



姓名：黃迪靖

學歷：

美國德州大學奧斯汀分校博士
(University of Texas at Austin) (1994)

現職及經歷：

國家同步輻射研究中心研究員 (2005/01- 至今)
國立清華大學物理系合聘教授 (2005/08- 至今)
國立交通大學電子物理系合聘教授 (2005/03- 至今)
國家同步輻射研究中心副研究員 (2003/01-2004/12)
行政院同步輻射研究中心籌建處副研究員 (1996/07-2002/12)
Brookhaven National Laboratory, Research Associate (1994/07-1996/07)



著作名稱：

1. D. J. Huang, W. B. Wu, G. Y. Guo, H.-J. Lin, T. Y. Hou, C. F. Chang, C. T. Chen, A. Fujimori, T. Kimura, H. B. Huang, A. Tanaka, and T. Jo "Orbital ordering in $La_{0.5}Sr_{1.5}MnO_4$ studied by soft x-ray linear dichroism," Phys. Rev. Lett. 92, 87201 (2004).

2. D. J. Huang, L. H. Tjeng, J. Chen, C. F. Chang, W. B. Wu, S. C. Chung, G. Y. Guo, H.-J. Lin, S. G. Shyu, C. C. Wu, and C. T. Chen, "Anomalous spin-polarization and dualistic electronic nature of CrO_2 ," Phys.

Rev. B 67, 214419 (2003)

3. D. J. Huang, C. F. Chang, H.-T. Jeng, G. Y. Guo, H.-J. Lin, H. C. Ku, A. Fujimori, Y. Takahashi, and C. T. Chen, "Spin and orbital magnetic moments of Fe_3O_4 ," Phys. Rev. Lett. 93, 077204 (2004).

中文簡介：

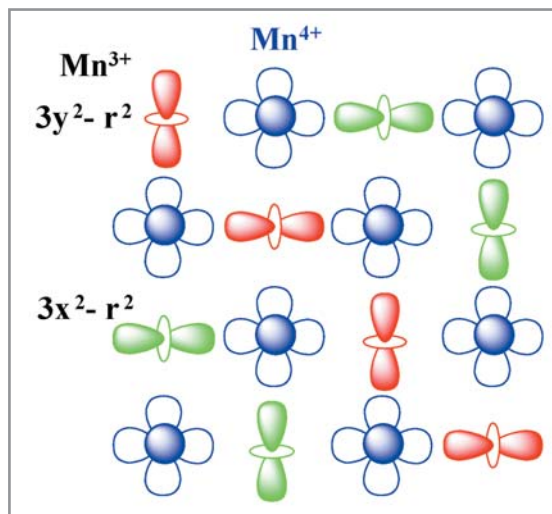
當今凝態物理學之基礎與應用研究有賴於前瞻性材料的發展，其中強電子關聯性過渡金屬氧化物，具有許多新穎而奇特的巨觀物理現象，並深富高科技應用潛力，如高溫超導與龐大磁致電阻等現象。儘管國際科學

界曾投入鉅大的資源研究這類材料，但對這些奇特現象仍無法圓滿解釋。而揭開其物理機制是目前凝態物理學的一大挑戰。以實驗方法來量測闡明這類材料之微觀電子與磁性結構，是解釋這些奇特現象之根本工作。

錳氧化物 $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 的價電子軌域對稱性

第一篇代表作為利用軟X光吸收能譜實驗技術，探測強電子關聯性過渡金屬氧化物的電子與磁性結構，主要研究內容是探測單層結構錳氧化物 $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 的價電子軌域對稱性。由於電子電荷、自旋以及晶體結構，皆與價電子軌域對稱性緊密地互相關聯， $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 的自旋、軌域與電荷有序的微觀機制，是當今凝態物理的重要課題，並掀起近年來的熱烈爭論。在這一篇文章發表前，尚未有實驗量測到 $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 的價電子軌域對稱性。

