

(DMET)₂BF₄ および (DMET)₂PF₆ の低温結晶構造

量子構造物性学研究室 41417108 菅野奈緒子

DMET 分子は、1/2 の TMTSF 分子と 1/2 の BEDT-TTF 分子からなる非対称ドナー分子である。TMTSF 塩と BEDT-TTF 塩の統括的な理解を深めるうえで、半導体から超伝導まで幅広い物性を示す DMET 塩の研究は重要な意義を持つ。

一次元鎖が直交した構造をもつ (DMET)₂BF₄ は 32K で金属 - 絶縁体転移を起こすが、磁気抵抗から、b 軸方向に積層する B カラム内で電子状態が変化したと考えられる [1]。絶縁状態を理解するために SPring-8/BL02B1 にある低温真空カメラなどを用い詳細な構造解析を行った。超格子に起因する衛星反射は観測されなかったため、 $2k_F$ または $4k_F$ CDW の可能性は否定される。構造を元に分子軌道を計算し、transfer 積分から、B カラムでは A カラムの 7 倍の分子二量体化が存在することがわかった (図 1)。分子の形から見積もった価数には大きな差がなく、クーロン反発による電荷秩序型金属 - 絶縁体転移ではない。逆に分子価数は、多少の誤差を含むが +0.25 で均一と考えても大きな矛盾は無い。これらの結果は、強い 2 量体化によって、分子対上に 1 キャリアという Mott 絶縁化が、b 軸カラムで起こったと解釈可能である。

(DMET)₂PF₆ は強い二量体化により電気伝導は半導体的であるが、25K 以下でスピン磁化率が減少しスピンパイエルズ転移の可能性が示唆される [2]。高感度の X 線散漫散乱写真の撮影を 10K まで行った結果、室温から起きている分子四量体化が低温できわめて強くなり、低温での磁化率の消失を説明可能であることがわかった。

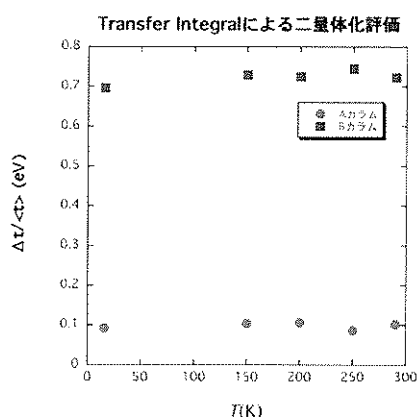


図 1 transfer 積分による
分子二量体評価化評価

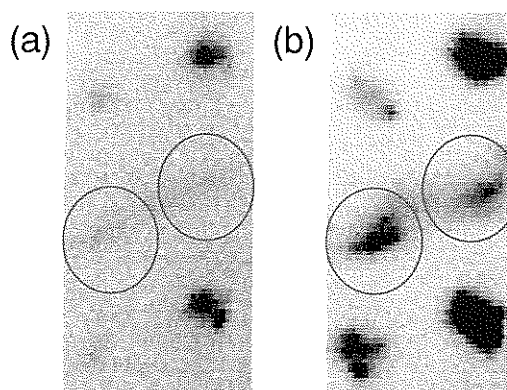


図 2 (DMET)₂PF₆ の X 線散漫散乱写真
(a) 295K (b) 10K

[1] K.Kikuchi, et al. Synth.Met.19, (1988)551.

[2] K.Kanoda, et al. Synth.Met.27, (1988)385.