

$\alpha \cdot (\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ の静水圧力下構造解析

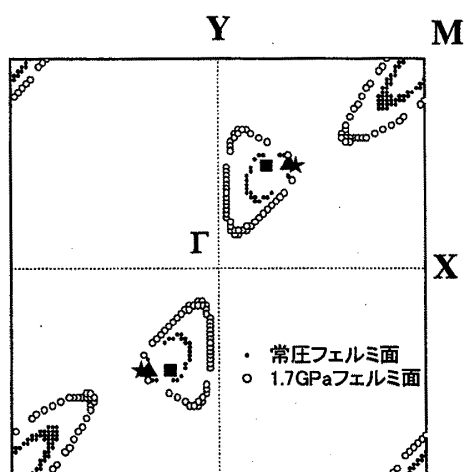
東大院総合文化

近藤隆祐、比嘉百夏、鹿児島誠一

実験から静水圧力下においてナローギャップ半導体的な電気抵抗挙動を示すことが見出され[1]、理論からゼロギャップの存在が示唆されている[2]、表題物質 $\alpha \cdot (\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ の室温・静水圧力下構造解析 (0.25GPa、0.5GPa、0.75GPa、1.7GPa) を行った結果について報告する。通常用いられる、分子軌道間の重なり積分に経験的定数 ($\sim 10\text{eV}$) をかけたものを当該分子間の飛び移り積分の値として採用する手法[3]によって、測定から得られた結晶構造を基に飛び移り積分を決定し、強束縛近似バンド計算によって正方格子における電子構造を求めた結果、以下の点が明らかになった。

1. ユニットセル内にある全てのサイトのポテンシャルが同じであるとして計算を行った場合、低温までナローギャップ的な挙動が見出されている 1.7GPa では、バンド幅の増大に伴って常圧において見出されている電子的及びホールのポケットの両方が大きくなることが見出された。(図) 理論からその存在を指摘されているゼロギャップは、星印で示した位置でフェルミエネルギーより 6.5meV 程度下に存在する。(常圧では三角で示した位置のフェルミエネルギーより 6meV 程度下に存在する)
2. 1.7GPa の結果において、高圧下のラマン測定によって見積もられたユニットセル内の分子の価数を再現する様に、charge-poor なことが示唆されている c 分子に相当するサイトのポテンシャルを変化させて計算を行った結果[4][5]、適当な値において 1. で得られたフェルミ面が無くなり、図で示した四角一点でフェルミエネルギーを横切るような電子構造が実現する。

講演においては、ゼロギャップの k 空間における位置及びフェルミエネルギーから測った深さの静水圧力及びサイトポテンシャル依存性について、実験を踏まえて議論する。



Reference

- [1] N. Tajima, *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **75** 051010 (2006).
- [2] A. Kobayashi, *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76** 034711 (2007).
- [3] T. Mori, *et al.*, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **57** 627 (1984).
- [4] R. Wojciechowski, *et al.*, *Phys. Rev. B* **67** 224105 (2003).
- [5] 森健彦「ゼロギャップ 電気伝導体」研究会 於 東邦大学 理学部 (2007/7/30)

図 常圧及び 1.7GPa におけるフェルミ面