

## 第四章 實驗樣品特性

### 4-1 九層 (9R) 的 BaRuO<sub>3</sub> 單晶

此單晶樣品是經由助熔劑法 (flux-melting method) 長成，肯達基大學物理系曹剛教授提供，樣品大小  $2.9 \times 1.5 \times 0.5 \text{ mm}^3$ 。單位晶胞 (unit cell) 為六角晶系 (Hexagonal,  $a = b \neq c$ ,  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 120^\circ$ ) 結構，如圖 4.1.1 所示<sup>[13]</sup>。由 X-ray 繞射得知其晶格常數為  $a = b = 5.747 \text{ \AA}$  及  $c = 21.60199 \text{ \AA}$ <sup>[29]</sup>。BaRuO<sub>3</sub> 不呈現鈣鈦礦結構，其中每三個 RuO<sub>6</sub> 八面體以共享面 (sharing faces) 在  $c$  軸方向成串相連，且在  $a$ - $b$  平面再以共享角 (氧原子) 相接，形成菱形最密堆積。除了 Ru-O-Ru 鍵結之外，還有穿過面共享面體的 Ru-Ru 鍵結更為重要，因為這樣的準一維金屬鍵結可能導致電荷密度波的不穩定性，或是電子結構在費米面  $k$  空間上產生虛能隙 (pseudogap)。

由電阻率對溫度的關係圖可知在  $T_0$  大約 110 K 以上呈現金屬態，以下則顯現類似絕緣態，如圖 4.1.2 所示。金屬態的變溫全頻反射光譜圖顯示，在 300 K 的紅外光區有較好的金屬性，且隨著溫度的降低，大約  $800 \text{ cm}^{-1}$  以下反射率變低，這樣的現象是不正常的，因為大部分的金屬態隨著電阻率的降低，反射率會變大，如圖 4.1.3 所示。光學電導率隨著溫度降低，權重在  $500 \text{ cm}^{-1}$  以下變低，大約  $800 \text{ cm}^{-1}$  以上則變大，形成一個虛能隙 ( $\omega_{c,9R} = 0.1 \text{ eV}$ ) 的現象，如圖 4.1.4

所示。將權重積分至 1.2 eV 為一定值，可見在虛能隙附近失去的權重已經轉移至  $800\text{ cm}^{-1}$  以上了<sup>[30]</sup>。

9R BaRuO<sub>3</sub> 每原始晶胞有三組分子單位，空間群為  $R\bar{3}m$  ( $D_{3d}$ ) 對稱，在位置對稱表 (site symmetry table) 編號為 166，群論計算結果共有 9 個拉曼活性振動模 ( $4A_{1g} + 5E_g$ )，16 個紅外活性振動模 ( $7A_{2u} + 9E_u$ ) 和 3 個非光學激發振動模 ( $2A_{1u} + A_{2g}$ )。其中拉曼振動模中包含 Ba 原子的  $A_{1g}$  和  $E_g$ ，Ru 原子的  $A_{1g}$  和  $E_g$  以及 O 原子的  $2A_{1g}$  和  $3E_g$ 。此外，不同位子的 O 和 Ru 原子也會有不同的振動模，O (2) 和 Ru (2) 應該只有紅外活性振動模 ( $2A_{2u} + 3E_u$ ) 和 ( $A_{2u} + E_u$ )，O (1) 和 Ru (1) 同時都有拉曼和紅外活性振動模。Y. S. Lee 等人 (圖 4.1.5) 可觀察到在溫度 300 K 偏極化拉曼散射光譜中有八個聲子，其中的  $E_g$  (Ba)、 $E_g$  (Ru) 和  $E_g$  (O) 在有無偏極化的情況下都可觀察到。因為  $E_g$  和  $A_{1g}$  分別代表在  $a$ - $b$  平面和  $c$  軸方向上的振動，在偏極化平行  $a$ - $b$  平面的變溫拉曼光譜中只可觀察到  $A_{1g}$  (O) 和  $A_{1g}$  (Ru)。隨著溫度降低， $A_{1g}$  (O) 和  $A_{1g}$  (Ru) 振動頻率有大約  $20\text{ cm}^{-1}$  的增加，他們推測在  $c$  軸方向上的準一維 Ru-Ru 金屬鍵變的更加緊密，因而產生電荷密度波。而  $E_g$  (O) 有軟化現象， $E_g$  (Ru) 則沒有太大的變化，所以可見層面上的 O 原子鍵結變的不緊密，如圖 4.1.6 所示<sup>[13]</sup>。

## 4-2 BaIrO<sub>3</sub> 單晶

此樣品由肯達基大學物理系曹剛教授所提供，樣品大小  $2.0 \times 2.0 \times 2.0 \text{ mm}^3$ 。單位晶胞 (unit cell) 為單斜晶系 (Monoclinic,  $a \neq b \neq c$ ,  $\alpha = \gamma = 90^\circ$ ,  $\beta = 103.274^\circ$ ) 結構。由 X-ray 繞射得知其晶格常數為  $a = 10.005 \text{ \AA}$ ,  $b = 5.751 \text{ \AA}$  及  $c = 15.174 \text{ \AA}$  [31]。BaIrO<sub>3</sub> 同樣沒有鈣鈦礦結構，每三個 IrO<sub>6</sub> 八面體以共享面 (sharing faces) 在  $c$  軸方向成串相連形成 Ir<sub>3</sub>O<sub>12</sub> 三聚體，且其中外面的兩個 IrO<sub>6</sub> 在  $a$ - $b$  平面再以共享角 (氧原子) 相接，形成二維的結構，如圖 4.2.1 所示。因為真實的結構為單斜晶系，使得  $c$  軸輕微的傾斜造成 IrO<sub>6</sub> 八面體的扭曲，形成兩個「Z」字型鏈。除了 Ir-O-Ir 鍵結之外，還有穿過面共享的 Ir-Ir 鍵結，其中 Ir 原子有較延伸的  $5d$  電子軌域，比 Ru 原子更具金屬性，導致在絕緣態時有更強電荷密度波的不穩定性，因此電子結構的改變在費米面  $k$  空間上產生  $0.12 \text{ eV}$  的虛能隙 (pseudogap) [15]。

平行  $c$  軸方向外加  $50 \text{ Oe}$  的磁場，隨著溫度的降低，在溫度約為  $175 \text{ K}$  時，BaIrO<sub>3</sub> 產生鐵磁的有序相變，如圖 4.2.2 所示。此外，沿著  $c$  軸方向測量電阻率，在溫度降至約為  $175 \text{ K}$  時產生電荷密度波和微弱的晶格扭曲，使得費米面裂開，電阻率提升，且約為  $80 \text{ K}$  以下時，因為費米面的部份裂開，價電電子可以向上躍遷跨過部分能隙，電導率顯現金屬性，再降到約為  $26 \text{ K}$  時能隙完全打開，造成莫特金

