

## ET<sub>5</sub>Te<sub>2</sub>I<sub>6</sub> および BETS<sub>5</sub>Te<sub>2</sub>I<sub>6</sub> 塩の電荷整列構造の競合

理研・分子研 山本貴 江田潤哉 中尾朗子 加藤礼三 薬師久弥

Competition between distributions of the site-charges for ET<sub>5</sub>Te<sub>2</sub>I<sub>6</sub>  
and BETS<sub>5</sub>Te<sub>2</sub>I<sub>6</sub>

RIKEN, Institute for Molecular Science  
Takashi Yamamoto, Junya Eda, Akiko Nakao,  
Reizo Kato, Kyuya Yakushi

表題物質は、herringbone 型配列を示す分子性導体の中でも、珍しく 5 量体を形成し、ET-塩と BETS-塩の結晶構造は同型である。従って、分子間距離はユニフォームではなく、かつ、両者の分子間距離はほぼ同程度である。ところが、重なり積分の大きさは両者で大きく異なる。従って、両者の電荷整列構造の比較は、電荷整列状態の支配要因を検討するのに良いモデルケースとなる。分子内振動は電荷量・電荷の整列様式・電荷の frustration や fluctuation、を調べるのに強力な手法であり、表題物質にこれを適用した。

まず、分子内振動と X 線構造解析から表題物質の電荷整列構造を調べ、絶縁相では Inner 型配列（図右）をとることが判明した。室温付近の高伝導状態でも、電荷は絶縁相と同様に分離している。しかし、電荷はサイトに局在していない。そこで、高伝導状態では、Inner 型配列と Outer 型配列（図左）が競合しているという仮説を立てた。

この仮説を実験の立場から検証できる測定結果として、一軸圧縮下における抵抗率測定がある。詳細は当日発表する。

図 Inner 型配列と Outer 型配列。大きな（小さな）楕円は電荷量に相当する。

