

## $^{13}\text{C-NMR}$ からみた $\alpha\text{-(ET)}_2\text{I}_3$ と $\alpha\text{-(BETS)}_2\text{I}_3$

学習院大理 高橋 利宏

バルクのディラック電子系としての理解が進んでいる  $\alpha\text{-(ET)}_2\text{I}_3$ 、および、同一の結晶構造を持つ  $\alpha\text{-(BETS)}_2\text{I}_3$  について、最近の NMR による知見についてレビューする。

$\alpha\text{-(ET)}_2\text{I}_3$  は常圧、135K で金属-絶縁体転移し、低温で電荷秩序を伴う絶縁相になる。この電荷秩序相は高压の引加によって抑圧され、いわゆるゼロ・ギャップ相（ディラック電子系）と呼ばれる状態が出現する。 $^{13}\text{C-NMR}$  は、常圧での電荷秩序相の存在、圧力下でのゼロ・ギャップ状態の出現の確認に役割を果たした。

ディラック電子系は周知の通り、純 2 次元電子系であるグラフェンで見いだされ注目を集めたが、バルクの物質において観測されることはまったく予想外のことであった。ディラック電子系を示すバルクの物質は、はたして $\alpha\text{-(ET)}_2\text{I}_3$  以外にも存在するのか、さらに常圧でのディラック電子系は実現できるかは、有機分子性導体を対象としたディラック電子系の研究における大きな課題である。

我々は、 $\alpha\text{-(ET)}_2\text{I}_3$ （ET 塩と略称）とほとんど同一の結晶構造を持ち類似した電子構造をもつと期待される  $\alpha\text{-(BETS)}_2\text{I}_3$ （BETS 塩）について、ET 塩との系統的な比較を行っている。BETS 塩は、常圧、約 50K 以下で金属絶縁体転移を示すことから、加圧下の ET 塩に対応する状態にあると考えられてきた。事実、 $^{13}\text{C-NMR}$  によって観測された金属領域での局所磁化率のサイト依存性は ET 塩の結果をよく再現する。ただし、磁化率の温度依存性については、金属領域ですでに温度の降下とともに指数関数的に急速に減少し、ディラック電子系に期待される  $T$ -linear の振る舞いの余地は残されていないように思われる。

さらにこのほど、絶縁相での  $^{13}\text{C-NMR}$  の角度依存性の解析からサイト毎の電荷の偏りを調べたところ、ET 塩で観測されたような反転対称性の破れが見いだされなかった（A、A'-サイトの分裂が見られない！）。このことは BETS 塩の絶縁相は電荷秩序相ではない可能性が高いことを示す。

これらの事実は、BETS 塩は、ET 塩と類似したバンド構造が期待されるにもかかわらず、ディラック電子系にはならない可能性を示唆しているように思われる。ディラック電子系を与えるバンド構造の条件について、より詳細な検討が求められると考えている。