

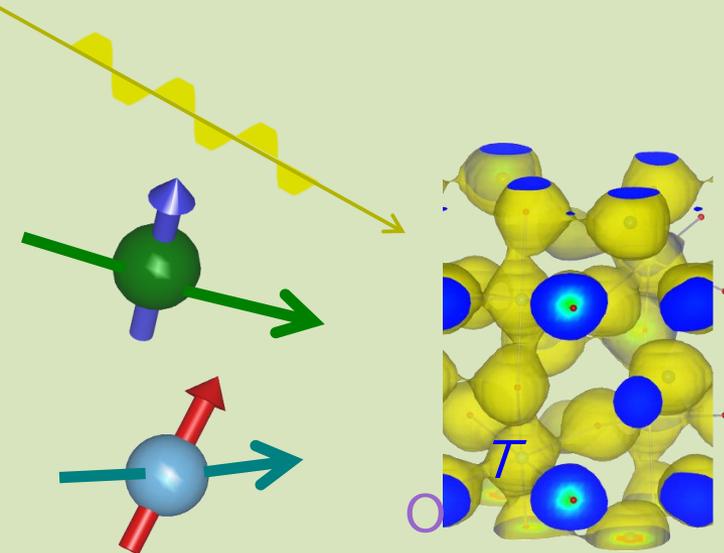


強相関電子系における 軌道混成秩序とその外場応答

- プロジェクト進捗状況 -

Condensed matter research center (CMRC)
Photon Factory, IMSS, KEK

中尾裕則



軌道混成秩序:

軌道混成の変調構造

バンド幅

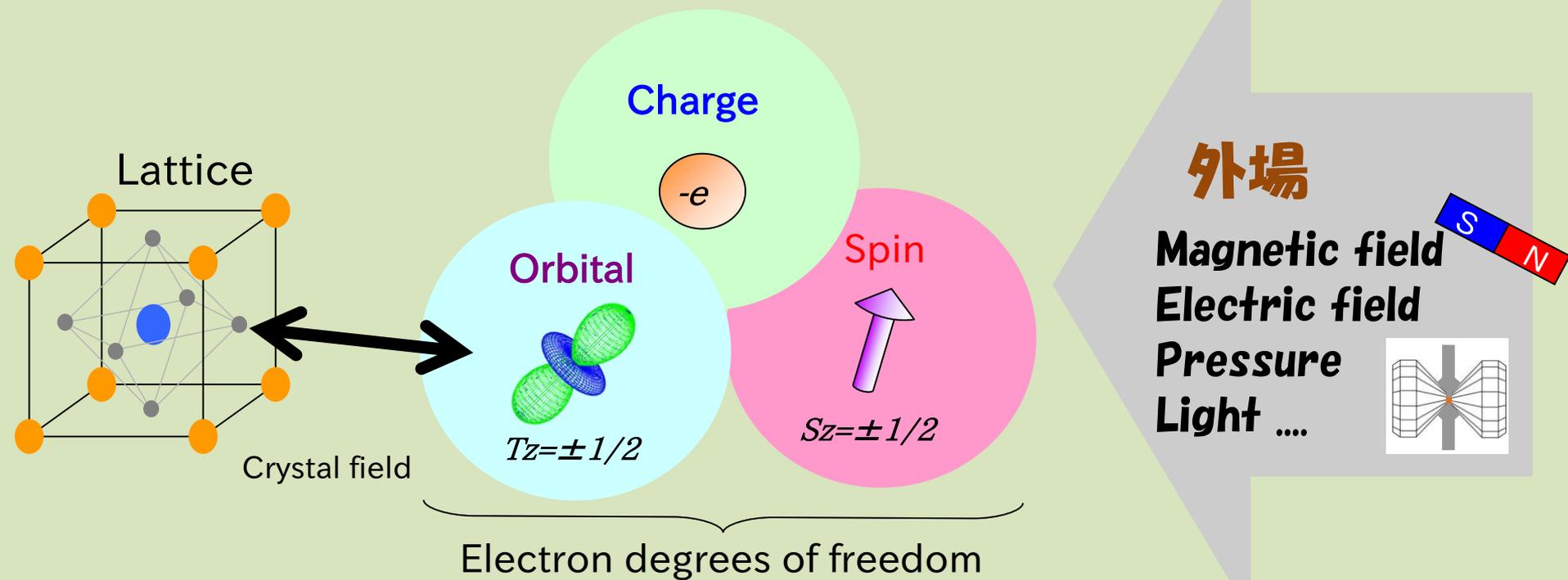
局在



遍歴



強相関電子系では...



