

活性サイト周りの 3次元原子構造と局所電子状態の解明による 新機能材料の創成

大門 寛

奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究科

我々は、BL07LSU の可変偏光（直線偏光と円偏光）を利用し、独自に開発してきた回転楕円面メッシュ二次元表示型光電子分光装置（DELMA）を用いた二次元光電子分光測定を行い、活性サイト周りの 3次元原子構造と局所電子状態の解明による新機能材料の創成を目的としている。

原子配列を知ることは物性解明の基礎であるが、結晶にならない非周期の局所構造の 3次元原子配列や電子状態を見る方法はほとんどない。局所構造は X線回折では見ることはできず、局所電子構造も通常の光電子分光では見ることはできない。このような非周期構造の原子配列は「光電子ホログラフィー」¹⁾、「立体原子写真法」²⁾で 3次元原子配列を直接可視化できる。また、局所電子状態は「偏光二次元光電子分光」³⁾、「光電子回折分光法」⁴⁾で軌道の対称性、磁気量子数、波動関数を構成する原子軌道の係数についての情報を得ることができる。これらの独自の手法を駆使して局所的な「活性サイト」の周りの原子構造と電子状態を解明し、その結果としてもたらされる「局所的な物性科学」を開拓する「3D 活性サイト科学」⁵⁾が科研費の新学術領域として発足した。

DELMA 分析器は、 $\pm 50^\circ$ 程度の広い立体角の放出角度分布が一度に得られるのみならず、試料表面の拡大像も見える顕微鏡機能が付いており、試料表面の微小領域だけを選択して二次元光電子分光を行うことができる。高エネルギー分解能の分析器 R4000 が付いているため、価電子帯の高分解能の研究が可能である。

本年度は、鉄ヒ素系超伝導体母物質 BaFe_2As_2 、 NiO 、マグネタイト Fe_3O_4 などを試料として用い、フェルミ面や価電子帯を構成する原子軌道や、価数選択原子構造の解明を行った。 BaFe_2As_2 については価電子帯の測定を、 NiO については価電子帯と内殻光電子回折パターンの測定を行った。 Fe_3O_4 については $\text{Fe}2p$ 内殻の光電子回折パターンの測定に成功し、解析により 2 価と 3 価の価数分離やサイト分離のパターンを得ることに成功した。

我々の実験はフリーポートに測定のたびに装置を接続して放射光ビームと分析器の位置合わせから行うため、測定の立ち上がりに時間がかかる。次回からは装置の設置方法を改良する。

- 1) T. Matsushita, et al. J. Phys. Soc. Jpn. 82 114005 (2013).
- 2) H. Daimon, Phys. Rev. Lett. 86, (10) 2034-2037 March (2001).
- 3) F. Matsui, et al., Surf. Rev. Lett. 14, 637 (2007).
- 4) F. Matsui, et al. J. Electr. Spectr. Relat. Phenom. 181, 150 (2010).
- 5) URL: <http://www.3d-activesite.jp/home>

