

佐々木研究室

身近な結晶で電子の世界を覗く

URL: <http://lipro.msl.titech.ac.jp/>



教授
佐々木 聡
博士 (理学)



助教
奥部真樹
博士 (理学)

固体の電子的な性質（機能や物性）と結晶構造との関係を知ることは、エレクトロニクスを始めとする多くの分野で重要です。研究室では、ミクロ領域で結晶構造や電子構造が、どのようにマクロの世界にかかわっているかを明らかにしたいと考えています。

このため、セラミックスなど機能性材料の結晶構造解析、混合原子価化合物での相転移や電荷秩序・価数揺動の研究、磁気吸収やX線共鳴磁気散乱による磁性材料の研究、機能性酸化物の電子状態の研究、計算機シミュレーション、高温高圧下での構造物性研究、地球・惑星物質の局所構造解析、地球環境を考慮した高集積熱電変換や廃熱回収システムなどの研究課題を実施しています。

電子状態や電荷整列の研究

光が物質にあたると、吸収・散乱・回折現象などが起きてその電子状態が変化します。物質を構成する原子の大きさや物質内電子のエネルギーに合せた光（X線）を用いると、原子や分子の配列や結晶の電子状態を研究できます。

これらの先端的研究には、シンクロトロン放射光や中性子など量子ビームの利用が不可欠です。特に研究室では、回折散乱に分光学的手法を取り入れた放射光測定技術の開発に力を入れ、結晶内原子の電子状態を研究しています。

放射光の連続光という特徴を利用した共鳴散乱で、 Eu_3S_4 の価数が異なるEuイオンを区別し、電荷秩序を求めた実例を図1に示します。

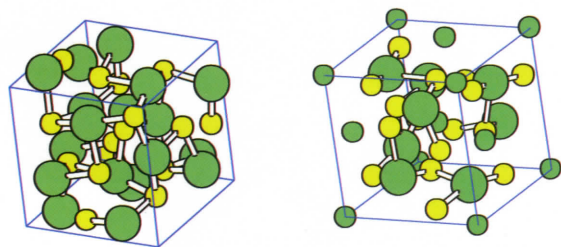


図1. Eu_3S_4 の高温相（左）。低温相（右）では4aサイト（緑小球）に Eu_3^{+} 、8d（緑大球）には $\text{Eu}_2^{+}+\text{Eu}_3^{+}=1:1$ 。

共鳴磁気と電子状態密度

放射光の特徴である直線偏光を円偏光に変換することで、共鳴磁気散乱効果から、フェリ磁性を示すマグネタイト（ Fe_3O_4 ）の不对電子の状態密度（DOS）を原子が占めるサイトを区別しながら実験的に求めることができました（図2）。この結果は、1sから3d(4p)に移る電子遷移と密接に関係しており、第一原理計算によるDOSともよい一致を示しました。

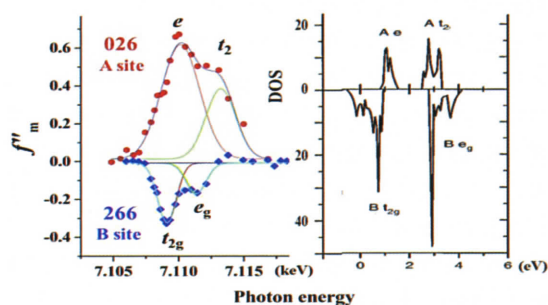


図2. Fe_3O_4 のFe共鳴磁気散乱因子（左）と理論DOS。

磁気構造の研究

軌道磁気とスピン磁気モーメントは、マクロな磁性を理解する上で基本的な量です。研究室では、磁気光学効果（X線磁気円二色性、XMCD）や磁気散乱の実験により、遷移金属・希土類元素酸化物の電子状態や磁気状態を研究しています。 NiFe_2O_4 のXMCDスペクトルとFeイオンの理論電子密度分布を示します（図3）。

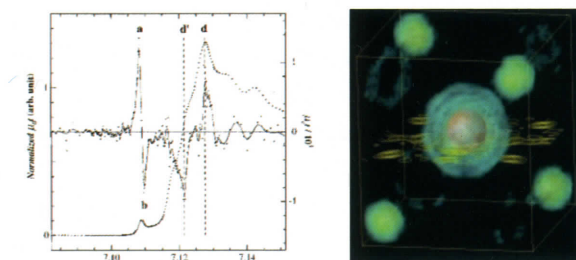


図3. NiFe_2O_4 のXMCDと Fe_3O_4 内AサイトFeの理論電子分布。

電子密度分布の研究

結晶構造解析では、電子密度分布が求められます。例えば、図2の $E = 7.109 \text{ keV}$ のX線を選んで磁気共鳴散乱を測定すれば、その電子遷移が関係するe軌道と t_{2g} 軌道の電子の空間的な広がりがフェリ磁性を示す正負ピークとして観測できます（図4）。

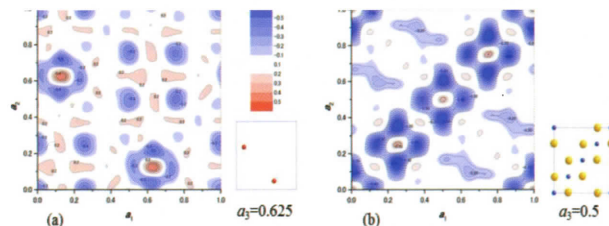


図4. Fe_3O_4 の(a) Aサイトと(b) Bサイトでの共鳴磁気散乱する磁性電子の密度分布。赤: spin up, 青: spin down。