

有機ディラック電子系 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ における 欠陥誘起ゼロエネルギー局在状態

東大理 金尾太郎、松浦弘泰、小形正男

近年、擬2次元分子性導体 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ (α -(ET) $_2$ I $_3$) が質量ゼロのディラック電子系として注目を集めている [1, 2]。 α -(ET) $_2$ I $_3$ 中に格子欠陥などが入ると、ディラック電子系に特有の状態が出現する可能性がある。そこで本研究では、欠陥周辺における電子状態を微視的に調べた [3]。手法として第一原理計算に基づいた強束縛模型 [4] の実空間における対角化を用いた。その結果、単位胞子中のあるサイト (A, A' サイト) に欠陥が存在するときのみ、局在状態がゼロエネルギー (ディラック点) に現れることを見出した。さらに、スーパーセル法を用いて A サイトに欠陥のある場合のスピン帯磁率を求めた。その結果、フェルミ準位付近での状態密度の変調のため、スピン帯磁率に特徴的な振る舞いが現れることがわかった。これは、理想的な質量ゼロの2次元ディラック電子系の場合とは異なっている。

- [1] N. Tajima, S. Sugawara, M. Tamura, Y. Nishio, and K. Kajita, J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 051010.
- [2] S. Katayama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 054705.
- [3] T. Kanao, H. Matsuura, and M. Ogata, in preparation.
- [4] H. Kino and T. Miyazaki, J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 034704.