



|              |  |
|--------------|--|
| Title        | Theoretical Study on Lattice Dynamics, Superconductivity and Transport Phenomena in Layered Transition Metal Dichalcogenide 2H-NbS <sub>2</sub> .  |
| Author(s)    | 西尾, 好正   |
| Citation     | 大阪大学, 1993, 博士論文   |
| Version Type |  |
| URL          | <a href="https://hdl.handle.net/11094/38226">https://hdl.handle.net/11094/38226</a>  |
| rights       |  |
| Note         | 著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">＜a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"&gt;https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed</a> >大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。 |

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

|               |  |
|---------------|--|
| 氏 名           | にし お よし まさ<br>西 尾 好 正  |
| 博士の専攻分野の名称    | 博 士 (理 学)  |
| 学 位 記 番 号     | 第 1 0 7 9 3 号  |
| 学 位 授 与 年 月 日 | 平 成 5 年 3 月 25 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     | <b>Theoretical Study on Lattice Dynamics, Superconductivity and Transport Phenomena in Layered Transition Metal Dichalcogenide 2H-NbS<sub>2</sub>.</b><br>(層状遷移金属ダイカルコゲナイド 2H-NbS <sub>2</sub> の格子振動, 超伝導および輸送現象に関する理論的研究) |
| 論 文 審 査 委 員   | (主査)<br>教 授 張 紀久夫<br><br>(副査)<br>教 授 朝山 邦輔    教 授 天谷 喜一<br>助教授 鈴木 直    助教授 大門 寛  |

### 論 文 内 容 の 要 旨

本研究では、微視的に導出した電子帯構造と電子格子相互作用を用いて、(1)NbS<sub>2</sub> および NbSe<sub>2</sub> の格子振動と構造相転移、(2)NbS<sub>2</sub> の超伝導、(3)NbS<sub>2</sub> の輸送現象、を統一的に理解することに成功した。NbS<sub>2</sub> および NbSe<sub>2</sub> は二次元性の強い層状物質で層間化合物の母体として応用的にも注目されている。

まず最初に、第一原理的に得られている電子帯構造を強結合法に基づいて再現した後、トランスファー積分の原子間距離依存性に起因する電子格子相互作用の結合係数を計算した。その結果c面内のNbの格子振動と伝導電子が特に強く相互作用することが明らかとなった。

上述の電子格子相互作用の効果を取入れて格子振動を計算した結果、電子格子相互作用のモード依存性を反映してc面内でのNbの縦振動モードのソフト化（振動数の低下）が両物質において大きいことを見出した。またこのソフト化は二次元的フェルミ面のネスティング効果によりブリルアンゾーンの $Q=2/3\Gamma M$ 近傍で最も顕著であることも見出した。さらに、この $Q=2/3\Gamma M$ におけるNbの縦振動モード凍結による構造相転移が、NbSe<sub>2</sub> では起こるのに対してNbS<sub>2</sub> では起らないことは、S-S間の短距離力の違いにより説明されることを明らかにした。

得られた格子振動と電子格子相互作用を用いて超伝導を特徴づけるスペクトル関数を評価した結果、Nbの振動、特に電子格子相互作用によって著しくソフト化したNbの縦振動に対応するエネルギー領域で顕著な値を持つことを見出した。このスペクトル関数を線形化されたエリアシュベルグ方程式に用いて求めた超伝導転移温度 $T_c$ は実験値と良く対応している。

輸送現象を特徴づけるトランスポート・スペクトル関数もやはりNbの縦振動に対応するエネルギー領域でのみ顕著な値を持ち、このトランスポート・スペクトル関数を用いて計算したc面内の電気抵抗率の温度変化は、格子振動の温度に依存したソフト化を考慮すると実験結果を定量的に良く説明することが明らかになった。また計算した熱抵抗率の温度変化も50 K以下の低温領域を除き、実験結果と定性的に一致する。

### 論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

遷移金属ダイカルコゲナイド NbS<sub>2</sub> は理論的にも興味ある多様な物性を示すと同時に、層間化合物の母体として応

用的にも注目されている。本論文は、電子格子相互作用がNbS<sub>2</sub>の種々の物性に果す役割を微視的な立場から理論的に明らかにした研究をまとめたもので、その主な研究成果は次の通りである。

(1) 強結合法に基づいて求めた電子格子相互作用はc面内のNbの格子振動と伝導電子が特に強く結合するという特徴を持っている。

(2) 上述の電子格子相互作用の効果を取入れて求めた格子振動はc面内でのNbの縦振動モードが著しくソフト化する(振動数が低下する)という特徴を有する。さらに、このソフト化は二次元的フェルミ面のネスティング効果によりブリルアンゾーンの $Q = 2/3 \Gamma M$ 近傍で最も顕著であり、NbSe<sub>2</sub>における電荷密度波転移はこの $Q = 2/3 \Gamma M$ におけるNbの縦振動モードの凍結による。また、NbS<sub>2</sub>で電荷密度波転移が起らないのは、S-S間の短距離力がNbSe<sub>2</sub>のSe-Se間の短距離力より大きいためである。

(3) 超伝導を特徴づけるスペクトル関数は電子格子相互作用によって著しくソフト化したNbの縦振動に対応するエネルギー領域で顕著な値を持ち、エリアシュベルグ方程式を解いて求めた超伝導転移温度 $T_c$ は実験値と良く対応している。

(4) 得られた電子格子相互作用により電子が散乱される効果を取り入れて計算したc面内の電気抵抗率および熱抵抗率の温度変化は、格子振動の温度に依存したソフト化を考慮すれば実験結果を半定量的に良く説明する。

以上のように本研究は、微視的に導出した電子格子相互作用を用いてNbS<sub>2</sub>の格子振動、超伝導および輸送現象を統一的に理解するとともに電子格子相互作用の果している役割を明らかにしており、物性物理学の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。