

有機導体 κ -(ET)₂X における電荷相関とスピン相関

佐藤直道（東北大理）、渡邊努（千葉工大）、中惇（東北大理）、石原純夫（東北大理）

分子性導体 κ -(ET)₂X（X はアニオン分子）は、ET 分子がダイマーを形成し三角格子状に配列した伝導層とアニオン分子からなる絶縁層が交互に積層した構造をしている。

X = Cu₂(CN)₃ の物質では、幾何学的フラストレーションと電子相関の効果によりスピン液体状態や超伝導など多彩な相が出現することが知られている。近年、ダイマー内の電荷の自由度の存在が誘電率の測定などから示唆されており[1,2]、超伝導などにおける役割を明らかにすることが大きな課題として認識されている。

本研究では、分子性導体 κ -(ET)₂X における電子状態と電子相関の効果を調べることを目的として、ダイマー内自由度のある拡張ハバード模型を変分モンテカルロ法により解析した。ここでは反強磁性秩序と強誘電的電荷秩序を考慮し、ダイマー間クーロン相互作用とダイマー強度をパラメータとして相図を作成した。金属相からダイマー間クーロン相互作用の増大により反強磁性を伴った電荷秩序相へ、ダイマー強度の増大により反強磁性相に転移する。金属相から反強磁性・電荷秩序共存相へ近づくにつれて、電荷相関が増大する一方でスピン相関はほとんど変化しないことを見出した。数値計算の結果をもとに κ -(ET)₂X のモット転移近傍におけるスピンゆらぎと電荷ゆらぎについて議論する。

[1] M. Abdel-Jawad *et al.*, Phys. Rev. B **87**, 075107 (2010).

[2] M. Naka and S. Ishihara, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 063707 (2010).