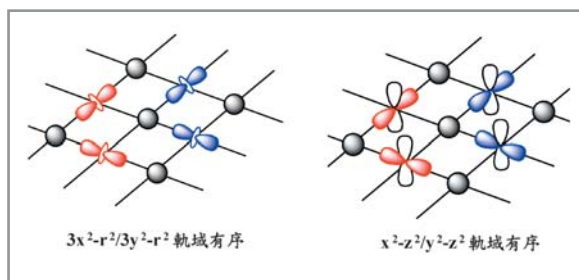
$\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 是半摻雜 (half-doped)、具有單層結構的反鐵磁氧化物。在化學鍵結觀念下， LaSrMnO_4 中每個過渡金屬 Mn 皆為正三價 Mn^{3+} 離子。Mn 的 3d 價電子軌域受到周圍六個氧離子的作用，分裂為兩群具有不同對稱性的軌域，即 t_{2g} 與 e_g 對稱性； t_{2g} 軌域電子的能量較 e_g 軌域電子的能量低，而且 Mn^{3+} 的 3d 價電子中， t_{2g} 軌域是填滿的，但 e_g 軌域僅有一個電子。經過摻雜 Sr 至 LaSrMnO_4 化合物後， $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 中一半的 Mn 為 Mn^{3+} ，另一半為 Mn^{4+} ，但 Mn^{4+} 並無 e_g 軌域電子。在溫度低於 217 K 時， $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 的 MnO_2 平面上的 Mn 呈現電荷及軌域有序，如圖一所



圖一： $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 之 MnO_2 平面上（即 xy 平面上）自旋、電荷及軌域有序排列情形。

示，化學態不同的 Mn 在空間中形成交錯排列。一般認為， $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 中 Mn^{3+} 的 e_g 電子具有啞鈴型對稱性 ($d_{3x^2-r^2}/d_{3y^2-r^2}$) 的軌域有序，有規則地交替排列在 MnO_2 平面上，而且各形成兩個次晶格。然而在 MnO_2 平面上，啞鈴型軌域有序與十字型軌域有序 ($d_{x^2-z^2}/d_{y^2-z^2}$)，具有相同的對稱性，如圖二所示，因此不能排除 $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 具有十字型軌域有序的可能性。

我們應用軟X光吸收能譜線二向性的實驗技術，研究 $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 的軌域對稱性。軟 X 光吸收能譜的線二向性實驗，是物質對兩種不同偏極化方向的 X 光吸收實驗。



圖二： $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{1.5}\text{MnO}_4$ 之 MnO_2 平面上兩種不同軌域有序排列情形。

比較軟 X 光吸收能譜線二向性的實驗結果及能譜計算，我們發現在這個半摻雜的錳氧化物裡， Mn^{3+} 應該是具有 $d_{x^2-z^2}/d_{y^2-z^2}$ 佔有態的軌域有序，並非一般所認為的 $d_{3x^2-r^2}/d_{3y^2-r^2}$ 的軌域有序。更進一步的溫度變化實驗顯示，在溫度 220 K 附近，線二向性之強度隨溫度上升而劇烈下降，與 $La_{0.5}Sr_{1.5}MnO_4$ 的軌域有序相變及中子繞射實驗結果相吻合。我們的軟 X 光能譜實驗結果，首次證實 $La_{0.5}Sr_{1.5}MnO_4$ 的價電子具有十字型軌域對稱性，而非先前認定的啞鈴型軌域對稱性，為電子軌域有序性的微觀機制提供關鍵性的實驗結果。

