

α -(BEDT-TTF)₂I₃ の電荷秩序相における 電子型強誘電分極に対する密度汎関数理論研究

松本祐樹 (AIST CD-FMat)、岩野薫 (KEK 物構研)、下位幸弘 (AIST CD-FMat)

分子性結晶 α -(BEDT-TTF)₂I₃ は π 電子系分子 BEDT-TTF による二次元伝導面を持ち、近年その低温電荷秩序相において電子自由度に起因した電子型強誘電性を示すことが報告された [1, 2]。我々は本物質の強誘電分極を、スピン分極と非分極の二つの電子状態について密度汎関数理論により研究した。

(1) スピン分極解では、実験で観測された誘電分極の方向をおおむね再現し、大きな電子移動積分を持つ BEDT-TTF 分子間方向と誘電分極の向きが対応することが示唆された [2]。

(2) スピン非分極解では、ブリルアンゾーン内の一軸方向に沿って計算した Berry 位相が特異な波数依存性を示すことを見出した (図 1)。この振る舞いは、反転対称性を持つ仮想的結晶構造 ($\lambda=0$) ではバンド分散にディラックコーンを持ち、gap の開いた現実の結晶構造 ($\lambda=1$) においてもその影響を及ぼしているためである [3]。

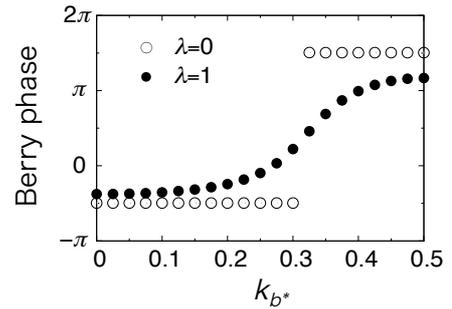


図 1: a^* 方向積分による Berry 位相のブリルアンゾーン内波数依存性 ($k_{c^*}=0$)

- [1] K. Yamamoto, et al., J. Phys. Soc. Jpn. 77, 074709 (2008).
- [2] H. Yamakawa, et al., Sci. Rep. 6, 20571 (2015).
- [3] Y. Matsumoto, K. Iwano, and Y. Shimoi, in preparation.