

(様式 2)

議事録番号

提出 2013 年 1 月 16 日

会合議事録

研究会名：構造物性研究会、キラル磁性・マルチフェロイックス研究会

日 時：平成 25 年 1 月 12 日

場 所：名古屋大学 ES 館 033 講義室

出席者：森吉千佳子、加藤健一、藤原明比古、杉本邦久、青柳忍、中尾裕則、
巽修平、有馬孝尚、澤博、若林裕助、鈴木基寛、石井賢司、井上克也、久保田
佳基、大隅寛幸、西堀英治

計 16 名

議題：

本合同研究会は、物性科学分野における SPring-8 の利活用について会員間で最新の情報共有のために、最近の研究成果や SPring-8 のビームラインの現状についてお話しをいただく。また、SPring-8 次期計画についての説明を頂き、SPring-8 次期計画および次期 SPring-8 の利活用について、会員間で議論する。

プログラム

18:45-18:50 開会の挨拶

(構造物性研究会代表 東京大学：有馬孝尚)

(キラル磁性・マルチフェロイックス研究会代表 広島大学：井上克也)

18:50-19:10 BL02B1 を用いた誘電体結晶の時分割構造計測

(広島大学:森吉千佳子)

19:10-19:20 偏光 X 線が可能にする放射光磁気構造計測

(RIKEN:大隅寛幸)

19:20-19:30 X 線非弾性散乱の現状と将来

(原研：石井賢司)

19:30-19:35 SPRUC における研究会活動

(RIKEN/SPRUC 庶務幹事：西堀英治)

19:35-20:05 SPring-8 次期計画の概要

(JASRI/鈴木基寛)

20:05-20:30 総合討論 次期 SPring-8 でのサイエンスについて

(司会 JASRI:藤原明比古)

議事内容：

1. 有馬孝尚，井上克也両研究会の代表から挨拶があった。
2. 森吉千佳子（広島大学），大隅寛幸（理研），石井賢司（原研）各氏より回折，磁気散乱，非弾性散乱の最近の研究について発表があった。各氏の研究内容に加えて最近の分野の研究動向についても紹介があった。発表内容については、最後に試料として添付。
3. 西堀英治氏より SPRUC における研究会活動について紹介があった。研究会では研究活動に加えて， SPring-8 利用者の動向調査，特に次期計画に関する意見徴集を行うことが説明された。
4. 鈴木基寛（JASRI）氏より SPring-8 次期計画の概要について説明がされた。
5. 鈴木基寛（JASRI）氏の発表終了後に藤原明比古（JASRI）を司会として次期計画に対する質疑を受け付け，随時討論を行った。

以下に主な意見を列挙する。

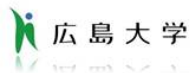
- * 光源の性能が向上することにより従来の実験が行えなくなることがあるのではないか。自動的に現状とは変わってしまうことを示して欲しい。
- * シャットダウン期間は1年以内と見込んでいるが，実験ができるまでには実質的にはもっとロスの時間は多いのではないか。
- * 分光結晶など現在のハードウェアがそのまま使用できるのか
- * 電子ビームの位置の安定性はどうなると予想されるのか。
- * 硬 X 線のことが中心で話されているが，軟 X 線領域はどうなるのか。
- * 時間領域についてはどのようなスペックを想定しているのか。
- * ビームラインの構成等について例を示して、エンドユーザーが使うところまでの計画を見せてほしい。
- * 次期計画に関わらず、すべての BL がスクラップ&ビルドを考えなければならない。新しい技術開発を始めなければならない時期なのではないか。そのためには、施設側とユーザーとの間でより具体的な内容について意見交換をする機会を多く持つことが大変重要である。

*会合で使用した 資料

BL02B1を用いた 誘電体結晶の時分割構造計測

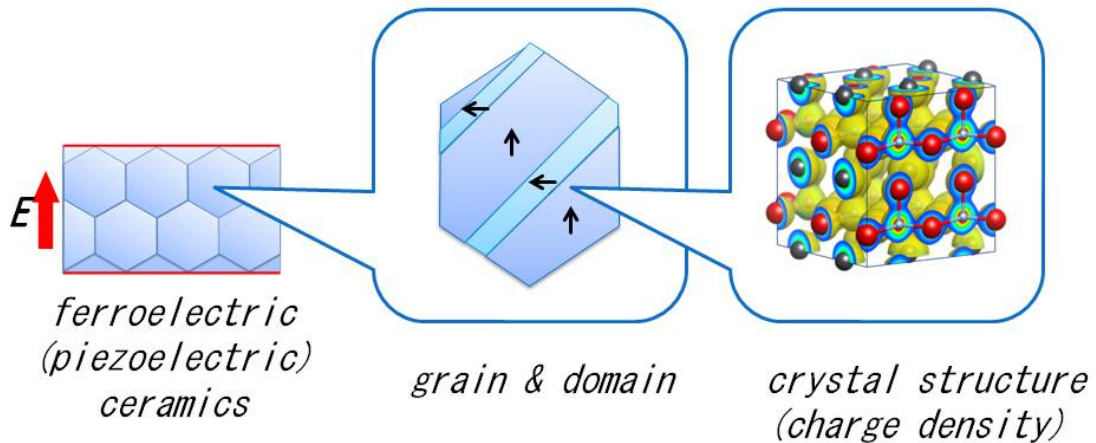
Chikako Moriyoshi

Shozo Hiramoto, Hisanori Ohkubo, Shoichi Takeda, Natsuko Hikiji,
Yoshihiro Kuroiwa,
Hitoshi Osawa, Kunihisu Sugimoto, Shigeru Kimura, Masaki Takata,
Yuuki Kitanaka, Yuji Noguchi, and Masaru Miyayama



Deformation in Ferroelectrics/Piezoelectrics under E

2



How grain and structure deform ?
(shape & speed)

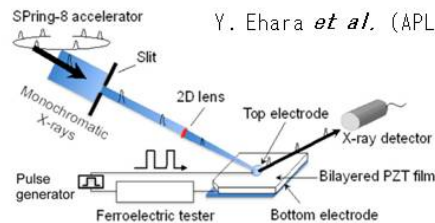
Time-resolved measurements at BL02B2 & BL02B1

Examples (thin films, ceramics)

PZT thin films

SR X-ray diffraction at SPring-8.
 $\Delta t = 10^{-7}$ s. $E = 10^2$ MV/m.

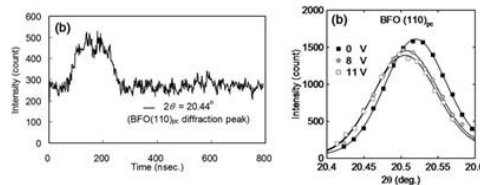
Y. Ehara *et al.* (APL, 2011)



BiFeO₃ polycrystalline thin films

SR X-ray diffraction at SPring-8.
 $\Delta t = 10^{-9}$ s. $E = 10^2$ MV/m.

S. Nakashima *et al.* (APL, 2008)

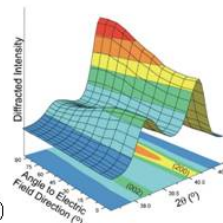


Tetragonal soft PZT ceramics

Neutron diffraction.
 $\Delta t = 10^{-1}$ s.
 $E = 500$ kV/m.