屬 - 絕緣相變 ( Mott-like transition )，可知有三個相變溫度  $T_M = T_{c3} = 175 \text{ K}$ ， $T_{c2} = 80 \text{ K}$ ， $T_{c1} = 26 \text{ K}$ ，如圖 4.2.3 所示。G. Cao 等人測量光學電導率可得知  $\sigma_c(0)/\sigma_{ab}(0) \approx 8$ ，結果與電阻率的測量是一致的。當溫度大約 180 K 下時，在  $c$  軸與  $a$ - $b$  平面分別形成  $1055 \text{ cm}^{-1}$  與  $1200 \text{ cm}^{-1}$  的能隙，如圖 4.2.4 所示<sup>[15]</sup>。

$\text{BaIrO}_3$  的空間群 ( space group ) 為  $C2/m$  ( $C_{2h}^3$ ) 對稱，在位置對稱表 ( site symmetry table ) 編號為 12，可知在  $\text{BaIrO}_3$  內原子可能的子群對稱模式包括： $4C_{2h}(1)$ 、 $2C_i(2)$ 、 $2C_2(2)$ 、 $C_s(2)$  及  $C_1(4)$ 。並由表 4.2.1<sup>[32]</sup> 得知各原子的位置，推得各原子真正的對稱模式： $\text{Ir1}$ 、 $\text{Ir3}$ 、 $\text{Ba1}$ 、 $\text{Ba2}$ 、 $\text{Ba3}$ 、 $\text{O1}$ 、 $\text{O3}$ 、 $\text{O5}$  的  $i$  對應  $C_s$ ， $\text{Ir2}$  的  $a$  對應  $C_{2h}$ ， $\text{O2}$ 、 $\text{O4}$  的  $j$  對應  $C_1$ 。再由表 4.2.2<sup>[32]</sup> 可查得  $C_s$  主群的  $T_x$ 、 $T_y$ 、 $T_z$  方向振動模式為  $A'$  和  $A''$ ， $C_{2h}$  主群的  $T_x$ 、 $T_y$ 、 $T_z$  方向振動模式為  $A_u$  和  $B_u$ ， $C_1$  主群的  $T_x$ 、 $T_y$ 、 $T_z$  方向振動模式為  $A$ 。最後對應表 4.2.3 得到各原子的振動模式

$$\Gamma_{\text{Ir}(1)} + \Gamma_{\text{Ir}(3)} + \Gamma_{\text{Ba}(1)} + \Gamma_{\text{Ba}(2)} + \Gamma_{\text{Ba}(3)} + \Gamma_{\text{O}(1)} + \Gamma_{\text{O}(3)} + \Gamma_{\text{O}(5)} = (A_g + A_u + B_g + B_u) \times 8$$

$$\Gamma_{\text{Ir}(2)} = (A_u + B_u) ,$$

$$\Gamma_{\text{O}(2)} + \Gamma_{\text{O}(4)} = (A_g + A_u + B_g + B_u) \times 2$$

再考慮原子間同時沿三軸方向振動 ( $T_x$ 、 $T_y$ 、 $T_z$ ，如表 4.3.3 所示)

$$\text{的情形 } \Gamma_{\text{acoustic}} = A_u + B_u ,$$

予以扣除便可得到

$\Gamma_{\text{all}} - \Gamma_{\text{acoustic}} = 10A_g + 11A_u + 10B_g + 11B_u$  共有 40 個振動模，其中包含

20 個拉曼活性振動模  $10A_g + 10B_g$ ，

22 個紅外活性振動模  $11A_u + 11B_u$  [32]。

### 4-3 $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ 單晶

此樣品由肯達基大學物理系曹剛教授所提供，樣品大小  $3.5 \times 2.5 \times 1.0 \text{ mm}^3$ 。單位晶胞 (unit cell) 為四角晶系 (Tetragonal,  $a = b \neq c$ ,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ) 結構。由 X-ray 繞射得知其晶格常數為  $a = b = 5.4979 \text{ \AA}$  及  $c = 25.7980 \text{ \AA}$ 。 $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  不呈現鈣鈦礦結構，在  $a$ - $b$  平面上每三個  $\text{IrO}_6$  八面體以角共享 (sharing corner)，形成二維的結構，且在  $c$  軸方向層層交錯相疊，如圖 4.3.1 所示 [33]。在  $5d$  的電子軌域系統中，結構的改變對於電性有很大的影響，其中 Ir-O-Ir 鍵結的角度由  $180^\circ$  嚴重的扭曲成  $157^\circ$ ，造成  $t_{2g}$  能帶變窄。隨著降溫過程，由磁化曲線發現在大約 240 K， $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  顯現鐵磁的有序相變，如圖 4.3.2 所示。電阻率的曲線中大約 200 K 時有金屬-絕緣的相變，同時可知在 295 K 和 2 K 時的  $\rho_c/\rho_a$  值分別為 3 和 5.6，很明顯有電子結構上的異向性，而且  $\rho_a(T)$  不明顯的相變可能是由無序的緩慢變化造成的。20 K 以下電阻率的突然降低，因為有更多的非局域化電子，如圖 4.3.3 所示 [16]。

$\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  的空間群 (space group) 為  $I4_1/acd$  ( $D_{4h}^{20}$ ) 對稱，在位置對稱表 (site symmetry table) 編號為 142，可知在  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  內原子可能的子群對稱模式包括： $S_4(4)$ 、 $D_2(4)$ 、 $C_i(8)$ 、 $3C_2(8)$  及  $C_1(16)$ 。並由表 4.3.1<sup>[32]</sup> 得知各原子的位置，推得各原子真正的對稱模式： $\text{Ir1}$  和  $\text{Ir2}$  的  $a$  對應  $S_4$ ， $\text{Sr1}$ 、 $\text{Sr2}$  和  $\text{O1}$  的  $d$  都對應  $C_2$  及  $\text{O2}$  的  $f$  對應  $C_2$ 。再由表 4.3.2<sup>[32]</sup> 可查得  $S_4$  主群的  $T_x$ 、 $T_y$ 、 $T_z$  方向振動模式為  $B$  和  $E$ ， $C_2$  主群的  $T_x$ 、 $T_y$ 、 $T_z$  方向振動模式為  $A$  和  $B$ 。最後，對應表 4.3.3<sup>[32]</sup> 主群與子群的關係得到各原子的振動模式

$$\Gamma_{\text{Ir}(1)} + \Gamma_{\text{Ir}(2)} = (A_{1u} + A_{2u} + B_{1g} + B_{2g} + E_g + 2E_u) \times 2,$$

$$\Gamma_{\text{Sr}(1)} + \Gamma_{\text{Sr}(2)} + \Gamma_{\text{O}(1)} + \Gamma_{\text{O}(2)} = (A_{1g} + A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + A_{1u} + A_{2u} + B_{1u} + B_{2u} + 2E_g + 2E_u) \times 4$$