Various remarkable physical properties

High T_c superconductivity,
Colossal magnetoresistance effect,
Gigantic magnetoelectric effect,

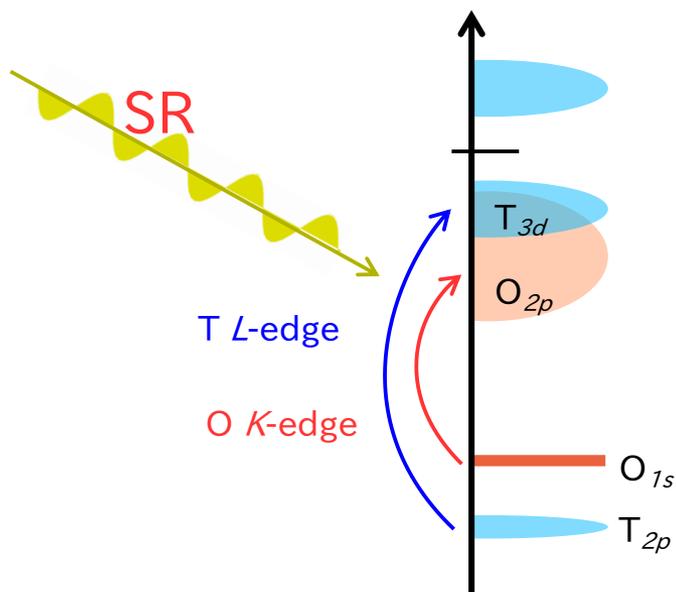
.....



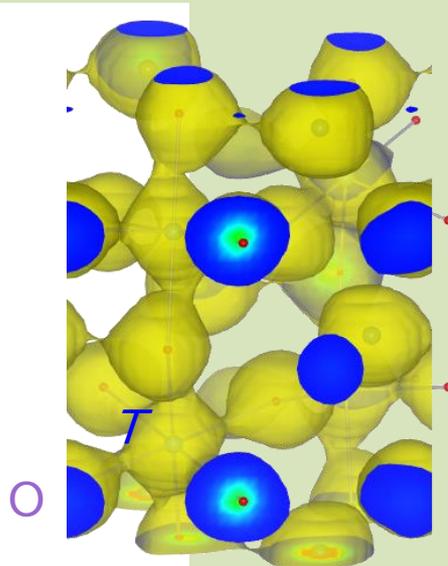
軌道混成状態の解明を通じた 構造物性研究

共鳴軟X線散乱

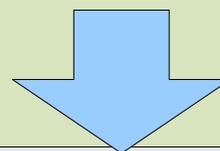
Element & orbital selective info.