J. L. Jones *et al.*
 (APL, 2006)

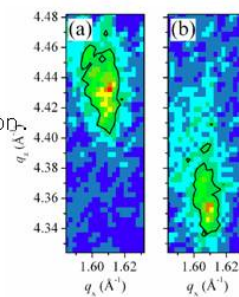
J. E. Daniels *et al.*
 (J. Appl. Phys., 2007)



PbZr_{0.2}Ti_{0.8}O₃ thin films

SR X-ray diffraction.
 $\Delta t = 10^{-9}$ s.
 $E = 10^2$ MV/m.

A. Grigoriev *et al.*
 (PRL, 2008)

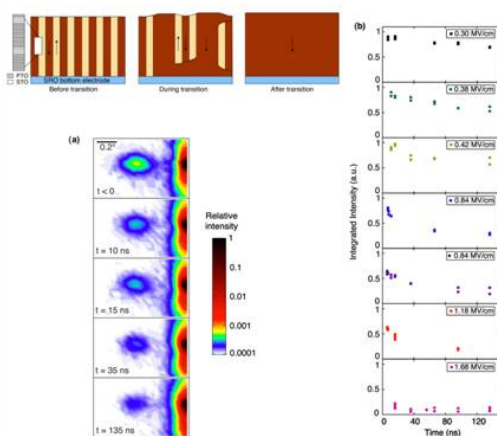


Examples (superlattices, bulk)

PbTiO₃/SrTiO₃ superlattice

SR X-ray diffraction at APS (10 keV).
 $\Delta t = 10^{-9}$ s. $E = 10^2$ MV/m.

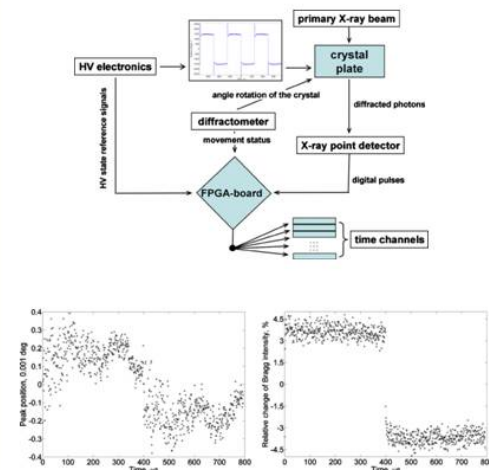
Ji Young Jo *et al.* (PRL, 2011)



BiB₃O₆ and Li₂SO₄·H₂O

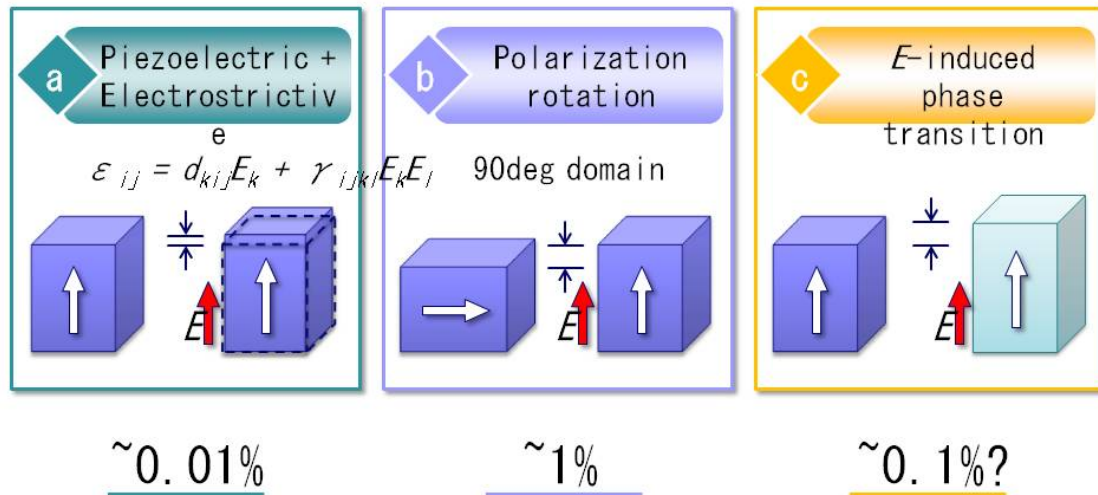
SR X-ray diffraction at ESRF. Single crystal.
 $\Delta t = 10^{-7}$ s. $V = 10^4$ V.

S. Gorfman *et al.* (JAP, 2010)



Length-Resolution Required

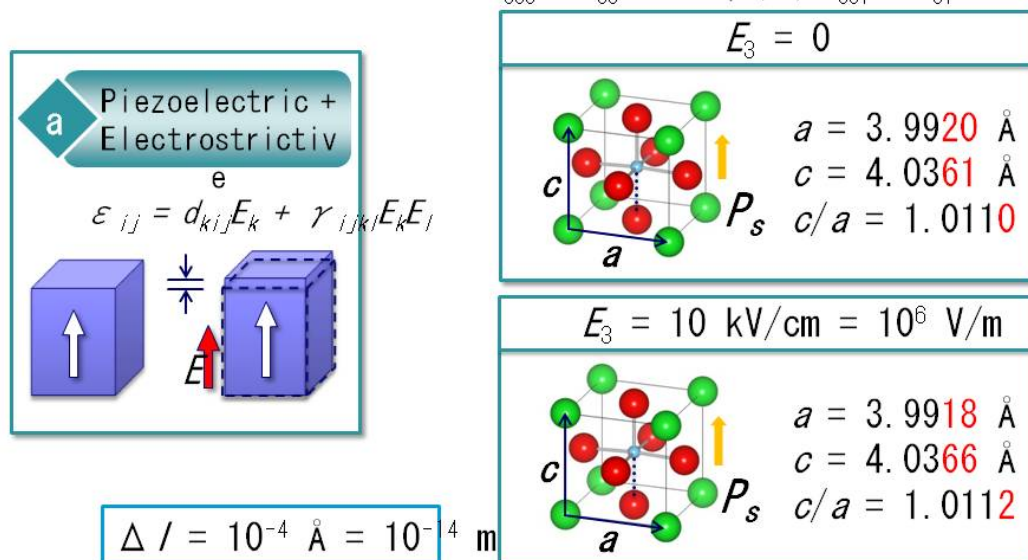
Possible lattice strain of ferroelectrics induced by appl



