

放射光を利用した光誘起相転移研究と理論的取り組み

岩野薫(物構研)

近年、光誘起相転移の研究はますます盛んになってきているが、いわゆる可視～遠赤光を用いたポンププローブ分光測定以外の新しい可能性として、放射光(X線～VUV光)を使った研究を考えたい。特に今回紹介したいのは、以下の2つの方向性である。

1. X線～VUV光による直接的なドメイン励起の可能性とその時空間観察

最近、理論的な可能性として放射光により直接的にドメインを生成することを提唱している[1]。ごく単純には相転移近傍では2つ以上の相がエネルギー的に拮抗しており、適切なトリガーさえあれば比較的小さいエネルギーでドメインが生成できるはずである。もちろん、それは可視光や遠赤外光でも可能だが[2]、しかしそのような波長の長い光の場合はドメインという空間的拡がりを持った「粒子」の(重心)運動量依存性(分散関係)を捉えることが出来ない。具体的には、非弾性X線散乱や角度分解光電子分光などの測定を考えている。

2. 時間分解X線構造解析実験

こちらはご存じのように既にKEKのNW14Aビームラインで測定が始められている。特にその対象の1つとなっているのが、 $(\text{EDO-TTF})_2\text{PF}_6$ という1種の擬1次元分子性結晶であり、この系に関しては既に(0 1 1 0)型(=1次元的に並んだ4量体内の価数パターン)の電荷秩序の光による融解という現象が発見されている。このような系の光励起構造緩和を理論的に扱うためには分子間のみならず分子内の多数の自由度に対して出来るだけ現実的な取り扱いをする必要があり、そのような目的のためにはやはり第1原理計算が欠かせない。我々はいわゆる分子軌道法を用い、分子クラスターベースの手法の確立を目指している。ただし、クラスターは孤立したものではなく、その周りに出来るだけ固体内の状態に似せた環境を配する必要があり、そのために自己無撞着な点電荷環境[3]やクラスターと環境との間のレナードジョーンズ型相互作用を組み込んでいる。これまでのところ、①基底状態の電荷秩序の再現、②吸収スペクトルの再現、③クラスターの基底状態における構造安定性、に成功しており、今後は光構造緩和に取り組もうとしている。

【参考文献】

- [1] K. Iwano, Phys. Rev. Lett. 102, 106405 (2009).
- [2] K. Iwano, Phys. Rev. Lett. 97, 226404 (2006).
- [3] K. Iwano and Y. Shimoi, Phys. Rev. B 77, 075120 (2008).