

## 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

熊井 玲児 (産総研・光技術、物構研・構造物性センター)

**実験組織** 産総研 PRI(堀内、山田、峯廻、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)

**研究目的** 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必要な、種々の条件下(低温、高温、高圧、低温高圧)での結晶構造を明らかにする。また、これらの物質における物性発現機構を理解し、物質開発へのフィードバックを行う。

**2010年度の研究進捗状況** BL-8AにおいてIP回折計により、種々の物質を用いた精密構造解析、高圧下、電場下回折実験などを行った他、BL-3Aにおいて4軸回折計を用いたX線誘起構造相転移の観測を行った。以下にいくつかの例を記す。

1) 電荷移動型強誘電体 TTF-CA の分極ドメインの観測: 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。

2) Wドープ VO<sub>2</sub> 薄膜におけるX線誘起構造相転移: VO<sub>2</sub> 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プを行った W-doped VO<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub>(001)薄膜では、低温の絶縁体相がWドープとともに縮小し、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。

3) 一軸性圧縮下θ-ET<sub>2</sub>CsZn(SCN)<sub>4</sub> の構造変調: 有機導体ETラジカル塩のうち、θ型配列と呼ばれる構造では、構成分子の隣接分子間クーロ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。

このほか、圧力下での精密構造解析を行うためのバックグラウンド低減型クランプセルの開発、有機単結晶薄膜の結晶性の評価、電荷秩序型有機強誘電相転移を示すET塩の構造解析などを行っている。詳細については当日報告を行う。