

## イオン性分子結晶表面の特異な安定化機構と相転移

筑波大学物理工学系・CREST 石田真彦  
重川秀実

BEDT-TTF系の低次元有機伝導体結晶は、イオン性の分子間結合を持ち、また各分子が層状に積層している為、極性を持った分子が表面に表れる。このような物質では、結晶全体の電荷バランスを保つために、最表面層の電荷量が変化する。従来、多くの分子性結晶はバルク構造に極めて近い表面構造を示すことが知られてきたが、BEDT-TTF系有機伝導体では、上記電荷量変化が表面状態に影響を与える可能性が高い。実際、 $\beta$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>PF<sub>6</sub>表面のSTM観察により、無機結晶と同様の機構で表面再構成が発現することを初めて確認した。また同試料は、約297Kで金属-絶縁体相転移を起こすが、STMによる観察と理論計算の結果、表面に現れるCDW構造も表面の電荷量変化に強く影響を受け、バルク内のCDW相とは異なる構造を取ることが明らかになった。更に、同試料の表面では、上記要因だけでは説明できない特異な周期構造が観察される。分子軌道計算によるSTM像解析の結果、結晶を構成する分子自身の構造緩和に起因することを確認した。構成要素が分子である為に、結晶構造だけでなく構成分子自身の構造が表面構造の形成に関与し、隣接する分子配列の対称性が崩れ周期構造が誘起される分子性結晶特有の現象の存在を示したものである。