

加藤礼三

理化学研究所 加藤分子物性研究室

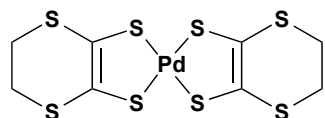
埼玉県和光市広沢 2-1

reizo@riken.jp

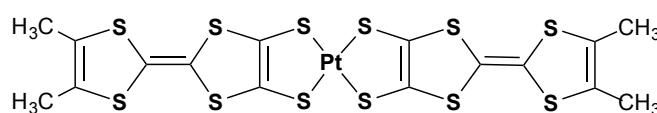


多軌道系分子性導体におけるディラック電子系の開発

小分子の結晶は、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る。従来の分子性導体では、一つの分子において電子物性を担うフロンティア分子軌道は HOMO か LUMO のどちらか一方だけであったが、近年、同じ分子の HOMO と LUMO の両方が電子物性に関与する多軌道系分子性導体の報告例が増え、その多軌道性が新しい物性をもたらしている[1]。その典型例の一つが、単一成分分子性導体におけるディラック電子系である。



[Pd(dddtd)₂]



[Pt(dmdtd)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、単一成分の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できる。我々は、高圧下の[Pd(dddtd)₂]がディラック電子系（ノーダルライン半金属）である可能性を見出した[2]。当初は、第一原理 DFT 計算で推定した高圧結晶構造を元に解析を行っていたが、今回ようやく英国 Diamond Light Source における放射光 X 線回折実験で高圧下の結晶構造を決定することに成功し、強結合近似バンド計算を用いてディラック電子系が形成されるメカニズムを検討した。その結果、単一成分分子性ディラック電子系は、HOMO バンドと LUMO バンドが交差し、かつ HOMO と LUMO の分子間相互作用にノードが存在するという二つの条件を満たせば形成されることがわかった。この条件は汎用性があり、最近 Zhou らが報告した常圧ディラック電子系[Pt(dmdtd)₂] [3]にも適用できることを明らかにした[4]。

参考文献

- 1) R. Kato, “Multi-Orbital Molecular Conductors Based on Metal Dithiolene Complexes”, ISCOM2019, Tomar, Portugal, September 26 (2019): Plenary talk
- 2) R. Kato, H. B. Cui, T. Tsumuraya, T. Miyazaki, and Y. Suzumura, *J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 1770-1773 (2017).
- 3) B. Zhou, S. Ishibashi, T. Ishii, T. Sekine, R. Takehara, K. Miyagawa, K. Kanoda, E. Nishibori, and A. Kobayashi, *Chem. Commun.*, **55**, 3327-3330 (2019).
- 4) R. Kato and Y. Suzumura, submitted to *J. Phys. Soc. Jpn.*