

機関番号：13901
 研究種目：若手研究(B)
 研究期間：2007～2009
 課題番号：19740205
 研究課題名(和文) 分子性導体における質量ゼロのディラック粒子に対する電子相関効果の理論
 研究課題名(英文) Theory of electron correlation effect on massless Dirac particle in molecular conductor
 研究代表者
 小林 晃人 (KOBAYASHI AKITO)
 名古屋大学・高等研究院・特任講師
 研究者番号：80335009

研究成果の概要(和文)：本研究では分子性導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ のディラック・コーンにおいて磁場と電子相関を取り入れることで磁場中の特異な物性を理論的に解明した。具体的には、低温かつ強磁場中での長距離クーロン相互作用を取り扱うことを目的とした有効ハミルトニアンを提案した。これにより擬スピン XY 強磁性と KT 転移が起きる可能性を示した。

研究成果の概要(英文)：In the present study, anomalous properties in magnetic field was investigated theoretically treating the electron correlation effect in the Dirac cone of the molecular conductor α -(BEDT-TTF)₂I₃. It was predicted that symmetry breaking on Coulomb interaction induces the pseudo-spin XY ferromagnet and the KT transition.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,800,000	0	1,800,000
2008年度	600,000	180,000	780,000
2009年度	500,000	150,000	650,000
総計	2,900,000	330,000	3,230,000

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

分子性導体では組成や分子配列の違い、圧力による分子間の距離や角度の変化により多様な電子状態が出現す。 α -(BEDT-TTF)₂I₃ は初期に合成された擬2次元分子性導体の1つであり、圧力下における異常な輸送現象で知られている。常温から1Kまでの温度変化に対してキャリア密度が6桁減少するにも拘らず、電気抵抗はほとんど変化しないのであ

る。この現象は有機ナローギャップ半導体と名付けられ、同じ α 型に属するいくつかの物質でも観測されたが、その電子状態は未解明であった。さらに磁場中ではNMRの1/T₁Tの増大(スピン揺らぎの増大)や磁気抵抗における2段階構造が観測された]、これらのメカニズムも解明されていない。また1軸性圧力下では電荷秩序と共存する新奇な超伝導が観測されている。

我々はX線構造解析のデータに拡張ヒュッケル法を適用し見積もられた飛び移り積分パラメータに基づき、単位胞当たり 4 つの BEDT-TTF 分子サイトから成る拡張ハバードモデルを導入した。そしてその電子状態を平均場理論・RPA 等により理論的に解析した。その結果、我々は α -(BEDT-TTF)₂I₃ はフェルミエネルギー近傍において質量ゼロのディラック粒子（あるいはニュートリノ）と同様の円錐状の線形分散を持ち、圧力下で線形分散の交点にフェルミエネルギーが一致することにより系はゼロギャップ半導体となることを発見した。この円錐状の線形分散はディラック・コーンと呼ばれる。ディラック・コーンの物理は単原子層グラファイト（グラフェン）でも盛んに議論されているが、我々は分子性導体におけるディラック・コーンは3つの独自の性質、すなわち波数 \mathbf{K}_0 と $-\mathbf{K}_0$ のペアで存在し (\mathbf{K}_0 は圧力変化と共に変化)、電荷不均化と共存し、強い異方性を持つことを明らかにした。一方グラフェンのディラック・コーンは結晶の高い対称性によりブリルアンゾーンの対称点に存在し、単位胞当たり 2 サイトの系であるため電荷不均化とは共存不可能なことが数学的に証明される。こうして α -(BEDT-TTF)₂I₃ の電子状態を解明したことによりキャリア密度と電気抵抗の温度依存性を理解することができたが、磁場中の磁気抵抗測定等で観測される特異な物性のメカニズム、その示唆する非自明な電子状態は解明されていなかった。

2. 研究の目的

本研究では磁場中のディラック・コーンにおいて電子相関を取り入れることで磁場中の特異な物性を理論的に解明することを目指した。

3. 研究の方法

傾斜したディラック電子を記述する tilted Weyl Hamiltonian に基づき、強磁場下での電子状態を $N=0$ ランダウ準位の磁気格子のワニエ関数を用いて表し、長距離クーロン相互作用の効果を解析的手法、および数値計算により調べた。

