

|              |  |
|--------------|--|
| Title        | Electronic Structures of Mn Based Alloys and Transition Metal Intercalated IT-TiS <sub>2</sub> |
| Author(s)    | 木村, 昭夫   |
| Citation     | 大阪大学, 1995, 博士論文   |
| Version Type | VoR  |
| URL          | <a href="https://doi.org/10.11501/3081501">https://doi.org/10.11501/3081501</a>                |
| rights       |  |
| Note         |  |

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

|               |  |
|---------------|--|
| 氏 名           | 木 村 昭 夫  |
| 博士の専攻分野の名称    | 博 士 (理 学)  |
| 学 位 記 番 号     | 第 1 1 9 2 8 号  |
| 学 位 授 与 年 月 日 | 平 成 7 年 3 月 23 日   |
| 学 位 授 与 の 要 件 | 学位規則第4条第1項該当<br>基礎工学研究科物理系専攻   |
| 学 位 論 文 名     | Electronic Structures of Mn Based Alloys and Transition Metal<br>Intercalated 1 T-TiS <sub>2</sub><br>(Mn を含む強磁性合金と遷移金属原子をインターカレートしたTiS <sub>2</sub> の<br>電子状態の研究) |
| 論 文 審 査 委 員   | (主査)<br>教 授 菅 滋 正<br><br>(副査)<br>教 授 鈴 木 直 教 授 三 宅 和 正   |

#### 論 文 内 容 の 要 旨

本博士論文では、Mnを含む強磁性合金やインターカレーション物質の電子状態を詳しく調べるために、軟X線吸収分光における磁気円二色性の観測や共鳴光電子分光を行い、電子状態に基づく議論を展開している。

TiS<sub>2</sub>はその層間の混成が弱い事を反映して擬2次的な電子状態が実現されている系であるが、TiS<sub>2</sub>の層間に遷移金属原子をインターカレートした系(M<sub>x</sub>TiS<sub>2</sub>)は金属的になるだけでなく、磁氣的構造、輸送現象、熱的現象において母体とはかなり異なった性質を示し、さらにはインターカレートする遷移金属原子の種類によってもこれらの性質が異なってくる。このような物性の変化を電子状態の違い、すなわち母体とインターカレートされた原子との混成の違い、電子間相互作用の度合いの違い等を調べるために我々は、反射分光、光電子分光、逆光電子分光を含めて様々な角度から高エネルギー分光を行った。本論文では、主に遷移金属2p内殻励起吸収スペクトル及び共鳴光電子分光スペクトルを通じて電子状態の議論をしている。

母体のTiS<sub>2</sub>のTi 2p XASスペクトルは形式的にTi<sup>4+</sup>の物質に特有なスペクトル形状を示した。一方、M<sub>x</sub>TiS<sub>2</sub>についての、Ti 2p XASスペクトルは母体のもとはかなり異なったスペクトル形状を示した。このスペクトル形状は比較的形式的にV<sup>4+</sup>の物質に特有な吸収スペクトル形状を示しているのが特徴である。このことから、インターカレーション物質ではTiの3d軌道に遷移金属(M)から電荷移動が起こっている事が示唆される。

Ti 2p XAS, XPSスペクトルにはメインピークに付随して明確なサテライト構造が現れている。このようなサテライトはTiO<sub>2</sub>などのTi酸化物でも観測されており、その起源が議論的になっていた。最近では、岡田等によって配置間相互作用(Configuration Interaction (CI))を取り入れた理論計算がなされておりサテライトを含めたスペクトル形状をよく再現している。TiS<sub>2</sub>, M<sub>x</sub>TiS<sub>2</sub>でもこのようなサテライトが明確に観測されている事からやはり上記のようなCI描像がよく成り立っていると考えられる。価電子帯についてもこのようなCI描像によるサテライト構造が現れる事が、岡田らによって示唆されており、我々はこれらの事を確かめる意味でも、価電子帯における共鳴光電子分光を行った。

このような吸収領域で共鳴光電子分光を価電子帯、内殻両方に付いて行っている。特に価電子帯の共鳴光電子スペクトルではたいへん興味深い結果が得られている。例えば、M<sub>x</sub>TiS<sub>2</sub>についての共鳴スペクトルでは、フェルミレベル直下の鋭い構造についてTi 2p → 3d (e<sub>g</sub>)におけるスペクトル強度がTi 2p → 3d (t<sub>2g</sub>)におけるものよりも強度の増大が顕著であることが観測された。本博士論文ではこのように対称性を分離して電子状態の議論を可能に

している。

### 論文審査の結果の要旨

本研究は、Mnを含むいろいろな強磁性合金や遷移金属をインターカレートした層状物質である  $\text{TiS}_2$  について電子状態を詳しく調べるために、軟X線吸収の磁気円偏光二色性や共鳴電子分光を行ったものである。

文部省高エネルギー物理学研究所放射光実験施設（フォトンファクトリー）の円偏光軟X線アンジュレーターを利用して内殻吸収の磁気円偏光2色性研究が可能となった。本研究では超高真空下で光電子の全収量を測定する事で内殻吸収を評価し強力永久磁石で磁化した試料についてその磁気円偏光2色性が測定された。そのスペクトル形状解析により磁性電子状態についての新たな詳しい情報が得られた。

また同施設の世界のトップレベルの分解能を持つ分光器を用いて内殻吸収や内殻共鳴光電子分光が行われた。対象とした層状半導体  $\text{TiS}_2$  はその層間に各種遷移金属原子をインターカレートすることによって磁氣的構造、輸送現象、熱的現象において母体とはかなり異なった性質を示す事が知られている。上記の測定より混成や電子間相互作用など電子状態についての新しい知見が得られた。また大学研究室においてはX線光電子分光や逆光電子分光測定を行った。これらすべての実験結果を理論研究と比較検討しこれらの物質の電子状態に付いての総合的知見を得るのに成功した。

これらの結果は国際会議でも発表され、また referee 付きの専門誌にも複数の論文として発表されておりそれらの集大成である本研究は博士（理学）を授与するにふさわしい論文と認められる。