

# 電荷移動錯体の中性-イオン性相転移と強誘電性

Neutral-ionic phase transition and ferroelectricity in charge-transfer complexes

<sup>1</sup>(独)産業技術総合研究所 フレキシブルエレクトロニクス研究センター、<sup>2</sup>JST-CREST

堀内 佐智雄

<sup>1</sup>AIST – Flexible Electronics Research Center, <sup>2</sup>JST-CREST Sachio Horiuchi

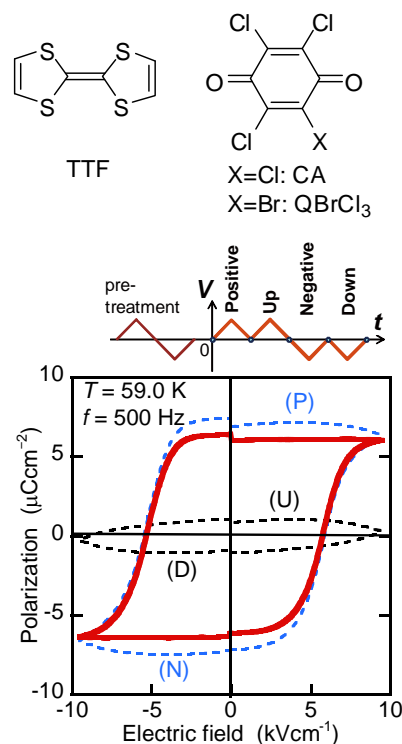
我々は、電子ドナー・アクセプター分子間(電荷移動錯体)での電子の授受や、水素結合を介したプロトン授受による強誘電性について、有機材料における性能向上を図っている。今回取り上げる交互積層型電荷移動錯体は、中性-イオン性相(NI)転移やイオン性分子のスピンプイエルス(SP)転移に伴う強誘電性<sup>1)</sup>として、近年新たな注目を集め始めている。今回は、TTF-*p*-ベンゾキノン類における中性-イオン性相(NI)転移と強誘電性に絞り紹介する。

TTF-CA 及び Br 一置換体の TTF-QBrCl<sub>3</sub> では、それぞれ 81K、71K で中性状態(電荷移動量  $\rho \sim 0.3$ )からイオン性状態( $\rho \sim 0.6$ )へと相転移し、ドナーとアクセプターが相対変位(二量体化)することで極性構造を形成する。TTF-CA について石橋<sup>2)</sup>、Picozziら<sup>3)</sup>による第一原理計算では、巨大な自発分極(8~10 $\mu\text{Ccm}^{-2}$ )の発生が予測されていたが、今回我々は分極履歴測定により、TTF-CA 及び TTF-QBrCl<sub>3</sub> で大きな残留分極(6~7 $\mu\text{Ccm}^{-2}$ )をもつ強誘電性を直接観測し、予測を裏付けることができた(右図)<sup>4)</sup>。分子の変位量から点電荷モデルにより期待されるイオン分極の20倍超の増強が生じており、極めて顕著な電子的効果の存在が示唆される。当日は、新たな TTF-*p*-ベンゾキノン類錯体における強誘電性 NI 転移と圧力誘起相転移についても報告する予定である。

本成果は、文部科学省の科研費(新学術領域研究「分子自由度が拓く新物質科学」A02)、JST(CREST)、住友財団基礎科学研究助成の支援を受けて実施し、熊井、小林、村上(KEK)、十倉、賀川(東大)との共同研究で得られたものである。また理論的解釈については、石橋(産総研)、寺倉(JAIST)(敬称略)との有意義な議論に感謝する。

## 文献

- 1) F. Kagawa, S. Horiuchi, M. Tokunaga, J. Fujioka, Y. Tokura, *Nature Phys.* **6**, 169 (2010).
- 2) S. Ishibashi, K. Terakura, *Physica B* **405**, S338 (2010).
- 3) G. Giovannetti, S. Kumar, A. Stroppa, J. van den Brink, S. Picozzi, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 266401 (2009).
- 4) K. Kobayashi, S. Horiuchi, R. Kumai, F. Kagawa, Y. Murakami, Y. Tokura, unpublished.



【図】 TTF-CA の分子構造と電場一分極履歴特性。