



Doctoral Thesis

## On the electronic structure of the light rare earth hydrides

**Author(s):**

Osterwalder, Jürg

**Publication Date:**

1985

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000343068> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH No 7766

ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE LIGHT RARE EARTH HYDRIDES

---

A dissertation submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY

for the degree of  
Doctor of Natural Sciences

presented by  
Jürg Osterwalder  
dipl.phys. ETH  
born on the 26<sup>th</sup> of February 1957  
citizen of Stettfurt (Thurgau)

accepted on the recommendation of  
Prof.Dr.H.C.Siegmann, examiner  
Prof.Dr.S.Hüfner , co-examiner

1985

### Abstract

Photoemission (XPS, HeI) and inverse photoemission ( $h\nu = 9.7$  eV) data on Y, La, Ce, Pr and their hydrides are presented. The discussion focusses on the ground state electronic properties of the hydrides and in particular on the empty density of states. In addition the correlation effects which appear in these experimental techniques in the presence of well localized, partly filled 4f states are stressed. Hybridization is displayed in three typical situations: a) The very existence of a weak 4f - conduction band mixing allows electronic transitions into 4f derived states to be observed by low energy BIS, although the cross section is exceedingly small at this energy - b) 3d core excitation pulls the empty 4f levels close to the hydrogen ligand levels such that they become strongly mixed and the screening level is markedly split - c) A schematic relation is found between core level shifts upon hydriding, charge transfer and the position of the hydrogen induced band, simply by considering the mixing of hydrogen ligand states with metal d states.

## Zusammenfassung

Resultate von Photoemissions- (XPS, HeI) und inversen Photoemissionsexperimenten ( $h\nu = 9.7 \text{ eV}$ ) an Y, La, Ce, Pr und an deren Hydriden werden zusammengefasst. Die Diskussion konzentriert sich auf die elektronischen Eigenschaften der Hydride im Grundzustand, wobei uns vor allem die unbesetzte Zustandsdichte interessiert, und auf Korrelationseffekte, die bei obigen Spektroskopien auftreten als Folge der stark lokalisierten, teilweise besetzten 4f-Zustände. Man findet, dass sich Hybridisierung von Zuständen in drei typischen Situationen zeigt: a) Eine schwache Beimischung von Leitungszuständen zu den unbesetzten 4f-Zuständen führt dazu, dass man die letzteren mit Niederenergie-BIS beobachtet, obwohl deren Wirkungsquerschnitt eigentlich viel zu klein ist bei diesen niedrigen Anregungsenergien - b) Die Anregung von 3d Rumpfelektronen zieht leere 4f-Zustände energetisch in die Nähe der Wasserstoff-Liganden-zustände, was zu einer starken Hybridisierung der beiden führt und das lokalisierte Abschirmniveau stark aufspaltet - c) Wir schlagen eine schematische Beziehung vor zwischen Rumpfniveaushiftungen, Ladungstransfer und der Position des wasserstoffinduzierten Bandes, in der das wesentliche Element die Hybridisierung der Wasserstoff-Liganden-zustände mit den d-Zuständen des Metalles ist.