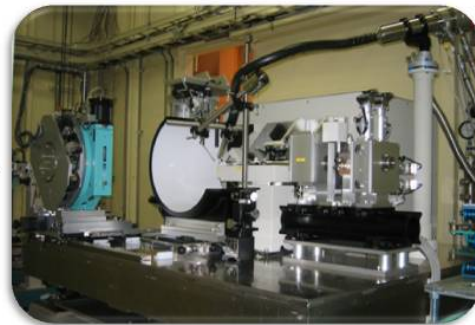
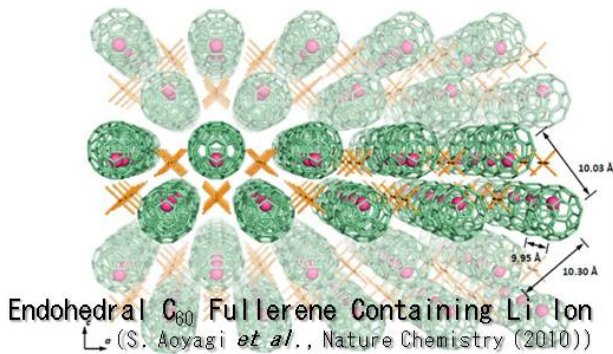
Length-Resolution Required

Expected piezoelectric strain of tetragonal BaTiO_3 under $E //$

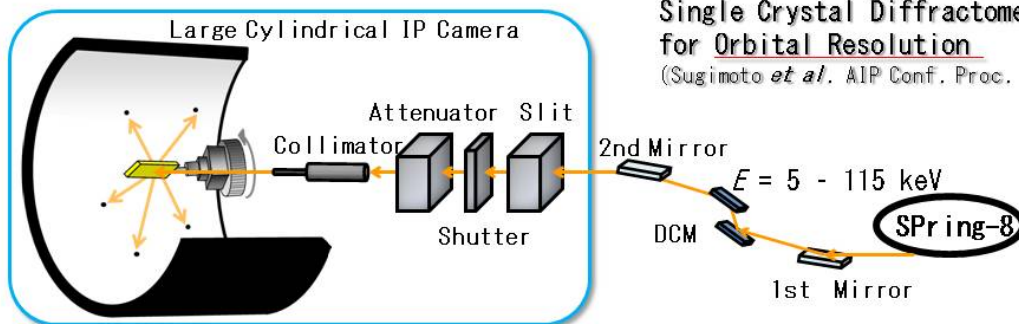
$$d_{333} = d_{33} = 136 \text{ pm/V}, d_{331} = d_{31} = -53 \text{ pm/V}$$



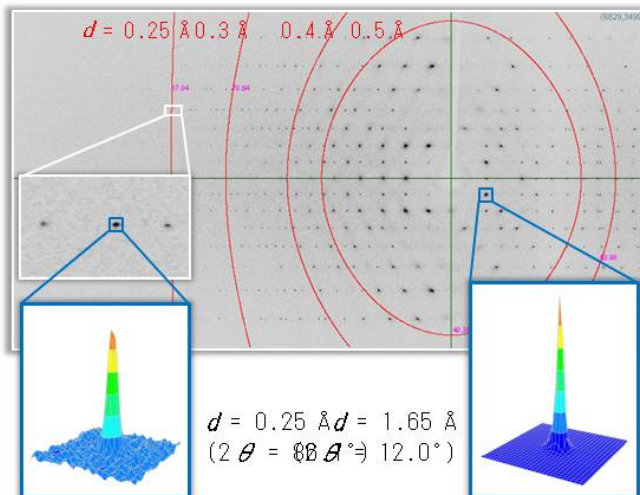
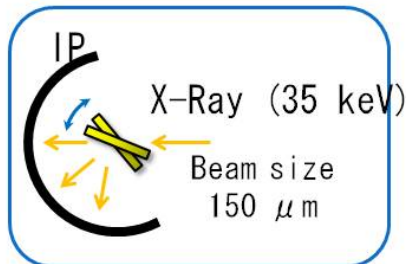
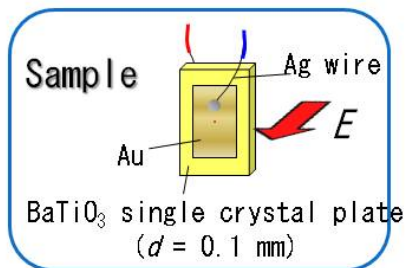
Single Crystal SR Diffraction at SPring-8 BL02B1 7



Extremely High Resolution Single Crystal Diffractometry for Orbital Resolution
 (Sugimoto *et al.*, AIP Conf. Proc. (2010))

