

自己評価報告書

平成 23 年 4 月 25 日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2008～2012

課題番号：20540324

研究課題名 (和文) 3 d 遷移金属化合物系のバルク敏感硬 X 線光電子分光の理論

研究課題名 (英文) Theory for the bulk sensitive hard x-ray photoemission spectroscopy on 3d transition metal compounds

研究代表者

田口 宗孝 (TAGUCHI MUNETAKA)

独立行政法人理化学研究所・励起秩序研究チーム・研究員

研究者番号：10415218

研究分野：数物系化学

科研費の分科・細目：物理学・物性 I

キーワード：硬 X 線光電子分光、3d 遷移金属化合物、配置間相互作用模型、金属絶縁体転移

1. 研究計画の概要

本研究では、金属・絶縁体相転移や価数相転移などを起こす強相関電子系の 3 d 遷移金属化合物における硬 X 線を用いた内殻光電子分光スペクトルの理論的な解析、数値計算法の開発を行う。そして電荷秩序、軌道秩序、磁気秩序などに起因するフェルミ準位近傍の電子状態の変化とそれが内殻光電子分光スペクトルに与える影響、そしてその物理的機構についての知見を得ることを目的とする。

2. 研究の進捗状況

本研究は、2 サイト・クラスター模型のプログラム開発がやや遅れ気味であるが、おおむね好調に推移し、研究業績も着実に発表されている。これまでに本研究で達成した成果は、以下のとおりである。

- (1) VO₂ の金属絶縁体転移に伴う電子状態の変化の機構解明
- (2) NiO の電子状態の再検討の理論研究
- (3) Ti₄O₇ の金属絶縁体転移に伴う電子状態変化の機構解明
- (4) CrN の金属絶縁体転移に伴う電子状態変化の機構解明
- (5) コバルト添加の二酸化チタンの電子状態研究

において大きな前進があった。

特に、(2) に関しては、典型的なモット絶縁体と考えられてきた NiO のバンドギャップの起源の再検討を行なった。我々は、HX-PES スペクトルの形状を理論解析し、その結果 NiO のバンドギャップは従来の解釈とは異なり Zhang-Rice 二重項束縛状態から構成されていることを初めて示した。(4) に関しては、マグネリ相とよばれる特異な組成、構造、物性を示す化合物についての電子

状態の再検討を行った。Ti₄O₇ は、電気抵抗が温度変化によって 3 ケタの変化を二回も容易に起こす (つまり 3 種類の電子相が存在する) ことで古くから知られている物質である。しかしながら、その各相における電子状態やその伝導機構の全容については今日に至るまで、謎のベールに包み隠されていた。我々は HX-PES を用いてベールの裏に隠されていた三つの顔の正体に迫った。その結果、金属相と半導体相に挟まれた第三の電子相が金属でもなく半導体でもないとても奇妙な相であることを発見した。

上記の我々の成果等は国際的に評価を受け 2009 年 5 月にアメリカのブルックヘブンで開かれる国際会議において招待講演として発表をおこなっている。また、2011 年 9 月にも本研究についての招待講演をドイツ、ハンブルグにて行う予定である。

3. 現在までの達成度

①おおむね順調に進展している。

(理由)

本研究は、2 サイト・クラスター模型のプログラム開発がやや遅れ気味であるが、おおむね好調に推移し、研究業績も着実に発表されている。上述した我々の成果等は国際的に評価を受け研究開始から 3 年間で Physical Review Letters に 3 本の論文が掲載され、国際会議等での招待講演も 4 件行っている (内、一件は予定)。

4. 今後の研究の推進方策

やや遅れ気味である 2 サイト・クラスター模型のプログラムコード開発については、引き続き一層の努力を行い、研究を推進していく予定である。その間にも重要な実験結果が

出てくると予想されるのでそれらについては上記のプログラム開発と並行して HX-PES による電子状態の再検討の研究を遂行していく予定である。

5. 代表的な研究成果

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6 件)

