

氏 名 (本 籍)	たか 高	はし 橋	はる 晴	お 夫 (神奈川県)
学 位 の 種 類	理	学	博	士
学 位 記 番 号	博	甲	第	24 号
学 位 授 与 年 月 日	昭和54年 3 月24日			
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 5 条第 1 項該当			
審 査 研 究 科	物理学研究科 物理学専攻			
学 位 論 文 題 目	The XUV Spectra of KMgF_3 , KZnF_3 , and NaMgF_3 . (極紫外領域に於ける KMgF_3 , KZnF_3 , NaMgF_3 の反射スペクトル)			
主 査	筑波大学教授	理学博士	尾 中 龍 猛	
副 査	筑波大学教授	理学博士	坂 柳 義 巳	
副 査	筑波大学教授	理学博士	中 村 正 年	
副 査	筑波大学教授	工学博士	松 浦 悦 之	

論 文 の 要 旨

結晶固体の電子状態は、原子配列の並進対称性のために、電子のエネルギー準位がいわゆる帯構造をなしており、一つのエネルギー帯の中では電子の伝播波数ベクトル \mathbf{k} の関数として表わすことができる。

このような固体の電子エネルギー帯構造を解明する仕事は、理論と実験双方から進められており、両者の比較によって、そのエネルギー準位の性格がかなりの精度で成功しているが複雑な構造をもつ結晶に関しては明らかにされてきている。しかし、この種の仕事は、比較的簡単な構造の結晶に関しては明らかにされた例はまだ少ない。

本論文もこの線に沿った研究であるが、対象とされた物質は ABC_3 という化合物の結晶で、結晶系はペロブスカイト型である。即ち、 KMgF_3 、 KZnF_3 および NaMgF_3 の単結晶を自作し、その光学反射スペクトルを $9\text{ eV} \sim 30\text{ eV}$ の極紫外領域で測定し、それからクラマース・クローニッヒ解析によって誘電率の実数部 ϵ_1 、虚数部 ϵ_2 のスペクトルを求めた。更に X 線光電子スペクトル (XPS) および紫外線光電子スペクトル (UPS) の測定も行って、有益な情報を得ている。

本論文で最も重要な部分は、基礎吸収端近傍に現われる励起子吸収帯の形状に関するものである。研究された物質はすべて単位胞の中に 3 個の F^- イオンを含んでおり、従って価電子帯を構成する F^- イオンの ($2p$) 電子はスピン・軌道相互作用を無視した場合でも尚 3 枚のエネルギー面から成っており、 Γ 点 ($\mathbf{k} = 0$) においては 2 個の Γ_{15} と 1 個の Γ_{25} から成っている。電子が全く空になっ

ている伝導帯の底は K^+ (又は Na^+) の s 電子と M ($=Mg, Zn$) の s 電子の混成した状態と考えられ、これはUPSの実験から確められた。価電子帯に对称性の同じな Γ_{15} が2個存在する結果、励起子として2種類 ($\Gamma_{15}^a - \Gamma_1$), ($\Gamma_{15}^b - \Gamma_1$) が可能となり、しかも両者の間には相互作用をもつことになる。価電子帯が1個の Γ_{15} できているアルカリハライドでは、スピン軌導相互作用を無視すれば、励起子は一種のみであり、スピン軌導相互作用を考慮すれば2種の励起子を生ずるが、この場合でも両者を結ぶ相互作用は交換相互作用のみでよい。著者の取り扱った物質では ($\Gamma_{15}^a - \Gamma_1$), ($\Gamma_{15}^b - \Gamma_1$) の2種の励起子の間に交換相互作用の他にクーロン相互作用も必要となってくる。

著者は以上の事情を考慮して、励起子帯の形を理論的に求めた。もちろん用いられる相互作用の大きさは第1原理から出発して理論的に求めることは困難であるが、実験と一致するように求められたその値は合理的な範囲に収まるものであることが解った。

著者は尚励起子帯の他の吸収帯についても、3種類の違った物質のスペクトルの類似性と相違を検討し、XUV領域の吸収帯の同定を行なっている。

審 査 の 要 旨

複雑な ABC_3 ペロブスカイト型結晶は、強誘電体になるものも多く、その電子構造は興味深い問題である。著者はこの複雑な構造の結晶の電子構造をより簡単な AB 型、例えばアルカリ・ハライドで得られている知識を基礎として、これを拡張することによってその解明を試みた。その結果、励起子吸収帯の形状について、励起子間の相互作用によるFano効果が明瞭に現われていることを示した。この事は他のペロブスカイト型結晶の励起子についても考えられることであり、この方面の研究に新しい解決法を見出したものと言うことができる。

実験に用いられた波長範囲はXUV領域であり、反射スペクトルの測定にも新しく解決を必要とする問題が多かった。著者は結晶試料の作製、光学測定に多くの新しい技術を開発し、実験に成功することができた。又スペクトル形状の解釈にはかなり難しい理論的技法を必要としたが、これにも成功した。これらの事実は著者の実験物理における卓越した能力を示すと共に、将来行われるであろうところのこの種の複雑な物質の研究に多大の貢献をなしたものと言うことができる。

よって、著者は理学博士の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。