

有機トポロジカル物質のバンド構造と結晶構造の関係

(愛大院理工¹・E-USE²) ○船津 公輝¹・平本 朔良¹・岡 竜平¹・内藤 俊雄^{1,2}

Relationship between Band and Crystal Structures of Organic Topological Materials
(¹Graduate School of Science and Engineering, Ehime University, ²E-USE, Ehime University)

○Koki Funatsu,¹ Sakura Hiramoto,¹ Ryuhei Oka,¹ Toshio Naito^{1,2}

Recently, an increasing number of topological materials (=TMs) with Dirac cones (DCs) or Nodal lines (NLs) have been discovered in organic charge-transfer complexes^{1,2}. α -ET₂I₃ (ET: Fig. 1a) belongs to the TMs with anisotropic and tilted DCs, where pressure (P) suppresses the anisotropy and tilting angles³. The analogue compounds of α -ET₂I₃, α -STF₂I₃¹ (STF: Fig. 1b) and α' -STF₂IBr₂², also share such features of the TMs. The band structure of α -STF₂I₃ is characterized by DCs with small anisotropy (Fig. 1c)⁴, while that of α' -STF₂IBr₂ is close to NLs or tilted DCs with large anisotropy (Fig. 1d)². The temperature (T) dependence of resistivity of α' -STF₂IBr₂ at 2.0 GPa is close to that of α -STF₂I₃ at ambient pressure², which suggests that pressure transforms the band structures from NL- to DC-types. Systematic studies on the organic TMs would enable to delve into the Dirac fermion systems based on a unified P - T phase diagram.

Keywords : Organic Topological Materials; Charge Transfer; Band Structure; Anisotropy

有機分子性導体でも Dirac cone(DC)や Nodal line(NL)のような特殊なバンド構造を持つ物質(トポロジカル物質)が報告された^{1,2}。中でも α -ET₂I₃(ET: Fig. 1a)は異方性が大きく、円錐の軸が傾いた DC を持つ。この DC の傾きと異方性は圧力の印加で小さくなることが理論計算により報告された³。 α -ET₂I₃ と類似の結晶構造を持つ α -STF₂I₃¹ (STF: Fig. 1b)と α' -STF₂IBr₂²もトポロジカル物質に特徴的なバンド構造を持つ。 α -STF₂I₃は異方性が小さい DC (Fig. 1c)を持ち⁴、 α' -STF₂IBr₂は NL や傾いた DC のような異方性が大きいバンド構造 (Fig. 1d)を持つ²。また、 α' -STF₂IBr₂に 2.0 GPa の圧力を印加すると α -STF₂I₃に近い抵抗率の温度依存性を示す²。この変化から圧力の印加によりバンド構造が NL から DC に変化していることが示唆される。有機トポロジカル物質のバンド構造と結晶構造/電子物性を調べることで圧力-温度統一相図が得られ、Dirac 電子系の理解が深まると期待される。

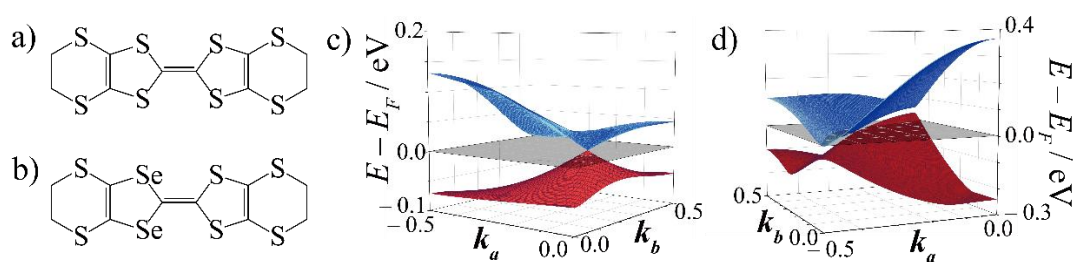


Fig. 1 Molecular structures of a) ET and b) STF. Band structures of c) α -STF₂I₃, d) α' -STF₂IBr₂.

- 1) R. Oka, *et al.*, *Magnetochemistry*, **2023**, 9, 153.
- 2) K. Funatsu, *et al.*, *Crystals*, **2023**, 13, 1606.
- 3) Y. Suzumura, *et al.*, *Crystals*, **2012**, 2, 266–283.
- 4) T. Naito, *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **2020** 89, 023701.