

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 5 月 27 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2010～2014

課題番号：22540366

研究課題名(和文) 分子性導体のディラック電子系の特性に由来する新物性の理論

研究課題名(英文) Theory on new properties of Dirac electron system in molecular conductor

研究代表者

小林 晃人 (Kobayashi, Akito)

名古屋大学・理学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：80335009

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：分子性導体のディラック電子系における特異な物性のメカニズムを解明すると共に、その結果を利用して物質開発をサポートすることを目的として理論研究を行った。具体的には電気抵抗やNMRで観測される異常物性のメカニズムの解明、および電荷秩序により質量を獲得するディラック電子の性質の解明を行った。さらに新規ディラック電子系の可能性を理論面から探索した。これらの成果により「固体中のディラック電子系」の物理の新しい側面を開拓し、より普遍的な理解に寄与した。

研究成果の概要(英文)：Mechanisms of anomalous properties observed in molecular Dirac electron system were studied theoretically, and possible mechanisms of anomalous temperature dependences in resistivity and NMR experiments were proposed. In addition, new Dirac electron systems were searched among molecular conductors, and several candidates were suggested. As a result, a new aspect in the solid state physics of Dirac electron system was developed.

研究分野：物性物理学

キーワード：分子性導体 ディラック電子系 傾斜ディラックコーン 分子自由度 電子間相互作用

### 1. 研究開始当初の背景

固体中を動く電子の速さは光速の数百分の1にすぎないが、電子の波動性と結晶の周期性により、その電子が光速あるいは光速に近い速さで動く相対論的粒子に類似した挙動を示す事がある。このような「固体中のディラック電子系」はグラフェン、ビスマス合金、HgTe 量子井戸、分子性導体  $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$  など多様な物質で見出されている。

分子性導体では異常な輸送現象が日本で発見され、研究代表者らによりディラック電子の存在が見出されたことを契機に急速に研究が進んだ。唯一の層状2次元ディラック電子系という特性を持つため、独自の方向性の発展が期待されている。

強磁場下において観測される特異な輸送現象のメカニズムは解明されていなかった。磁気抵抗やNMRの温度依存性は素朴なランダウ量子化とゼーマン効果だけでは説明できず、電子相関効果により何らかの秩序状態が出現している事が示唆された。

また、現在知られている4種類の分子性導体のディラック電子系では、いずれも常圧ではディラック電子は電荷秩序により質量を獲得している。この質量はバンドの縮退点に大きなギャップを形成し、ディラック電子の性質の観測を妨げている。仮にこの質量を大幅に抑制することができればディラック電子の性質を測定する手段が格段に増えると期待される。

### 2. 研究の目的

本研究では分子性導体のディラック電子系における特異な物性のメカニズムを解明すると共に、その結果を利用して物質開発をサポートすることを目的として理論研究を行った。具体的には強磁場下で観測される特異な輸送現象のメカニズムの解明、および電荷秩序により質量を獲得するディラック電子の性質の解明を遂行した。これにより「結晶中のディラック電子系」の物理の新しい側面を開拓し、より普遍的な理解に寄与することを目指した。

### 3. 研究の方法

量子統計力学に基づき、解析的な計算と数値計算を組み合わせた理論研究を行う。具体的には分子性導体  $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$  の伝導電子系を表す拡張ハバード模型に基づき電荷秩序相とディラック電子相を含む相図を解明する。ここで有限サイズ対角化によりエッジ状態も調べる。また、低エネルギー有効模型である傾斜ワイルハミルトニアンに基づいて長距離クーロン相互作用を取り入れ、光学応答、輸送現象、NMRのナイトシフトや $1/T1T$ などの物理量を計算する。

### 4. 研究成果

$N=0$  ランダウ状態におけるディラックコーンの傾斜による長距離クーロン相互作用の擬スピン対称性の破れを見出し、これによるXY型バレー分裂の可能性を指摘した。これは実際に分子性導体  $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$  において田嶋ら(2010)による層間磁気抵抗、鹿野田ら(2011)によるNMRにより観測された。また、傾斜したディラックコーンのペアをもつ2次元電子系において新たなプラズモンを見出し、さらにプラズモンのダンピングに非常に強い異方性があることを見出した(2011)。また  $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$  のストライプ電荷・磁気秩序相においてディラック電子が質量を獲得するメカニズムとその性質を解明した。特にゼロギャップ相との境界近くにおいて圧力を加えると質量を持ったディラック電子対が出現することを理論的に予測した(2011)。また、 $(\text{BEDT-TTF})_2\text{NH}_4\text{Hg}(\text{SCN})_4$  は常圧では金属(超伝導体)だが1軸圧を加えるとディラック電子によるゼロギャップ状態が出現することをバンド計算に基づいて予測した(2011)。

分子性導体における新規ディラック電子系の探索、バレーホール効果、クライン・トンネリング効果、および長距離クーロン相互作用効果に関する研究に着手し、学会等にて成果の一部を発表した(2012)。

