

ISSP ワークショップ

分子性物質における π 電子—水素相関機能物性

日時：3月29日（火） 10:55-18:00

場所：東大物性研 A615

世話人 森 初果、山下 穰

近年、水素[水素原子(H)、プロトン(H⁺)、ヒドリド(H⁻)、重水素原子(D)、デューテロン(D⁺)]に関係した機能性物質に対する関心が高まっている。最近、物性研究所においても、水素と π 電子が相関した分子性機能物質である κ -H₃(Cat-EDT-TTF)₂(水素体)およびその重水素体を含む誘導体が開発され、これまでに、両者が協奏した物性として「重水素移動をトリガーとした伝導性および磁性のスイッチング現象」、「単成分純有機物の金属状態」、「水素の量子性を利用した量子スピン液体状態」、「サーモクロミズム」、「電場印加下の非線形伝導」など新たな相関機能物性が発見されている。このように、 π 電子の電荷、スピン、格子、軌道の自由度に加え、プロトンという自由度が増えることにより、同じエネルギースケールに多様な自由度が協奏、競合し、広い時空間に渡る揺らぎがもたらす相関物性が注目を集めている。

この相関物性における最近の研究成果の情報交換および議論を、物質開発、物性物理、物性理論が一堂に会して行う機会を設けて欲しいというリクエストに応え、ISSP ワークショップを開催した。下記のプログラムのように、前半が実験研究、後半が理論研究の紹介で、11人の研究者が質問を含んで30分ずつ発表を行った。実験研究の紹介で、まず上田顕博士(物性研)は、水素・重水素— π 電子相関物質の合成、結晶構造およびその抵抗率・磁化率の結果より、重水素のダイナミクスが引き起こす物性スイッチング現象およびその要因について議論した。次に磯野貴之博士(NIMS)は、水素体のトルク測定と静磁化率測定から、水素体が量子スピン液体であること、またその電子状態が磁化率でスケールリングできることを述べた。伊藤哲明博士(東京理科大)は、¹³C-NMR と ¹H-NMR の測定より、水素体は低温で、分子スケールのミクロな不均一性を持つ量子スピン液体状態であること、また電荷秩序相と隣接していることを述べた。橋本顕一郎博士(東北大金研)は水素体の誘電応答測定より、低温での量子常誘電性が水素の量子揺らぎ由来であること、また光学測定よりサーモクロミズムを示すことを紹介した。山下智史博士(阪大院理)は水素体および重水素体の熱容量測定より、水素体が量子スピン液体であること、重水素体ではスピギャップがあること、水素体の格子熱容量が顕しく高いことを述べた。下澤雅明博士(物性研)は水素体および重水素体における熱伝導の顕著な異方性の測定より、スピンのギャップレス励起とプロトンダイナミクスが強くカップリングしていることを紹介した。岡本 博教授は(東大新領域)、テラヘルツ電場応答が分子性伝導体の新しい電子状態制御法であることを、いくつかの例を示しながら解説した。

理論の研究紹介では、中 惇博士(東北大院理)が、プロトン・電子結合系の理論計算より、CDW(電荷密度波)、ダイマーモット(電子とプロトンのパイロニック状態)、CO(電荷秩序)相が競合していることを示した。圓谷貴夫博士(NIMS)は、第一原理計算で、水素運動と電荷分離がカップルしていること、水素の動きにより対称性が破られた強誘電性が発現する可能性を示した。渡部 洋博士(理研)は、モンテカルロ計算より、水素体は電子相関・格子歪み・プロトン振動の協力と競合が起こっており、重水素体との大きな違いは、水素結合ポテンシャルの形状とゼロ点振動に起因していることを紹介した。山本魁知氏(横浜市立大)は、水素の量子効果と π 電子の寄与を入れた多成分密度汎関数法による計算で、水素体では室温より非調和型の単一ポテンシャルカーブが計算されるのに対して、重水素体はダブルミニマムカーブが描かれ、両者の異差が相転移の有無と相関することを示した。

日本物理学会、日本化学会、分子科学討論会と、日頃日々の学会で発表する講演者が一堂に会して研究を紹介し、年度末であったにもかかわらず多く参加者(40名)間で時間を延長した活発な議論が続いた。分子性物質における π 電子—水素相関機能物性に新たな展開を感じることができたというコメントを多数の参加者からいただき、今後の研究の進展に大きく寄与しうるワークショップとなった。

プログラム

日時：平成 28 年 3 月 29 日（火） 10:55-18:00

場所：東大物性研 A615

10:55	森 初果（東大物性研）	はじめに
11:00	上田 颯（東大物性研）	Cat-TTF 系有機伝導体の開発研究
11:30	磯野貴之（NIMS）	π 電子－水素相関系有機磁性体における量子スピン液体状態
12:00	昼休み	
13:00	伊藤哲明（東京理科大）	$^{13}\text{C-NMR}$ 、 $^1\text{H-NMR}$ で見た Cat-TTF 系におけるスピン液体と電荷秩序
13:30	橋本颯一郎（東北大金研）	$\kappa\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ の誘電・光学特性
14:00	山下智史（阪大院理）	$\kappa\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ の熱容量挙動
14:30	下澤雅明（東大物性研）	プロトン揺らぎがもたらす量子スピン液体状態による異方的熱伝導： $\kappa\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$
15:00	岡本 博（東大新領域）	テラヘルツ電場応答～分子性導体の新しい電子状態制御法～
15:30	休憩	
16:00	中 惇（東北大院理）	プロトン-電子相関系の電荷励起と光学応答
16:30	圓谷貴夫（NIMS）	水素結合系 $\kappa\text{-(H/D)}_3(\text{Cat-EDT-TTF/ST})_2$ の構造と電子状態 ～第一原理計算による研究～
17:00	渡部 洋（理研）	$\text{-H}_3/\text{D}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ における電子相関・格子歪み・プロトン振動の協力と競合
17:30	山本魁知（横浜市立大）	$\text{H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ における H/D 同位体効果による相転移機構の理論的研究