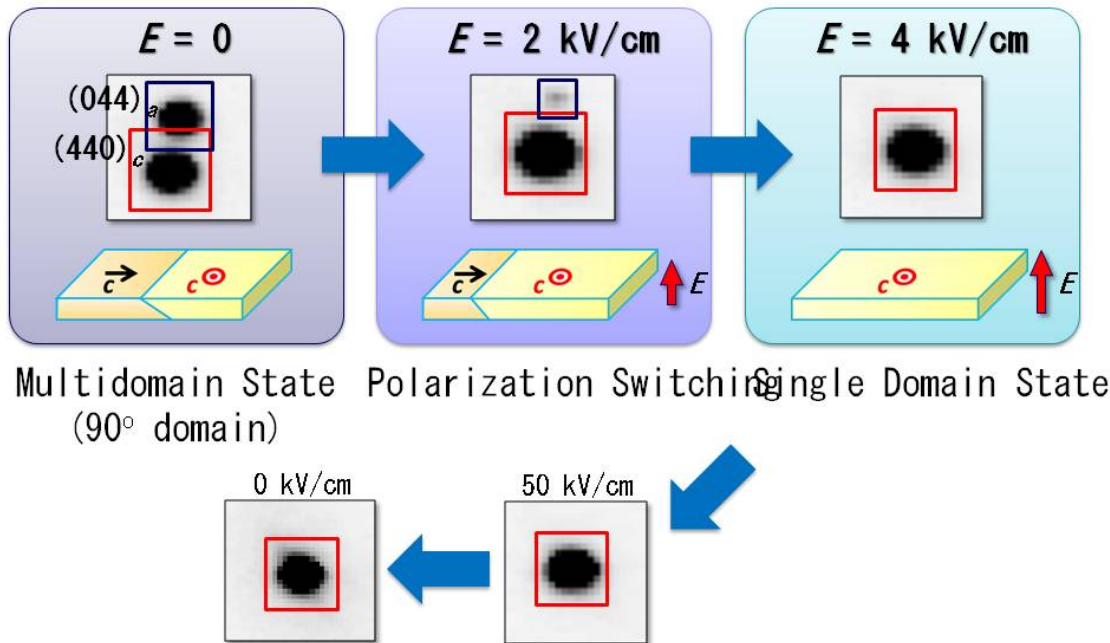


Single Crystal SR Diffraction of BaTiO₃ 8

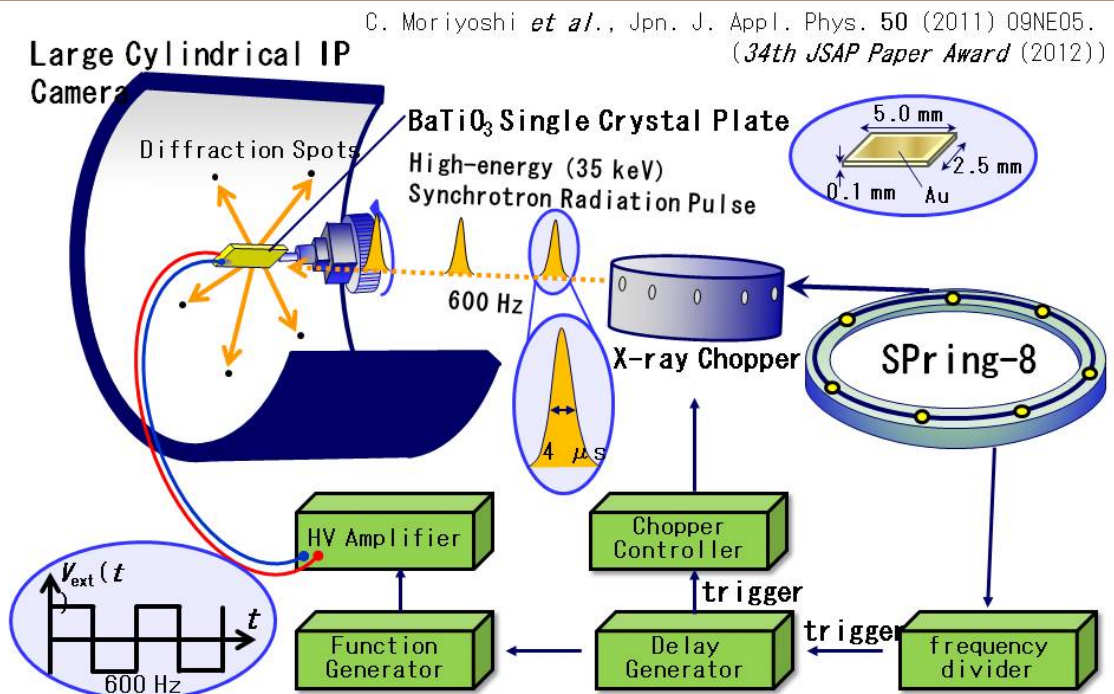


Transmission geometry & High-*Q* data & No diffraction of Au
 High-quality data enough to analyze crystal structure

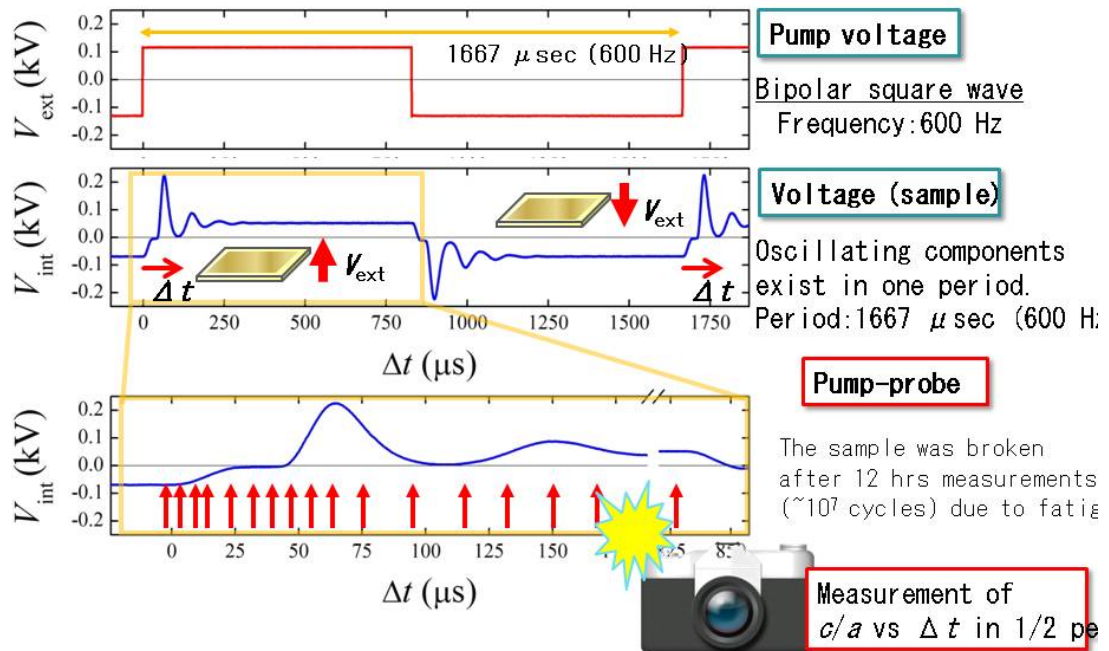
Diffraction Spots under Static Electric Field



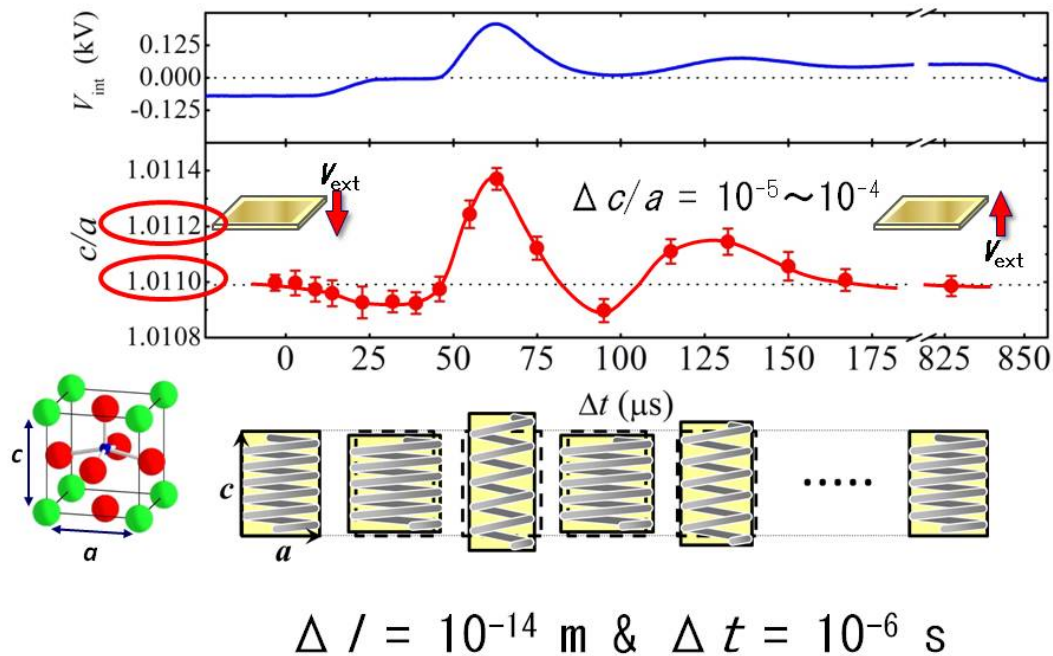
Equipment Installed in BL02B1



Electric Field Applied to BaTiO₃

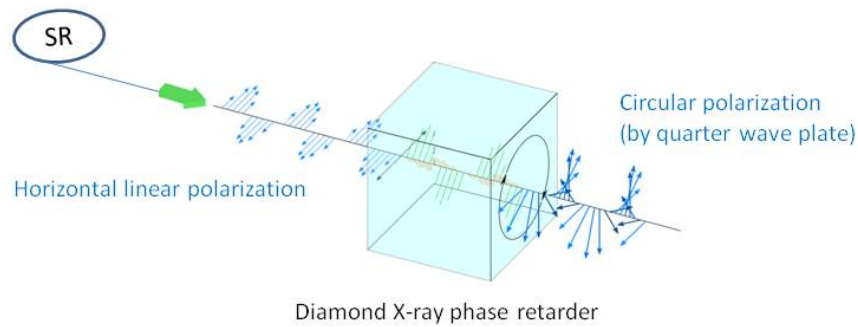


Time-Evolution of Tetragonal Lattice Distortion c/a



偏光X線が可能にする放射光磁気構造計測

理化学研究所 放射光科学総合研究センター
 大隅 寛幸



電子によるX線の散乱断面積

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} = I_{unpolarized} + P_{45} I_{45} + P_C I_C + P_L I_L$$