異なる対称性の2つの軌道から成る分子2軌道模型のバンド構造とベリー曲率を調べた。その結果、この模型では時間反転対称点でない一般の運動量にディラック点が存在することを見出した(2013)。

拡張ハバード模型においてディラック電子相近傍の電荷秩序相においてヘリカルにバレー分裂したエッジ状態が存在することを見出した(2014)。これは実際に D. Liu et al. (2015)により観測された。またクーロン相互作用による電子・正孔対のエキシトン凝縮とそれに伴う揺らぎに着目し、分子性導体の傾斜したディラックコーンではバレー縮退が解けることを見出した。さらに面内磁場中ではバレー間エキシトニックSDW揺らぎが低温において増大することを見出し、実験で観測される $1/T1T$ の低温異常を説明し得るメカニズムを提案した(2014)。

### 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 18 件)

K. Kajita, Y. Nishio, N. Tajima, Y. Suzumura, and A. Kobayashi, Molecular Dirac Fermion Systems -Theoretical and Experimental Approaches-, J. Phys. Soc. Jpn. 83, 072002-1-31 (2014), Invited Review Papers, 査読有

<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.072002>

A. Kobayashi and Y. Suzumura, Effects of Zero Line and Ferrimagnetic Fluctuation on Nuclear Magnetic

Resonance for Dirac Electrons in Molecular Conductor  $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ , J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 054715-1-7, 査読有  
<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.054715>

Y. Suzumura and A. Kobayashi, Zero-Gap State in  $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$  under Hydrostatic Pressure, J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 044709-1-5, 査読有  
<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.044709>

Y. Suzumura and A. Kobayashi, Theory of Dirac Electrons in Organic Conductors Crystals 2012, 2(2), 266-283, 査読有  
doi:10.3390/cryst2020266

T. Nishine, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, New Plasmon and Filtering Effect in a Pair of Tilted-Dirac Cone, J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 114713, 査読有  
<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.80.114713>

Y. Suzumura and A. Kobayashi, Berry Curvature of the Dirac Particle in  $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ , J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 104701, 査読有  
<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.80.104701>

A. Kobayashi, Y. Suzumura, F. Piechon, and G. Montambaux, Emergence of Dirac electron pair in the charge-ordered state of the organic conductor  $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ , Phys. Rev. B 84, 075450 (2011), 査読有  
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.84.075450>

T. Choji, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Zero-Gap State in Organic Conductor,  $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{NH}_4\text{Hg}(\text{SCN})_4$ , J. Phys. Soc. Jpn. 80 (2011) 074712, 査読有  
<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.80.074712>

Y. Mizuno, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Role of charge fluctuation in Q1D organic superconductor  $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ , Physica C 471 (2011) 49-54, 査読有  
doi:10.1016/j.physc.2010.11.008

T. Nishine, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Tilted-Cone Induced Cusps and Nonmonotonic Structures in Dynamical Polarization Function of Massless Dirac Fermions, J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010) 114715, 査読有  
<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.79.114715>

H. Fukuyama, Y. Fuseya and A. Kobayashi, Transport Currents and Persistent Currents in Solids: Orbital Magnetism and Hall Effect of Dirac Electrons, Perspectives of Mesoscopic Physics - Dedicated to Yoseph Imry's 70th Birthday, (2010) 69-78, ed. by A. Aharony and O. E. Wohlmann, World Scientific, 査読有  
DOI: 10.1142/9789814299442\_0004

K. Miyahara, M. Tsuchiizu, and A. Kobayashi, A Possible Massless Dirac

Electron in Molecular Two-Orbital Model, JPS Conf. Proc. 3, 017011-1-6 (2014), 査読有

<http://dx.doi.org/10.7566/JPSCP.3.017011>  
Y. Omori, G. Matsuno, and A. Kobayashi, Edge States in Molecular Solid  $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ : Effects of Electron Correlations, JPS Conf. Proc. 1, 012119-1-6 (2014), 査読有

<http://dx.doi.org/10.7566/JPSCP.1.012119>  
H. Fukuyama, Y. Fuseya, M. Ogata, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Dirac electrons in solids, Physica B 407 (2012) 1943-1947, 査読有  
doi:10.1016/j.physb.2012.01.071

H. Fukuyama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Dirac Electrons in Molecular Solids, Journal of Physics: Conference Series 302 (2011) 012017, 査読有  
doi:10.1088/1742-6596/302/1/012017

C. Hotta and A. Kobayashi, Effect of interactions on Dirac points in organic solids, Physica B 405 (2010) S164-S167, 査読有  
doi:10.1016/j.physb.2010.02.027

小林晃人, 森成隆夫, 分子性導体のディラック電子系における新物性の理論、固体物理 Vol.49, No.4 pp.241-251 (2014)、査読無  
<http://www.agne.co.jp/kotaibutsuri/kota1049.htm>

小林晃人, 擬スピン強磁性とKT転移 (理論), 固体物理 Vol. 45 No. 11 (2010) 147-154、査読無  
<http://www.agne.co.jp/kotaibutsuri/kota1045.htm>