，再考慮原子間同時延三軸方向振動 ( $T_x$ 、 $T_y$ 、 $T_z$ ，如表 4.3.3 所示)

$$\text{的情形 } \Gamma_{\text{acoustic}} = A_{2u} + E_u,$$

予以扣除便可得到

$$\Gamma_{\text{all}} - \Gamma_{\text{acoustic}} = 4A_{1g} + 6A_{1u} + 4A_{2g} + 5A_{2u} + 6B_{1g} + 4B_{1u} + 6B_{2g} + 4B_{2u} + 10E_g + 11E_u$$

共有 60 個振動模，其中包含

$$30 \text{ 個拉曼活性振動模 } 4A_{1g} + 10E_g + 6B_{1g} + 6B_{2g} + 4A_{2g},$$

$$16 \text{ 個紅外活性振動模 } 5A_{2u} + 11E_u,$$

$$\text{及 } 14 \text{ 個非光學激發振動模 } 6A_{1u} + 4B_{1u} + 4B_{2u}^{[32]}。$$

表 4.2.1 BaIrO<sub>3</sub> 結構之原子對應位置圖，取材於文獻<sup>[32]</sup>。

Atom	Site	x	y	z	$B_{iso}^b$
Ir1	4i	0.08511(8)	0	0.17641(5)	0.506(21)
Ir2	2a	0	0	0	0.51(3)
Ir3	4i	0.46755(8)	0	0.32276(5)	0.504(21)
Ir4	2d	0.5	0	0.5	0.49(3)
Ba1	4i	0.77795(14)	0	0.24898(10)	0.85(4)
Ba2	4i	0.36885(15)	0	0.07343(10)	0.86(4)
Ba3	4i	0.14970(14)	0	0.42281(10)	0.86(4)
O1	4i	0.2848(22)	0	0.2295(14)	1.2(3)
O2	8j	0.0527(14)	0.246(3)	0.2619(9)	1.04(16)
O3	4i	0.8919(16)	0	0.0990(10)	0.47(17)
O4	8j	0.1151(12)	0.2350(23)	0.0824(8)	0.73(13)
O5	8j	0.4040(12)	0.2314(22)	0.4047(8)	0.70(13)
O6	4i	0.6407(18)	0	0.4234(12)	0.73(19)

表 4.2.2 子群特性表。取材於文獻<sup>[32]</sup>。

$C_s$	E	$\sigma_h$		
$A'$	1	1	$T_x, T_y, R_z$	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$
$A''$	1	-1	$T_z, R_x, R_y$	$\alpha_{xz}, \alpha_{yz}$

$C_i$	E	i		
$A_g$	1	1	$R_x, R_y, R_z$	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}, \alpha_{xz}, \alpha_{yz}$
$A_u$	1	-1	$T_x, T_y, T_z$	

$C_2$	E	$C_2$		
A	1	1	$T_z, R_x$	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$
B	1	-1	$T_x, T_y, R_x, R_y$	$\alpha_{xz}, \alpha_{yz}$

$C_{2h}$	E	$C_2$	i	$\sigma_h$	
$A_g$	1	1	1	1	$R_z$
$B_g$	1	-1	1	-1	$R_x, R_y$
$A_u$	1	1	-1	-1	$T_z$
$B_u$	1	-1	-1	1	$T_x, T_y$

表 4.2.3  $C_{2h}$  主群與子群之相關表。取材於文獻<sup>[32]</sup>。

$C_{2h}$	$C_2$	$C_s$	$C_i$
$A_g$	$A$	$A'$	$A_g$
$B_g$	$B$	$A''$	$A_g$
$A_u$	$A$	$A''$	$A_u$
$B_u$	$B$	$A'$	$A_u$

表 4.3.1  $Sr_2IrO_4$  結構之原子對應位置圖，取材於文獻<sup>[16]</sup>。

Atom	position	Oxid.	x	y	z
Ir1	(8a)	4	0	0.25	0.375
Sr1	(16d)	2	0	0.25	0.55053(6)
O1	(16d)	-2	0	0.25	0.45473(7)
O2	(16f)	-2	0.1991(3)	0.4491(3)	0.125



表 4.3.2 各子群對應的振動模。取材於文獻<sup>[32]</sup>。

$D_{4h}$	$E$	$2C_4$	$C_2$	$2C_2'$	$2C_2''$	$i$	$2S_4$	$\sigma_h$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
$A_{2g}$	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1		$\alpha_{xx} - \alpha_{yy}$
$B_{1g}$	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	$(R_x, R_y)$	$\alpha_{xy}$
$B_{2g}$	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1		$(\alpha_{xz}, \alpha_{yz})$
$E_g$	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0	$T_z$	
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	$T_z$	
$A_{2u}$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1		
$B_{1u}$	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	$(T_x, T_y)$	
$B_{2u}$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
$E_u$	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0		

$D_{2d} \equiv V_d$	$E$	$2S_4$	$C_2$	$2C_2'$	$2\sigma_d$		
$A_1$	1	1	1	1	1	$R_z$	$\alpha_{xx} + \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
$A_2$	1	1	1	-1	-1		$\alpha_{xx} - \alpha_{yy}$
$B_1$	1	-1	1	1	-1	$T_z$	$\alpha_{xy}$
$B_2$	1	-1	1	-1	1		$\alpha_{xz}, \alpha_{yz}$
$E$	2	0	-2	0	0	$(T_x, T_y); (R_x, R_y)$	

$C_s$	$E$	$\sigma_h$		
$A'$	1	1	$T_x, T_y; R_z$	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$
$A''$	1	-1	$T_z; R_x, R_y$	$\alpha_{xz}, \alpha_{yz}$

$C_i$	$E$	$i$		
$A_g$	1	1	$R_x, R_y, R_z$	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}, \alpha_{xz}, \alpha_{yz}$
$A_u$	1	-1	$T_x, T_y, T_z$	

$C_2$	$E$	$C_2$		
$A$	1	1	$T_z; R_z$	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$
$B$	1	-1	$T_x, T_y; R_x, R_y$	$\alpha_{xz}, \alpha_{yz}$

$C_{2h}$	$E$	$C_2$	$i$	$\sigma_h$		
$A_g$	1	1	1	1	$R_z$	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}, \alpha_{xy}$
$B_g$	1	-1	1	-1	$R_x, R_y$	$\alpha_{xz}, \alpha_{yz}$
$A_u$	1	1	-1	-1	$T_z$	
$B_u$	1	-1	-1	1	$T_x, T_y$	

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$		
$A_1$	1	1	1	1	$T_z$	$\alpha_{xx}, \alpha_{yy}, \alpha_{zz}$
$A_2$	1	1	-1	-1	$R_z$	$\alpha_{xy}$
$B_1$	1	-1	1	-1	$T_x; R_y$	$\alpha_{xz}$
$B_2$	1	-1	-1	1	$T_y; R_x$	$\alpha_{yz}$