斜め45度偏光度 円偏光度 直線偏光度

$ C ^2$ $\text{Im}[CM^*]$ $ M ^2$	$\text{Im}[CM^*]$ $ M ^2$	$\text{Im}[CM^*]$ $ M ^2$	$ C ^2$: 純電荷散乱 $\text{Im}[CM^*]$: 電荷磁気干渉散乱 $ M ^2$: 純磁気散乱
---	------------------------------	------------------------------	--

無偏光
 ±45度偏光
 左右円偏光
 σ偏光、π偏光

↓

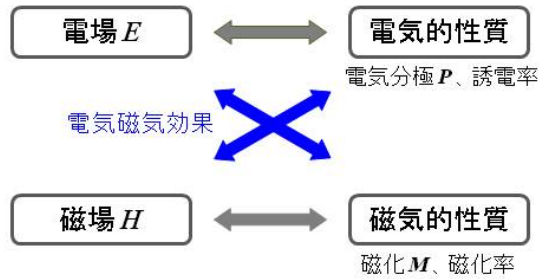
磁気構造計測

電気磁気結合と特異な電磁応答

$$\begin{aligned}
 P &= \varepsilon_0 \chi_e^{(1)} E + \varepsilon_0 \chi_e^{(2)} E^2 + \varepsilon_0 \chi_e^{(3)} E^3 + \dots + \alpha H + \dots \\
 M &= \chi_m^{(1)} H + \chi_m^{(2)} H^2 + \chi_m^{(3)} H^3 + \dots + \alpha E + \dots
 \end{aligned}$$

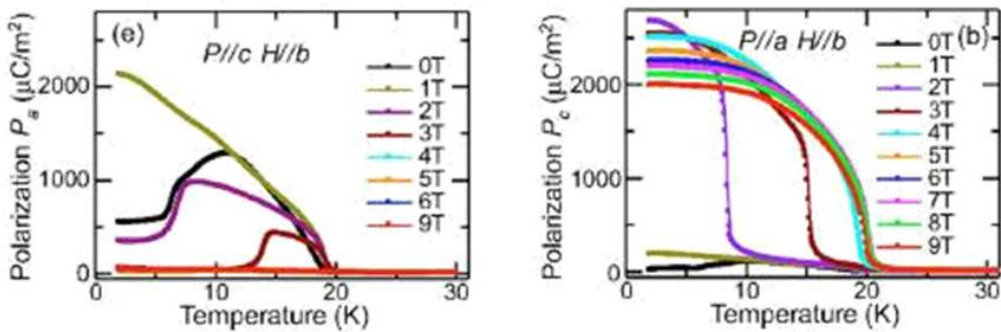
線形応答
非線形応答
非共役な場に対する応答
(電気磁気効果)

電気磁気結合



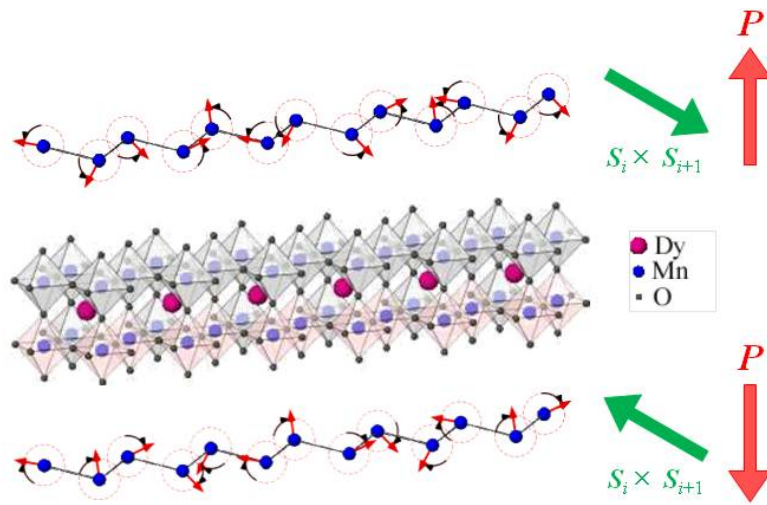
マルチフェロイック物質 DyMnO₃

磁場による電気分極の変化



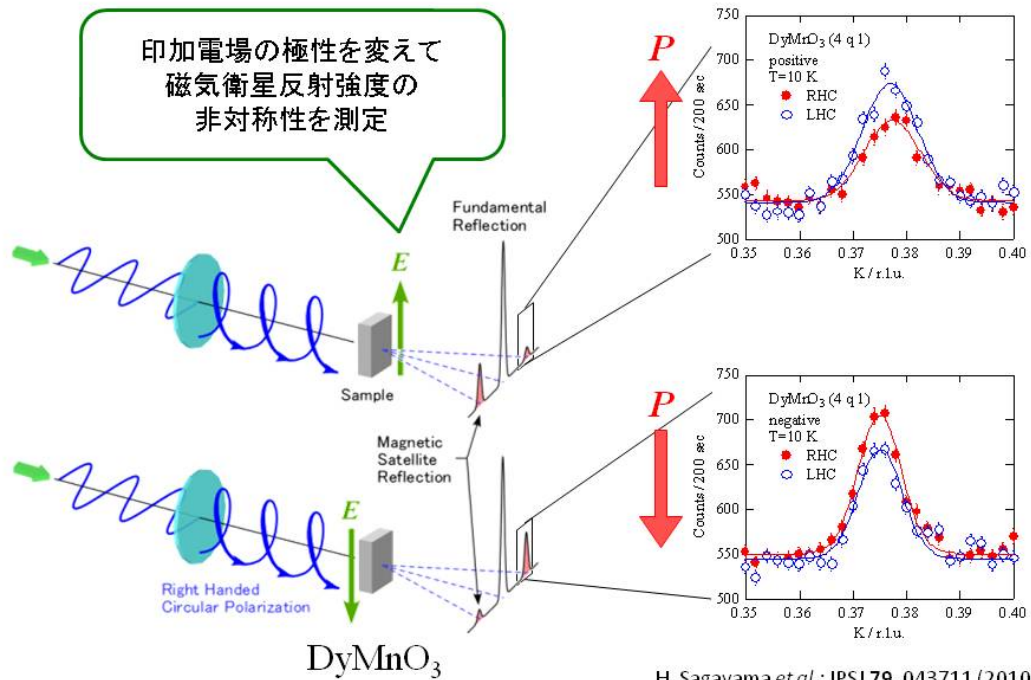
Temperature profiles of polarization along a and c axes at various magnetic fields along the b -axis.

