

論文審査の結果の要旨

氏名 奈須 義総

本論文は全5章より構成されており、第1章では研究の背景と目的、第2章ではイプシロン酸化鉄の第一原理計算及び吸光スペクトルの測定、第3章ではイプシロン酸化鉄の可視光吸収におけるアルミニウム置換効果、第4章ではイプシロン酸化鉄の可視光吸収におけるガリウム置換効果、第5章では研究のまとめと今後の展望について述べている。以下に各章の概要を示す。

第1章では、本研究の背景として、酸化鉄および本研究対象であるイプシロン酸化鉄について述べられている。イプシロン酸化鉄の発見、合成手法、結晶構造、相安定性、磁気特性、電磁波吸収特性に関する説明がなされており、特に結晶構造に関しては、4種類の鉄イオンサイト（A, B, C, D サイト）が存在し、様々なイオンで金属置換できることに言及している。また、色の薄い磁性体である透明磁性体について述べた後、本研究の目的としてイプシロン酸化鉄の色について検討したことを述べている。

第2章では、イプシロン酸化鉄の電子状態と可視光領域の吸光係数について述べている。第一原理計算を行うことにより、バンドギャップが 2.4 eV の強い吸収と 2.0 eV の弱い吸収の存在が示唆され、弱い吸収が鉄の D サイトに隣接する酸素のサイトから鉄の C サイトへの遷移に帰属されることが示唆されている。高分子を含む有機溶媒に分散したイプシロン酸化鉄の紫外可視吸光スペクトルの測定結果からイプシロン酸化鉄の吸光係数が低いことが示されており、これらの結果からイプシロン酸化鉄が広いバンドギャップを持つ色の薄い磁性体であると結論づけている。

第3章では、イプシロン酸化鉄の可視光領域の吸光係数におけるアルミニウム置換効果について検討している。アルミニウムイオンで D サイトを置換したイプシロン酸化鉄の第一原理計算の結果、ダウンスピンとアップスピンの遷移が、それぞれ 2.0 eV から 2.5 eV、及び、2.4 eV から 2.6 eV へと増大することが示唆されている。この原因として、無置換体における D サイトに由来するエネルギー状態が、アルミニウム置換により消失することが述べられている。紫外可視吸光スペクトルの測定結果からアルミニウム置換によって吸光係数の減少が観測されており、アルミニウム置換によって、バンドギャップが増大し、色が薄くなる効果があると結論づけている。

第4章では、イプシロン酸化鉄の可視光領域の吸光係数におけるガリウム置換効果について検討している。第一原理計算及び紫外可視吸光スペクトルの測定結果から、ガリウムイオンによる金属置換はアルミニウムイオンによる金属置換と同様の効果、すなわち、イプシロン酸化鉄のバンドギャップを増大させ、色を薄くする効果があることが述べられている。

本論文では、酸化鉄の中でも稀な相であるイプシロン酸化鉄の可視光領域における吸光

係数とその金属置換効果について、第一原理計算と実験を用いて検証している。イプシロン酸化鉄が色の薄い磁性体であり、アルミニウムイオン及びガリウムイオンで置換することで、その色をさらに薄くできることを示し、そのメカニズムについて説明している。本論文の結果は、イプシロン酸化鉄の電子状態の解明だけでなく、色の薄い磁性体の発展に貢献できると考えられ、物理化学、固体化学をはじめとした広範な分野の進展に役立つと期待される。なお、本論文の第2章は、大越慎一、生井飛鳥、井元健太、吉清まりえ、太郎良和香、中川幸祐、小峯誠也、宮本靖人、岡俊介、所裕子との共同研究であり、既に学術雑誌として出版されたものであるが、本論文の第2章に該当する箇所については論文提出者が主体となって行ったものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断する。また、本論文第3章については、吉清まりえ、所裕子、生井飛鳥、大越慎一との共同研究であり、既に学術雑誌として出版されたものであるが、論文提出者が主体となって行ったものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。