表 4.3.3  $D_{4h}$  主群與子群之相關表。取材於文獻<sup>[32]</sup>。

$D_{4h}$	$D_4$	$C_2'$ $D_{2d}$	$C_2''$ $D_{2d}$	$C_{4v}$	$C_{4h}$	$C_2'$ $D_{2h}$	$C_2''$ $D_{2h}$	$C_4$	$S_4$	$C_2'$ $D_2$	$C_2''$ $D_2$	$\frac{C_2, \sigma_v}{C_{2v}}$	$\frac{C_2, \sigma_d}{C_{2v}}$
	$A_{1g}$	$A_1$	$A_1$	$A_1$	$A_1$	$A_g$	$A_g$	$A_g$	$A$	$A$	$A$	$A$	$A_1$
$A_{2g}$	$A_2$	$A_2$	$A_2$	$A_2$	$A_g$	$B_{1g}$	$B_{1g}$	$A$	$A$	$B_1$	$B_1$	$A_2$	$A_2$
$B_{1g}$	$B_1$	$B_1$	$B_2$	$B_1$	$B_g$	$A_g$	$B_{1g}$	$B$	$B$	$A$	$B_1$	$A_1$	$A_2$
$B_{2g}$	$B_2$	$B_2$	$B_1$	$B_2$	$B_g$	$B_{1g}$	$A_g$	$B$	$B$	$B_1$	$A$	$A_2$	$A_1$
$E_g$	$E$	$E$	$E$	$E$	$E_g$	$B_{2g} + B_{3g}$	$B_{2g} + B_{3g}$	$E$	$E$	$B_2 + B_3$	$B_2 + B_3$	$B_1 + B_2$	$B_1 + B_2$
$A_{1u}$	$A_1$	$B_1$	$B_1$	$A_2$	$A_u$	$A_u$	$A_u$	$A$	$B$	$A$	$A$	$A_2$	$A_2$
$A_{2u}$	$A_2$	$B_2$	$B_2$	$A_1$	$A_u$	$B_{1u}$	$B_{1u}$	$A$	$B$	$B_1$	$B_1$	$A_1$	$A_1$
$B_{1u}$	$B_1$	$A_1$	$A_2$	$B_2$	$B_u$	$A_u$	$B_{1u}$	$B$	$A$	$A$	$B_1$	$A_2$	$A_1$
$B_{2u}$	$B_2$	$A_2$	$A_1$	$B_1$	$B_u$	$B_{1u}$	$A_u$	$B$	$A$	$B_1$	$A$	$A_1$	$A_2$
$E_u$	$E$	$E$	$E$	$E$	$E_u$	$B_{2u} + B_{3u}$	$B_{2u} + B_{3u}$	$E$	$E$	$B_2 + B_3$	$B_2 + B_3$	$B_1 + B_2$	$B_1 + B_2$

$D_{4h}$	$C_2'$ $C_{2v}$	$C_2''$ $C_{2v}$	$C_2$ $C_{2h}$	$C_2'$ $C_{2h}$	$C_2''$ $C_{2h}$	$C_2$ $C_2$	$C_2'$ $C_2$	$C_2''$ $C_2$	$\sigma_h$ $C_s$	$\sigma_v$ $C_s$	$\sigma_d$ $C_s$	$C_i$
	$A_{1g}$	$A_1$	$A_1$	$A_g$	$A_g$	$A_g$	$A$	$A$	$A$	$A'$	$A'$	$A'$
$A_{2g}$	$B_1$	$B_1$	$A_g$	$B_g$	$B_g$	$A$	$B$	$B$	$A'$	$A''$	$A''$	$A_g$
$B_{1g}$	$A_1$	$B_1$	$A_g$	$A_g$	$B_g$	$A$	$A$	$B$	$A'$	$A'$	$A''$	$A_g$
$B_{2g}$	$B_1$	$A_1$	$A_g$	$B_g$	$A_g$	$A$	$B$	$A$	$A'$	$A''$	$A''$	$A_g$
$E_g$	$A_2 + B_2$	$A_2 + B_2$	$2B_g$	$A_g + B_g$	$A_g + B_g$	$2B$	$A + B$	$A + B$	$2A''$	$A' + A''$	$A' + A''$	$2A_g$
$A_{1u}$	$A_2$	$A_2$	$A_u$	$A_u$	$A_u$	$A$	$A$	$A$	$A''$	$A''$	$A''$	$A_u$
$A_{2u}$	$B_2$	$B_2$	$A_u$	$B_u$	$B_u$	$A$	$B$	$B$	$A''$	$A'$	$A'$	$A_u$
$B_{1u}$	$A_2$	$B_2$	$A_u$	$A_u$	$B_u$	$A$	$A$	$B$	$A''$	$A''$	$A'$	$A_u$
$B_{2u}$	$B_2$	$A_2$	$A_u$	$B_u$	$A_u$	$A$	$B$	$A$	$A''$	$A'$	$A''$	$A_u$
$E_u$	$A_1 + B_1$	$A_1 + B_1$	$2B_u$	$A_u + B_u$	$A_u + B_u$	$2B$	$A + B$	$A + B$	$2A'$	$A' + A''$	$A' + A''$	$2A_u$

