

# 有機導体 $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ のディラック点の振舞い

## 名大理 鈴村順三

有機導体  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$  では第1バンド  $E_1$  と第2バンド  $E_2$  が偶然の波数  $\pm k_0$  (ディラック点) で縮退し、圧力変化とともに  $k_0$  が変化する。単位胞は4分子 A, A', B and C から構成され A と A' の間に空間反転対称点が存在する。ディラック点は、分子間の飛び移りエネルギー (分子積層方向の  $a_1, a_2, a_3$  および垂直方向の  $b_1, b_2, b_3, b_4$  の7種類) により決定される。ディラック点が存在するかどうかは、波数空間の対称点 ( $\Gamma, X, Y, M$ ) の波動関数の空間反転対称の parity により決定されることを具体的に示す (Y.S., T. Morinari, F. Piechon: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 023708; F. Piechon and Y.S.: J. Phys. Soc. Jpn. **82** (2013) 033703)。第1バンドの parity の固有値を  $E_P(G/2) = \pm 1$  とすると4個の固有値の積が負、つまり、 $P(E_P(\Gamma), E_P(X), E_P(Y), E_P(M)) = -1$  の場合にディラック点が存在することを右図に示す。実際  $-11.6 \text{ kbar} < P < 39.2 \text{ kbar}$  では  $P(+, -, +, +)$  でディラック点が存在し、圧力増加とともに、Y点から出現し、 $\Gamma$ 点で2つのディラック点の merging が起きる。電子相関を考慮するとY点の代わりにM点から出現するが、これは有効的なサイトポテンシャルが生じるためである。 $a_j = 0$  の場合はMoriにより (J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 014703) 存在条件が解析的に得られている。 $a_j = 0$  の場合の特徴として、圧力依存性を挿入図に示すように、出現および merging はM点、Y点のみで、 $\Gamma$ 点、X点では生じない。P=39.2kbar でディラック点  $\Gamma$  点で merging する際、異なる parity を持った  $E_1$  と  $E_2$  が交差する様子を左図に示す (挿入図は  $P=-11.6 \text{ kbar}$  でのY点での merging を示唆している)。したがって merging は対称点の  $E_1$ 、 $E_2$  の圧力依存性から理解できる。

図:  $\Gamma$ (Y)点における固有値(左図)およびディラック点(右図)の一軸圧力依存性

