



薬師 久彌 (教授)

1968年東京大学卒 1972年同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

専門領域

構造分子科学専攻

分子導体の研究はわが国で生まれた有機半導体の研究に端を発するが、1970年代に飛躍的に発展して以来、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いかに反映させるかということにあり、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超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。われわれの研究グループは後者の物性解明に重きを置きながら、物質合成グループとの共同研究を通して、新しい物質を探索している。主な研究手法としては、紫外から赤外領域にわたる偏光顕微反射分光法、遠赤外領域の反射分光法、顕微ラマン分光法などの分光学的方法を用いている。特に、顕微ラマン分光法ではサファイア・アンビルを用いて、4.2 K、5万気圧下の低温・高圧下の実験を行っている。この他、電気抵抗、熱電能、比熱、磁化率、ESRなどの測定も併用して以下のような電子の局在性と遍歴性に関する研究を行っている。

①振動分光法による電荷整列現象の研究

分子導体中の分子間の原子間距離は結合距離に比べてはるかに長い（約 3.5 Å）ために、多くの物質で電子は遍歴性と局在性の境界領域に位置し、僅かな配列の変化（温度・圧力）によって相転移を起こして状態を変える。分子導体では伝導電子あるいは正孔の数が分子の数よりも少ないので、局在化に伴って電子密度の濃淡（電荷の不均化）が発生する。

この局在状態は現在多くの物質において発見され、超伝導状態にも隣接していると予想されている。われわれのグループでは電荷の不均化を伴う相転移を示す物質の赤外・ラマンスペクトルを系統的に研究している。不均化に伴い電子スペクトルと振動スペクトルが共に劇的に変化するが、このスペクトルの変化を利用してBEDT-TTF塩を始めとするさまざまな電荷移動塩の低温・高圧下の状態を（*P-T*相図）調べている。

②赤外・遠赤外反射分光法によるバンド構造の研究

物質のバンド構造は電子物性を理解するための基盤となる知見を提供する。我々のグループは広い周波数範囲で反射率を測定し、伝導体の次元性、バンド幅、予想されるフェルミ面の形状等に関する知見を得ている。反射率の解析から、電気伝導度の周波数依存性 $\sigma(\omega)$ が求められるが、遠赤外領域の電気伝導度 $\sigma(\omega)$ はフェルミ準位近傍の状態密度を反映するために、伝導電子の遍歴性あるいは局在性に伴い大きく変化する。この性質を利用して赤外・ラマン分光法とは異なる角度から電荷の遍歴性・局在性の程度を研究している。

参考文献

- 1) K. Yamamoto, K. Yakushi, K. Miyagawa, K. Kanoda and A. Kawamoto, "Charge ordering in θ -(BEDT-TTF) $_2$ RbZn(SCN) $_4$ studied by vibration spectroscopy," *Phys. Rev. B* **65**, 85110(8) (2002).
- 2) R. Wojciechowski, K. Yamamoto, K. Yakushi, M. Inokuchi and A. Kawamoto, "High-pressure Raman study of the charge ordering in α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$," *Phys. Rev. B* **67**, 224105 (11) (2003).
- 3) K. Suzuki, K. Yamamoto and K. Yakushi, "Charge-ordering transition in two crystal modifications of θ -(BEDT-TTF) $_2$ TlZn(SCN) $_4$ studied by vibrational spectroscopy," *Phys. Rev. B* **69**, 085114 (11) (2004).