ポーリングによるスピнкаイラリティの制御

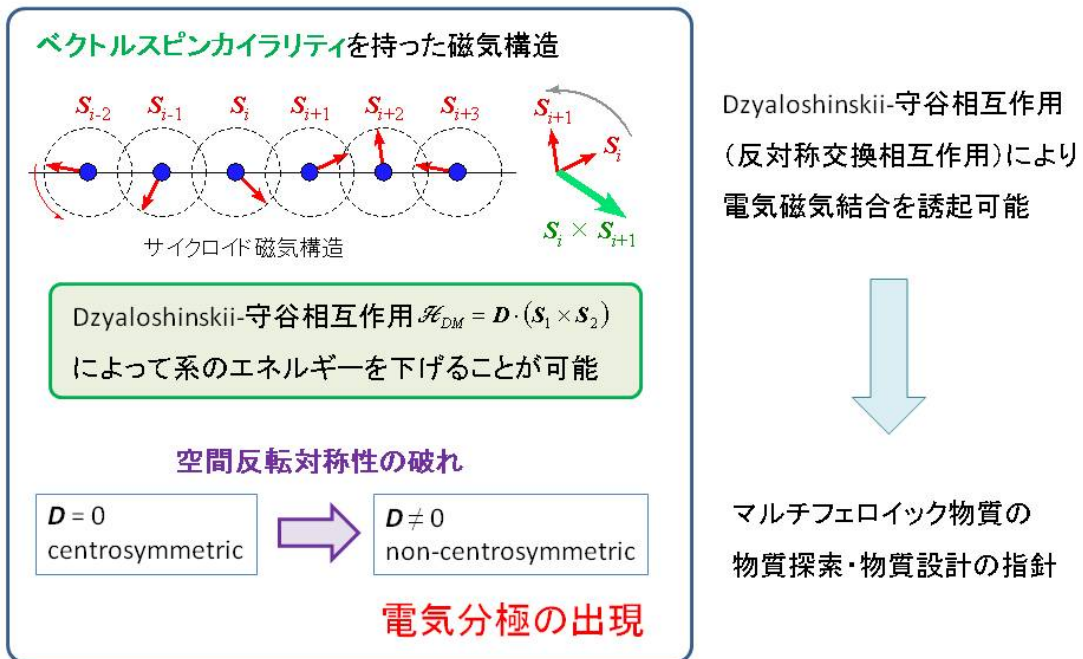


スピнкаイラリティ ⇒ 円偏光X線

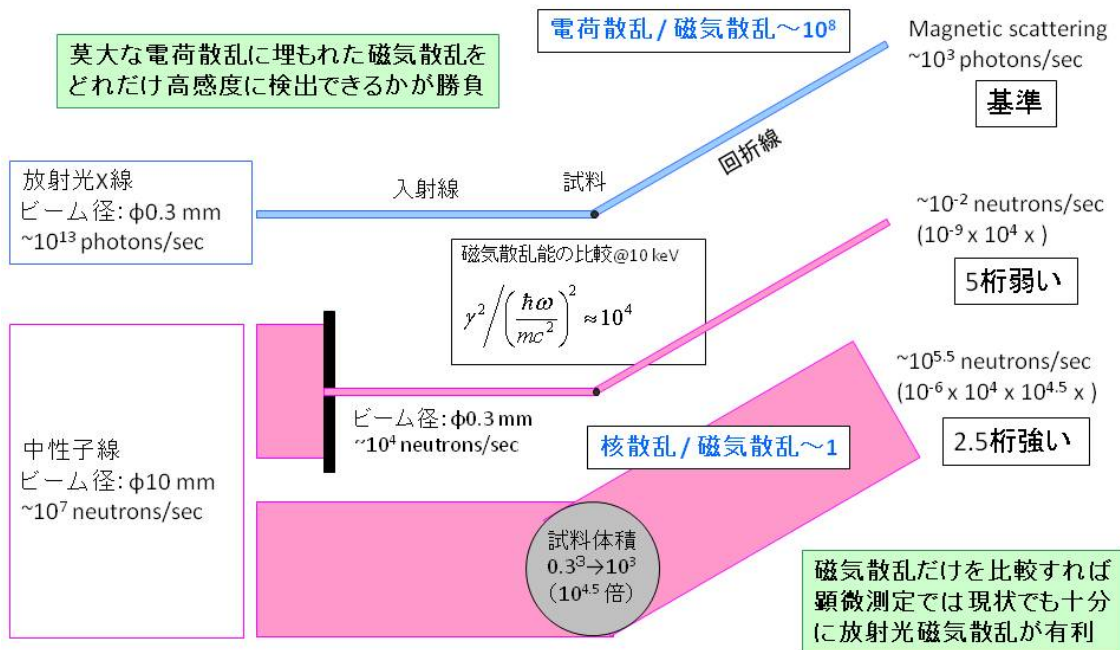
ポーリングによるスピнкаイラリティの変化を観測



電気磁気結合の微視的機構



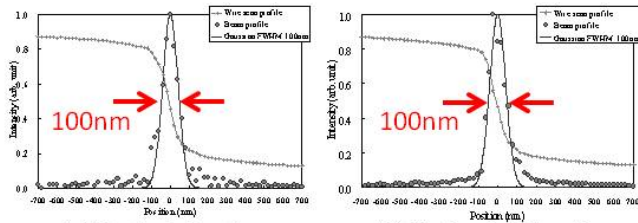
放射光磁気散乱の現状



高分解能化が進む走査型X線顕微鏡



×線集光光学系と走査型顕微鏡回折計



(a) Vertical direction (b) Horizontal direction

12.4keVにおける集光ビームの強度プロファイル

3.7×10^{10} photons/s
@ $100 \times 100 \text{ nm}^2$

BL19LXU/SPring-8



資料提供：竹下聡史氏（理研播磨）

偏光反転による電荷散乱の相殺

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} = I_{unpolarized} + P_{45} I_{45} + P_C I_C + P_L I_L$$

$$P_{45} = P_L = 0$$

$$I(P_C = +1) = I_{unpolarized} + 0 + I_C + 0$$

$$I(P_C = -1) = I_{unpolarized} + 0 - I_C + 0$$

$ C ^2$	$\text{Im}[CM^*]$	$\text{Im}[CM^*]$	$\text{Im}[CM^*]$
$\text{Im}[CM^*]$	$ M ^2$	$ M ^2$	$ M ^2$
$ M ^2$			

