

κ -(BEDT-TTF)₂X の磁性と超伝導の解析：ダイマー近似を超えて

渡部洋（早大高等研）、妹尾仁嗣（理研）、柚木清司（理研）

分子性導体系 κ -(BEDT-TTF)₂X は、構成アニオン X を変えることで磁性・非磁性モット絶縁体や超伝導など様々な物性を示すことが知られている。この系では向かい合った二つの BEDT-TTF 分子（ダイマー）の軌道が強く混成しているため、ダイマーを一つのサイトと見なすダイマー近似が広く用いられてきたが、スピン液体や超伝導を正しく記述できるか否かについては結論に至っていない。また、 κ -(BEDT-TTF)₂Cu₂(CN)₃ などいくつかの系においてはダイマー近似で無視されているダイマー内電荷自由度が誘電異常を引き起こすことが提案されており、注目を集めている。

我々はダイマー内電荷自由度と分子間の長距離クーロン相互作用を考慮した 3/4-filled 拡張ハバード模型を用いて、 κ -(BEDT-TTF)₂X 全般をカバーできるモデルを構築し、変分モンテカルロ法によって精密な基底状態相図を得た。常圧超伝導物質 X=Cu[N(CN)₂]Br に対応するパラメータを用いた結果、電子相関の度合いにより常磁性金属、反強磁性ダイマーモット絶縁体、反強磁性電荷秩序、三倍周期電荷秩序、超伝導など様々な相が拮抗することが分かった。超伝導相関は広く安定化し、その秩序変数の対称性は extended-s+d_{x²-y²} 的であり以前のダイマー近似を超えた弱結合的なアプローチと合致する。発表では各秩序相の発現機構について詳しく議論する。