

| | |
|--------------|---|
| Title | Angle Resolved Photoemission Studies of Layer Type Transition Metal Compounds : 1T - TaS ₂ and 3d Transition Metal Intercalated TiS ₂ |
| Author(s) | 松下, 智裕 |
| Citation | 大阪大学, 1996, 博士論文 |
| Version Type | |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/39807 |
| 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"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。 |

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

| | |
|------------|---|
| 氏名 | まつしたともひろ 松 下 智 裕 |
| 博士の専攻分野の名称 | 博 士 (理 学) |
| 学位記番号 | 第 1 2 5 5 0 号 |
| 学位授与年月日 | 平成 8 年 3 月 25 日 |
| 学位授与の要件 | 学位規則第 4 条第 1 項該当 基礎工学研究科物理系専攻 |
| 学位論文名 | Angle Resolved Photoemission Studies of Layer Type Transition Metal Compounds : 1 T-TaS ₂ and 3 d Transition Metal Inter-calated TiS ₂ (層状遷移金属化合物の角度分解光電子分光研究 : 1 T-TaS ₂ と 3 d 遷移金属をインターカレーションしたTiS ₂ について) |
| 論文審査委員 | (主査) 教授 菅 滋正 (副査) 教授 鈴木 直 教授 中島 尚男 助教授 大門 寛 |

論 文 内 容 の 要 旨

LCAO近似した始状態と自由電子的な終状態を用いて角度分解光電子分光における光電子の放出角度分布の一般式を導いた。これを利用して1T-TaS₂の価電子帯を直線偏光で励起した場合の光電子放出分布を計算した結果、それが実験的に得られた光電子放出分布を良く説明することが分かった。さらに円偏光で励起した場合の光電子放出分布についても計算を行い、光電子放出角度分布における円二色性が非磁性の物質で起こり得ることを発見し、その起因を論議した。

遷移金属をインターカレーションした $M_x\text{TiS}_2$ ($M=\text{Mn, Fe, Co, Ni}$; $x=1/3, 1/4$) のバンド構造を角度分解光電子分光を用いて詳細に研究した。インターカレーションによるバンドの変形から $S3p$ と $M3d$ の混成が重要であることが分かった。Niをインターカレーションした場合、束縛エネルギー (E_B) が1.0eVにほとんど分散を示さないバンドが新しく現れた。このバンドはCoでは $E_B \sim 0.5\text{eV}$ に見られたが、Fe, Mnをインターカレーションした場合には見られなかった。このバンドは $\text{Ti } 3d_{z^2}$ と $\text{Ni } 3d_{z^2}$ の結合状態と考えられる。また、測定されたすべての $M_x\text{TiS}_2$ には $E_B \sim 0.2\text{eV}$ と 6.5eV に付加的な2つのバンドが存在する。これらのバンドは終状態 d^0 と d^1L の結合軌道と反結合軌道に起因すると考えられる。

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

本論文は層状物質の電子状態を研究するための2次元角度分解光電子分光の実験的研究と理論的研究から構成されている。

はじめにLCAO近似した始状態と自由電子的な終状態を用いて角度分解光電子分光における光電子の放出角度分布の一般式が導かれている。これを利用して層状金属1T-TaS₂の価電子帯を直線偏光で励起した場合の光電子放出2次元角度分布を計算した結果、それが実験的に得られた光電子放出分布の非対称性を定性的に良く説明することが分かった。さらに円偏光で励起した場合の光電子放出分布についても計算を行い、光電子放出角度分布における円二色性(CDADと呼ばれている)が非磁性の物質でも起こり得ることを予言し、その起因を議論している。この予言は今後の実験的研究によって確かめられるであろう。

次に遷移金属をインターカレーションした $M_x\text{TiS}_2$ ($M=\text{Mn, Fe, Co, Ni}$; $x=1/3, 1/4$) のバンド構造が角度分解光電子分光を用いて詳細に研究されている。インターカレーションによるバンドの変形から $S\ 3p$ と $M\ 3d$ の混成が重要であることを明らかにした。Ni をインターカレーションした場合、束縛エネルギー (E_B) が 1.0eV にほとんど分散を示さないバンドが新しく現れることならびにこのバンドは Co では $E_B \sim 0.5\text{eV}$ に見られるが、Fe, Mn をインターカレーションした場合には見られないことを紹介している。これらの結果よりこのバンドは $\text{Ti}\ 3d_{z^2}$ と $\text{Ni}\ 3d_{z^2}$ の結合状態と考えられるとされた。また、測定されたすべての $M_x\text{TiS}_2$ には $E_B \sim 0.2\text{eV}$ と 6.5eV に付加的な 2 つのバンドが存在するが、これらのバンドはクラスターモデルに立てば終状態 d^0 と d^1L の結合軌道と反結合軌道に起因すると考えられる。

これらの結果は実験的にも理論的にも新しいものであり、現在共に専門誌に投稿準備中である。以上のように本研究は独創性に富み博士 (理学) の学位にふさわしいと認められる。