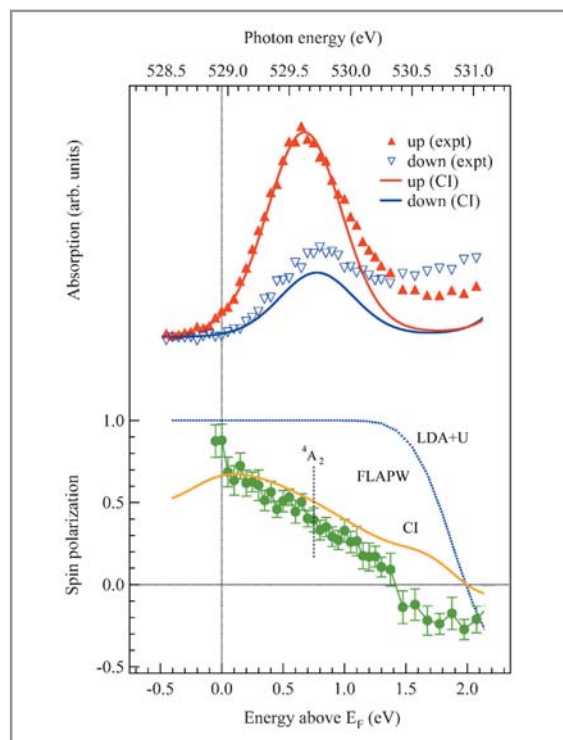
半金屬氧化物的電子結構研究

另外兩篇代表作為半金屬氧化物的電子結構研究。磁性薄膜的特性與應用一直是凝態物理研究的熱門課題，近年來發現的半金屬磁性薄膜即是一個例子。物質的磁性性質主要源自於電子的自旋交互作用，鐵磁性材料的導電電子中，自旋向上與向下的電子數目並不相等，但這兩種自旋方向的電子皆負責導電現象。半金屬材料是一特殊磁性物質，它們的導電電子僅具有一種自旋方向，而另一自旋方向的電子並不參與導電。因此，半金屬材料具有完全自旋極化的導電電子，其導電性完全決定於單一自旋方向的電子。半金屬材料亦具有磁矩量子化與零磁化率等特殊物理性質。

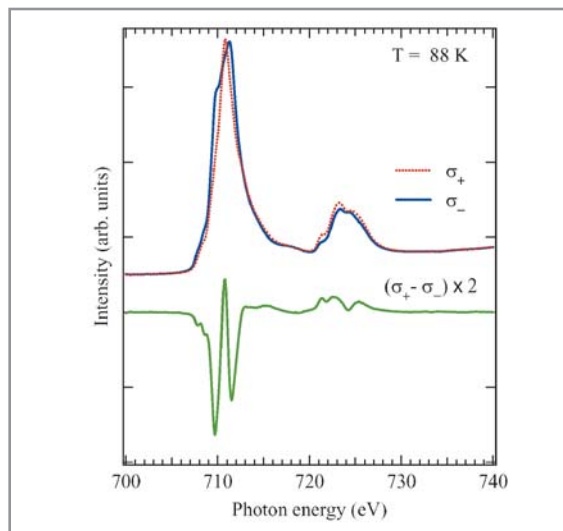
二氧化鉻 CrO_2 是最簡單的半金屬氧化物，但科學界對 CrO_2 的了解並不完全。我們最近發展的電子自旋解析軟 X 光吸收能譜技術，提供 CrO_2 的半金屬特性之能譜證據，並揭開其電子結構之謎，闡明為何 CrO_2 具有強

電子關聯性卻是導體的微觀機制。在費米能階附近價電子具有 100% 自旋極化是半金屬的特殊性質，自旋解析電子能譜實驗是研究半金屬材料中，費米能階附近價電子自旋極化的直接方法。我們可以藉由光電子發射能譜 (photoemission)、電光子能譜 (即反光電子發射能譜，inverse photoemission) 及 O 1s 軟 X 光吸收能譜等實驗方法，探討半金屬磁性氧化物的電子結構。我們討論如何應用自旋解析 O 1s 軟 X 光吸收能譜實驗來研究半金屬磁性氧化物的電子結構。

