

精密構造解析を中心とした強相関電子物質の物性発現機構の解明

Structural study for the origin of phase transition in correlated electron system

実験組織
研究代表者 熊井 玲児(産業技術総合研究所 光技術研究部門(PRI))、KEK 物質構造科学研究所
産総研PRI(堀内、山田、峯岡、堤)、物構研CMRC(小林、中尾、村上)、理研(奥山、渋谷)、東大院総合(近藤)、東大院理(石田)、東大院工(打田)、東北大(野田、渡邊、玄)、北大(山田、武田)

課題有効期間 2009年4月 ~ 2012年3月

研究目的
有機物、遷移金属酸化物など、強相関電子系物質を用い、種々の新規物性の開拓を行う上で、これらの物質の種々の条件下(低温、高温、高圧、低温高圧)での分子構造、電子構造を明らかにする。また、構造的見地から、これらの物質における物性発現機構を解明するとともに、新規物質開発へのフィードバックを行う。

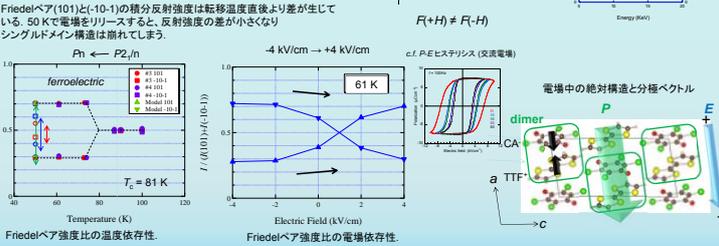
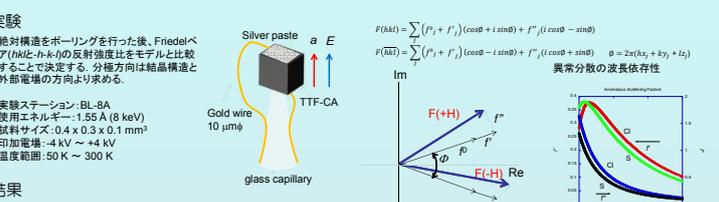
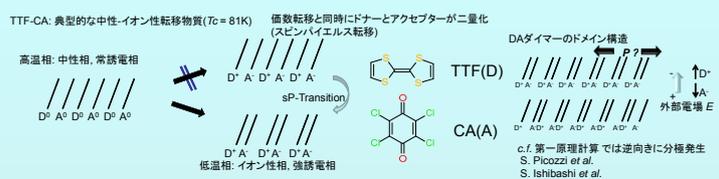
実験ステーション BL-8A, BL-3A, BL-4C

2010年度の進捗状況

電荷移動型強誘電体TTF-CAの分極ドメインの観測

BL-8A

典型的な中性・イオン性転移物質TTF-CAは、価数転移に伴い強誘電転移を示す。この結晶の電場下における回折実験から、分極の方向が単純なイオン対による点電荷モデルとは逆向きに誘起されることを明らかにした。これは巨大な分極値を示唆するBerry位相モデルによる第一原理計算の結果と一致する。



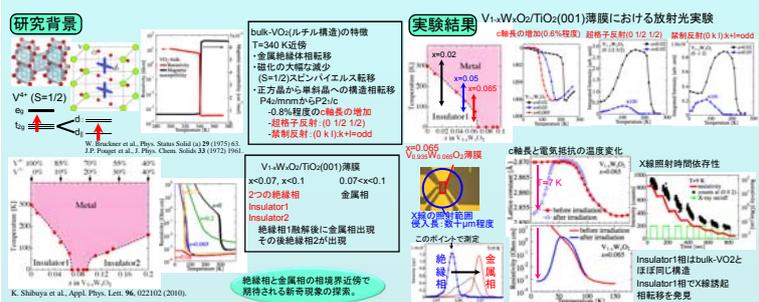
まとめ

- Friedelヘアの強度比をモデルと比較した結果、電場下ではシングルドメイン構造となっていることがわかった。
- 外部電場と絶対構造より分極ベクトルは-a方向。
- 低温で電場をリリースするとシングルドメイン構造は崩れてしまう。
- 電場によるドメイン構造の反転はPヒステリシス測定値と同程度。