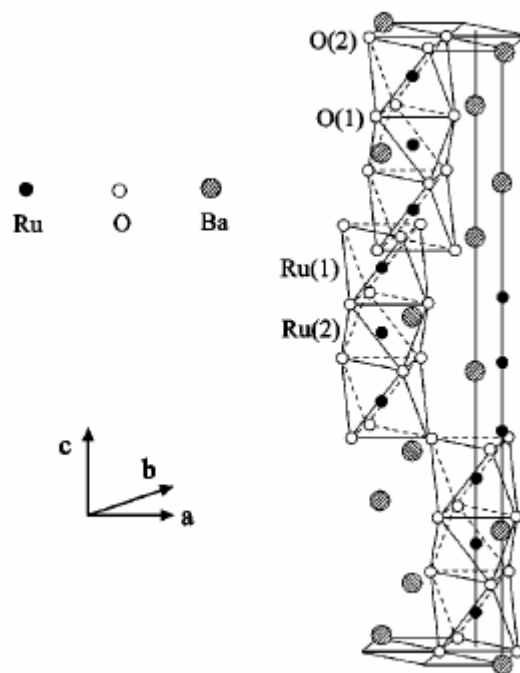


圖 4.1.1 9R BaRuO<sub>3</sub>的晶格結構圖。取材於文獻<sup>[13]</sup>。

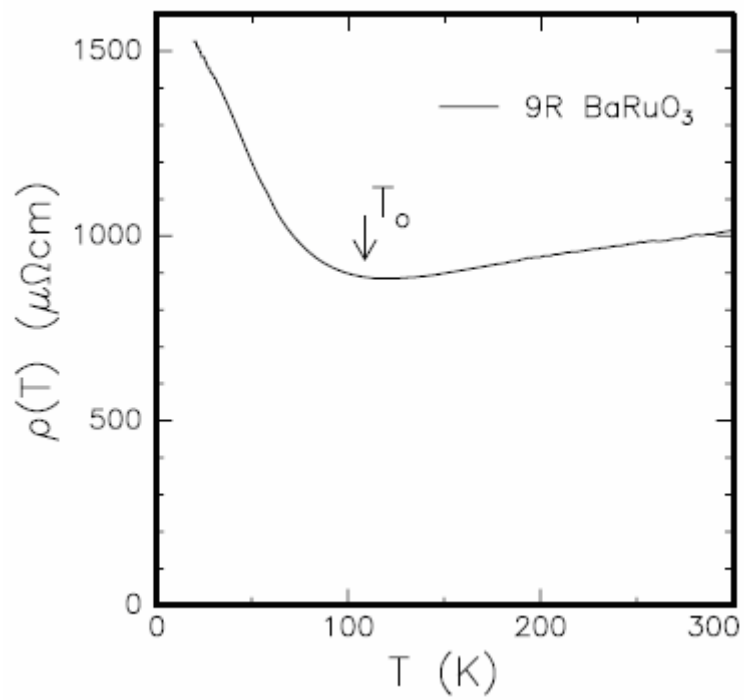


圖 4.1.2 9R BaRuO<sub>3</sub> 的電阻率隨溫度變化關係圖， $T_0$  為金屬態相變成絕緣態的溫度。取材於文獻<sup>[30]</sup>。

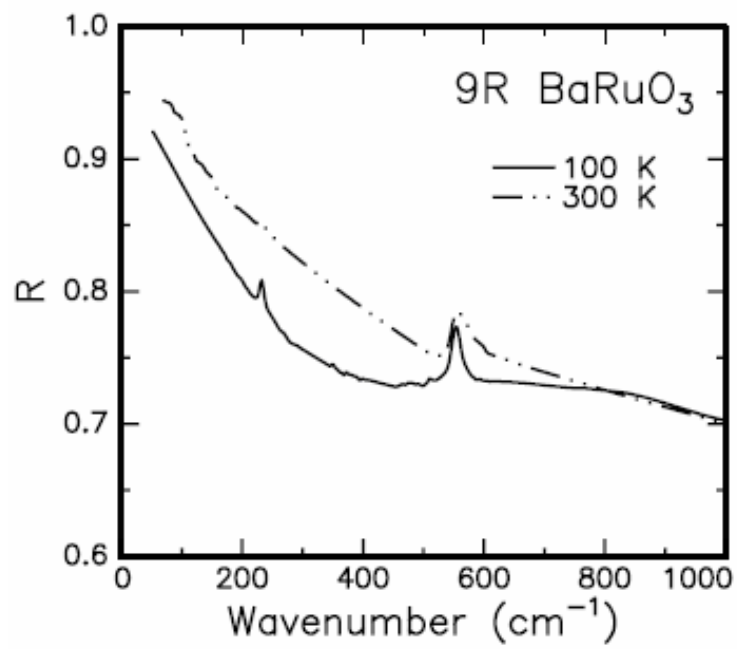


圖 4.1.3 9R BaRuO<sub>3</sub>於 300 K 和 100 K 的反射率圖，此兩溫度下的 BaRuO<sub>3</sub>皆為金屬態。取材於文獻<sup>[30]</sup>。

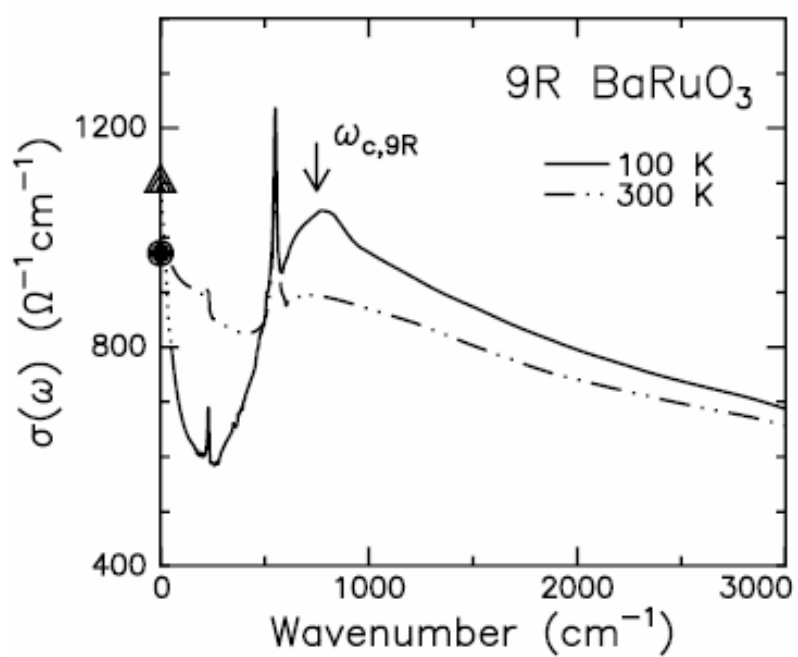


圖 4.1.4 9R BaRuO<sub>3</sub> 於 300 K 和 100 K 的光學電導率圖，三角形和圓形符號分別代表 100 K 和 300 K 的電阻率。取材於文獻<sup>[30]</sup>。

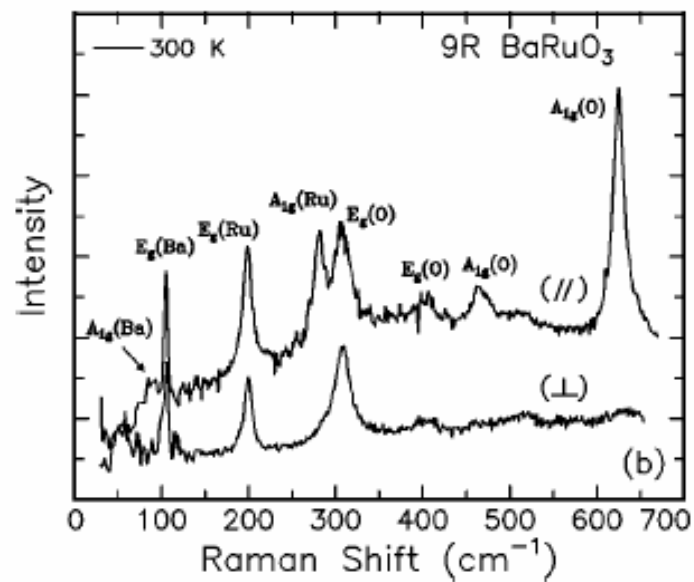


圖 4.1.5 在 300 K 時，入射光電場平行與垂直  $a$ - $b$  平面的 9R  $\text{BaRuO}_3$  之拉曼散射光譜。取材於文獻<sup>[13]</sup>。

