

共鳴磁気散乱を用いた差フーリエ法による 磁性電子密度分布の研究

奥部真樹、金子悠平、安江拓也、佐々木聡、・東京工業大学

X線共鳴磁気散乱 (RXMS) で電子非占有準位への電子遷移を利用すると、遷移金属元素の3d-4p軌道や酸素の2p軌道などのスピン分極を反映した磁気情報が得られる。本研究では、吸収端近傍の左右円偏光X線を用いて回折強度の差をフーリエ変換することで、フェリ磁性であるマグネタイト Fe_3O_4 に対し、Feイオンに関係する不対スピン電子の空間分布を求める試みを行った。

RXMS実験は、移相子システムが常設されているPF-BL6Cにて行った。実験波長は、XMCD実験より得られた磁氣的応答の比較的強い波長($\lambda = 1.7442 \text{ \AA}$, $E = 7.1082 \text{ keV}$)を選択した。試料には Fe_3O_4 単結晶を用い、外部磁場中に設置した。回折強度の測定には、BL-6Cに今年度設置された、Rigaku AFC-5回折計を用いた。左右円偏光それぞれについて、124個のブラッグ反射の積分反射強度を測定した。偏光補正等を行った後に、原子散乱因子の共鳴磁気散乱項が結晶構造因子の観測値に残るよう処理した上で、以下の式(1)に基づいて差フーリエ合成を試みた。

$$\begin{aligned} \Delta\rho(\mathbf{r})^{\text{spin}} &= \Delta\rho_{\text{obs}}(\mathbf{r})^{\text{left}} - \Delta\rho_{\text{obs}}(\mathbf{r})^{\text{right}} \\ &\cong \frac{1}{V} \sum \sum \sum \left[\left(\left| F_{\text{obs}}^{E,\text{left}} \right| - \left| F_{\text{obs}}^{E,\text{right}} \right| \right) / \left(\left| F_{\text{obs}} \right| + 1 \right) \left| F_{\text{calc}} \right| - \left| F_{\text{calc}} \right| \right] \exp(-2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1)$$

左右円偏光での電子密度の差、を図1に示す。BサイトにあるFeイオンの位置(1/2,1/2,1/2)においては+の密度分布が得られた。これがアップスピン電子の密度分布であるとする、a1軸とa2軸方向に1/2離れた位置にある酸素原子近傍では、a1-a2平面で斜め45度方向にダウンスピンの電子軌道を持っていると理解できる。

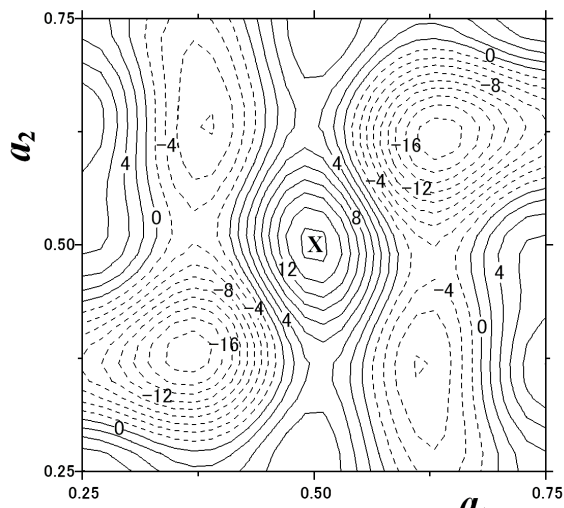


図1: Fe_3O_4 の磁気電子密度分布図 ($\text{e}/\text{\AA}^3$ 単位)。図は B サイトの $X=(1/2,1/2,1/2)$ を通過する $(hk0)$ 面。等高線間隔: $0.04 \text{ e}/\text{\AA}^3$ 、数字: 50 倍値、実線が+、破線が-。