

放射光 X 線回折による分子性結晶の精密解析の研究

鬼頭 俊介 藤井 達也 澤 博 中村 敏和^A

名大院工 分子研^A

擬 1 次元有機導体(TMTCF)₂X (C=S,Se; X=PF₆,AsF₆,SbF₆) は温度や圧力の変化により超伝導を含む多彩な秩序状態を形成することが知られている[1]。我々は一連の系の中でも構造的な研究が様々な角度から最も多く行われてきた(TMTTF)₂PF₆に注目した。この系は降温と共に、金属状態から 250K で Mott 絶縁体へと転移し、更に 65K で電荷秩序転移、18 K でスピンパイエルズ転移を起こす。この電荷秩序転移は、誘電率測定[2]、NMR 測定[3]により確認されているものの、その小さな電荷移動量の空間的な決定は困難であった。我々は(TMTTF)₂PF₆の電荷秩序状態を直接観測することを目指し、放射光施設 SPring-8 の BL02B1 で単結晶 X 線回折により、超精密解析を行ってきた。しかしながら、電荷密度解析と構造データの傾向の整合が取れず、完全な解とは判断できなかった。本発表では、価電子の電子分布を含めた非球状原子散乱因子を用いた多極子展開法による解析の結果について報告する。

[1] D. Jerome, Science, **252** (1991) 1509-1514.

[2] F. Nad *et al.*, PRB, **62.3** (2000) 1753.

[3] T. Nakamura *et al.*, JPSJ, **76.6** (2007) 064715.