

## 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 (KEK 物構研 PF・構造物性研究センター)

**実験組織** 産総研 FLEC(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)、東北大(野田、渡邊、玄)

**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などを行った。以下にいくつかの例を記す。

1)  $\alpha'$ -ET<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub>の逐次相転移における構造変調: 電荷秩序を起源とする強誘電体である $\alpha'$ -ET<sub>2</sub>IBr<sub>2</sub>は、温度の変化に伴い3回の逐次相転移を示す。各相における構造解析から、電子状態と分極発現機構に関する知見を得た。

2) バックグラウンド低減型クランプセルの開発: 有機導体・誘電体などは、格子の柔軟さを反映して比較的低い圧力で物性変化が観測される。これらの物性発現機構を明らかにするために、圧力下精密構造解析を目指して構造解析用圧力セルの改良を行い、従来型セルを用いた場合に比べて解析精度が向上することを確認した。

3) Ruパイロクロアにおける低温高圧下絶縁相: 幾何学的フラストレーションを内在するパイロクロア型構造をもつTi<sub>2</sub>Ru<sub>2</sub>O<sub>7</sub>は、低温において対称性の低下に伴う金属-絶縁体転移が観測されるが、高圧下では常圧低温相とは別の絶縁相が出現することが予想されていた。この結晶の低温高圧下回折実験を行い、新たな絶縁相の構造に関して知見を得た。

4) 有機薄膜の結晶性評価: 近年、次世代デバイスとして有機半導体材料が注目されているが、有機薄膜を用いたデバイスでは、成膜プロセスや基板処理の違いなどで大きく特性が変化することが知られている。薄膜成膜条件によるデバイス特性の違いと結晶性の関連を明らかにするために、いくつかの薄膜について結晶性の評価を行った。

その他 WドーピングVO<sub>2</sub>薄膜の高圧下における金属絶縁体転移の起源、マンガン酸化物人工超格子における電荷秩序出現に伴うラウエフリンジの変化、などを行った。詳細については当日報告を行う。