

有機伝導体におけるゼロギャップ状態出現の条件

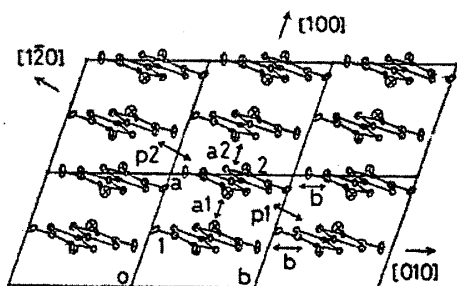
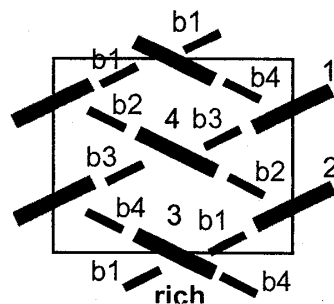
東京工業大学大学院理工学研究科物質科学専攻

森 健彦

α -(ET)₂I₃において、一軸圧下での構造解析[1]をきっかけに、 E_F において上下のバンドが1点で交わるゼロギャップ状態が発見され[2]、質量ゼロのディラック粒子として、また高压下の異常な輸送現象を説明するものとして注目を集めている[3]。ここでは強結合近似バンドの立場からゼロギャップが出現する条件と、ゼロギャップをもつ他の物質の可能性について検討する。

簡単のために(TMTSF)₂Xのように単位格子中に2分子のある場合(図1)のゼロギャップ条件は、まず上下バンドが接する「第1」条件として「 $t_{a1}+t_{a2}>t_{p1}+t_{p2}$ について $t_{a1}-t_{a2}<t_{p1}-t_{p2}$ 」が得られる。この場合も通常は電子とホールポケットが出るが、フェルミ面が実際に1点となる「第2」条件は $t_{a1}-t_{a2}>2t_b$ となる。実際に2分子/セルのうち β -(ET)₂I₃、 β' -(ET)₂AuCl₂といった代表的なほとんどの物質は第1条件を満たさずギャップを持つが、 β'' -(ET)₂AuBr₂、 β -(DOET)₂Au(CN)₂といった物質は例外的に第1条件を満たす。4分子/セルの場合は解析的に解けないので、強結合近似のバンド計算プログラム[4]によってゼロギャップを調べたところ、 α -(ET)₂I₃の他 α -(ET)₂KHg(SCN)₄系の物質すべて、 β'' -(ET)₂Pd(CN)₄H₂O、 λ -(BETS)₂FeCl₄といった物質が第1条件を満たし、第1条件を満たさないのは例外的に β'' -(ET)₂Pd(CN)₄のみであった。4分子/セルの場合、第2条件は2分子/セルの場合よりも厳しくなるが、 α -(ET)₂I₃について図2のようなノンストライプ電荷整列を仮定すると上下バンドが分裂して第2条件も満足したゼロギャップ状態が出現する。図2は分子3, 4のカラムだけに電荷の偏りを起こしたもので、最近X線[5]やNMR[6]からも示唆されている。 α 相の「金属相」では、元々の2倍周期のため、 θ 相の3倍周期の代わりに[7]、このようなノンストライプ電荷整列が起こるものと考えられる。

[1] R. Kondo, *J. Phys. IV* **114** (2004) 523. [2] S. Katayama, *JPSJ*, **75** (2006) 023708, 054705. [3] N. Tajima, *JPSJ*, **71** (2002) 1832. [4] tbmap3 at <http://www.op.titech.ac.jp/lab/mori/lib/program.html>. [5] 澤, *JPSJ* 印刷中. [6] 高橋, 本研究会. [7] 森, 日本物理学会誌 **61**(7), 516 (2007).

図1 (TMTSF)₂Xにおけるトランスファー図2 α 相におけるノンストライプ電荷整列