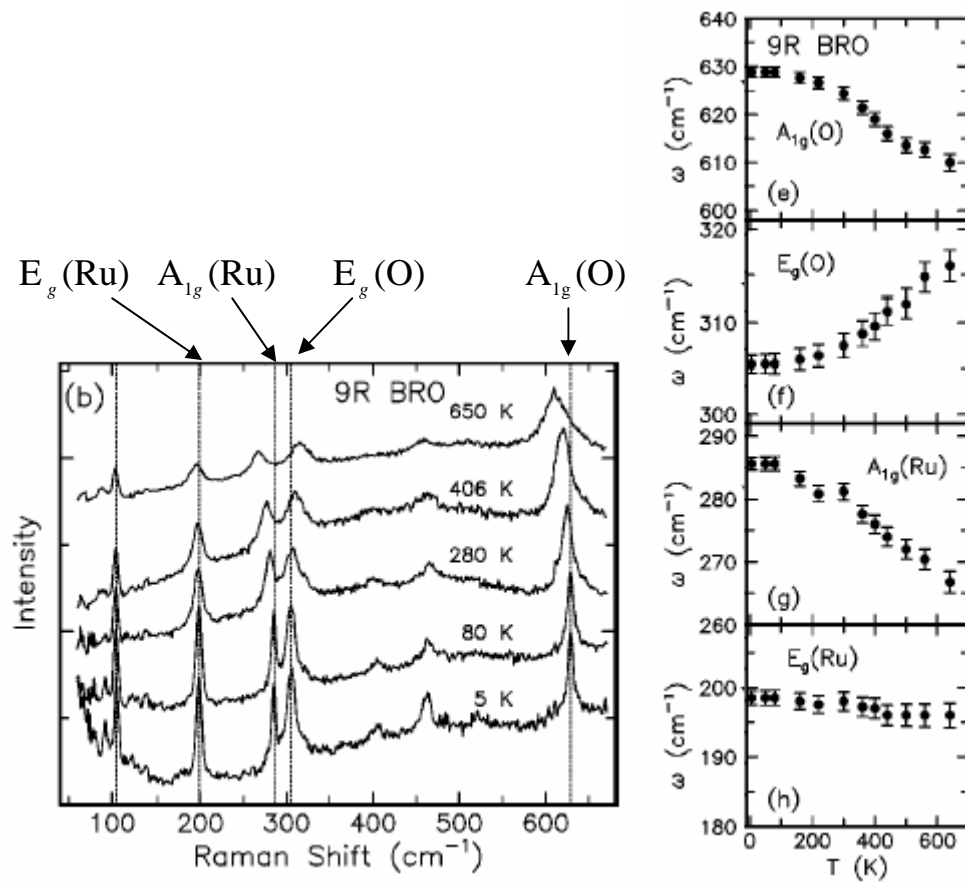


圖 4.1.6 9R BaRuO<sub>3</sub> 的 A<sub>1g</sub>(O)、E<sub>g</sub>(O)、A<sub>1g</sub>(Ru) 和 E<sub>g</sub>(Ru) 拉曼聲子  
 頻率隨溫度變化圖。取材於文獻<sup>[13]</sup>。



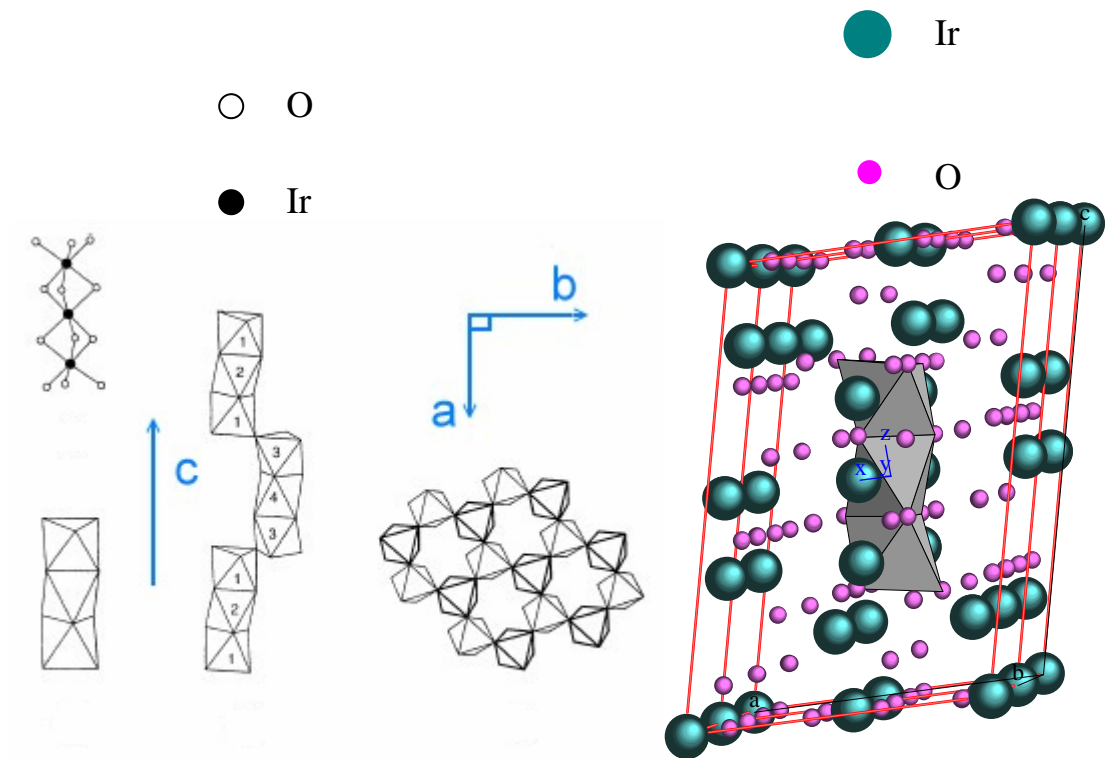


圖 4.2.1  $\text{BaIrO}_3$  的  $\text{IrO}_6$  八面體，面共享所形成的  $\text{Ir}_3\text{O}_{12}$  三聚體，與  $c$  軸和  $a$ - $b$  平面的結構圖。取材於文獻<sup>[31]</sup>。