Direct info. of $T3d$ & $O2p$
in soft x-ray region



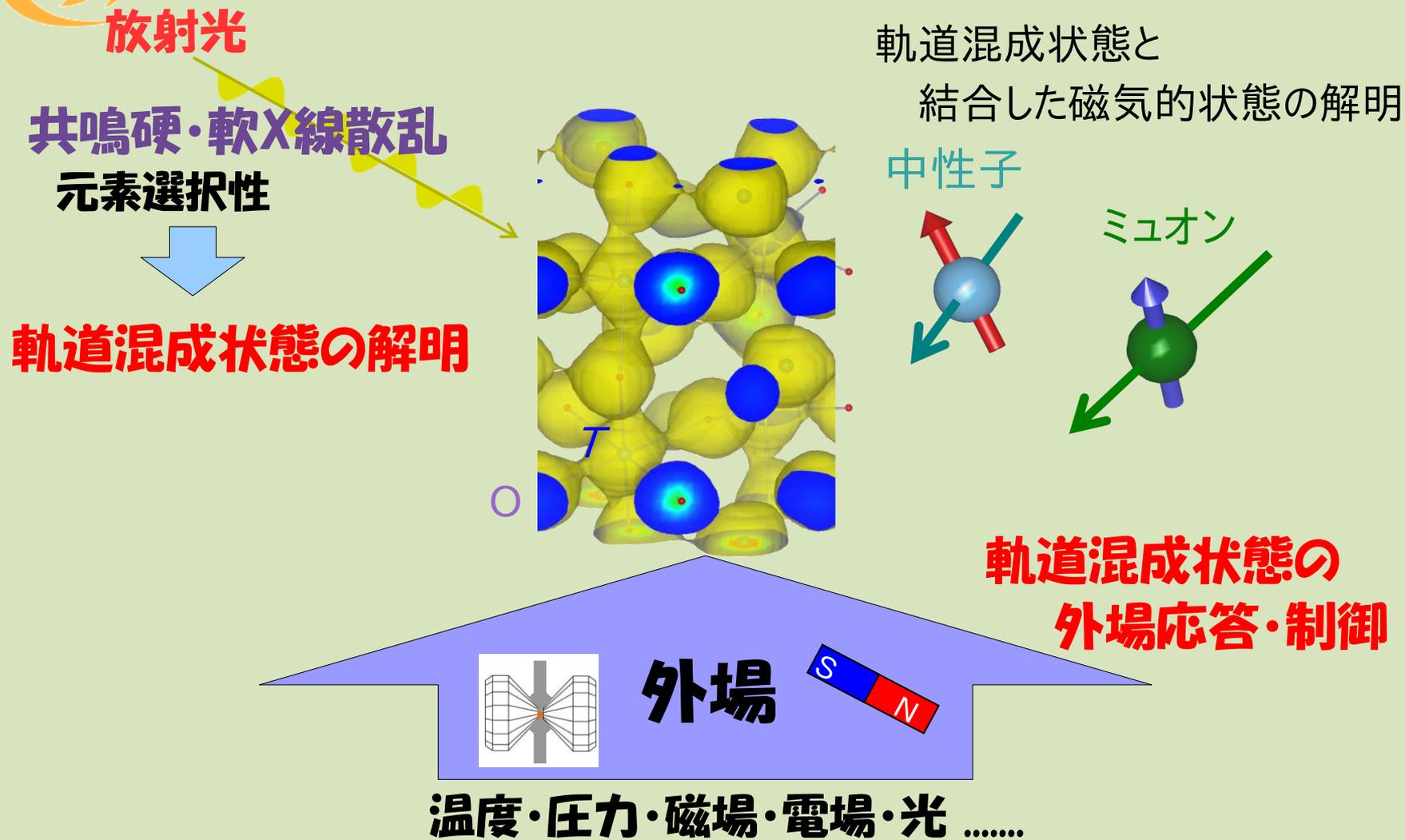
混成に関与している2つの元素の
共鳴X線散乱



遷移金属酸化物: $T3d-O2p$ 軌道混成
希土類金属化合物: $p-f$ 混成, $c-f$ 混成
分子性導体: $p-d$ 軌道混成



強相関電子系における軌道混成秩序とその外場応答



放射光・中性子・ミュオンを相補的に利用した構造物性研究



「構造物性研究の現状と今後の展開 — 共鳴軟X線散乱を中心に —」

<3月12日>

座長：中尾裕則

- 3d遷移金属**
- 10:15-10:20 村上洋一 (KEK-PF/CMRC) 「はじめに」
- 10:20-10:45 富安啓輔 (東北大学高等教育開発推進センター)
「希薄不純物置換や電子ドーピングで作る LaCoO_3 の新たなスピントロニクスオーバー」
- 10:45-11:10 岡本 淳 (KEK-PF/CMRC)
「共鳴 X 線散乱による室温強磁性 $\text{Sr}_3\text{YCo}_4\text{O}_{10.5}$ の電子状態研究」
- 11:10-11:35 藤岡 淳 (東大)
「ペロブスカイト型 LaCoO_3 薄膜におけるストレイン誘起フェリ磁性とスピン・軌道秩序の観測」
- 11:35-12:00 山崎裕一 (KEK-PF/CMRC)
「斜入射軟 X 線共鳴散乱による LaCoO_3 薄膜の磁気・軌道秩序の観測」



T. Sudayama

座長：石原純夫

- 13:30-13:55 打田正輝 (コーネル大)
「共鳴 X 線散乱による層状ペロブスカイト型 Ni 酸化物の磁気・軌道秩序の観測」
- 13:55-14:20 須田山貴亮 (KEK-PF/CMRC)
「磁場下共鳴軟 X 線散乱による人工超格子 Mn 薄膜の研究」
- 14:20-14:45 奥山大輔 (理化学研究所交差相関物性科学研究グループ)
「ペロブスカイト Mn 酸化物超格子のラウエフリンジの減衰とスピン・軌道秩序の観測」
- 14:45-15:10 宮坂茂樹 (大阪大学大学院理学研究科)
「ペロブスカイト型バナジウム酸化物におけるランダムネスによる磁気・軌道秩序制御とキャリアドーピングによるモット転移近傍の 2 次元スピンゆらぎによる臨界異常」
- 15:10-15:30 勝藤拓郎 (早稲田大学)
「擬三角格子にある t_{2g} 軌道が生み出す新奇物性」
- 15:30-15:55 寺崎一郎 (名古屋大学)
「面共有三量体構造をもつ遷移金属酸化物の構造と機能」

座長

- 分子性結晶**
- 16:10-16:30 中尾裕則 (東大物性研)
「ブロッホ波と分子性物質の構造物性」
- 16:40-17:00 中尾裕則 (KEK-PF/CMRC)
「共鳴軟 X 線散乱による有機導体 $\beta\text{-(ET)}_2\text{PF}_6$ の電荷秩序状態」
- 17:00-17:30 中尾裕則 (KEK-PF/CMRC)
「共鳴軟 X 線散乱による有機強誘電体 TTF-CA の電子状態観測の試み」
- 17:30-17:55 石橋章司 (産総研ナノシステム)
「有機強誘電体 TTF-CA 他における XANES のペクトロスコピー」
- 17:55-18:15 中尾朗子 (CROSS)
「J-PARC の単結晶回折計による中性子構造解析の現状」



