

# 【基盤研究(S)】

## 理工系(数物系科学)



### 研究課題名 共鳴軟X線散乱と中性子散乱による 外場下での局所電子構造と混成軌道秩序の研究

高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・教授

むらかみ よういち  
村上 洋一

研究分野：数物系科学 物理学・物性Ⅱ

キーワード：放射光、中性子、共鳴X線散乱、強相関電子系、軌道秩序、電荷秩序、磁気秩序

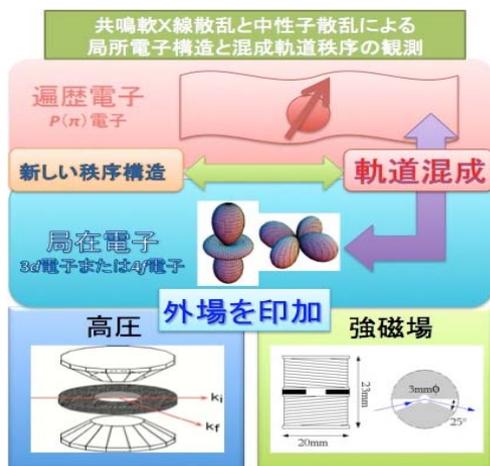
#### 【研究の背景・目的】

強相関電子系において現れる多彩な物性の発現には、電子自由度（電荷・スピン・軌道）が織りなす秩序状態とその揺らぎが、重要な役割を担っている。強相関電子物性を外場により制御しようという試みは、応用研究と結びつき発展しつつあるが、どのような機構によって電子自由度秩序とマクロ物性が結びついているのか、という基礎的な理解はまだ十分には進んでいない。

本研究では、強相関電子系（ $\pi$ - $d$  電子系・ $3d$  遷移金属化合物・ $4f$  多極子秩序系）を対象として、外場（磁場・圧力）を加え、局所的な電子自由度秩序構造と遍歴的な電子自由度秩序構造の変化を直接観測することにより、これらの系の新奇な物性（磁気抵抗効果・金属絶縁体転移・マルチフェロイクスなど）の発現機構を明らかにする。本研究の特徴は、局所的電子と遍歴的電子の混成軌道の秩序化を、放射光共鳴X線散乱と中性子散乱を用いて観測する点である。特に、共鳴X線散乱法において独自に開発を進めてきた手法をさらに発展させ、偏光状態を制御した軟X線領域での共鳴散乱を行う新しい実験装置・手法を開発する。また、J-PARCのビームラインを利用して高エネルギー領域までの非弾性散乱実験を行う。これらの測定結果と理論計算を比較検討することにより、局所電子構造がマクロ物性に及ぼす影響を明らかにすることが本研究の目的である。

#### 【研究の方法】

本研究の目的を達成するためには、下図に示した局在電子（ $3d$  または  $4f$  電子）の電荷・スピン・軌道秩序状態を観測すると共に、遍歴電子（ $p$  ま



たは $\pi$ 電子)の秩序状態を観測することが重要である。特に、両者の軌道混成効果が顕著な場合には、両電子系が混然となった新しい電子状態が実現する。本研究では、このような電子状態を明らかにするために、高圧または強磁場下において、共鳴X線散乱、共鳴軟X線散乱、そして中性子散乱実験を相補的に行なう。

#### 【期待される成果と意義】

本研究では、顕著な混成効果によって新しい電子状態を形成していると考えられる下記の3つの系を対象として、局在・遍歴電子の両側面から実験的・理論的研究を進める。

##### (A) $\pi$ - $d$ 電子系

遷移金属イオンを含んだ分子系で、局所的な  $d$  電子軌道と遍歴的な  $\pi$  軌道との混成効果により、顕著な物性（巨大磁気抵抗やフラストレーション効果によるスピン液体状態）を示す  $\pi$ - $d$  電子系を対象として、その物性発現機構を明らかにする。

##### (B) $3d$ 遷移金属化合物

ペロブスカイト型遷移金属酸化物を対象とする。磁場や圧力によって、遷移金属  $3d$  軌道と酸素  $2p$  軌道または含有される希土類金属  $d$  軌道との混成状態を変化させたときに出現する、マルチフェロイクス物性などの発現機構を明らかにする。

##### (C) $4f$ 多極子秩序系

$f$  電子系において混成効果が重要となる物質群を対象として、磁場や圧力下において、 $4f$  軌道と遍歴電子軌道の混成効果が高次電気多極子秩序や金属-非金属転移に及ぼす機構を明らかにする。

#### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Y. Murakami et al., PRL80, 1932 (1998).
- Y. Murakami et al. PRL81, 582 (1998).
- T. Kiyama et al., J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 785 (2003).
- H. Ohsumi et al., J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 1006 (2003).
- K. Ohwada et al., Phys. Rev. B **72**, 014123 (2005).
- K. Iwasa et al., J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1930 (2005).
- Y. Murakami et al. J. Mag. Mag. Mater. **310**, 723 (2007).
- D. Bizen et al., Phys. Rev. B **78**, 224104 (2008).

#### 【研究期間と研究経費】

平成21年度－25年度  
168,900千円  
ホームページ等  
<http://cmrc.kek.jp>  
[youchi.murakami@kek.jp](mailto:youchi.murakami@kek.jp)