

加藤礼三

理化学研究所 加藤分子物性研究室

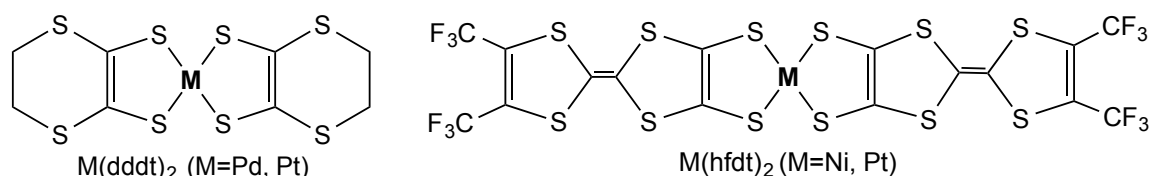
埼玉県和光市広沢 2-1

reizo@riken.jp



単一成分分子性導体の開発

低分子の結晶は、物質階層のほぼ中間に位置づけられ、多彩な電子物性を示す一方で、その電子構造はフロンティア分子軌道間の相互作用によって明快に記述でき理論的解析に適している。また、化学修飾によって多様な分子を合成できるので、新しい電子系の開発に適している。単一成分の分子結晶は通常絶縁体であるが、化学修飾や圧力印加によって HOMO バンドと LUMO バンドとを重ねることができれば、金属伝導さらには超伝導を示す。このこと自体は、バンド理論的には特に不思議ではないが、HOMO と LUMO の対称性、HOMO バンドと LUMO バンドの形状や両者の相互作用等が特異な電子物性をもたらす。例えば、高圧下の $[\text{Pd}(\text{ddd}t)_2]$ 結晶で見られるディラック電子系（ノーダルライン半金属）は、その典型例である [1, 2]。



金属ジチオレン錯体は、HOMO と LUMO のエネルギー差が小さいため、単一成分結晶を加圧することによって、金属あるいは超伝導状態、さらにはエキゾチックな電子状態を実現させることができる。今回は、中心金属の置換効果に注目し、ノーダルライン半金属 $[\text{Pd}(\text{ddd}t)_2]$ および単一成分分子性超伝導体 $[\text{Ni}(\text{hfd}t)_2]$ [3] の Pt 誘導体の物性を検討した。Pt 置換がもたらす特異な圧力誘起構造相転移やスピン軌道相互作用について議論する。

本研究は、崔亨波（理研）、圓谷貴夫（熊本大）、Hamish H-M Yeung（Oxford Univ.）、川相義高（理研）の各氏との共同研究である。

参考文献

- 1) R. Kato, H. B. Cui, T. Tsumuraya, T. Miyazaki, and Y. Suzumura, *J. Am. Chem. Soc.*, **139**(5), 1770-1773 (2017).
- 2) T. Tsumuraya, R. Kato, and Y. Suzumura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**(11), 113701 (2018).
- 3) H. B. Cui, H. Kobayashi, S. Ishibashi, M. Sasa, F. Iwase, R. Kato, and A. Kobayashi, *J. Am. Chem. Soc.*, **136**(21), 7619-7622 (2014).