$|C|^2$: 純電荷散乱
 $\text{Im}[CM^*]$: 電荷磁気干渉散乱
 $|M|^2$: 純磁気散乱

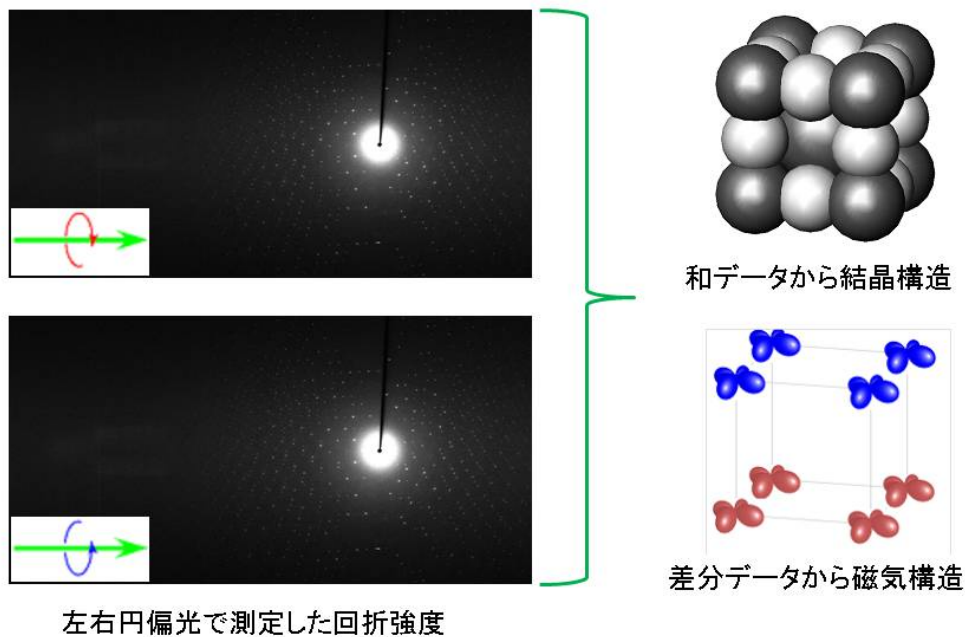
差は $I(P_C = +1) - I(P_C = -1) = 2I_C$

電荷磁気干渉散乱が支配的

和は $I(P_C = +1) + I(P_C = -1) = 2I_{unpolarized}$

電荷散乱が支配的

偏光X線が可能にする放射光磁気構造計測

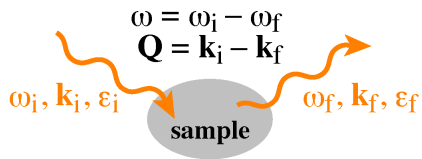


X線非弾性散乱の現状と将来

Current status and future perspectives of inelastic x-ray scattering

日本原子力研究開発機構
量子ビーム応用研究部門
石井賢司

Elastic v.s. Inelastic



$$\omega = \omega_i - \omega_f$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$$

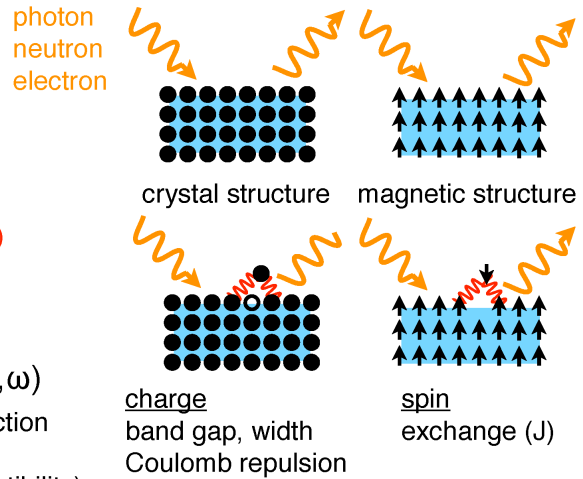
when $\omega_i \neq \omega_f$,
 inelastic x-ray scattering (IXS)
 x-ray Raman scattering, x-ray emission spectroscopy
 here,
 momentum-resolved IXS from crystalline materials

- **Elastic scattering (diffraction)**
 [ground state]
 static state of material

- **Inelastic scattering**
 [excited state]
 dynamics of materials
 → interaction of electrons (> 1 meV)
 understanding of mechanism
 [fluctuation]
 near phase boundary

$$S(\mathbf{Q}, \omega) \sim [V(\mathbf{Q})]^2 [1 - e^{-\beta\omega}]^{-1} \text{Im}\chi(\mathbf{Q}, \omega)$$

$S(\mathbf{Q}, \omega)$: dynamical correlation function
 $V(\mathbf{Q})$: interaction of probe
 $\chi(\mathbf{Q}, \omega)$: response function (susceptibility)



2

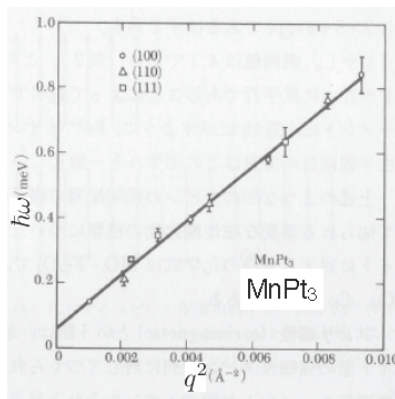
Inelastic scattering in textbook

magnetic excitation (spin wave)

ferromagnetic order

$$H = -2J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$$

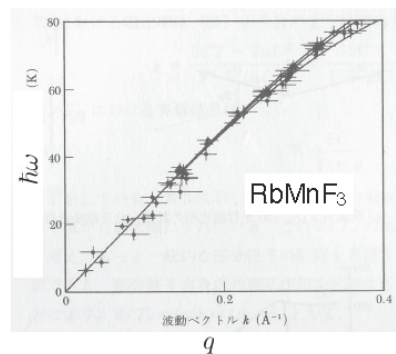
$$E = 4JS(1 - \cos qa) \sim (2JSa^2)q^2$$



antiferromagnetic order

$$H = 2J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$$

$$E = 4JS|\sin qa| \sim 4JSa|q|$$



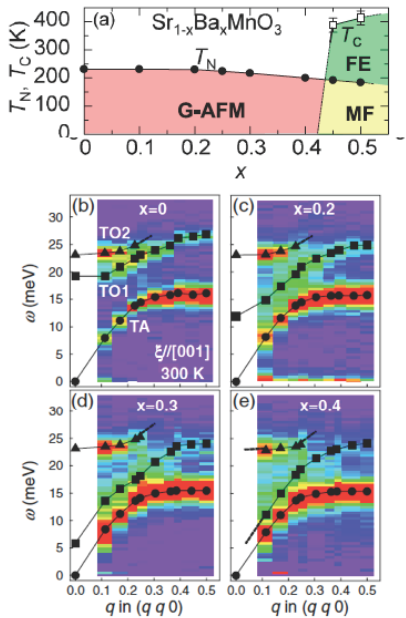
C. Kittel, Introduction of Solid State Physics

dispersion relation of magnetic excitation ⇒ **intersite** magnetic interaction J
 width of excitation ⇒ coupling to other degree of freedom (lifetime)

