

Title	価電子力場モデルによる FexNbS_2 ($x=0, 0.25$) の長波長フォノンの解析
Author(s)	小野田, 寛子
Citation	
Issue Date	2001-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	http://hdl.handle.net/10119/2752
Rights	
Description	Supervisor: 片山 信一, 材料科学研究科, 修士

価電子力場モデルによる Fe_xNbS_2 ($x=0,0.25$) の長波長フォノン の解析

小野田 寛子 (片山研究室)

2H-NbS_2 は S-Nb-S 層を単位層とし、層間がファンデアワールス力で結合した層状物質である。この層間に濃度 x で Fe 原子をインターカレートした系を層間化合物 Fe_xNbS_2 と呼ぶ。最近のラマン散乱測定において、 $x=0.25$ では他の濃度のものに比べ、より多くの新しいピークが報告された。これは $2a \times 2a$ の超格子を形成するという特徴から Brillouin ゾーンが半分に折り畳まれ、M 点にあるフォノンが Γ 点に現れると考えられるが、それだけでは説明できないピークが存在する。本研究では相関法と価電子力場 (Valence-Force-Field: VFF) モデルにより母体 2H-NbS_2 の長波長フォノンモードのエネルギーと原子変位の解析を行ない、それに基づいて $\text{Fe}_{0.25}\text{NbS}_2$ の A_{1g} モードのエネルギーを求め、実験値と比較、検討することを目的とした。

図 1 に示すように我々の VFF 解析で用いる三角プリズムは、中心にある Nb 原子の d-軌道とその周囲の S 原子の p-軌道の混成により安定化したものと考えられる。 2H-NbS_2 の基本単位胞は 2 個のプリズムから構成され、2 個の Nb 原子と 4 個の S 原子を含む。一方 $\text{Fe}_{0.25}\text{NbS}_2$ の基本単位胞はその 4 倍のプリズムと 2 個の Fe 原子を含む大変大きなものとなる。

VFF モデルに基づき各原子変位に対応するボンド長変化 Δr 、ボンド角の変化 $\Delta\psi$ 、 $\Delta\theta$ 、 $\Delta\phi$ を求め、全ポテンシャルの増分

$$\Delta\Phi = \frac{1}{2} \sum_{\text{Nb-S}} k_r (\Delta r)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\text{S-Nb-S}} k_\psi (r\Delta\psi)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\text{S-Nb-S}} k_\theta (r\Delta\theta)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\text{Nb-S-Nb}} k_\phi (r\Delta\phi)^2,$$

に層間の中心力の寄与 (k_R) を加えて、各原子の運動方程式を導いた。

数値計算はこの VFF モデルで求めた母体 2H-NbS_2 の周波数の表式と実験結果を比較し、最小二乗法からパラメータ k_r 、 k_ψ 、 $k_\theta+k_\phi$ 、 k_R を決定した。更に、 2H-NbS_2 の各モードについて、 k_r のみ、 $k_\theta+k_\phi$ のみ、 k_R を除いた他の力、全てを入れた力での振動解析を行ない、周波数、原子の動きとボンド伸縮、ボンド変角、層間相互作用との関係を明らかにした。その結果、興味深い挙動を示したのが E_{1g} モードである (図 1)。これより層間の k_R によって上下層の位相が定まることが分かる。次に $\text{Fe}_{0.25}\text{NbS}_2$ について同一のパラメータを用い A_{1g} モードの固有ベクトルと周波数を求めた。図 2 の $\text{Fe}_{0.25}\text{NbS}_2$ の準位 4 が実験で得た Brillouin ゾーンの折り返しと一致しないフォノンである。本研究の計算ではこれに対応すると思われるエネルギーを求めることができた。

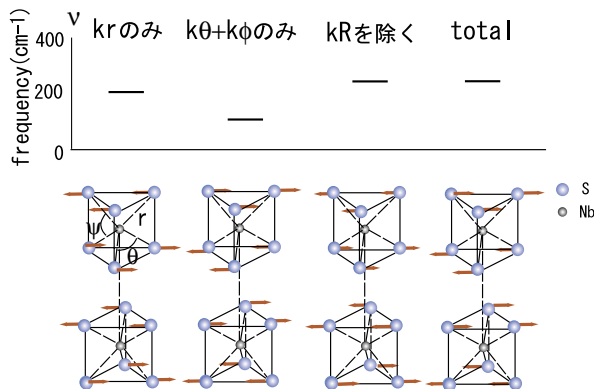
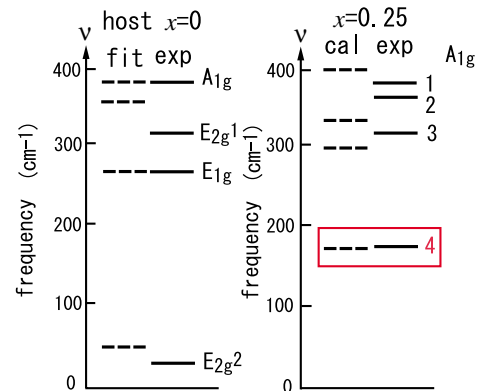
図 1: 2H-NbS_2 の E_{1g} モードの解析。

図 2: フォノンエネルギーの測定値と理論値。

keywords 価電子力場モデル, 2H-NbS_2 , $\text{Fe}_{0.25}\text{NbS}_2$, 長波長フォノン