

氏名(本籍)	みやうちひろし 宮内洋司(茨城県)		
学位の種類	博士(理学)		
学位記番号	博甲第1,845号		
学位授与年月日	平成10年3月23日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	物理学研究科		
学位論文題目	Core-Level Magnetic Circular Dichroism Study of 3d Transition-Metal Chalcogenides (3d 遷移金属カルコゲナイドの内殻吸収磁気円二色性)		
主査	筑波大学教授	理学博士	福谷博仁
副査	筑波大学教授	理学博士	長澤博
副査	高エネルギー加速器研究機構助教授		
		理学博士	小出常晴
副査	高エネルギー加速器研究機構助教授		
		理学博士	設楽哲夫

論文の内容の要旨

固体の磁気的性質のミクロな起源は、大別して2つのモデル(局在モデル, 遍歴モデル)で説明される。局在モデルでは、磁性は原子の局在モーメントに起因し、磁性ガーネットなど酸化物磁性体に対して良い近似となる。一方、遷移金属およびその合金などの磁性は、固体中を遍歴する電子により良く説明され、磁気(スピン)偏極した電子状態に微視的起源が求められる。

CoS₂などの3d 遷移金属カルコゲナイドは、3d 電子が遍歴電子と局在電子の中間の性質を持つため多彩な磁気的性質(強磁性, 反強磁性, フェリ磁性, 常磁性)を示し、これらの物質の電子的, 磁気的状態の研究は磁性の微視的起源の理解に重要な鍵となる。中性子回折, 正逆光電子分光, 飽和磁化測定がこれまで研究されてきたが、スピン偏極した3d電子状態の知識を得るに至っていなかった。

本研究は、円偏光放射光を利用することで可能になった内殻吸収磁気円二色性実験により、3d遷移金属カルコゲナイドのスピン偏極3d電子状態に関する情報を得、磁性の微視的起源を解明したものである。論文は2つの主要部分より構成される。

1) CoS₂の内殻吸収磁気円二色性の研究

内殻吸収磁気円二色性の総和則および内殻吸収の元素選択性を利用して、磁性を担うCoのスピン磁気モーメントと軌道磁気モーメントを分離して求め、 $m(\text{spin})=0.74\mu_B$, $m(\text{orb})=0.10\mu_B$ を得た。これらの値は、飽和磁化測定値 $m(\text{total})=0.855\mu_B$ と良く一致する。 $m(\text{spin})$ の値に基づいて、スピン偏極した3d電子状態の状態密度(3dDOS)を初めて決定した。また同時にCo sp伝導帯中のCo s成分のスピン分極を確認し、s-d混成でよく説明できることを示した。

2) Fe₇S₈, 3c-, 4c-Fe₇Se₈の内殻吸収磁気円二色性の研究

これらの物質の磁気的性質は飽和酸化の値もこれまでの研究では確定されていなかったが、本研究により初めてそれぞれFe₇S₈化学式当り $m(\text{spin})=2.0\mu_B$, $m(\text{orb})=0.16\mu_B$, 3c-Fe₇Se₈化学式当り $m(\text{spin})=2.3\mu_B$, $m(\text{orb})=0.40\mu_B$, 4c-Fe₇Se₈化学式当り $m(\text{spin})=2.4\mu_B$, $m(\text{orb})=0.070\mu_B$ と高い信頼性で決定した。CoS₂と同様に、スピン偏極3dDOS初めて得た。これまでに報告されているバンド計算は3d多数スピン状態が殆ど占有されている

結果を与えている。本研究の結果はそれを否定するものであり、3d 多数スピン状態にも多くの空準位が存在することを明らかにした。また Fe sp 伝導帯中の Fe s 成分のスピン分極も観測した。

審 査 の 結 果 の 要 旨

固体の磁氣的性質の微視的起源の解明には、電子的、磁氣的状態の研究、特にフェルミ準位近傍の磁性を担う元素が関与する電子状態の情報を得ることが最も直接的であるが、従来の方法（中性子回折、正逆光電子分光、飽和磁化測定など）では困難であった。

本研究で著者は、円偏光放射光を利用した内殻吸収磁気円二色性実験により、スピン偏極した電子状態の知見が得られることを示すことができた。内殻吸収磁気円二色性実験は磁性研究の新しい手法として世界の研究者から注目されているが、本論文は著者によるわが国では最初の系統的な研究のひとつであり、以下の点で磁性の微視的起源の解明に大きく貢献し、新しい知見を与えるものとして高く評価できる。

(1)遷移金属カルコゲナイト (CoS_2 , Fe_7S_8 , Fe_7Se_8) の磁性を担う遷移元素の電子状態について、初めてスピン分極した電子状態密度を定量的に決定した。

(2)それぞれの物質のスピン磁気モーメント、軌道磁気モーメントを分離して決定し、より詳細な磁氣的性質を明らかにした。

(3)内殻吸収磁気円二色性実験が磁性の微視的起源の解明に最も有効な手法のひとつであることを、系統的研究により明らかにした。

よって、著者は博士（理学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。