

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 5 月 23 日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2009～2011

課題番号：21740252

研究課題名（和文） 有機導体におけるディラック電子系の磁気抵抗理論

研究課題名（英文） Theory of Dirac fermion magnetoresistance in organic conductor

研究代表者

森成隆夫（MORINARI TAKAO）

京都大学・基礎物理学研究所・助教

研究者番号：70314284

研究成果の概要（和文）：現代社会を支える基礎技術を発展させていく上で、固体中の電子の基礎理論を拡充させていくことが不可欠である。本研究で対象とした有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ は、圧力下で電子が相対論的ディラック方程式として記述されるという著しい特徴を持つ。この系の磁場下での電気抵抗は特異な磁場・温度依存性を示すことが知られている。本研究ではこの系の特徴を取り入れた理論を構築し、磁気抵抗に現れる特異な物性の起源を解明した。

研究成果の概要（英文）：Fundamental research on electronic properties of various systems provides us the key for the development of modern technology. In this research project, we have studied an organic compound, α -(BEDT-TTF)₂I₃, where electrons obey the relativistic Dirac equation under pressure in spite of the fact that the velocity of electrons is much slower than the speed of light. We have formulated the theory describing the electronic transport properties of this system under magnetic field, and have explained anomalous temperature and magnetic field dependence of the resistivity.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	900,000	270,000	1,170,000
2010 年度	700,000	210,000	910,000
2011 年度	700,000	210,000	910,000
年度			
年度			
総計	2,300,000	690,000	2,990,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学，物性 II

キーワード：分子性固体・有機導体

1. 研究開始当初の背景
近年、固体中の電子の励起エネルギーがディ

ラック電子的な線形分散を持つ系が世界的に注目を集めている。これは、単層グラファ

イトすなわちグラフェンが作製可能になり、さらにディラック電子系特有の現象が実験的に確認されたことによる。ディラック電子系では、通常の電子と異なり、カイリティと呼ばれる新たな自由度が電子の運動を特徴づける。特に、伝導バンドと価電子バンド一点で接するディラック点近傍の電子は、カイリティに起因する効果によって散乱が著しく抑えられる。本研究で対象とした有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ は圧力下でディラック電子系となるが、純粋な2次元系であるグラフェンと異なり、バルクの系である。そのためグラフェンとは異なる実験手段が利用できる。また、ディラック電子系を安定化させる上で電子相関効果が重要な役割を演じると考えられており、この点についてもグラフェンにはない特長である。この系の磁場下での電気抵抗は、他の系にはみられない特異な磁場依存性、温度依存性を示し、その理論的解明が望まれていた。

2. 研究の目的

有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ で実現しているディラック電子系の電子状態を、磁場下での電気抵抗の振舞いから解析し、グラフェンと共通の現象とこの系特有の現象を峻別し、基礎理論を構築することを目的とした。この系はバルク物質であるため、面間磁気抵抗の測定が可能である。グラフェンは2次元物質であるため、面内磁気抵抗測定は可能だが、面間磁気抵抗は適用できない。これらふたつの磁気抵抗に、有機導体系の特徴がどのように現れるかを解明する必要があった。

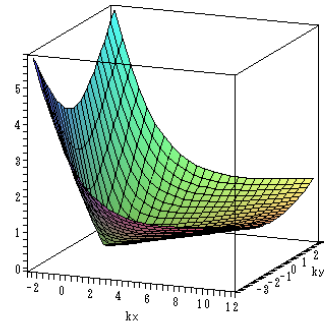
3. 研究の方法

磁場下での電気抵抗を計算する上で、磁場下での電子の波動関数を解析的に求める必要がある。通常の電子は磁場下でランダウ準位を形成し、エネルギー準位が離散化する。ディラック電子系でもランダウ準位が形成されるが、エネルギー準位構造が通常の電子と異なってくる。また、不純物散乱効果によってランダウ準位が幅をもつ。このランダウ準位が幅を持つ効果を取り入れて、電気抵抗を久保公式を用いて計算した。ランダウ準位の広がりについて、電子間相互作用効果の解析も行った。

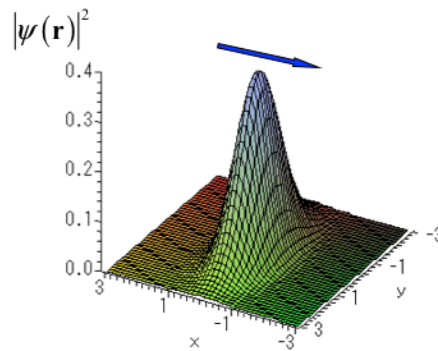
4. 研究成果

(1) ディラック電子のエネルギー分散は、円錐形をしており、ディラックコーンと呼ばれる。有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ のディラック電子は、エネルギー分散の形状が、次図のように傾いたディラックコーンで与えられ