Y. Takahashi

<3月13日>

座長：山崎裕一

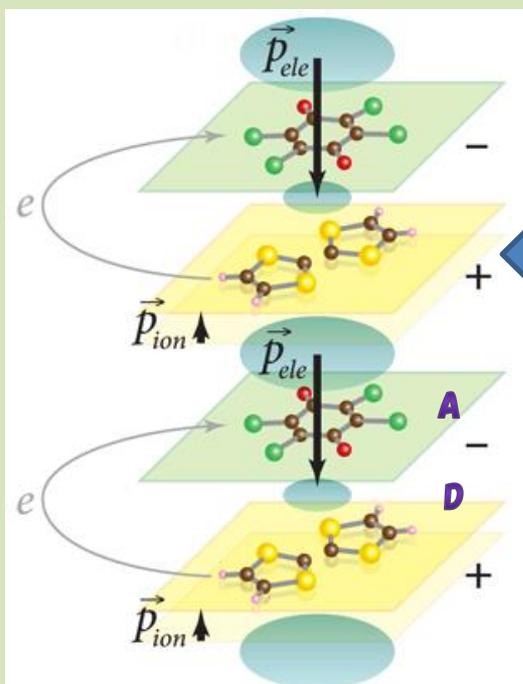
- 4d, 4f, 5d, 5f**
- 9:00-9:25 花咲徳亮 (大阪大学理学研究科物理学専攻)
「パイロクロア型ニオブ酸化物のニオブ変位の局所秩序」
- 9:25-9:50 岩佐和晃 (東北大院物理学)
「全対称型 f 電子自由度による相転移と揺らぎの効果」
- 9:50-10:05 中尾裕則 (KEK-PF/CMRC)
「共鳴 X 線散乱による $\text{PrRu}_4\text{P}_{12}$ の金属・非金属転移の研究」
- 10:05-10:30 佐賀山基 (東大新領域)
「X 線共鳴磁気散乱実験によるパイロクロア型イリジウム酸化物の磁気構造の決定」
- 10:30-10:55 網塚浩 (北海道大学大学院理学研究院)
「共鳴・非共鳴 X 線回折による URu_2Si_2 の隠れた秩序相の解明」



有機強誘電体

強誘電性発現の微視的理解

電荷移動錯体: TTF-CA



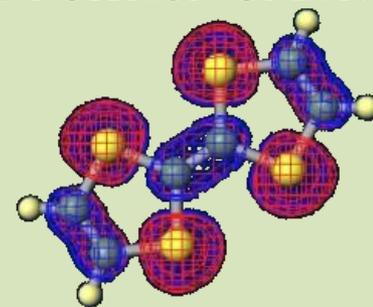
単なる変位型ではない…

Molecular orbital

LUMO

HOMO

Frontier orbital



物性発現の舞台

フロンティア軌道の電子状態の解明

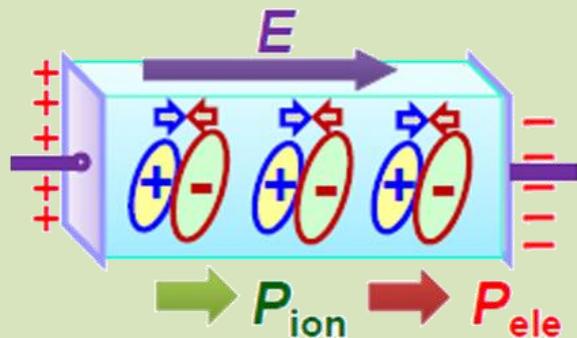


TTF-CAの強誘電性

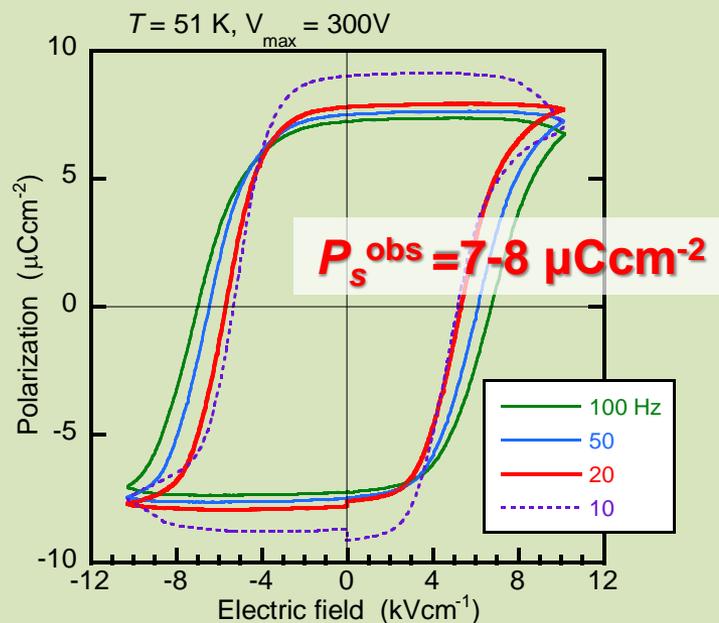
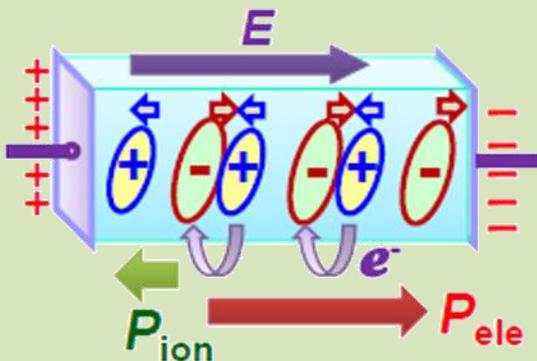