[学会発表](計 33 件)

G. Matsuno, A. Kobayashi and H. Kohno, Excitonic fluctuation in tilted Dirac electron system: A possible mechanism of low-temperature anomaly in  $\alpha$ -ET salts, IGER International Symposium 2015, Nagoya University, 2015年3月, poster

N. Norizuki, A. Kobayashi, and H. Kohno, Spin polarization induced by diamagnetic current in Rashba system, IGER International Symposium 2015, Nagoya University, 2015年3月, poster

法月直人, 小林晃人, 河野浩, 電流に対するスピン軌道相互作用の効果, 第70回年次大会 (2015年) 早稲田大学 早稲田キャンパス, 2015年3月, poster

松野元樹, 小林晃人, 河野浩, 分子自由度を有するディラック電子系における磁場中の電子相関効果, 第70回年次大会 (2015年) 早稲田大学 早稲田キャンパス 2015年3月, oral

G. Matsuno, A. Kobayashi and H. Kohno, Effects of long-range Coulomb interaction in two-dimensional massless

Dirac electron systems, International Workshop on Dirac Electrons in Solids, University of Tokyo, 2015年1月, poster

G. Matsuno, A. Kobayashi and H. Kohno, Excitonic mass generation in Honeycomb lattice, Nove Quantum States in Condensed Matter 2014 (NQS2014), Kyoto University, 2014年11月, poster

松野元樹、小林晃人、河野浩、二次元ディラック電子系における低温異常と長距離クーロン相互作用、日本物理学会 2014年秋季大会、中部大学春日井キャンパス、2014年9月, oral

G. Matsuno, A. Kobayashi and H. Kohno Excitonic mass generation in Dirac electron system in  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ , International School and Workshop on Electronic Crystals (ECRYS-2014), Cargèse, France, 2014年8月, poster

G. Matsuno, A. Kobayashi and H. Kohno, Excitonic mass generation in Dirac electron system in an organic conductor, The OIST International Workshop on Novel Quantum Materials and Phases (NQMP2014), 沖縄科学技術大学院大学, 2014年5月, poster

小林晃人、松野元樹、 $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ のディラック電子系におけるパレーホール効果、日本物理学会 2013年秋季大会徳島大学、2013年9月, oral

A. Kobayashi and T. Eguchi, Orbital Magnetism and Valley Hall Effect in Two-Dimensional Electron System with Tilted Dirac Cones, SCES '13, The University of Tokyo. 2013年8月, poster

Y. Omori, G. Matsuno, A. Kobayashi, Edge states in Molecular Solid  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ : Effects of Electron Correlations, The 12th Asia Pacific Physics Conference, Chiba, Japan, 2013年7月, poster

宮原和之、土射津昌久、小林晃人、分子二軌道系における新規ディラック電子の可能性とエッジ状態、固体中におけるディラック電子系物理の新展開、京都大学基礎物理学研究所、2013年6月 poster

松野元樹、津村卓弥、小林晃人、傾斜ディラックコーンをもつ2次元電子系におけるエッジ状態と束縛状態、およびクライン・トンネリング、固体中におけるディラック電子系物理の新展開 京都大学基礎物理学研究所、2013年6月, poster

K. Miyahara, M. Tsuchiizu, and A. Kobayashi, Possible Massless Dirac Electron in Molecular Two-Orbital Model, SCES'13 The University of Tokyo, 2013年8月, poster

G. Matsuno, T. Tsumura, and A. Kobayashi, Klein Tunneling and Bound

States on the Potential Barrier in Two-Dimensional Electron System with Tilted Dirac Cones, SCES'13, The University of Tokyo, 2013年8月, poster

宮原和之、小林晃人、分子性導体のディラック電子系における光誘起ギャップの効果、日本物理学会 2013年秋季大会 徳島大学、2013年9月, oral

松野元樹、小林晃人、 $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ のディラック電子系における電荷秩序と熱電効果、日本物理学会 2013年秋季大会、徳島大学、2013年9月, oral

宮原和之、小林晃人、ディラックコーンのマーキングと円偏光照射効果、「固体中のディラック電子」研究会、兵庫、2013年12月, poster

G. Matsuno, A. Kobayashi, Electron correlation effects in Dirac electron system in  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ , IGER International Symposium on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems 2014, Nagoya University, 2014年3月, poster

以下略

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕  
出願状況(計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：  
国内外の別：

取得状況(計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：  
取得年月日：  
国内外の別：

〔その他〕  
ホームページ等  
<http://www.slab.phys.nagoya-u.ac.jp/akitoto/>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

小林 晃人 (KOBAYASHI, Aki to)  
名古屋大学・大学院理学研究科・准教授  
研究者番号：80335009

(2)研究分担者

( )

研究者番号：

(3)連携研究者

鈴村 順三 (SUZUMURA, Yoshikazu)

名古屋大学・大学院理学研究科・名誉教授

研究者番号：90108449