

論文審査の結果の要旨

氏名 堀田 知佐

有機導体は一次元、二次元の低次元強相関係の舞台として活発な研究が続いている。本論文の考察の対象となっている擬二次元有機導体においても、構成有機分子の種類またその構造などによって反強磁性絶縁体や、超伝導などさまざまな物性を示すことが知られている。本論文では、これらの多様な物性を最高占有分子軌道 (HOMO) のもつバンド構造に基づいて統一的に理解しようとしている。

当論文は7章から成っている。二次元有機導体ではさまざまな分子配列をとる構造が知られている。それらは、 α 型、 β 型、 θ 型、 κ 型、 λ 型などとギリシャ文字を冠して区別される。論文全体の簡単な導入部である第一章の後、第二章では以上五種類の分子配列を持つ有機導体について、その性質がまとめられている。

第三章では HOMO 軌道に対するバンド構造が分子間の重なり積分を用いて議論されている。 β 、 θ 型は単位胞に二個の分子を含むのに対して、 α 、 κ 、 λ 型では、単位胞に四個の分子を含んでいる。電子数はいずれも $3/4$ フィリングになっている。しかし単位胞に四個の分子を含むものでは、程度の差はあれ分子が二個ずつ二量体化している。とくに、強く二量体化している κ 、 λ 型ではエネルギーの高い反結合軌道は、 θ 、 β 型のバンドと良く似た構造を持っている。したがって、反結合軌道のみを考えると単位胞に二個の分子軌道を持つ同一のモデルを考えれば良いということになる。電子数が $3/4$ フィリングであるか、 $1/2$ フィリングであるかが二つのグループを分けることになる。では、各グループ内で β 型と θ 型、あるいは κ 型と λ を区分するものは何かということであるが、当論文ではバンド分散の分裂の様子に着目し「バンド分裂度」と呼んでいる。これは分子軌道間の重なり積分の方向依存性を採り入れることに対応する。

以上のような考察にもとづき、単位胞に二個分子軌道のある三角格子ハバードモデルを採用する。運動エネルギーとしては、 y 軸方向の飛び移り積分 c と二個の分子軌道間の飛び移り積分を考えるが、後者については方向に応じて d_1, d_2, d_3, d_4 の四個を考える。 d_1 から d_4 を等しくとると Brillouin 域の X - M - Y に沿った線上で二つのバンドが縮退する。し

たがって、これらのパラメーターの違いがバンド分裂度を定義することになる。相互作用としては、同一サイトの分子軌道に二個電子が入った時のクーロン相互作用 U と異なる分子軌道間に働く V を考える。

三角格子ハバードモデルの相互作用項については、平均場近似を採用する。秩序変数としてはスピン密度波と電荷密度波を考えるが、それらの構造については、単位胞が二倍になるものまでに限り、代表的と思われる状態について計算をしている。以上モデルとそれに対して採用する近似が四章で提示され、その結果が五章にまとめられている。3/4 フィリングでは、正常相と SDW 相のほか電荷秩序のある相が可能であるが、それはバンド分裂度に敏感でその特定の範囲において電荷秩序が起こりやすくなっている。一方、1/2 フィリングでは電荷秩序は形成されない。磁気相に関しては二種類の SDW 相が見られ、その間に正常相が存在する場合がある。

計算結果と実際の二次元有機導体の比較検討が第六章でなされている。 θ 型 ET 系については、分子の二面体角で整理した良く知られた相図がある。この二面体角はバンド幅の指標として解釈され、インターサイトクーロン相互作用 (V) とバンド幅 (W) の比 (V/W) をかえたときの相図と理解されてきたが、バンド分裂度の違いと考えた方がより詳細な対応関係が成り立つことが指摘されている。これは 3/4 フィリングの例であるが、二量体化した 1/2 フィリングの例を挙げると、 κ 型 ET_2X の相図についても、電子相関とバンド分裂度の両者を考えることにより、より合理的な相図が得られることが指摘されている。

以上見てきたように、本論文では二次元有機導体について、三角格子ハバードモデルを有効ハミルトニアンとして、バンドフィリングとバンド分裂度のふたつを軸に整理したものである。多様な現象が見られる有機導体の系について、新たな視点を導入して整理した功績は大きく、今後の実験的研究の指針としても役立つことが期待される。また、本論文は指導教官である福山秀敏教授との共同研究であるが、本人の寄与は主体的で十分であると認められる。

よって論文審査委員会は全員一致で博士(理学)の学位を授与できると認めた。