4. 研究成果

本研究では低温かつ強磁場中での長距離クーロン相互作用を取り扱うことを目的とした有効ハミルトニアンを提案した。その特徴は $N=0$ ランダウ状態において単位胞に磁束量子 1 つを含む仮想的なワニエ関数を基底とする 2次元格子モデルであり、通常のスピンと Valley 擬スピンに関する拡張されたスピンモデルにマップできることである。さらにディラックコーンの傾斜により $N=0$ ランダウ状態における Valley 間散乱項が現れることを世界で初めて見出し、これにより擬スピン XY 強磁性と KT 転移が起きる可能性を指摘した。さらに、傾斜したディラックコーンにおける動的誘電関数や光学伝導率などの動的応答関数を解析的に計算した。その結果、傾斜したディラックコーンでは傾斜のない場合には存在しないカusp構造が動的応答関数に現れることを見出した。このように本研究ではディラックコーンの傾斜がホール効果、電子相関効果、動的応答などにおいて非自明な特性を生み出すことを明らかにしてきた。この結果は分子性導体以外で傾斜したディラックコーンが発見された場合にも応用が可能であり、広い意味でのディラック電子の固体物理の新しい側面の開拓に寄与するものと思われる。

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 14 件)

- ① 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. 査読有, 79 (2010) 114715.
- ② 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, 査読有, (2010) 69-78, ed. by A. Aharony and O. E. Wohlmann, World Scientific
- ③ A. Kobayashi, Y. Suzumura, H. Fukuyama, and M. O. Goerbig, Tilted-Cone-induced easy-plane pseudo-spin ferromagnet and Kosterlitz-Thouless transition in massless Dirac fermions, J. Phys. Soc. Jpn. 査読有, 78 (2009) 114711.
- ④ A. Kobayashi, S. Katayama, and Y. Suzumura, Theoretical study of the zero-gap organic conductor α -(BEDT-TTF)₂I₃, Sci. Technol. Adv. Mater. 査読有, 10 (2009) 024309.
- ⑤ S. Katayama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Electronic Properties Close to Dirac Cone in Two-Dimensional Organic Conductor α -(BEDT-TTF)₂I₃, Eur. Phys. J. B. 査読有, 67, (2009) 139-148.
- ⑥ A. Kobayashi, Y. Suzumura, and H. Fukuyama, Hall Effect and Orbital Diamagnetism in Zeropgap State of Molecular Conductor α -(BEDT-TTF)₂I₃, J. Phys. Soc. Jpn. 査読有, 77 (2008) 064718.
- ⑦ C. Hotta and A. Kobayashi,

- Effect of interactions on Dirac points in organic solids, Physica B, 査読有, 405 (2010) S164-S167.
- ⑧ A. Kobayashi, Y. Suzumura, and H. Fukuyama, Theory on Electronic Properties of Gapless States in Molecular Solids, α -(BEDT-TTF)₂I₃, Proceedings of the 9th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology - ISQM-TOKYO' 08, ed. by S. Ishioka and K. Fujikawa, World Scientific Publishing Co., Pte. Ltd., 査読有, (2009) 168.
 - ⑨ S. Katayama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Effect of anion potential on the zero-gap state in the two-dimensional organic conductor α -(BEDT-TTF)₂I₃, J. Phys.: Conf. Ser. 査読有, 132 (2008) 012003.
 - ⑩ A. Kobayashi, S. Komaba, S. Katayama, and Y. Suzumura, Exotic properties of zerogap state in α -(BEDT-TTF)₂I₃, J. Phys.: Conf. Ser. 査読有, 132 (2008) 012002.
 - ⑪ Y. Mizuno, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Role of charge fluctuation in Q1D organic superconductor (TMTSF)₂C₁₀, Physica C, 査読有, 471 (2011) 49-54.
 - ⑫ Y. Nonoyama, Y. Maekawa, A. Kobayashi, Y. Suzumura, and H. Ito, Mechanism of Superconductivity in Quasi-Two-Dimensional Organic Conductor β -(BDA-TTF) Salts, J. Phys. Soc. Jpn. 査読有, 77 (2008) 094703.
 - ⑬ A. Kobayashi, Y. Suzumura, M. Higa, R. Kondo, S. Kagoshima and H. Nishikawa, Charge ordered metal and pressure-induced superconductivity in two-dimensional

organic conductor beta''-(DODHT)2PF6, J. Phys.: Condens. Matter, 査読有, 20 (2008) 125205.