中性・イオン性転移

従来型の変位型強誘電体



TTF-CA



Large spontaneous polarization

cannot simply explained
by molecule displacement



Theoretically calculated

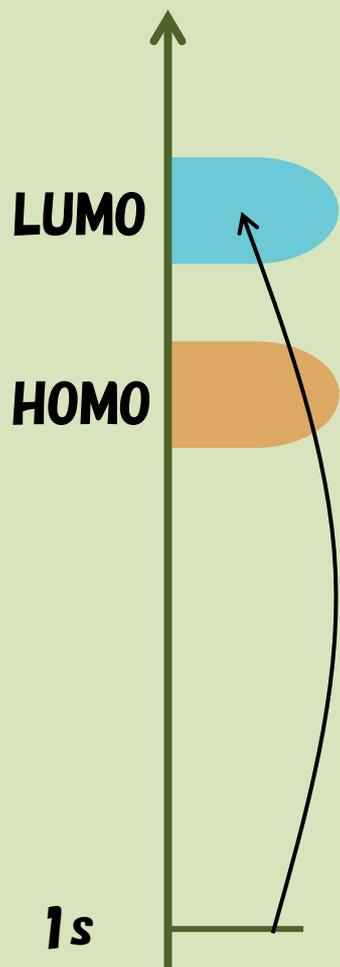
Ishibashi (AIST)



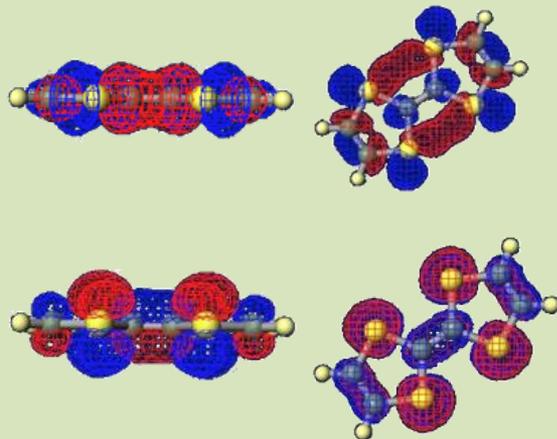
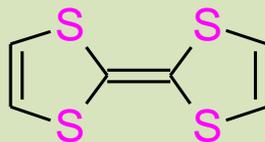
分子軌道とXAS

XAS Unoccupied electronic state

Molecular orbital



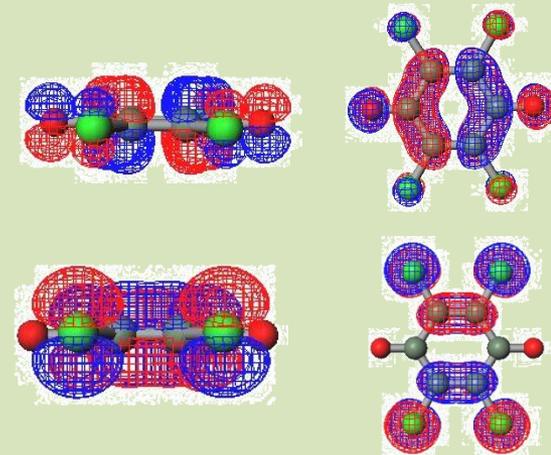
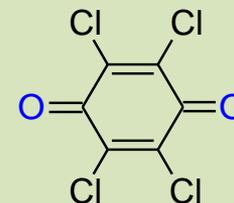
TTF ($C_6H_4S_4$)



$$|\Psi_{LUMO}\rangle = |\Psi_{S(3p)}\rangle + |\Psi_C\rangle + |\Psi_H\rangle$$

S K-edge : $1s \rightarrow 3p$

CA ($C_6Cl_4O_2$)