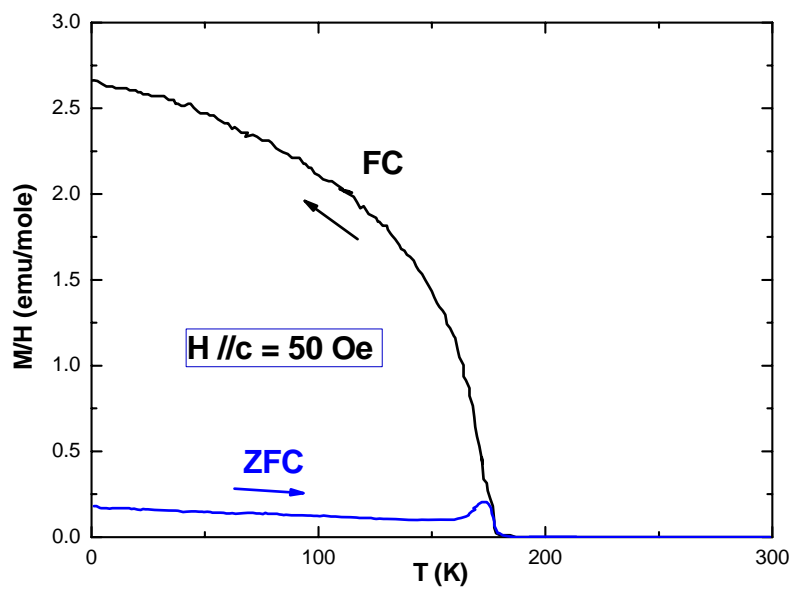


圖 4.2.2 在沿  $c$  軸外加 50 Oe 的磁場下， $\text{BaIrO}_3$  磁化率隨溫度變化的關係圖，其中  $T_M = 175 \text{ K}$ 。取材於文獻<sup>[15]</sup>。

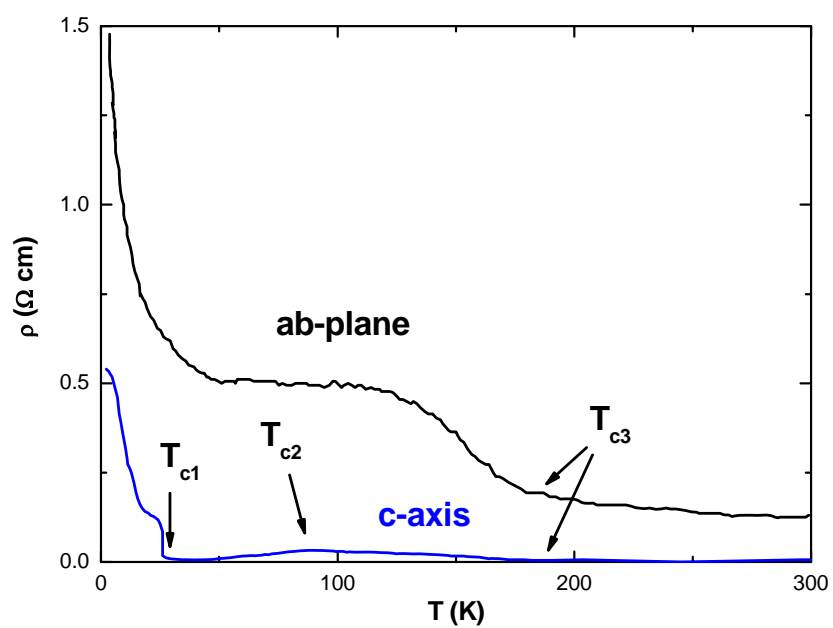


圖 4.2.3 在沿  $c$  軸和  $a-b$  平面測量所得的  $\text{BaIrO}_3$  電阻率隨溫度變化圖，相變溫度分別為  $T_{c3} = 175 \text{ K}$ ， $T_{c2} = 80 \text{ K}$ ， $T_{c1} = 26 \text{ K}$ 。取材於文獻 [15]。

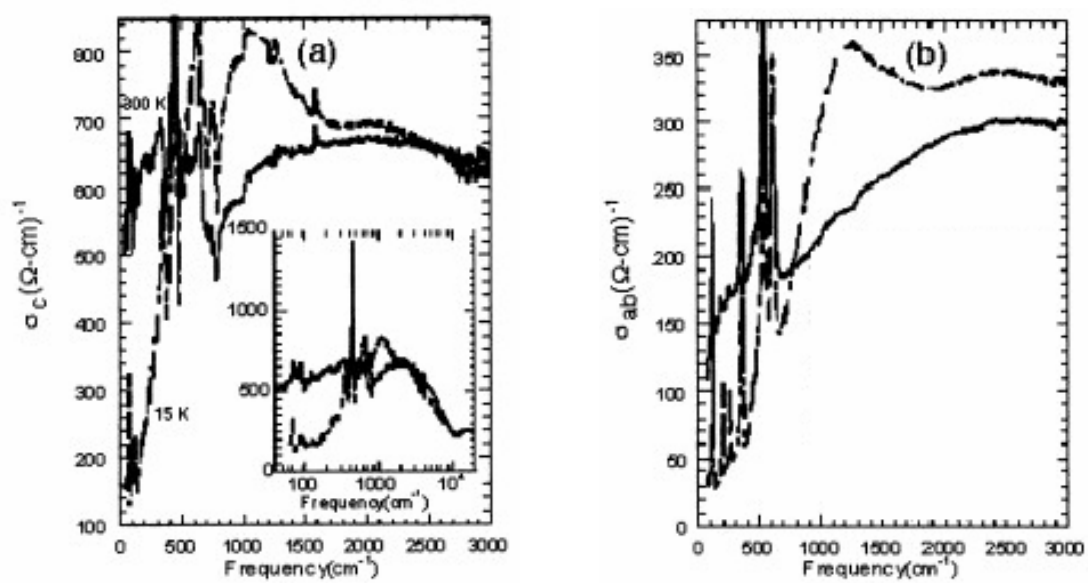


圖 4.2.4 沿  $c$  軸和  $a$ - $b$  平面，測量 300 K 和 15 K 所得的 BaIrO<sub>3</sub> 光學電導率。取材於文獻<sup>[15]</sup>。

