

Possible Massless Dirac Electron and Edge State in Molecular Two-Orbital Model

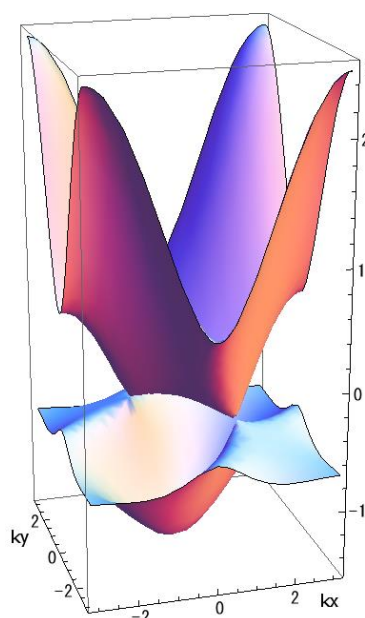
K. Miyahara, M. Tsuchiizu, and A. Kobayashi

分子二軌道系における新規ディラック電子の可能性とエッジ状態

名大理 宮原和之, 土射津昌久, 小林晃人

固体中のディラック電子はグラフェン, ビスマス, 分子性導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ など様々な物質で見出され, その存在条件や安定性, 特異な物性のメカニズムが研究されている。

本研究では分子二軌道系[1,2]を想定して, TTM-TTP 分子で見られる対称性の異なる 2 種類の π 軌道が(擬)縮退しているモデルを解析した(単位胞に 1 分子)。2 種類の π 軌道の対称性からハミルトニアンは σ_y と σ_z のみの線形結合で表せる。結果, このような分子二軌道モデルにおいて飛び移り積分の次元性を擬 1 次元から 2 次元に変化させることで 1 組(2 点)のディラック点が時間反転対称点から出現することが分かった。右図はパラメータを 2 次元的に設定した場合のバンド構造である。加えて, 次近接の飛び移り積分の値を考慮するとディラック点が非整合な波数でさらに 2 組対生成する可能性があることを指摘する。この系におけるゼロ磁場でのエッジ状態を計算も行い, バルク・エッジ対応の観点から異方的グラフェンなどの場合と比較する。



また, 固体中のディラック電子系に円偏光を照射すると動的な光誘起ギャップが開くことが知られている[3]。本発表では分子二軌道系のモデルにおける光誘起ギャップの性質も報告する予定である。

参考文献

- [1] M. Tsuchiizu, Y. Omori, Y. Suzumura, M.-L. Bonnet, V. Robert, S. Ishibashi, and H. Seo, J. Phys. Soc. Jpn., **80**, 013703 (2011)
- [2] M. Tsuchiizu, Y. Omori, Y. Suzumura, M.-L. Bonnet, and V. Robert, J. Chem. Phys., **136**, 044519 (2012)
- [3] T. Oka and H. Aoki, Phys. Rev. B **79**, 081406 (2009)