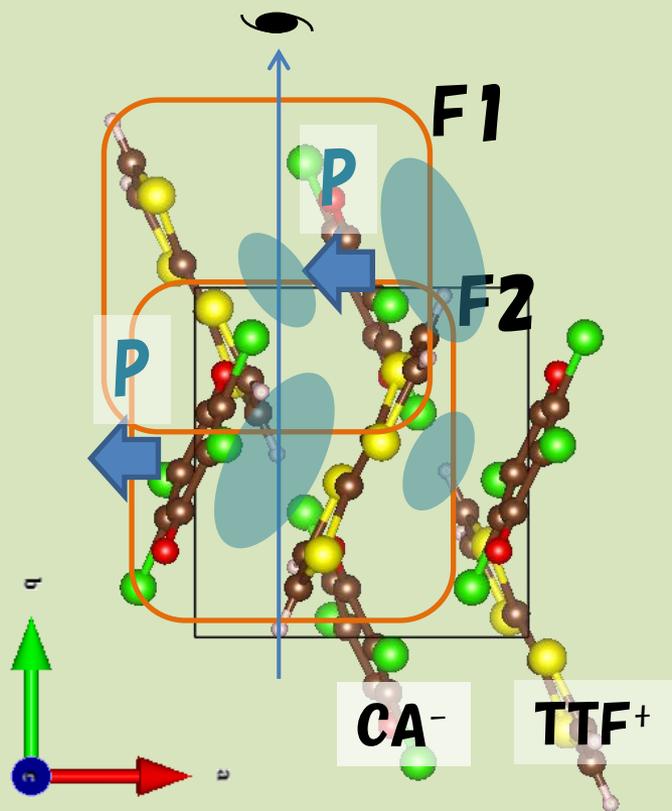


$$|\Psi_{LUMO}\rangle = |\Psi_{O(2p)}\rangle + |\Psi_C\rangle + |\Psi_{Cl}\rangle$$

O K-edge : $1s \rightarrow 2p$



分極発現に関わる電子状態の解明を目指して



RXS

(010): F1-F2

対称性の破れに関わる
電子状態の解明

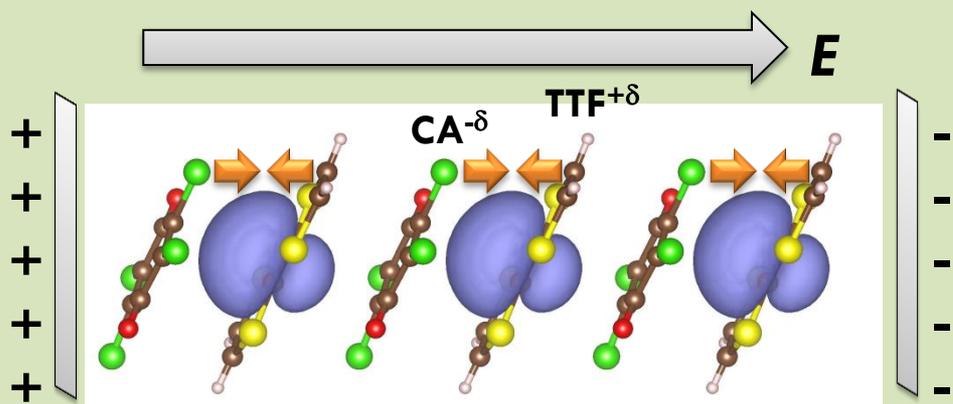
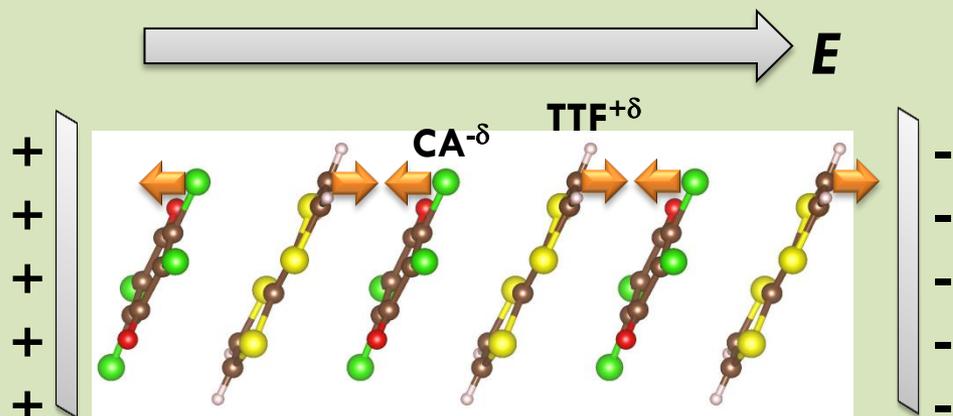
単にNI転移だけでは、
空間群は変化なし