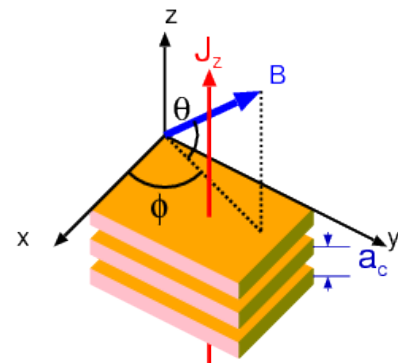
ると考えられている。



このディラックコーンの傾きの存在が、面間磁気抵抗を測定することで可能であることを示した。傾きが存在する場合、波動関数は次図に示すように実空間で異方的になる。

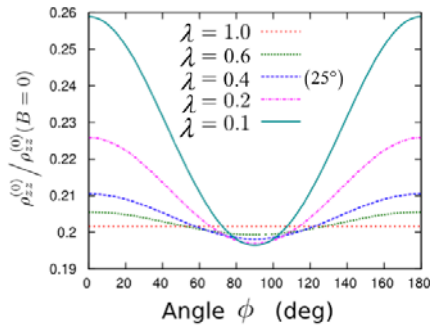


面間の伝導において、面に平行な磁場が存在していると、電子の波動関数は平行磁場の影響を受ける。古典的にはローレンツ力によって電子の軌道が曲げられる効果があるが、量子力学的効果が存在し、波動関数の位相が平行磁場の存在によって変調を受ける。ディラックコーンが傾いている場合には、後者の量子力学的効果が支配的となる。



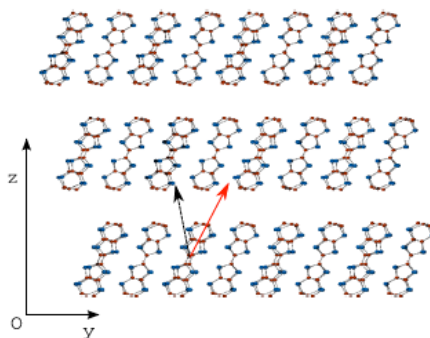
図で示したように、面間磁気抵抗を測定する

際に、面に平行な磁場を導入する。この面に平行な磁場の方向を変えると、ディラックコーンの傾きの存在を反映した、面間磁気抵抗の振動現象がおこる。



上の図に示したように、傾きのパラメータ λ が1のときは、ディラックコーンが全く傾いておらず、面間磁気抵抗（縦軸）の振動は起こらない。しかし、 λ を増加させていくと、磁場方向を回転したときに、面間磁気抵抗が振動する。傾きの存在の検証は、この系の特徴を確立するうえで非常に重要な位置づけであったが、本研究によって実験的検証の具体的方法が提案され、その後の実験によって確認されている。

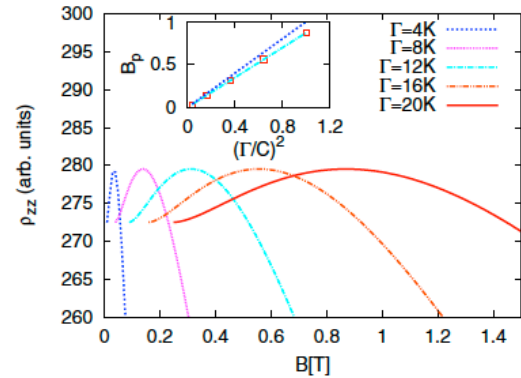
(2) 面間磁気抵抗がディラック電子のみで決まるとすると、面間磁気抵抗は負の磁気抵抗となる。磁場が比較的高磁場のときには負の磁気抵抗が実験的に確かめられていたが、低磁場で正の磁気抵抗が観測されていた。この問題について、面間のホッピング方向が垂直からずれる効果を取り入れることで、ランダウ準位間の混成が起こり、正の磁気抵抗領域が現れうることを示した。



上図に示すように BEDT-TTF 分子上の電子が上の層の BEDT-TTF 分子へとびうつるときに、赤で示した方向へとびうつる。この方向は垂直方向からずれている。このとき、波動関数が面内で移動するため、異なるランダウ

ウ準位波動関数が混成する。

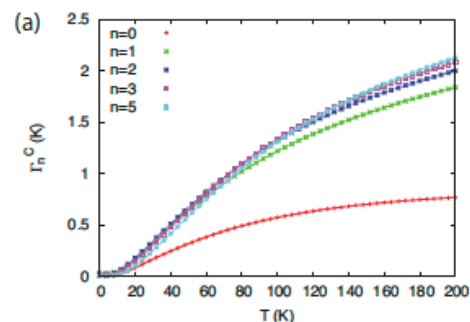
正の磁気抵抗から負の磁気抵抗へ変化する磁場の測定から、この系のディラック電子のエネルギー準位を決めるパラメータが求められることを示した。



上図に示したように、面間抵抗（縦軸）は、磁場を変化させたとき増加から現象へ転じる。磁場を増加させて抵抗が現象する振舞いはディラック電子系におけるエネルギーゼロのランダウ準位の存在による効果である。一方、磁場を増加させたときに抵抗が増大する低磁場での振舞いは、ディラック電子のランダウ準位を考慮するのみでは説明できない。上述のように面間のホッピング方向が垂直からずれることを考慮することで、ランダウ準位間の混成効果によって正の磁気抵抗領域が現れる。

