

# 1次元系ハロゲン架橋有機錯体における 電荷密度波-モットハバード相転移のSTM観察

細見友香<sup>1</sup>、吉田昭二<sup>1</sup>、高石慎也<sup>2</sup>、山下正廣<sup>2</sup>、吉田健文<sup>2</sup>、武内修<sup>1</sup>、重川秀実<sup>1</sup>

(1. 筑波大学数理物質科学研究科、2. 東北大学応用化学専攻)

<http://dora.bk.tsukuba.ac.jp>

1次元系ハロゲン架橋有機錯体は電子-格子相互作用とオンサイトクーロン反発が競合することからパイエルス-ハバードモデルの典型的系として注目されている。これまでに温度変化や光照射によって引き起こされる電荷密度波(CDW)相-モットハバード (MH)相間の相転移が、X線回折やXPS、赤外吸収分光法などによって観測されている。しかし、これらの実験結果は試料の状態の平均的かつ間接的な評価に過ぎなかった。そこで、本実験では相転移のより詳細なダイナミクスの観察を目的として、低温STMを用いた温度変化測定によって1次元系ハロゲン架橋有機錯体の相転移観察を行った。

Fig.1 に本研究で用いた1次元系ハロゲン架橋有機錯体である  $[\text{Pd}(\text{chxn})_2\text{Br}]\text{Br}_2$  の構造を示す。b軸方向に沿ったPd-Brの繰り返し構造が1次元的に連なり、a,c軸方向にはこの直鎖が並列に配列し分子結晶を形成する。Fig.2 にSTMで観察した温度変化の様子を示す。Fig.2(a) は113Kでの試料表面のbc面である。STM像ではPd原子位置が突出し明るく観測されるが、その高さはPd原子価数に依存して変化する。像の右半分はb軸に沿ってPd原子の高さに高低差があることから、 $\text{Pd}^{4+}$ と $\text{Pd}^{2+}$ が交互に配列したCDW相( $\text{Pd}^{4+}-\text{Pd}^{2+} 2\times 1$ )ドメインが形成されていることがわかる。また、像の左半分はPd原子の高さが等しいことからMH相( $\text{Pd}^{3+}-\text{Pd}^{3+} 1\times 1$ )ドメイン形成が確認できる。一方106KではFig.2(b)に観測されるようにMH相が全体的に支配的であり、CDW相は欠陥近傍でのみ観測された。さらに、CDW相とMH相の相転移は、温度にヒステリシスをもち、1次の相転移であることが分かった。より詳細については本公演にて発表する。

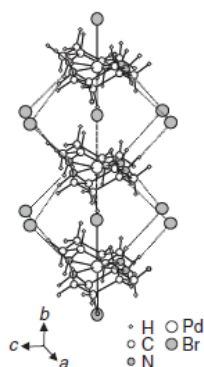


Fig.1  $[\text{Pd}(\text{chxn})_2\text{Br}]\text{Br}_2$  の構造モデル

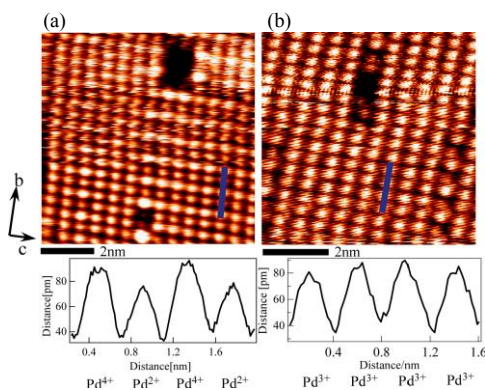


図2 STM像 (a)113K (b) 106K