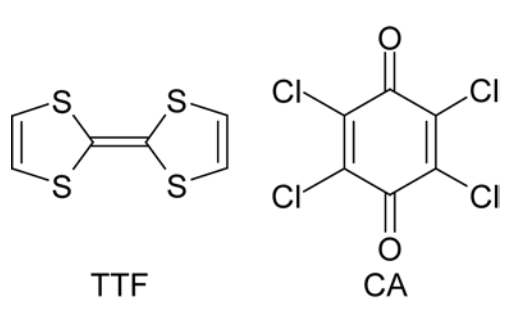


TTF-CA の光誘起動的構造変化の時間分解結晶解析

Time-Resolved Crystallographic Analysis of Photoinduced Structural Dynamics in TTF-CA

星野学^{1,2}、野澤俊介³、佐藤篤志³、富田文菜³、足立伸一^{3,4}、腰原伸也^{1,2}

TTF-CA (TTF: tetrathiafulvalene, CA: *p*-chloranil、) は、電子供与体である TTF と電子受容体である CA が交互積層した 1 次元スタッキングを基本構造とした電荷移動錯体結晶である。この TTF-CA に 90 K 付近の低温条件下で 800 nm のレーザー光を照射すると、(1)局所的に TTF から CA への光誘起電荷移動が起こり、(2)スタッキング方向に連鎖的に電荷移動が誘起され、(3)続いてスタッキング軸と垂直方向にも電荷移動が誘起されて新しい結晶相が形成される“光誘起相転移”を示すことが知られている。本研究では、時間分解単結晶 X 線構造解析を用いることで、(3)の過程の前駆現象として「衝撃波の伝播による分子間相互作用の緩和」が起こることを明らかにしたので報告する。実験では、PF-AR NW14A でフェムト秒レーザーとパルス X 線を同期させた時間分解単結晶 X 線回折実験を行い、レーザー照射後から 150 ps, 500 ps, 800 ps, 1 ns 後の結晶からの回折データを収集した。得られたデータの構造解析を微小な光誘起電子密度変化に注目して行ったところ、レーザー照射後から 800 ps の間に CA 中の Cl 原子と O 原子の位置が段階的に変化することがわかった。この段階的な変化と結晶中で CA に働く分子間相互作用を比較したところ、上記の光誘起相転移過程のうち(2)に付随する衝撃波が結晶全体に伝播することで、弱い分子間相互作用から徐々に緩和されて、それが CA の動的構造変化として反映されていることが明らかになった。発表ではさらに、分子間相互作用の緩和と TTF-CA の電荷移動相互作用の関係についても詳細に議論する。