$2_1 \bar{1}$ の破れ

分極の発現・Dimer化



TTF-CAの分極発現機構



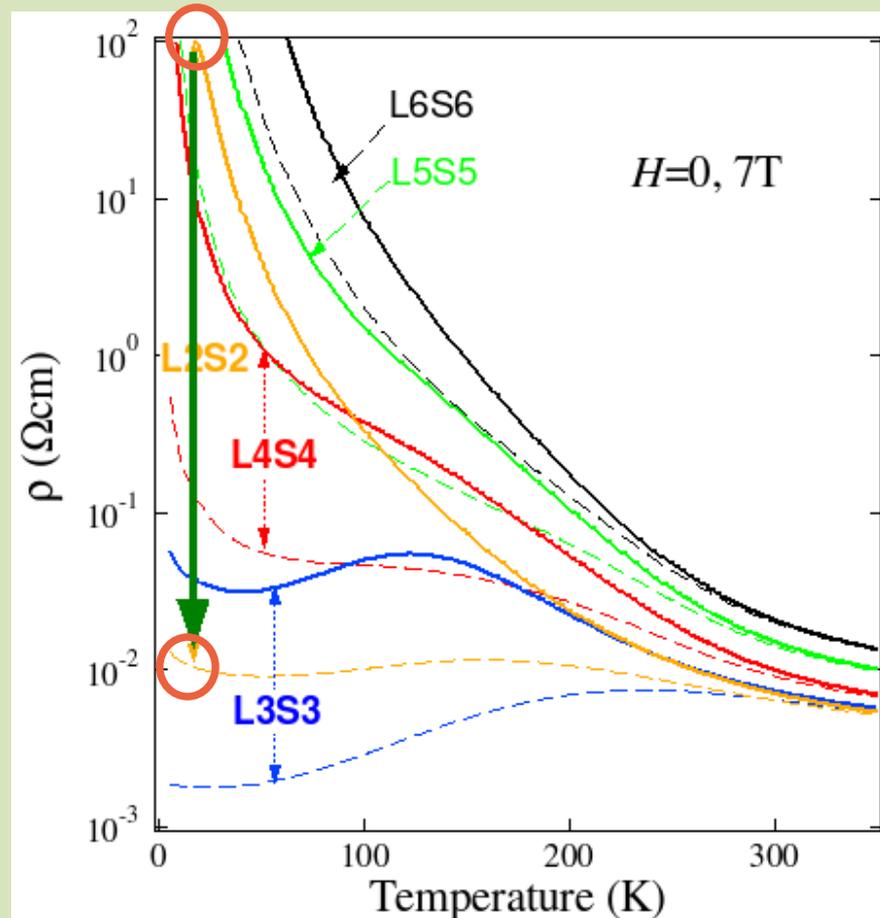
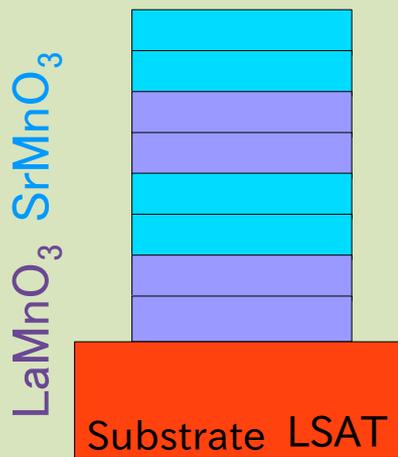
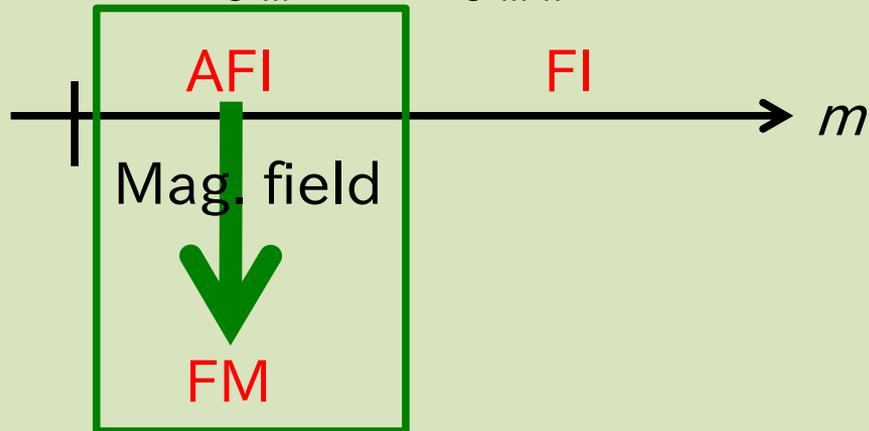
外部電場と
イオン変位による
分極の向きが逆

大きな電気分極の起源



人工超格子 $[(\text{LaMnO}_3)_m(\text{SrMnO}_3)_m]_n$

$[(\text{LaMnO}_3)_m(\text{SrMnO}_3)_m]_n$ / LSAT



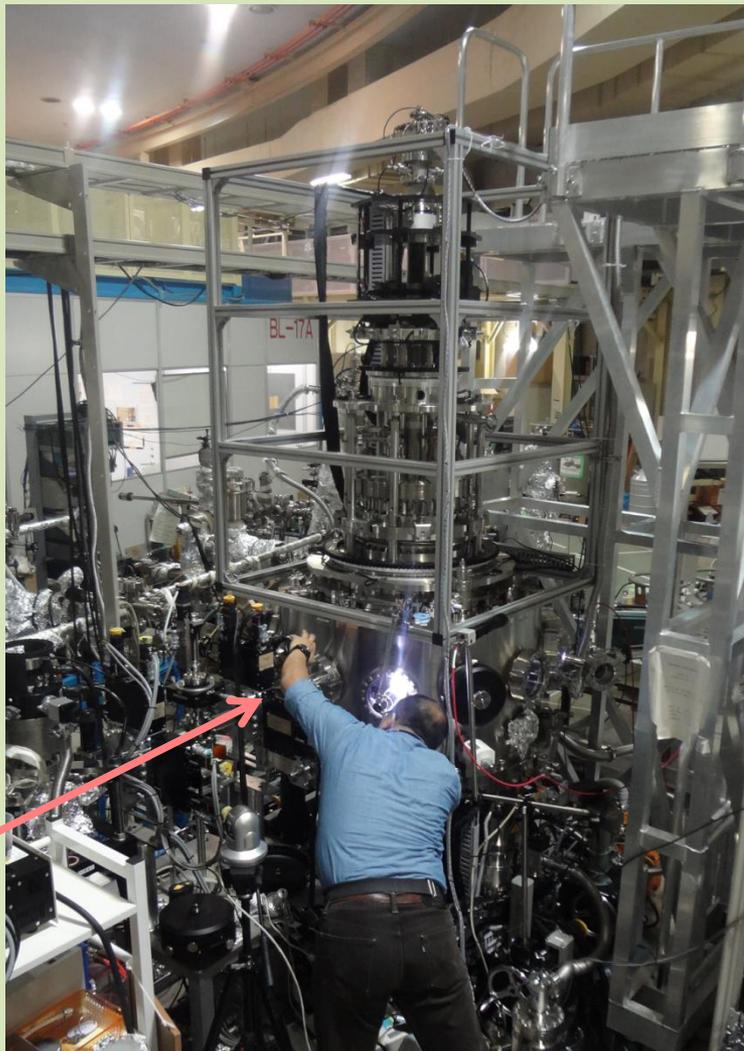
$m \leq 4$:

**薄膜化により初めて出現した
巨大磁気抵抗効果**

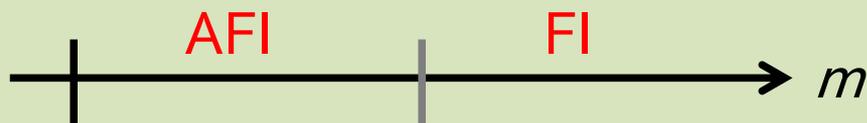
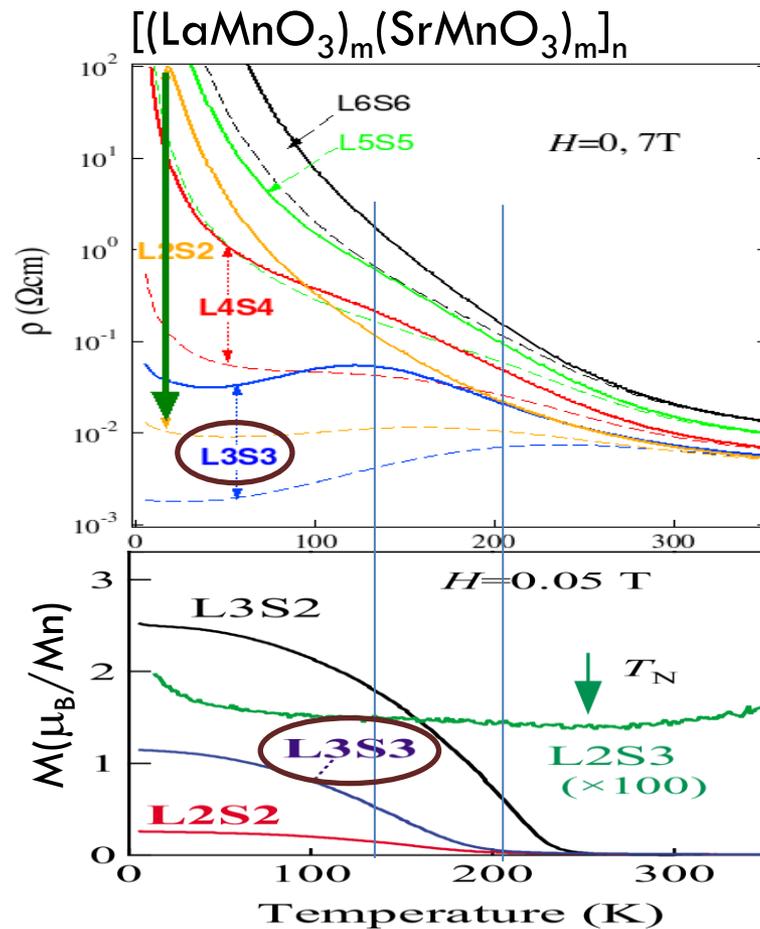


磁場下共鳴軟X線散乱実験を目指して

超伝導磁石搭載型軟X線2軸回折計



7.5Tまでの磁場下実験が可能に



L3S3: 特異な温度依存性、Qの制限の緩和

まとめ

薄膜化により初めて出現した巨大磁気抵抗効果の起源

- Synchrotron radiation

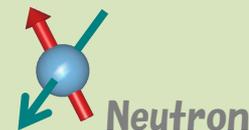
X線回折、共鳴X線散乱



共鳴軟X線散乱

- Neutron

磁気散乱



中性子反射率測定,
超低速ミュオン....

相補利用による電荷・磁気状態の多面的な解明が可能に！

人工超格子: $[(\text{LaMnO}_3)_m(\text{SrMnO}_3)_{m'}]_n$

バルク試料では未報告の電荷・磁気相

新たな巨大磁気抵抗効果の可能性

