

2006S2-005 「軌道放射光を用いた強相関電子材料の構造解析による物性発現機構の解明」

実験組織

研究代表者 熊井 玲児(産業技術総合研究所 強相関電子技術研究センター(CERC))
産総研・CERC(長谷川、堀内、高橋、山田)、ERATO-MF(徳永、奥山)、東大・工(井口、藤岡、山崎、関、酒井、打田)、北大(芥川、越中)、

課題有効期間 2006年4月～2009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、構造物性的見地から、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-1A, BL-4C

2007年の研究進捗状況 主に BL-1A に設置されたイメージングプレート回折計を用いて、強相関電子材料の構造解析を行った。高温、低温における精密構造解析に加え、マキシマムエントロピー法(MEM)による解析によって、電子密度の小さな水素原子の座標の特定など物性発現機構の解明に関する解析結果を得ることができた。以下にいくつかの例を記す。

1) 水素結合型有機強誘電体の構造解析、電場下構造解析

近年、水素結合型 電子系超分子構造体において、いくつかの強誘電体が開発された。これらの分極の起源を特定するために、強誘電相及び常誘電相の構造解析を行った。テトラピリジルピラジン(TPPZ)とクロラニル酸、あるいはプロマニル酸からなる錯体($H_2\text{-TPPZ}^{2+}(\text{Hx}_a)_2$)では、 $H_2\text{-TPPZ}^{2+}$ 分子内の $N\dots H^+\dots N$ 型水素結合において、高温におけるプロトン無秩序状態が低温で凍結することによって分極が生じ、これらが結晶内で整列することによって強誘電体となることが明らかになった。さらに、結晶に電場を印加し、強誘電ドメインの制御を行い、構造解析から強誘電相における絶対構造を決定した。

2) 有機 FET における構造相転移に起因したキャリア伝達特性

交互積層型電荷移動錯体 ClMePD-Et₂TCNQ 単結晶をチャネル材料として用いた FET の伝達特性は、常温の n 型から温度の低下にともない、ambipolar 型を経て 140K 以下では p 型へと変化する。この温度領域において単結晶 X 線構造解析を行ったところ、電子相転移の存在が確認され、本物質の伝達特性の変化はこの 2 相間の競合により起因している事が、結晶構造、電子構造から明らかになった。

3) ハーフドープ層状 Mn 酸化物における電子軌道状態

ハーフドープペロフスカイト Mn 酸化物で MnO_6 八面体が 2 次元的な結合の $Eu_{0.5}Ca_{1.5}MnO_4$ (ECMO-214)と準 2 次元的な結合の $PrSr_{0.2}Ca_{1.8}Mn_2O_7$ (PSCMO-327)では、charge-orbital stripe 型の電荷軌道秩序をなすことが知られている。これらの物質の構造解析を行い、3 次元的な八面体の結合の $La_{0.5}Ca_{0.5}MnO_3$ (LCMO-113)のデータを用いて、電荷軌道秩序相における Mn サイトの 3d 軌道の形状の比較を行い、電子軌道の形状が八面体の次元に強く依存している事を見いだした。