



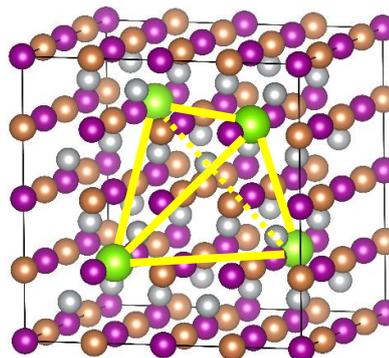
福原 忠 (物性物理 (実験))

## 結晶中で整列する「穴ぼこ」

第1回の執筆を初代ホームページ編集長の谷田先生から依頼されました。第1回投稿という責任の重さに潰されそうになりながら(というか、潰れた状態で)この記事を書いています。さて、教養教育センターのみなさんは約3年に1回マンスリーコラムを書く事になります。コラムの主題は自由でよいとのことですが、もし可能な方は、それぞれのご研究で「最近見つけたちょっと面白い結果」を(公表してよい範囲で)一般向けにご紹介いただくと、楽しく読めてよいと思います。一方で、まとまった研究成果は「最近の研究成果」で存分に書いていただくと、これまたよいと思います。

さて、私はこの20年くらいNiMnSb(ニッケル・マンガン・アンチモン)という物質の研究に取り組んでいます。この物質はハーフメタル強磁性という変わった磁性を示す事が理論的に予想されていますが、誰も観測に成功していません。別の理論計算では、ハーフメタル状態は結晶の乱れに極めて弱い事が示されており、ハーフメタル状態を観測できない理由の一つとして考えられていました。そこで、2018年に大学院生の神谷さんとNiMnSb単結晶の品質を精密に評価したところ、得られている最良のサンプルでも約1%のSbが欠損していることがわかりました。そこで、私の共同研究者は1000個以上の試料を作り、その作成条件を探索しましたが、どうやってもSb欠損を無くすことができず、その理由はわからないままでした。

右に示した絵の様に原子が規則正しく並んだ状態を結晶といい、その並び方を調べるにはX線を使います。結晶は鏡のようにX線を反射することができるのですが、鏡による光の反射と違う点は、結晶構造で決まる特定の角度にのみ反射が生じることです。それゆえ、反射の様子(X線回折といいます)を詳しく調べることで、結晶中の原子の並び方を知ることができます。以前よりNiMnSbのX線回折には、原因不明の弱い反射が現れる事がわかっていました。余計な反射を生じる不純物化合物は含まれていないはずなので、その弱い反射はNiMnSbの結晶に由来するはずですが、2年程前ですがSb欠損(穴ぼこ)が整列してX線を反射する構造を作っているのではないかと思いつき、X線回折のシミュレーションを行ったところ、右図の様に欠損が正四面体の頂点に並ぶ構造が弱い反射の原因であることがわかりました。こういう構造ができやすいためにSb欠損が不可避に残るのかもしれませんが、しかし、実際に観測されている結晶のSb欠損率(1%)は、この構造の欠損率(12.5%)よりかなり小さく、この構造が現れるのは結晶のごく一部に限られていると思われます。この点をうまく説明できる理屈を考える事が当面の課題です。



NiMnSbの結晶構造。Ni, Mn, Sbの原子は、それぞれ灰、紫、茶色の球で示されています。緑は、本来はSbのあるべき場所にできた「穴ぼこ」で、ちょうど正四面体の頂点に位置しています。図の黒線で描かれた立方体の中には32分子のNiMnSbが含まれていることから、Sbの欠損は32個中4個(12.5%)となります。