過渡金屬氧化物 (如 CrO_2) 中的氧 2p 軌道會與過渡金屬 3d 軌道混合，在費米能階附近它們的對稱性幾乎相同。因此 O 1s \rightarrow 2p 軟 X 光吸收能譜，可以提供過渡金屬 3d 軌道的能量與對稱性等相關訊息。能帶計算結果告訴我們 CrO_2 的 O 2p 電子地與 Cr 3d 電子混合，在費米能階附近 O 2p 電子也具有 100% 電子自旋極化。圖三為 CrO_2 的自旋解析 O 1s 軟 X 光吸收能譜實驗結果。圖上半部份是 O 1s \rightarrow 2p 軟 X 光吸收能譜中，能量 529.6 eV 吸收峰附近的自旋解析能譜；圖下半部份是 O 1s \rightarrow 2p 軟 X 光吸收能譜的電子自旋極化。圖三的實驗結果清楚地顯示，費米能階附近的 O 2p 能帶具有 100% 自旋極化，因此 O 1s \rightarrow 2p 軟 X 光吸收實驗結果證明 CrO_2 是半金屬。雖然 CrO_2 的自旋解析軟 X 光吸收實驗提供 CrO_2 是半金屬的能譜證據，有趣的是，如我們仔細檢驗 CrO_2 的自旋解析 O 1s 軟 X 光吸收能譜，可發現在能量距離費米能階上方 0.6 eV 處 (即入射光能量 529.6 eV)，O 2p 能帶反映出 Cr 3d 軌域的 d_{xz-yz} 對稱性，但這些 O 2p “電洞” (非佔有態) 的自旋極化並不是能帶理論預測的



圖三：CrO₂ 的自旋解析 O 1s 軌 X 光吸收能譜實驗結果。



圖四：Fe₃O₄ 的 Fe 2s → 3d 軟 X 光吸收與磁圓二向性能譜實驗結果

100%，僅為50%，這種差異源自於電子關聯性。

除了半金屬材料 CrO₂ 外，我們亦研究四氧化三鐵 Fe₃O₄ 的磁性與電子結構。Fe₃O₄

是一種早為人類所應用的重要磁性氧化物，能帶理論計算預測 Fe₃O₄ 為一半金屬，雖然經過科學界長期的研究，但其半金屬特性尚未被實驗證實或否定。應用軟 X 光能譜技術，我們量測 Fe₃O₄ 中 Fe 的 2p → 3d 軟 X 光吸收之磁圓二相性，提供 Fe₃O₄ 的自旋與軌道磁矩之精密量測，圖四所示的能譜實驗結果證明，四氧化三鐵 Fe₃O₄ 並不具有自旋磁矩量子化的特性，因此並非半金屬，而且具有強電子關聯性質。我們的決定性實驗證據回答了長久以來的疑問。

評審簡評：

黃迪靖博士利用精密之軟 X 光吸收譜，發展出新的電子自旋解析軟 X 光吸收能譜技術，進而研究過渡金屬氧化物及半金屬氧化物之電子電荷及自旋之有序性，研究成果具有突破性的結論：（一）提供決定性的實驗證據，證明四氧化三鐵 Fe₃O₄ 具有強電子關聯性質，而非一般傳統能帶理論計算預測之半金屬，解決長久以來相關的科學爭議；（二）首次測量出 La_{0.5}Sr_{1.5}MnO₄ 系統的價電子具有十字型軌域之特殊對稱性，推翻學界原先認定之啞鈴型對稱軌域，為電子軌域有序性的微觀機制提供關鍵性的實驗結果；（三）提供 CrO₂ 半金屬特性的能譜證據，闡明為何 CrO₂ 具有強電子關聯性卻是導體的微觀機制。以上之研究課題均為目前凝態物理中，有關於強關聯作用研究之最基礎及重要的研究方向，黃博士能有以上突破性的貢獻，在 2004 年發表三篇論文於物理界頂尖的期刊 Physical Review Letters，研究成果表現相當優異，實在值得大力鼓勵，並加以肯定。