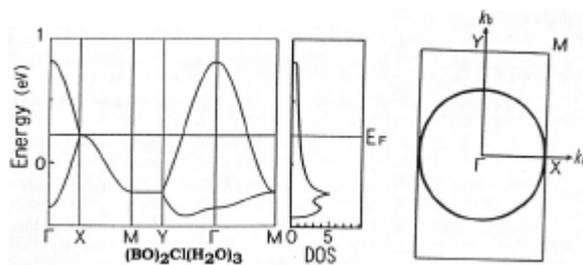
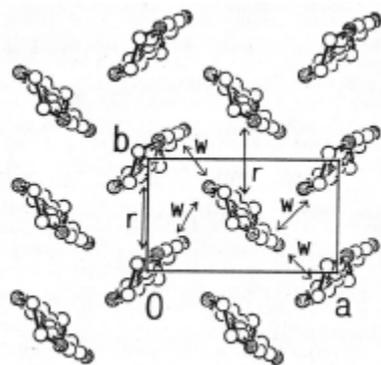
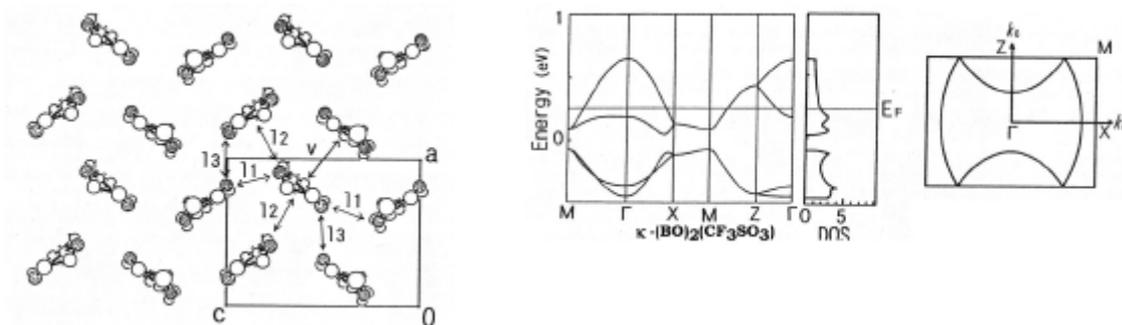


Cl-型

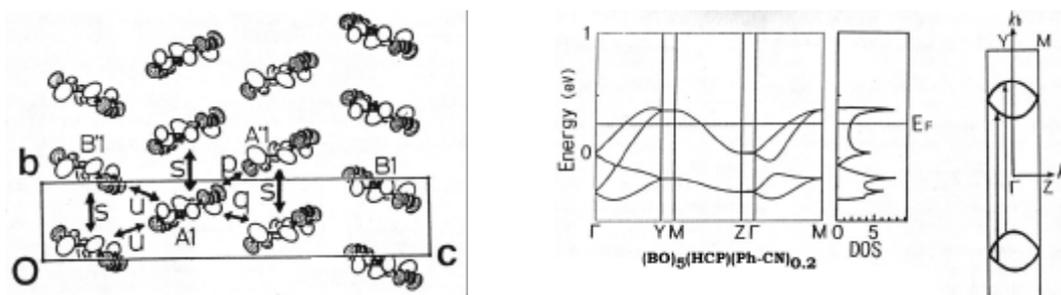


重なり積分は二種類のみ
Fermi 面は $BO^{0.5+}$ を仮定して描かれている

κ-型



HCP-型



Results of Band Calculations of BEDO-TTF Complexes of I₃, HCP, and Cl types

complex	type	intrastack				interstack						M(E _F)*	N _v * eV	S _{yz} /S _{yz} * (center)		
		s1	s2	s3	r	p1	p2	p3	q1	q2	q3				u	w
(BEDO-TTF) ₂ .I ₃	I ₃	5.5				15.2			-13.0					1.30	1.13	42(Y)
(BEDO-TTF) _{1.5} (CF ₃ SO ₃)(H ₂ O) ₂	I ₃	5.9				14.9			-13.3					1.26	1.13	40(Z)
(BEDO-TTF) ₂ Br(H ₂ O) ₂	I ₃	5.6				14.6			-13.4					1.30	1.12	50(Z)
(BEDO-TTF) ₂ (HCHA)	I ₃	6.6				14.9			-12.8					1.36	1.11	50(Z)
(BEDO-TTF) ₂ HCTM(PhCN) ₂	I ₃	-5.6	3.8	-3.7		-12.9	-13.2	-14.6	-15.6	14.4	9.8			1.36	1.10	25(B)
(BEDO-TTF) ₂ SQA(H ₂ O) ₂	I ₃	5.3	6.2			12.3			-13.5					1.46	1.03	8.0(X), 2.8(B), 5.1(Z)
(BEDO-TTF) ₂ Br(NaBr ₂ (H ₂ O) ₂)(H ₂ O)	I ₃	5.9	5.7			14.8	14.5	14.6	-13.7	-12.1				1.46	1.10	5.2(B)
(BEDO-TTF) ₂ ClO ₄	I ₃	5.9				14.1			-13.6					1.40	1.11	1.7(Z)
(BEDO-TTF) ₂ AuBr ₂	I ₃	-5.2				-14.6			-9.3	-14.4				1.30	1.07	
(BEDO-TTF) ₂ Cu ₂ (MCS) ₂	I ₃	5.3	-4.3			-13.2	-10.2		-10.0	12.6				1.46	0.92	50(Z)
(BEDO-TTF) ₂ ReO ₄ (H ₂ O)	I ₃	3.3	4.8			11.7	12.8		-13.3	-14.7				1.46	1.05	8.4(X), 6.5(B), 2.0(Z)
(BEDO-TTF) ₂ HCP(PhCN) ₂	HCP	5.6				-13.8			13.3			-7.8		1.93	0.73	
(BEDO-TTF) ₂ Cl(H ₂ O) ₂	Cl				-11.4								-14.6	1.20	1.22	50(Γ)

* Fermi-level DOS including spin degeneracy; units, states/(eV molecule of BEDO-TTF). * Total band width.
 * Area ratio (%) of closed Fermi surface to the Brillouin zone.

調査者注: 本表の N(ε_F)は、脚注にある通り、states/eV·molecule で示されている。他の文献では、states/eV·molecule·spin で表記されている事があり、その場合、この表の値に 1/2 をかけてから比較する必要がある。

拡張 Hückel 計算を行う際、用いるパラメーターを変えると、バンド構造が異なって見える事がある点に注意すべきである。下に文献 90 に記載された(BO)₂ReO₄(H₂O)のバンド計算結果を示す。この文献では、原子軌道として、H1s を single ζで、C2s, 2p, O2s, 2p, S3s, 3p 軌道(3d を含まない)を double ζで扱っている。上記の計算結果(I₃-型塩最後の図)と比較されたい。