

別紙 1-1

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 川村 泰喜

論文題目 Theory of magnetism due to molecular orbital degree of freedom and electron correlation in organic conductors

(有機導体における分子軌道自由度と電子相関による磁性の理論)

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 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
委 員	名古屋大学大学院工学研究科	教授 理学博士	田仲 由喜夫

論文審査の結果の要旨

別紙 1 - 2

物質の多様性が生み出す新奇な物理現象を解明することは、物性物理学の重要な目標の 1 つである。有機導体は、単位胞内の同一分子が異なる結晶学的な位置を取ることに由来する分子軌道自由度や原子・分子置換の自由度を有し、バンド幅に対する電子間相互作用の比も比較的大きいため、これらが生み出す多様な物性を研究するプラットフォームとなっている。

最近、伝導バンドと価電子バンドが線状に縮退するディラックノーダルライン物質 $[\text{Ni}(\text{dmdt})_2]$ 、および二つの非等価な二量体を含有する有機導体 $(\text{EDO-TTF-I})_2\text{C}_{10}\text{I}_4$ において、磁気秩序に関連すると考えられる異常な物性が観測されているが、その原因は解明されていない。本論文では分子軌道自由度に着目し、これらのメカニズムの解明を目的とする研究を行った。

$[\text{Ni}(\text{dmdt})_2]$ は金属錯体 $\text{Ni}(\text{dmdt})_2$ から成る単一成分分子性導体である。本論文では第一原理計算に基づいて多軌道ハバードモデルのパラメータを評価し、この物質のフェルミエネルギー近傍の電子状態がフラグメント軌道を基底として記述されることを示した。次にこのモデルに乱雑位相近似を適用しスピン感受率を計算した。その結果、ディラックノーダルライン物質特有の波動関数とフェルミ面の性質のため、分子の端に偏った 2 つのフラグメント軌道のスピンの互いに逆を向こうとする分子内反強磁性揺らぎが低温で大きく発達することを見出した。さらに、核磁気共鳴のナイトシフトと核スピン格子緩和率を計算し、実験結果と矛盾しないことを示した。

また、 $(\text{EDO-TTF-I})_2\text{C}_{10}\text{I}_4$ は、低温で単位胞内に 4 つの EDO-TTF-I 分子を有し、これらが結晶学的に非等価な二つの二量体を形成する電荷移動錯体である。本論文では、第一原理計算に基づいて拡張ハバードモデルのパラメータを評価し、平均場近似と多変数変分モンテカルロ法を用いて基底状態を調べた。その結果、非等価な二量体が逆向きに磁化することにより、全磁化がゼロであるにもかかわらずブリルアンゾーン全域でバンドがスピン分裂する補償型フェリ磁性が、 $(\text{EDO-TTF-I})_2\text{C}_{10}\text{I}_4$ の基底状態の候補となり得ることを示した。また、この補償型フェリ磁性が発現するための最小限のパラメータのみを含む有効モデルを導出し、一般に非等価な二量体の磁化がスピン分裂に寄与すること、およびバンドが $3/4$ 充填の場合に全磁化がゼロになることを示した。

これらの成果は、有機導体における分子軌道自由度と電子相関が、補償型フェリ磁性体や分子内反強磁性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、参考論文は実験グループとの共同研究により単一成分分子性導体の実験結果の詳細な解析を行ったものや、ディラックノーダルライン物質の理論解析、平均場近似の大規模計算の計算手法に関する研究であり、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。