- ① T. Ohtsuki, A. Chainani, R. Eguchi, M. Matsunami, Y. Takata, M. Taguchi, Y. Nishino, K. Tamasaku, M. Yabashi, T. Ishikawa, M. Oura, Y. Senba, H. Ohashi, and S. Shin
Role of Ti 3d Carriers in Mediating the Ferromagnetism of Co:TiO₂ Anatase Thin Films
Physical Review Letters **106** (2011) 047602-1-4 査読有
- ② P. A. Bhowe, A. Chainani, M. Taguchi, T. Takeuchi, R. Eguchi, M. Matsunami, K. Ishizaka, Y. Takata, M. Oura, Y. Senba, H. Ohashi, Y. Nishino, M. Yabashi, K. Tamasaku, T. Ishikawa, K. Takenaka, H. Takagi, and S. Shin,
Strong Evidence for a correlated insulator to antiferromagnetic metal transition in CrN
Physical Review Letters **104** (2010) 236404-1-4 査読有
- ③ M. Taguchi, A. Chainani, M. Matsunami, R. Eguchi, Y. Takata, M. Yabashi, K. Tamasaku, Y. Nishino, T. Ishikawa, S. Tsuda, S. Watanabe, C. -T. Chen, Y. Senba, H. Ohashi, K. Fujiwara, Y. Nakamura, H. Takagi, and S. Shin,
Anomalous State Sandwiched between Fermi Liquid and Charge Ordered Mott-Insulating Phases of Ti₄O₇
Physical Review Letters **104** (2010) 106401-1-4 査読有
- ④ M. Taguchi, M. Matsunami, Y. Ishida, R. Eguchi, A. Chainani, Y. Takata, M. Yabashi, K. Tamasaku, Y. Nishino, T. Nishino, T. Ishikawa, Y. Senba, H. Ohashi, and S. Shin
Revising the Valence-Band and Core-Level Photoemission Spectra of NiO
Physical Review Letters **100** (2008) 206401-1-4 査読有

[学会発表] (計 10 件)

- ① 「温度によって三つの顔を見せるチタン酸化物の正体に迫る」
田口宗孝 2011 年 4 月 1 日 RSC 報奨金表彰受賞講演 (SPRING-8 日本)
- ② 「硬 X 線光電子分光による Fe₃O₄ の電子状

態」

田口宗孝, 2010 年 3 月 21 日 日本物理学会 春季大会 (岡山大学)

- ③ 「Studies of the Electronic Structure of Strongly Correlated Materials by the Combination of HAXPES and Other Techniques」

田口宗孝, 2009 年 5 月 20-22

International Workshop for New Opportunities in Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy: HAXPES 2009 (National Synchrotron Light Source, New York, USA)

- ④ 「硬 X 線光電子分光による強相関物質の研究」

田口宗孝, 企画招待講演 ” 光電子分光によるフェルオロジー: 熱力学物性は光電子分光でどの程度理解できるか? ” 2009 年 1 月 9-12 日 第 22 回日本方射光学会年会・方射光科学合同シンポジウム (東京大学、本郷キャンパス)

[その他]

ホームページ

<http://www.riken.jp/lab/riken-sx/>

賞等の受賞

2011 年 4 月 1 日

平成 22 年度 RSC 報奨金表彰

新聞等記事記載

- ① マグネリ相チタン酸化物 温度変化で三つの顔 日刊工業新聞、2010 年 3 月 9 日
- ② 温度で 3 種の相変化 マグネリ相チタン酸化物 化学工業日報、2010 年 3 月 9 日
- ③ マグネリ相チタン酸化物 “三つの顔” の謎を解明 科学新聞、2010 年 3 月 26 日
- ④ 奇妙なチタン酸化物 - 温度で 3 種の相変化 - Ceramics Japan (セラミックス)、Vol. 45 7 月号 2010 年 572 ページ
- ⑤ Semiconducting sandwich filling retains its mystery RIEKN RESEARCH Volume 5 Number 7 (2010) 4
- ⑥ 酸化ニッケル絶縁体の謎解明 日経産業新聞、2008 年 5 月 19 日
- ⑦ 酸化ニッケルはなぜ金属でないのか - 長年の謎を解明 - 科学新聞、2008 年 5 月 30 日
- ⑧ A breath of fresh air for electronics RIEKN RESEARCH Volume 3 Number 11 (2008) 3
- ⑨ ノーベル賞学者モットを悩ませた謎に挑む SPRING-8 学術成果集 夢の光を使ってサイエンスの謎に挑む p47-48 (2010)