

氏 名 (本 籍)	きん の しげ お	金 野 茂 男 (岩手県)
学 位 の 種 類	理 学 博 士	
学 位 記 番 号	博 甲 第 100 号	
学 位 授 与 年 月 日	昭 和 56 年 3 月 25 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 Optical Properties and the Electronic Band Structures of MgCl ₂ and MgBr ₂ (MgCl ₂ とMgBr ₂ の光学的性質と電子帯構造)	
主 査	筑波大学教授	理学博士 尾 中 龍 猛
副 査	筑波大学教授	工学博士 松 浦 悦 之
副 査	筑波大学教授	理学博士 新 井 敏 弘
副 査	筑波大学教授	理学博士 澤 田 克 郎

論 文 の 要 旨

MgCl₂, MgBr₂単結晶は三方晶系に属し、空間群は前者がD_{3d}⁵ (R $\bar{3}m$) 後者がD_{3d}³ (C $\bar{3}m$) である。異方性が極めて大きく、C軸に垂直な面で劈開し易く、雲母のように薄片になり易い結晶である。又空气中で潮解性が大きく、取り扱いに注意が必要である。

本論文は、MgCl₂, MgBr₂の電子構造を実験的、理論的に研究したものである。実験的には、6^{ev} ~ 25^{ev}の領域で反射率を測定し、それより光学常数を求めた。

基礎吸収スペクトルには数多くのピークが観測された。一方理論的には、価電子帯、内殻電子帯については強束縛近似法を用いガウス型波動関数を用いて帯構造を計算した。伝導帯は平面波近似を用いた。この計算結果と、基礎吸収スペクトルを比較して、各吸収ピークの遷移の同定が行われた。更に上記の遷移の同定を確実なものにするため、劈開面への垂直入射だけでなく、60°~75°の斜入射P一偏光の反射スペクトルを測定した。これはC軸に垂直な劈開面への垂直入射反射スペクトルでは、光の電気ベクトルがC軸に垂直な成分のみが測定され、平行な成分の測定が不可能であるからである。斜入射P一偏光の反射スペクトルの結果、吸収ピークの同定が確実なものとなった。

得られた結果を総括すると、先づMgCl₂において8.5^{ev}付近に現われる吸収ピークはブリルアン帯のΓ点におけるΓ₃⁻, Γ₂⁻→Γ₁⁺帯間遷移に関係した励起子吸収であり、その高次励起子が9.2^{ev}付近に現われている。10.3~11.7^{ev}付近の3ケの吸収帯はZ点での遷移に対応するもので、偏光特性から10.3^{ev} (C帯), 10.7^{ev} (D帯) はそれぞれ Z₃⁻→Z₂⁻, Z₃⁻→Z₁⁺ 遷移と関係し、11.5^{ev} (E帯) はZ₁⁺→Z₂⁻遷

移に対応することが解った。MgBr₂においても同様の解析が行われた。特にMgBr₂では第1励起子吸収帯が4本に分離した構造をもっているが、これも斜入射反射スペクトルにおける強度変化からA₁ (6.7^{ev}), A₃ (7.0^{ev})はE//C, E⊥Cに対して許容であるので、Γ₄⁻→Γ₄⁺遷移, A₂ (6.8^{ev}), A₄ (7.2^{ev})はE⊥Cに対してのみ現われるので、Γ₅⁻又はΓ₆⁻からΓ₄⁺への遷移に対応した励起子吸収であることが明らかとなった。

審 査 の 要 旨

固体特に誘電体結晶のエネルギー帯構造の研究は、理論的にはコンピューターの高性能化、実験的には光源としてシンクロトン放射が利用できる様になった為、最近急速に進歩した領域である。最初は結晶構造が簡単で、対称性の高いアルカリ・ハライド等の研究が主であったが、次第に複雑な構造をもつ結晶、対称性の低い結晶の研究に進んできている。本研究もその流れに沿った研究であるが、MgCl₂, MgBr₂は層状結晶であるため劈開し易く、劈開面に垂直な結晶面を得ることが困難な結晶であった。著者は、このような面に頼ることをさげ、劈開面に光を斜に入射して、P一偏光の反射スペクトルを測定することによって、光の電気ベクトルが劈開面に垂直な光学常数の決定に成功した。この測定は他の劈開性の強い物質の研究にも有力な手段を与えるものである。

著者の行なった基礎吸収スペクトルの解釈は、理論的にも正しく、偏光実験も信頼できるものである。MgCl₂, MgBr₂において、吸収帯の同定に成功したことは、他の層状結晶構造をもつ物質にも解明の手段を与えるものであり、固体物性物理学の進歩に貢献する所が大きい。また、本研究で示された著者の物性物理学に対する理解力と、実験手段において示された研究能力は高く評価される。

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。