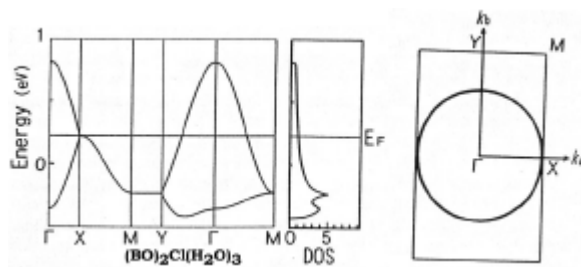
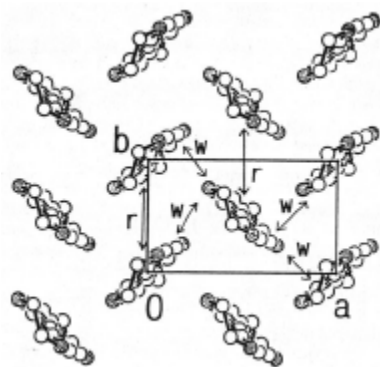
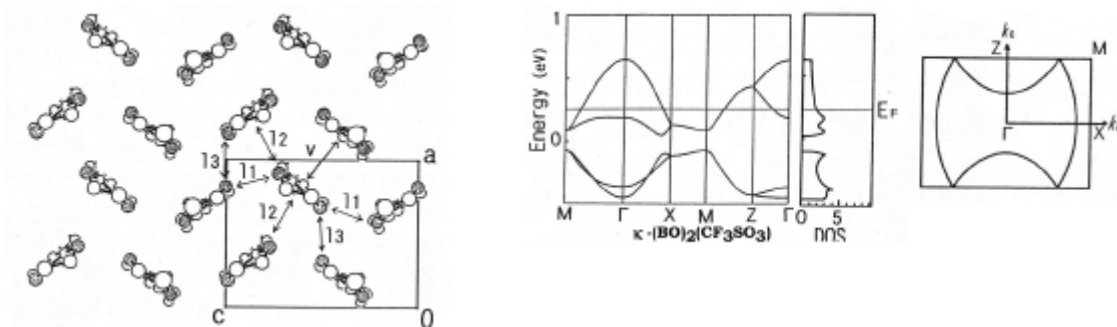


Cl-型

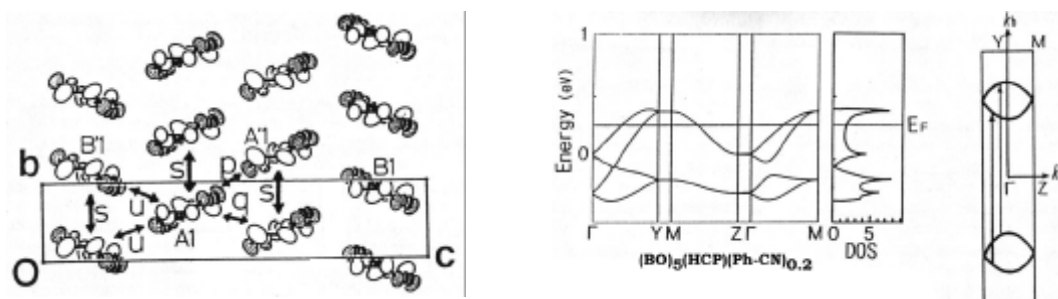


重なり積分は二種類のみ  
Fermi 面は  $BO^{0.5+}$  を仮定して描かれている

κ-型



HCP-型



Results of Band Calculations of BEDO-TTF Complexes of I<sub>3</sub>, HCP, and Cl types

| complex   | type           | intrastack |      |      |       | interstack |       |       |       |       | u   | w    | M(E <sub>F</sub> )* | N <sub>v</sub> * eV | S <sub>yz</sub> /S <sub>yz</sub> * (center) |                        |
|---|----------------|------------|------|------|-------|------------|-------|-------|-------|-------|-----|------|---------------------|---------------------|---|------------------------|
|   |                | s1         | s2   | s3   | r     | p1         | p2    | p3    | q1    | q2    |     |      |                     |                     |   | q3                     |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> .I <sub>3</sub>   | I <sub>3</sub> | 5.5        |      |      |       | 15.2       |       |       | -13.0 |       |     |      |                     | 1.30                | 1.13  | 42(Y)                  |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> .o(CF) <sub>3</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>                       | I <sub>3</sub> | 5.9        |      |      |       | 14.9       |       |       | -13.3 |       |     |      |                     | 1.26                | 1.13  | 40(Z)                  |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> .Br(H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>  | I <sub>3</sub> | 5.6        |      |      |       | 14.6       |       |       | -13.4 |       |     |      |                     | 1.30                | 1.12  | 50(Z)                  |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> (HCHA)  | I <sub>3</sub> | 6.6        |      |      |       | 14.9       |       |       | -12.8 |       |     |      |                     | 1.36                | 1.11  | 50(Z)                  |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> .HCTM(PhCN) <sub>2</sub>  | I <sub>3</sub> | -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) <sub>2</sub> .SQA(H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>                                       | I <sub>3</sub> | 5.3        | 6.2  |      |       | 12.3       |       |       | -13.5 |       |     |      |                     | 1.46                | 1.03  | 8.0(X), 2.8(B), 5.1(Z) |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> .Br[MeBr <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ](H <sub>2</sub> O) | I <sub>3</sub> | 5.9        | 5.7  |      |       | 14.8       | 14.5  | 14.6  | -13.7 | -12.1 |     |      |                     | 1.46                | 1.10  | 5.2(B)                 |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> .ClO  | I <sub>3</sub> | 5.9        |      |      |       | 14.1       |       |       | -13.6 |       |     |      |                     | 1.40                | 1.11  | 1.7(Z)                 |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> .AuBr <sub>2</sub>  | I <sub>3</sub> | -5.2       |      |      |       | -14.6      |       |       | -9.3  | -14.4 |     |      |                     | 1.30                | 1.07  |                        |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> .Cu <sub>2</sub> (MCS) <sub>2</sub>                                       | I <sub>3</sub> | 5.3        | -4.3 |      |       | -13.2      | -10.2 |       | -10.0 | 12.6  |     |      |                     | 1.46                | 0.92  | 50(Z)                  |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> .BeO <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)                                      | I <sub>3</sub> | 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) <sub>2</sub> .HCP(PhCN) <sub>2</sub>   | HCP            | 5.6        |      |      |       | -13.8      |       |       | 13.3  |       |     | -7.8 |                     | 1.93                | 0.73  |                        |
| (BEDO-TTF) <sub>2</sub> .Cl(H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>  | 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<sub>F</sub>)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)<sub>2</sub>ReO<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)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(I<sub>3</sub>-型塩最後の図)と比較されたい。