WドーピングVO2薄膜におけるX線誘起構造相転移

BL-3A

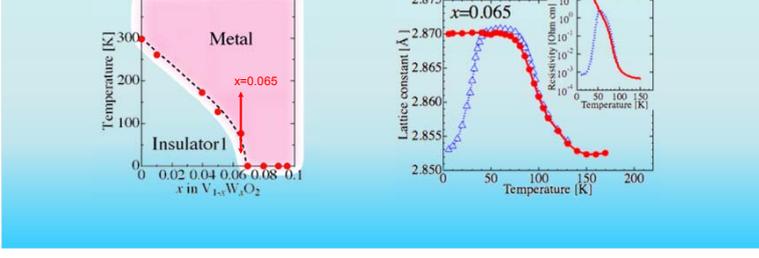
VO2は室温近傍で構造変化を伴う金属絶縁体相転移を起こす物質として知られている。VサイトをWイオンで置換して電子ドーピングを行ったW-doped VO2/TiO2(001)薄膜では、低温の絶縁体相がWドーピングとともに縮小し、完全に金属状態へと変わった後に、新しい絶縁体相が成長する事が観測されている。これら2つの絶縁体相が消失するW濃度近傍の絶縁体相では、高フラックスのX線照射により永続的な金属相が誘起される事を発見した。



まとめ

- 絶縁体と金属相の相境界で永続的なX線誘起相転移

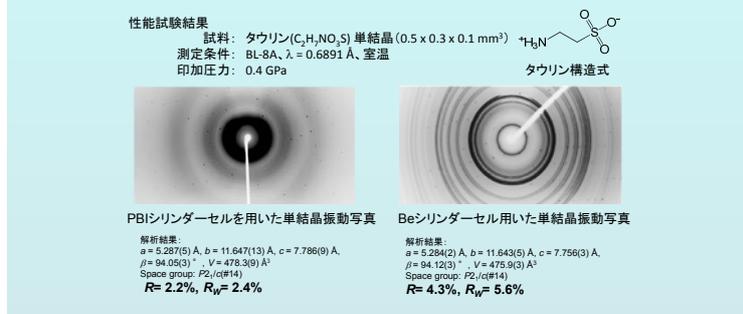
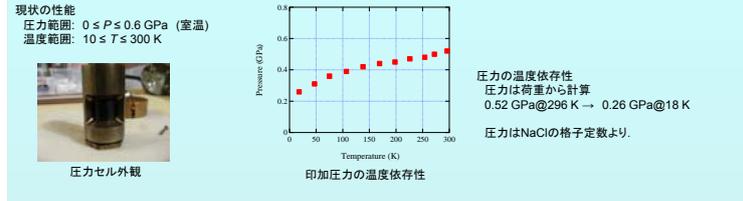
WドーピングVO2薄膜におけるInsulator1相と金属相の相境界で永続的なX線誘起相転移



高圧下精密構造解析用バックグラウンド低減型セルの開発

BL-8A

目的
圧力下でも常圧と同程度の精度で単結晶構造解析を行うことが可能な圧力セルを開発する。従来のBeシリンダーセルで解析の妨げとなるバックグラウンドのデバイリングが存在しない圧力セルを製作し、圧力下でも超格子や散漫散乱等微弱な反射の観測を可能とする。



