

機能性分子および遷移金属錯体の分子シミュレーション

Molecular Simulation on Functional Molecules and Transition-Metal complexes

京都大学大学院理学研究科 化学専攻 固体物性化学研究室

小松 徳太郎

研究成果概要

有機導電体をはじめとする機能性分子集合体は、電子輸送現象、プロトン伝導性、磁性、光電変換、分子認識などの多彩な物性とこれらの協働現象、高い設計性で注目されている。有機導電体(DIETSe)₂MX₄ (M = Fe, Ga; X = Cl, Br)は、電子供与性分子である DIETSe が分子平面をそろえてスタックした構造を含む擬一次元導電体である。

(DIETSe)₂MCl₄は、擬一次元的な伝導バンドに起因するスピン密度波(SDW)転移によって、10 K 付近で金属から半導体に変化する。また、M = Fe の場合、Fe³⁺のスピン反強磁性転移に伴って、2.5 K で再び電気抵抗の上昇が見られる。ハロゲンを Cl から Br に変更すると、SDW 転移は消失し、反強磁性転移温度は 7.2 K に上昇する。

このような相転移挙動における、物質—構造—物性相関、特に電気伝導を担う DIETSe 上の π 電子と Fe の局在した d 電子スピンとの π -d 相互作用を完全に解明するには至っていない。(DIETSe)₂MX₄ の複雑な電気伝導挙動と磁性の起源ならびに π -d 相互作用を調べるため、第一原理バンド計算を行った。図 1 に示すように、M=Fe の場合はフェルミ準位(E_F)近傍に Fe の 3d バンドが存在し、局在スピンの DIETSe の π 軌道からなる伝導バンドに影響を与えていることが分かった。

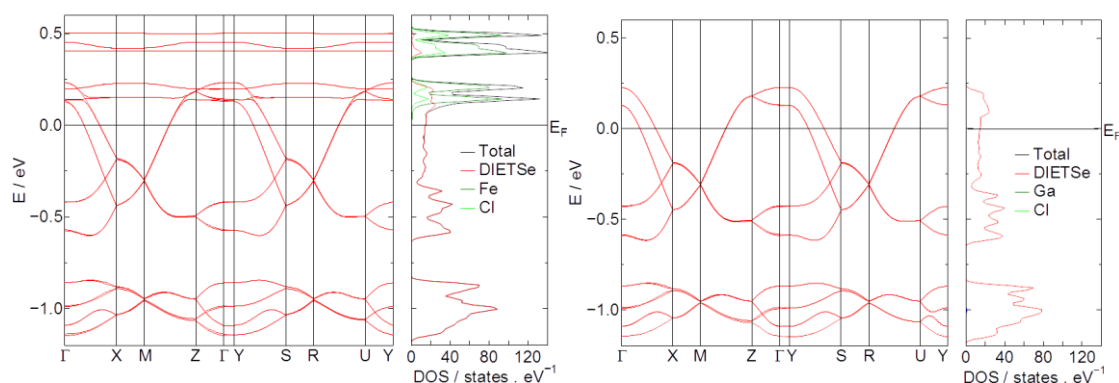


図 1: M=Fe(左)と M=Ga(右)の場合の(DIETSe)₂MCl₄ のバンド構造と状態密度。

発表論文(謝辞あり)

1. G. Kawaguchi *et al.*, Phys. Rev. B **93** (2016) 075124.
2. G. Kawaguchi *et al.*, Angew. Chem. Int. Ed. **53** (2015) 10169 – 10172.