

氏名	渡邊 真史
授与した学位	博士
専攻分野の名称	理学
学位授与番号	博 甲 第 1886 号
学位授与の日付	平成11年3月25日
学位授与の要件	自然科学研究科物質科学専攻 (学位規則第4条第1項該当)
学位論文の題目	3/4 filledバンドを有する擬2次元有機伝導体の低温構造 と絶縁相
論文審査委員	教授 大嶋 孝吉 教授 町田 一成 教授 澤田 昭勝

学位論文内容の要旨

有機分子BEDT-TTFからなる伝導体のうち、バンドが3/4 filled で2次元的なフェルミ面を持ちながら低温で非金属状態となる物質を含む2タイプの結晶構造に関してX線回折の手法により実験をおこなった。 κ -(BEDT-TTF)₂Cu [N(CN)₂]₂X [X=Cl, Br]では、BEDT-TTF分子が2量体化し伝導バンドは実効的に1/2 filledとなる。2量体化が強いとき2量体あたりのクーロン反発も大きく、Mott絶縁体化とするダイマーモデルを低温構造から実験的に検証した。 θ -(BEDT-TTF)₂CsCo (SCN)₄では、金属状態では単一のバンドと楕円型に近い単純な形状のフェルミ面を持つ。低温非金属状態では、超格子構造の振幅、相関長から、ダイマーモデルのMott相よりは、むしろ最近接クーロン反発の効果による電荷秩序相と考えた方よいことがわかった。なお、10.7 kbarの圧力下では、常圧低温とは別の新たな圧力誘起2k_F CDWを発見した。これはバンド幅の増大とフェルミ面の形状変化の双方に起因している。

論文審査結果の要旨

有機伝導体研究は近年急速に進展し、物性研究、特に多電子系の多体効果の研究の場として重要性を増している。有機伝導体は電子供与体と受容体の比が2 : 1であるものが多く、伝導バンドは $3/4$ filled になっている。これらの中には構成分子が異なっても同型の室温構造を持つものがあるが、それらの物性は超伝導体、金属、絶縁体など多くのバラエティに富み、圧力、元素置換、冷却速度などにより基底状態が変化するなど物質固有の現象が知られ、その物性発現の機構が実験的にも理論的にも問題となっている。

本論文では κ 型および θ 型と呼ばれる構造を持つ BEDT-TTF 分子からなる塩につき、特に物性理解の上で問題となる低温構造をX線を用いて明らかにする研究を行い、報告している。 κ 型塩は有機伝導体の代表的な系であり、これまでに電子相関の物性に対する重要な寄与が提案されている。伝導性の研究に重要なバンド構造は低温構造によって決定されるが、この研究以前には物性を議論できるほど詳細な低温構造研究は存在していなかった。本研究は分子ペア(二量体)のもつオンサイト・クーロン相互作用が分子の二量体化の程度によって変化することに着目し、系の伝導バンドが実効的に $1/2$ filled と見なせ、電子相関の効果が強く現れるとするモデルを、低温構造と、それに基づくバンド計算により初めて検証した。また超周期構造、分子端構造の役割などを明らかにした。また θ 型塩では圧力下低温構造解析を行い、他に例を見ない圧力誘起電荷密度波相転移を初めて観測した。さらに、超周期構造のデータをもとにこの物質の常圧下および圧力下の相転移や基底状態を議論し、電子状態について新しい知見を与えた。

本論文の内容、論文発表会、参考論文を総合的に審査した結果、本論文は博士学位論文に値するものと認定する。