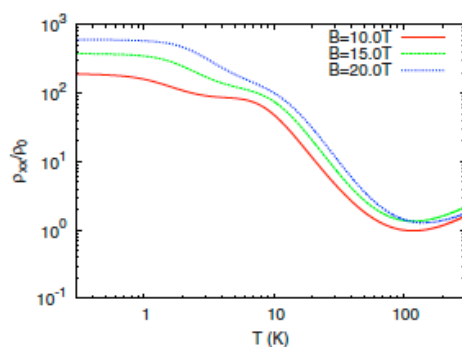
(3) 有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ の面内磁気抵抗における特異な温度依存性が、ディラック電子のランダウ準位構造を考慮することで理解できることを示した。また、電子間相互作用効果について自己エネルギーへの寄与を評価することで、電子相関効果となる温度領域を特定した。

下図は電子相関効果によるランダウ準位の広がりをも温度の関数として表示したものである。ゼロエネルギーのランダウ準位である $n=0$ の準位への電子相関効果は、他のランダウ準位と比較して抑制されていることがわかる。



このランダウ準位の広がりの効果を取り入れて久保公式によって、面内の抵抗を計算した。

磁場下での面内抵抗の温度依存性は下図のようになる。高温で、温度を増加させたときに抵抗が増大する振舞いは、電子相関効果によるものである。温度が 100K 以下では、電子相関効果は無視することができ、基本的にはランダウ準位構造によって温度依存性が説明できる。10K 以下で現れる平坦な領域はエネルギーゼロのランダウ準位と次のランダウ準位間のエネルギーギャップの存在によるものである。



(4) 圧力効果について平均場方程式を解析して、電荷密度状態の解析を行い、ディラック電子を特徴づけるパラメータの圧力依存性を決定した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6 件)

1. T. Himura, T. Morinari, and T. Tohyama, Pressure effects on Dirac fermions in α -(BEDT-TTF)₂I₃, J. Phys.: Condens. Matter 23 464202 (1-18) (2011). 査読有り. DOI:10.1088/0953-8984/23/46/464202

2. T. Morinari and T. Tohyama, Theory of inplane magnetoresistance in two-dimensional massless Dirac fermion system, Phys. Rev. B 82, 165117 (1-5) (2010). 査読有り. DOI:10.1103/PhysRevB.82.165117

3. T. Morinari and T. Tohyama, Crossover from Positive to Negative Interlayer Magnetoresistance in Multilayer Massless Dirac Fermion System with Non-Vertical

Interlayer Tunneling, J. Phys. Soc. Jpn. 79, 044708 (1-6) (2010). 査読有り. DOI: 10.1143/JPSJ.79.044708

4. T. Morinari, Dirac fermions in α -(BEDT-TTF)₂I₃: some topological properties, Physica B 405, S192-S194 (2010). 査読有り. DOI:10.1016/j.physb.2009.11.094

5. T. Himura, T. Morinari, and T. Tohyama, Pressure dependence of interlayer magnetoresistance in α -(BEDT-TTF)₂I₃, Physica B 405, S157-S159 (2010). 査読有り. DOI:10.1016/j.physb.2009.12.083

6. T. Morinari, T. Himura, and T. Tohyama, Interlayer magnetoresistance theory for layered Dirac fermion systems: Application to α -(BEDT-TTF)₂I₃, Physica E 42, 763-766 (2010). 査読有り. DOI:10.1016/j.physe.2009.11.071

[学会発表] (計 5 件)

1. T. Morinari, Magnetoresistance in organic Dirac fermion system, Workshop on Dirac Electron Systems 2011, National Institute for Materials Science, Jan. 19, 2011

2. 森成隆夫, α -(BEDT-TTF)₂I₃のDirac電子相における磁気抵抗理論, α -(ET)₂I₃のDirac電子相、電化不均化金属相、電荷秩序絶縁層に関する討論会, 東京大学, 2010年10月22日.

3. T. Morinari, Tilted Dirac Cone Effect on Interlayer Magnetoresistance in α -(BEDT-TTF)₂I₃, The 8th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets (ISCOM2009) Niseko, Hokkaido, September 12-17, 2009. □

4. T. Morinari, Theory for interlayer magnetoresistance in layered Dirac fermion systems: Application to α -(BEDT-TTF)₂I₃, The 18th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems Kobe International Conference Center, July 20, 2009. □

5. 森成隆夫, α -(BEDT-TTF)₂I₃ の面間輸送現象, 分子性導体における質量ゼロのディラック粒子とその新展開, 京都大学, 2009年7月2日.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

森成 隆夫 (MORINARI TAKAO)
京都大学・基礎物理学研究所・助教
研究者番号: 70314284

(2) 研究分担者

()
研究者番号:

(3) 連携研究者

()
研究者番号: