

別紙 4

報告番号	※ 甲 第 号
------	---------

主 論 文 の 要 旨

論文題目 Electron correlation and transport phenomena in organic Dirac electron systems α -(BEDT-TTF)₂I₃ and α -(BEDT-TSeF)₂I₃

(有機ディラック電子系 α -(BEDT-TTF)₂I₃および α -(BEDT-TSeF)₂I₃における電子相関と輸送現象)

氏 名 大木 大悟

論 文 内 容 の 要 旨

グラフェンや有機導体、ビスマスなどの多様な物質において、固体中で相対論的粒子と類似した性質を示す準粒子、ディラック電子が見出されている。ディラック電子系は後方散乱の消失など興味深い物性を示す。

本研究で着目する有機ディラック電子系 α -(BEDT-TTF)₂I₃ (α -(ET)₂I₃) と α -(BEDT-TSeF)₂I₃ (α -(BETS)₂I₃) では、電子間相互作用の値のエネルギースケールがバンド幅よりも比較的大きいことが知られており、電子相関効果が系の電子状態に重要な寄与を果たすことが示唆されている。両物質とも温度や圧力の減少により絶縁体化することや、絶縁体化に伴い特異な振舞いが生じることが報告されている。 α -(ET)₂I₃では横ストライプ電荷秩序相転移の近傍でゼーベック係数に特異な振舞いが観測されており、 α -(BETS)₂I₃では絶縁体化機構自体が未解明となっている。本研究ではこれらの解明を目的とした研究を行った。

初めに、静水圧下の α -(ET)₂I₃の横ストライプ電荷秩序相転移近傍で現れる、ゼーベック係数の非単調な温度依存性のメカニズムに関する研究結果を報告する。一般的なディラック電子系のゼーベック係数は温度比例した振舞いを示し、化学ポテンシャル μ と逆の符号を持つ。一方、 α -(ET)₂I₃のゼーベック係数は、ディラック電子相で $\mu < 0$ に起因した正の値を示すが、絶縁体化が生じる温度近傍で一度鋭いピークを形成してから符号反転を示す。このメカニズムの解明のため、本研究では、ディラック電子系のゼーベック係数が①化学ポテンシャルの符号に敏感であること、②不純物散乱の影響を強く受けること、③エネルギーバンドの持つ電子・正孔非対称性とキャリアドーピングに敏感であること、の3

点に着目し、中野-久保公式と半古典的論を用いた数値計算を行った。結果として、最近接クーロン相互作用によるバンドの電子-正孔非対称性の増強を考慮することで、ゼーベック係数の非単調な振舞いが説明できることが分かった。この結果は、横ストライプ電荷秩序相とディラック電子相の境界における緩和時間の変化が熱電効果に影響を及ぼすことを示している。

続いて、 α -(BETS)₂I₃の絶縁体化機構の正体の解明を目的とした研究結果を報告する。 α -(BETS)₂I₃はスピン軌道結合 (SOC) による 2 meV 程度の小さなギャップがバンド上に存在している。また、絶縁体化の前後で空間反転対称性は保たれているため、 α -(ET)₂I₃での電荷秩序化とは異なる絶縁体化が生じていると考えられる。本研究では、SOC を考慮した第一原理計算と Wannier フィットティングにより transfer 積分値を求め、遮蔽効果を考慮したクーロン相互作用を第一原理計算に基づいて導出した。構築したモデルを Hartree-Fock 近似で扱った結果として、絶縁体化前の小さなギャップが次近接クーロン相互作用の Fock 項の寄与により低温で増強され、実験の輸送係数の傾向を再現することが分かった。また、このギャップの増強はグラフェン等の他のディラック電子系で見出されている相互作用誘起の量子スピンホール状態が現れるメカニズムと密接に関係していることを見出した。

α -(ET)₂I₃と α -(BETS)₂I₃におけるこれらの研究結果により、ディラック電子系における電子相関効果により特異な電子状態が現れ、輸送現象にも影響することを示した。この結果は、電子間相互作用の強い他のディラック電子系にも応用できる可能性があ