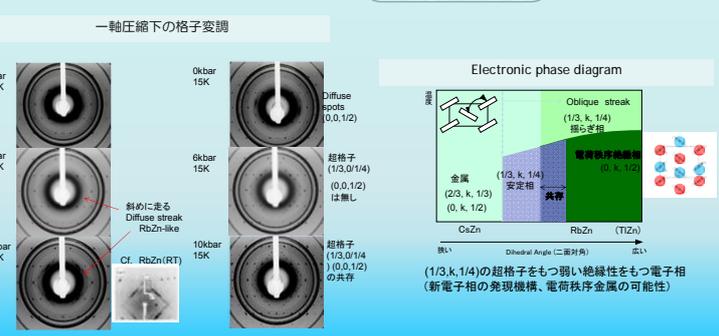
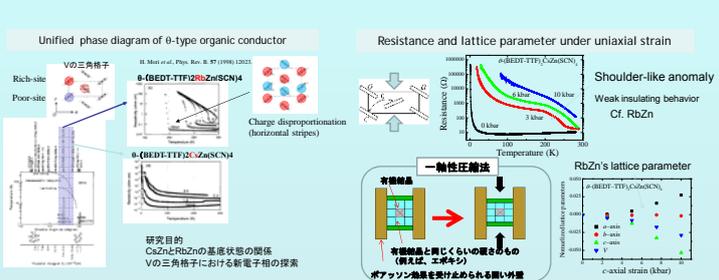
まとめ

- 室温0.4 GPaで標準試料の単結晶構造解析を行った結果、従来のBeシリンダーセルに比べR値が大幅に低下し、より精密な構造解析が可能となった。
- 圧力セル温度10 Kで室温印加圧力から0.26 GPa程度圧掛けが発生する。
- 荷重に対する試料室縮小幅が大きく、到達圧力が約0.6 GPa程度とBeシリンダーセル(1.5 GPa)に比べ低い。
- 到達圧力、圧掛け改善の為の圧力セル設計の最適化。
- TMB-TCNQIにおける圧力誘起超格子反射の観測。
- β-(meso-DMeET)2PF6の圧力下散漫散乱の観測。

一軸性圧縮下・θ-ET2CsZn(SCN)4の構造変調

BL-8A

有機導体ETラジカル塩のうち、q型配列と呼ばれる構造では、構成分子の隣接格子間クローン相互作用が三角格子を形成していることから、複数の電子相の競合がみられる。このうち、対イオンとしてCsとZnを含む塩に対して一軸性圧縮を印加することにより、電荷秩序絶縁相の周辺にどのような電子相が存在するかを探索した。一軸圧の印加方向による電気伝導挙動と構造変調の対応について知見を得た。



論文
1. J. S. Lee, M. Nakamura, D. Okuyama, R. Kumai, T. Arima, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Phys. Rev. B 82, 052406-1-4 (2010).
2. S. Horiuchi, Y. Tokura, G. Giovannetti, S. Picozzi, H. Ito, R. Shimano, R. Kumai, and Y. Tokura, Nature, 463, 789-792 (2010).
3. T. Yamada, R. Kumai, Y. Takahashi and T. Hasegawa, J. Mater. Chem., 20, 5810-5812 (2010).
4. M. Nakamura, D. Okuyama, J. S. Lee, T. Arima, Y. Wakabayashi, R. Kumai, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Adv. Mater., 22, 500-504 (2010).
5. S. Horiuchi, R. Kumai, J. Fujioaka, and Y. Tokura, Physica B 405, S334-S337 (2010).
6. S. Horiuchi, R. Kumai, and Y. Tokura, Adv. Mater., 23, 2098 (2011).
7. K. Ishizaka, M. S. Bahramy, H. Murakawa, M. Sakano, T. Shimojima, T. Sonobe, K. Koizumi, S. Shin, H. Miyahara, A. Kimura, K. Miyamoto, T. Okuda, H. Namatame, M. Taniguchi, R. Anta, N. Nagaosa, K. Kobayashi, Y. Murakami, R. Kumai, Y. Kaneko, Y. Onose, and Y. Tokura, Nature Mater. 10, 521 - 526 (2011).