (-i) \theta(t) \langle a_f^\dagger(t) a_f \rangle \quad (2)$$

で与えられる。 ω, ϵ_k はそれぞれ入射X線及びf光電子のエネルギーであり、 $-(\epsilon_k - \omega)$ は光電子の始状態における束縛エネルギーに対応する。ここで(2)式のf空孔のGreen関数の計算において $|U| \gg \pi \rho_f V^2$ と仮定し、Vについて2次、Uについて無限次まで考慮して計算を実行する。これは下図のFeynmanダイアグラムで表わされ、f空孔によって散乱状態に励起された伝導電子が混成相互作用によってf空孔を埋める過程に対応している。このとき、終状態はf電子 + 電子-正孔対を励起状態にあることに等しい。有限の時間範囲で散乱状態にある伝導電子のGreen関数はNoyes-de Dominicisの方法により求めることができ、これを用いると(2)式は次のようになる。



$$I_f(\epsilon_k - \omega) = -\frac{\rho_f}{\pi} |V|^2 \cos^2 \delta D^{\frac{1}{2} - \alpha - 2(\alpha)} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega - \epsilon_k + \epsilon_f)t} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{-\frac{\delta}{2} |i(t_1 - t_2)|^{-\alpha}} \left\{ \frac{t_2 - (t - t_1)}{t_1 - (t - t_1)} \right\}^{\alpha - \frac{1}{2}} \quad (3)$$

$$= \frac{A(\omega - \epsilon_k)}{(\omega - \epsilon_k + \epsilon_f)^2} \frac{\Gamma(1 - \alpha)}{(\omega - \epsilon_k)^{1 - \alpha}} \theta(\omega - \epsilon_k), \quad \alpha = (1 - \frac{\delta}{2})^2, \quad \delta = \tan^{-1}(\pi \rho_f U),$$

ここで、 $A(\omega - \epsilon_k)$ は $\omega - \epsilon_k = 0$ において正則な関数でありf光電子スペクトルは、 $\epsilon_k - \omega = 0$ となるフェルミ準位と $\epsilon_k - \omega = \epsilon_f$ に2つのピークをもつことがわかる。これは散乱状態に励起された伝導電子が混成相互作用によってf準位を埋める際、フェルミ準位近傍の電子がこの遷移に最も寄与することを示している。また、混成相互作用が限りとして、Coulomb相互作用のみを終状態相互作用として考慮すると、フェルミ準位におけるピークは消え、 $\epsilon_k - \omega = \epsilon_f$ の値エネルギー側に裾を引いた赤外発散のみが残ることになる。

以上のことから、フェルミ準位近傍に現れるピークは、f-s混成相互作用とf-s Coulomb相互作用の終状態における複合的な効果によるものと解釈することが可能である。