

α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ における電荷不均化と不純物効果名大院理、名大高等院^A 駒場繁、片山新也、小林晃人^A、鈴木順三

擬2次元有機導体 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ のゼロギャップ状態では、電荷不均化が圧力によって増大することと、ユニットセル中の4つの分子(A,A',B,C)の内、Cがhole-richでBがelectron-richとなるパターンが高橋らの実験により観測されている [1] が、これまでの計算 [2] ではともに逆の傾向が示されていた。本研究では、第一原理計算 [3] によって得られた飛び移り積分の値を用い、オンサイト斥力 U 、最近接サイト間クーロン斥力 V を持つ拡張ハバード模型に基づき、相互作用の多様性を考慮することで、この不一致の問題を検討した。図1は a 軸方向圧力に対するサイト別の電子数を表している。B,C不一致と圧力依存性の問題を同時に解決できる合理的なパラメータ (U,V) を見つけた。

また、 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ はグラフェンとは異なり、サイト別に見た電子数の運動量分布 $n_\alpha(\mathbf{k})$ は一定でない [2]。この特異な電荷分布は、不純物により並進対称性が破られるとSTMによって観測される可能性がある。本研究では不純物(ヨウ素欠損)による散乱を考え、どのような電子数の波が発現するかを調べた。図2、図3は不純物散乱による電子数変化をプロットしたものである。横軸はユニットセル単位での x 方向の距離。また、図2は散乱がinter valleyの場合で、contact point 間の波数 $2k_0$ の波を表している。図3は散乱がintra valleyの場合で、contact point 近傍の特異な電荷分布を反映した波と考えられる。

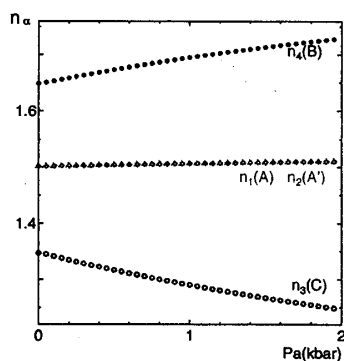


図 1: 電子数の圧力依存性

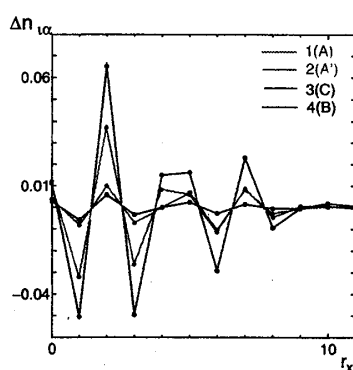


図 2: inter valley

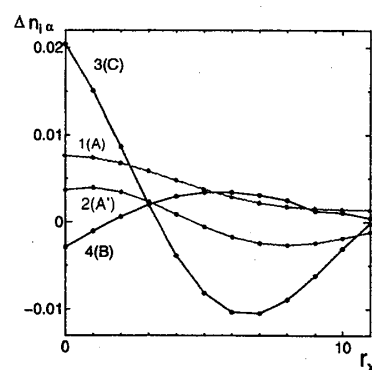


図 3: intra valley

参考文献

- [1] T.Takahashi:Synth.Met133-134(2003)261
- [2] A.Kobayashi,S.Katayama,Y.Suzumura,and H.Fukuyama:
J.Phys.Soc.Jpn.76(2007)034711
- [3] H.Kino,T.Miyazaki:J.Phys.Soc.Jpn.75(2006)034704