3

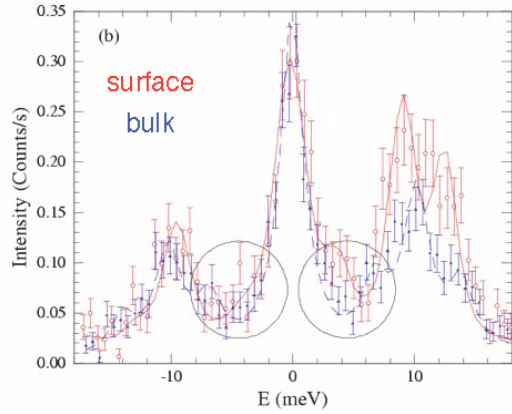
Recent topics (nonresonant, phonon)

Displacement-type ferroelectricity
in magnetic $\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{MnO}_3$



Sakai et al., PRL **107**, 137601 (2011)

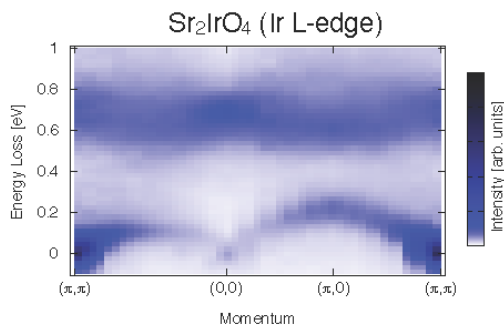
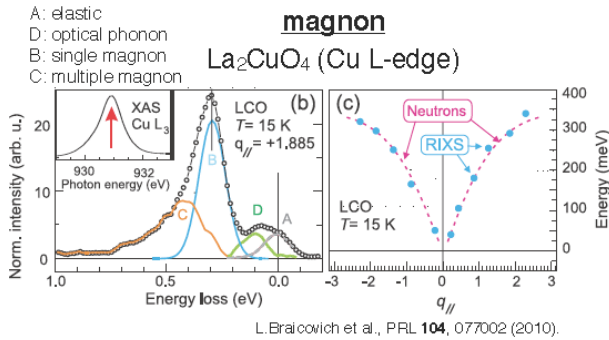
Phonon in 2H-NbSe_2 surface
(Kohn anomaly)



Murphy et al., PRL **95**, 256104 (2005)

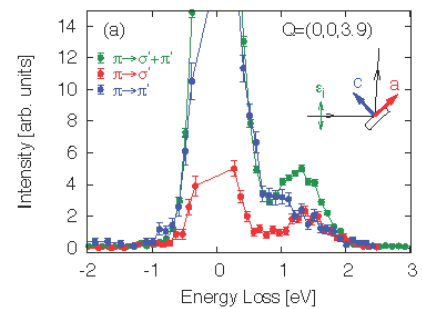
4

Recent topics (resonant, electronic)



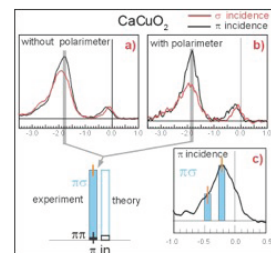
Similar data in Kim et al., PRL **108**, 177003 (2012)

Polarization analyzed RIXS
 KCuF_3 (Cu K-edge)



Ishii et al., PRB **83**, 241101 (2011)

CaCuO_2 (Cu L-edge)



<http://www.esrf.eu/news/spotlight/spotlight140>

5

IXS beamlines at SPring-8

nonresonant (NIXS)		resonant (RIXS)	
hard x-ray		soft x-ray	
phonon ($\Delta\omega \sim 1$ meV)	electronic excitation ($\Delta\omega \sim 100$ meV)		
10^9 Hz/1meV [1]	10^{11} Hz/100meV [2,3]		?
35XU	11XU, 12XU		07LSU (27SU, 17SU)

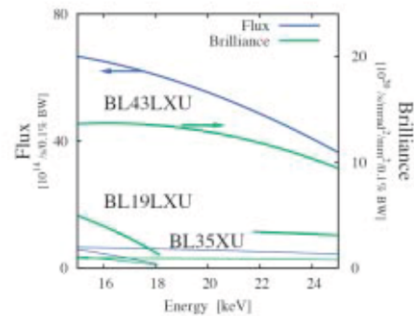
[1] 35XU: Baron et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **467-468**, 627 (2001)
 [2] 11XU: Inami et al., Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A **467-468**, 1081 (2001)
 [3] 12XU: Cai et al., AIP Conf. Proc. **705**, 340 (2004)

Most experiments are photon-demanding.

- New beamline BL43LXU
 (RIKEN Quantum NanoDynamics beamline)
- high electron beam energy (8 GeV)
 - long straight section
 - in-vacuum undulator technology

4×10^{11} Hz/1meV is expected.
 (for nonresonant IXS)

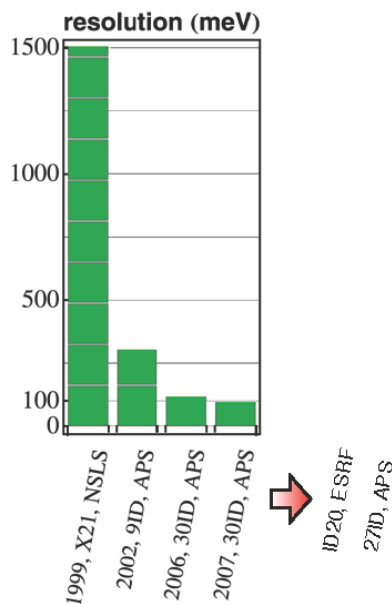
Baron, SPring-8 Newsletter **15**, 14 (2010)



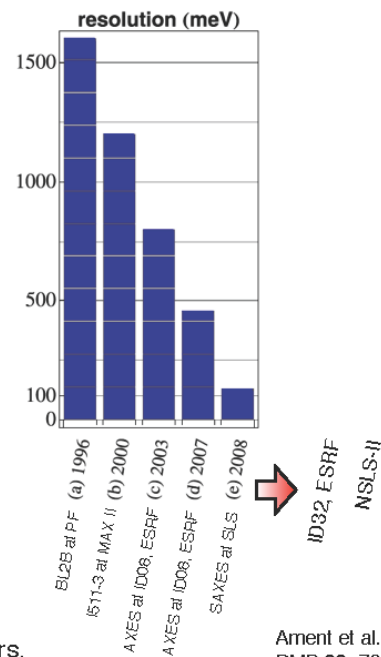
6

Energy resolution in RIXS

hard x-ray (Cu K-edge)



soft x-ray (Cu L₃-edge)



Probably, resolution will be improved further in next 10 years.

Ament et al.,
 RMP **83**, 705 (2011)

7

Future perspectives

NIXS

- atom dynamics
strongly correlated electron system (superconductor, multiferroics), liquid
+ extreme conditions (high pressure ...)
- electronic excitation
direct observation of dynamical charge correlation function $N(\mathbf{q}, \omega)$
orbital excitation (higher multipole transition)

RIXS (hard and soft x-rays)

- magnetic excitation (tiny sample, thin film, ...)

Approach from time domain (XFEL)

- $\Delta\tau$ SPring-8: several tens ps
SACLA (BL3): 6-30 fsec
energy (1 meV – 1 eV) \leftrightarrow time (1 ps – 1 fs)
- recovery force (interaction)
 - dissipation of energy (coupling to others)

higher flux sources
Seeded FEL, XFEL, ...

