

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 号
------	---------

氏 名 大木 大悟

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)

論文審査担当者

主 査 名古屋大学大学院理学研究科 准教授 博士 (理学) 小林 晃人
委 員 名古屋大学大学院理学研究科 教授 博士 (理学) 紺谷 浩
委 員 名古屋大学大学院理学研究科 教授 Ph.D. 岡本 祐幸
委 員 名古屋大学大学院理学研究科 教授 博士 (理学) 宮崎 州正
委 員 名古屋大学大学院理学研究科 准教授 博士 (理学) 小林 義明

論文審査の結果の要旨

別紙 1-2

固体中の伝導電子は、速さは光速の 1000 分の 1 程度だが、条件が揃うと光速より遅いにも関わらず実効的に相対論的量子力学に従うフェルミ粒子に類似した挙動を示し、ディラック電子と呼ばれる。このようなディラック電子系はグラフェンや電荷移動錯体など広範な物質で発見され、通常の金属とは異なり電子の移動度が極めて高いといった特性を有する。

ディラック電子系の中でも電子間相互作用が比較的強いことで知られる電荷移動錯体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ は、常圧で電荷秩序絶縁体であるが、圧力を加えるとディラック電子系に相転移する。これに伴い特異なゼーベック効果が観測されているが、そのメカニズムは解明されていない。また、類縁物質 α -(BEDT-TSeF)₂I₃ は、エネルギーギャップの小さいトポロジカル絶縁体と考えられてきたにもかかわらず、低温で電気抵抗の急激な増大が観測されている。しかし、その原因は解明されていない。本論文で申請者は、これらのメカニズムの解明を目的とする研究を行った。

初めに、申請者は、 α -(BEDT-TTF)₂I₃ の電荷秩序絶縁体相とディラック電子相間の相転移点近傍で観測されるゼーベック係数が非単調な温度依存性を示すメカニズムを調べた。 α -(BEDT-TTF)₂I₃ のゼーベック係数は、ディラック電子相で正值を示すが、温度低下とともに相転移点近傍で一度鋭いピークを形成してから符号反転する。本研究では第一原理計算に基づく拡張ハバード模型によりこの相転移を含む電子状態を記述した上で、ディラック電子系のゼーベック係数が化学ポテンシャル、不純物散乱、電子-正孔非対称性に敏感であることに着目し、中野-久保公式と半古典論を用いた理論研究を行った。その結果、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。

次に、申請者は、 α -(BEDT-TSeF)₂I₃ における低温の電子状態の解明を目的とする理論研究を行った。本研究では、第一原理計算に基づいて遮蔽効果を考慮した長距離クーロン斥力を含む拡張ハバード模型を構築した。このモデルをハートリーフォック近似で扱った結果、トポロジカル絶縁体であれば温度変化しないはずのエネルギーギャップが電子間相互作用の寄与により低温で急激に増大することが分かった。この影響を考慮して計算された直流電気伝導率は実験の傾向を再現することが分かった。また、このエネルギーギャップの増大の原因は量子スピンホール状態が出現する機構と密接に関係することを見出した。

これらの成果は、ディラック電子系における電子相関効果が、特異なゼーベック効果やスピン軌道結合によるエネルギーギャップの増大を引き起こすことを理論的に初めて示したものであり、高く評価される。また、参考論文は核磁気共鳴測定グループとの共同研究により実験結果の詳細な解析を行ったものや、電荷秩序相の理論解析などであり、いずれも価値あるものである。以上の理由により、申請者は博士（理学）の学位を与えられるに相応しいと認められる。