

静水圧下での α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の電子状態

物質・材料研究機構 木野日織

文献[1]において結晶軸 a 方向と b 方向の弱い一軸圧下の密度汎関数法による第一原理電子状態計算を行い massless Dirac Fermion dispersion が計算精度の範囲内で存在することを確認した。しかしながら、現実には弱圧下では低温で電荷整列相が存在しているため、密度汎関数法による結果は密度汎関数法がうまく表現できない近距離クーロン相互作用が弱かった場合の仮想的な電子状態を示していた。今回、0GPa から電荷整列相が実験的に消えていると思われる 1.81GPa までの静水圧下での格子定数[2]を用いて第一原理電子状態計算を行った。圧力によりバンド幅が倍程度に大きくなるが、文献[1]と同様に 1.81GPa でも massless Dirac Fermion dispersion が確かに存在していることを確認できた。

[1] H. Kino and T. Miyazaki, J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 034704.

[2] I. Tamura, H. Kobayashi and A. Kobayashi, J. Phys. Chem. Solids, **63** (2002) 1255.

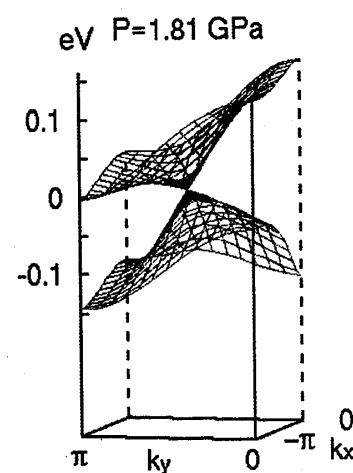


図. α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の静水圧 1.81GPa での電子状態。格子パラメタは文献[2]による。 $E(k_x, k_y, k_z=0)$ の $k_x k_y$ 平面の第二象限の HOMO band と LUMO band を示す。 $E=0$ は gapless 点のエネルギーにとっている。計算精度の範囲内で Massless Dirac Fermion dispersion が存在していることがわかる。