# 分子性導体の物性化学



# 藥師 久彌(教授)

1968 年東京大学卒 1972 年同大大学院理学系研究科中 退、理学博士 東京大学理学部化学科助手、講師、助教 授、1988 年分子科学研究所教授 この間、1982 年より一 年間 IBM サンホゼ研究所 (現アルマーデン研究所)にお いて客員研究員

TEL: 0564-55-7380 FAX: 0564-54-2254 電子メール: yakushi@ims.ac.jp

専門

須

域

構造分子科学専攻

分子性導体の研究は我が国で生まれた有機半導体の研究に端を発するが、1970年代に飛躍を遂げて以来、有機超伝導をはじめとする大きな成果が得られている魅力あふれる分野である。この研究の面白さは分子の個性を集合体の物性へ如何に反映させるかというところにあり、これまでに積み上げられた分子設計上の指導原理に基づく物質開発や、その指導原理の枠を越える新しい物質の開発を目指す研究が行われている。

物質開発を行うには物質の合成と物性の解明という車の両輪が必要である。我々の研究グループは後

者の物性解明に重きをおきながら、物質合成グループとの共同研究を通して、新しい物質を探査する事を行っている。主な研究手法としては分光学的方法を用いており、顕微分光法を用いる紫外から赤外の偏光反射吸収分光法、遠赤外反射分光法、顕微ラマン分光法を用いている。その他、電気抵抗、熱電能、比熱、ESR、静磁化率の測定も併用して以下のような課題の研究を実施している。

## (1) - d電子系の研究

金属フタロシアニン一次元導体は遷移金属の3dバンドと環状配位子の バンドが近接した2バンド電子系であるために、単一 バンドの分子導体とは異なる新しい物性を示す。我々は高圧をかけることによってNiPc(AsF<sub>6</sub>)<sub>0.5</sub>の3dバンドから バンドへ電荷が移動することまた

この電荷移動が金属・絶縁体転移を誘起することを見出し、この現象を解明するための電子模型を提唱している。 $^{1}$ またNiPc(AsF $_{6}$ ) $_{0.5}$ とほぼ同型の構造を持ちながら異なる電子物性を示すCoPc(AsF $_{6}$ ) $_{0.5}$ の電子構造を解明するために混晶  $Co_xNi_{1-x}Pc(AsF_{6})_{0.5}$  の光物性、電気物性、磁性について系統的な研究を行なっている。

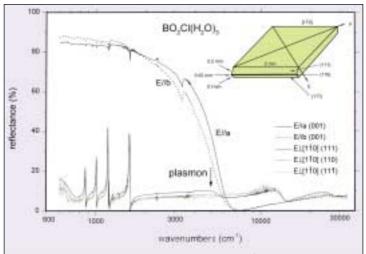
#### (2)分子導体の光物性

といった課題を研究している。

電子物性を理解する上で物質のバンド構造に関する知見は欠かせない。我々のグループは実験に基づいて分子導体の伝導帯の次元性、バンド幅、予想されるフェルミ面の形状等を調べている。また伝導電子の遍歴性と電子相関の関係を遠赤外反射分光法で、電荷整列現象を赤外・ラマン分光法で研究している。多くの共同研究者と協力しながら、金属的な性質を示すDMTSA-BF4とその関連物質の金属性の解明、2)安定な金属をつくるBDT-TTP塩とBEDO-TTF塩のバンド構造、3)型構造をもつBDT-TTPおよびBEDT-TTF塩における電荷整列相転移の機構解明、

### 参考文献

- 1) T. Hiejima and K. Yakushi, "Pressure-induced d-p charge transfer in one-dimensional phthalocyanine conductors, NiPc(AsF<sub>6</sub>)<sub>0.5</sub> and CoPc(AsF<sub>6</sub>)<sub>0.5</sub>," *J. Chem. Phys.* **103**, 3950-3959 (1995).
- 2) J. Ouyang, J. Dong, K. Yakushi, K. Takimiya, and T. Otsubo, "Spectroscopic Study of Isostructural Charge-Transfer Salts: Non-metallic DMTTA-BF<sub>4</sub> and Metallic DMTSA-BF<sub>4</sub>," *J. Phys. Soc. Jpn.* 68, 3708-3716 (1999).
- K. Yakushi, J. Ulanski, H. Yamochi, and G. Saito, "Observation of Plasmons by Normal-incidence Reflectivity in Twodimensional Organic Metals," *Phys. Rev. B* 61, 9891-9894 (2000-I).



二次元分子導体  $BO_2CI(H_2O)_3$  における反射率とプラズモンの観測。二次元伝導面と傾斜した結晶面では通常は光で観測できないはずのプラズモン(矢印)を捕らえることができる。挿入図は結晶の外形と寸法である。