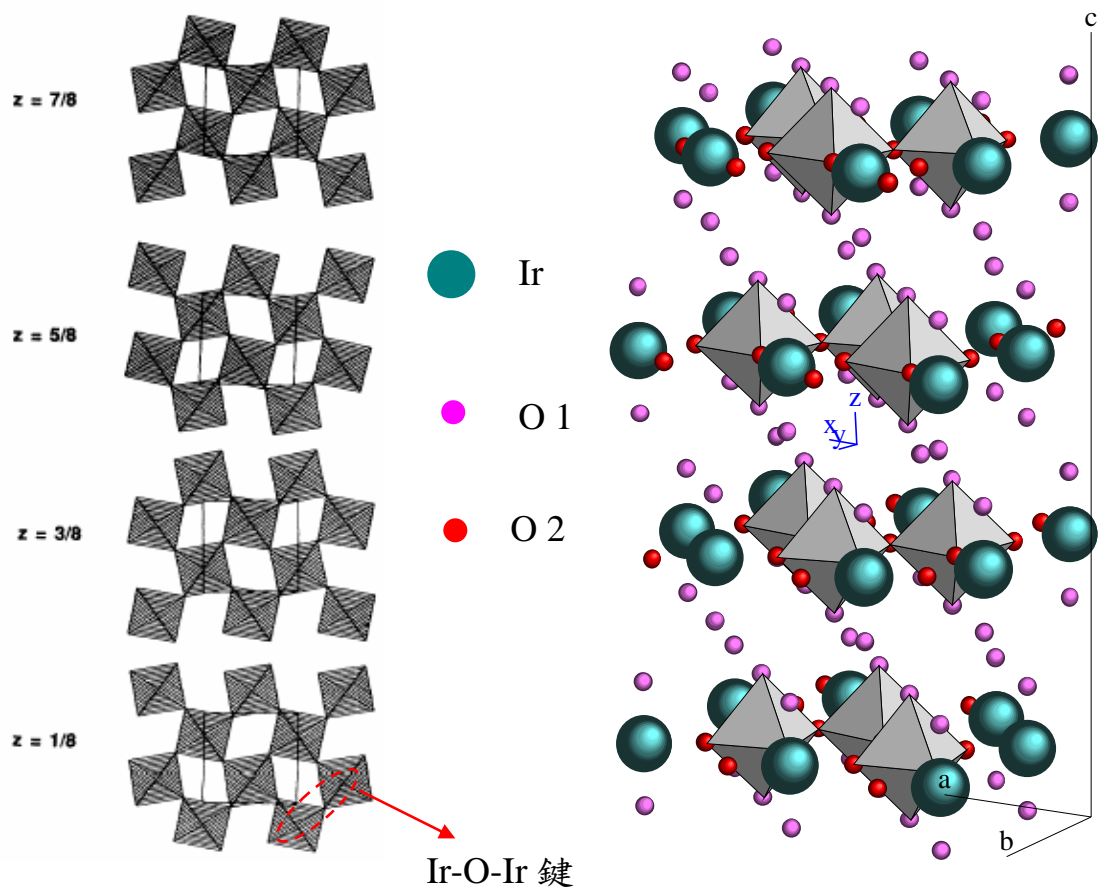


圖 4.3.1  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  的晶相結構圖與  $c$  軸方向各層的示意圖。取材於文獻 [33]。

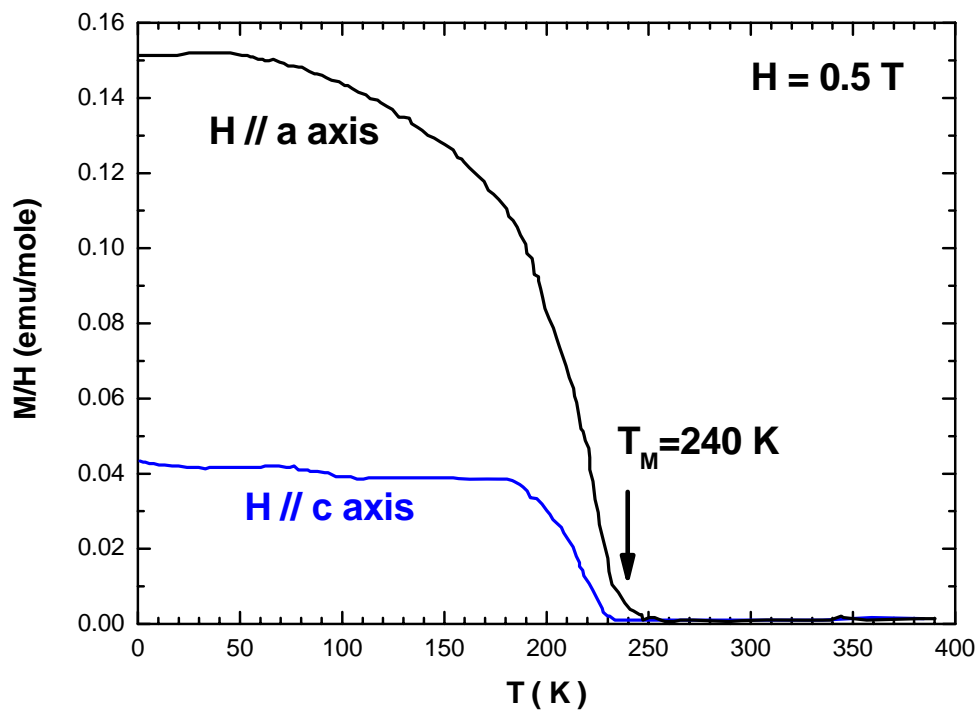


圖 4.3.2 在沿  $c$  軸與  $a$  軸外加 0.5 特士拉的磁場下， $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  磁化率隨溫度變化的關係圖，其中  $T_M = 240$  K。取材於文獻<sup>[16]</sup>。

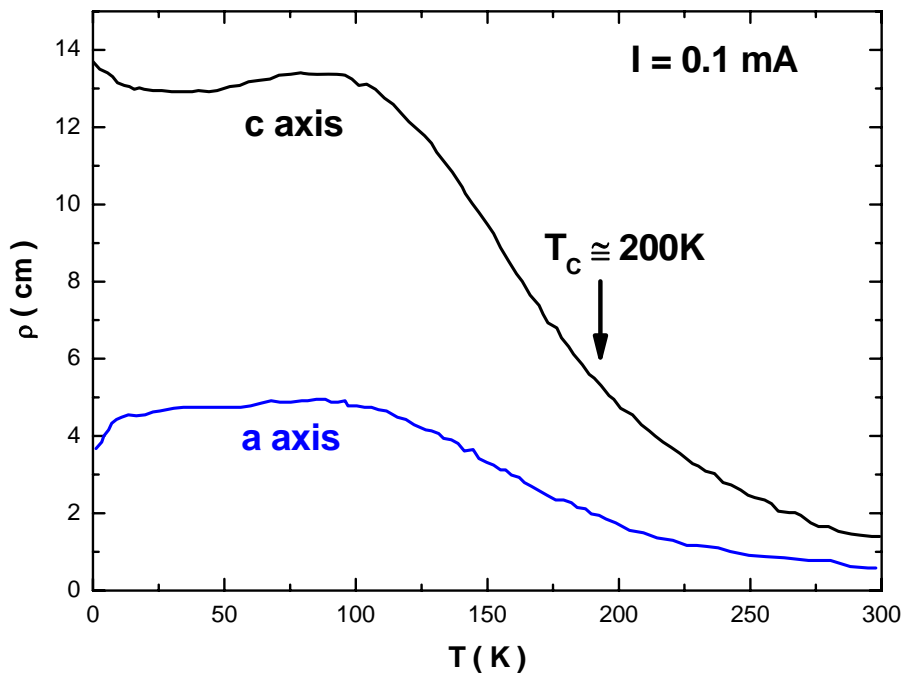


圖 4.3.3 在沿  $c$  軸與  $a$  軸外加 0.1 mA 的電流下， $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  電阻率隨溫度變化的關係圖，其中  $T_c \approx 200$  K。取材於文獻<sup>[16]</sup>。