⑭ S. Katayama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Role of Interlayer Electron Hopping for Spin Density Wave State in the Zero-Gap Organic Conductor, J. Phys. Soc. Jpn. 査読有, 77 (2008) 014710.

[学会発表] (計 28 件)

国際会議招待講演

① A. Kobayashi, Y. Suzumura, H. Fukuyama, and M. O. Goerbig, Electron Correlation Effects on Massless Dirac Fermions under Strong Magnetic Field in Organic Conductor Alpha-(BEDT-TTF)2I3, ISCOM2009, Niseko Hokkaido, Japan, September 12-17, 2009

② A. Kobayashi, Y. Suzumura, and H. Fukuyama, Theory on Electronic Properties of Dirac Electrons in Organic Conductors, The International Symposium on Anomalous Quantum Materials 2008 (ISAQM2008) and the 7-th Asia-Pacific Workshop, Tokyo, Japan, November 7-10, 2008

③ A. Kobayashi, Y. Suzumura, and H. Fukuyama, Theory on Electronic Properties of Gapless States in Molecular Solids, α -(BEDT-TTF)2I3, The 9th International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology (ISQM-TOKYO' 08), Hitachi, Ltd. Hatoyama, Japan, August 25-28, 2008

国際会議発表

① T. Nishine, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Dielectric Properties in the Zero-Gap Organic Conductor alpha-(BEDT-TTF)2I3, International

Conference on Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM 2010), 7 / 2010, Kyoto, Japan, Poster

② A. Kobayashi, Y. Suzumura, F. Piechon, and G. Montambaux, Electron Correlation Effects on Massless Dirac Fermions in Organic Conductor Alpha-(BEDT-TTF)2I3, SCMC2009, Narita, Japan, September 18-19, 2009

③ Y. Mizuno, A. Kobayashi, and Y. Suzumura Superconducting State of Quasi-one-dimensional Conductors in a Magnetic Field, Int. Workshop on Organic Electronics and Spintronics 2010, Nagoya, Japan, March 8-9, 2010

④ A. Kobayashi, S. Katayama, Y. Suzumura, and H. Fukuyama, Exotic properties of zerogap state in α -(BEDT-TTF)2I3, International Symposium on Molecular Conductors 2008 (ISMC2008), Okazaki Conference Center, Institute for Molecular Science, July 23-25, 2008

⑤ Y. Nonoyama, Y. Maekawa, A. Kobayashi, Y. Suzumura, and J. Yamada, Possible mechanism to enhance spin-fluctuation-mediated superconductivity in two-dimensional organic conductor, International Symposium on Molecular Conductors 2008 (ISMC2008), Okazaki Conference Center, Institute for Molecular Science, July 23-25, 2008

⑥ S. Katayama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura, Effect of anion potential on the zero-gap state in the two-dimensional organic conductor alpha-(BEDT-TTF)2I3, International Symposium on Molecular Conductors 2008 (ISMC2008), Okazaki

Conference Center, Institute for Molecular Science, July 23-25, 2008

国内会議招待講演

① 小林晃人、鈴村順三、福山秀敏、Mark O. Goerbig, ディラックコーンの傾斜に起因する擬スピン強磁性と KT 転移, 物性研究所短期研究会「ディラック電子系の物性 - グラフェンおよび関連物質の最近の研究」, 東京大学物性研究所、2009 年 10 月 22-24 日

国内会議発表

① 小林晃人、鈴村順三、J. -N. Fuchs, G. Montambaux, F. Piechon, α -(BEDT-TTF)2I3 の電荷秩序相におけるディラック電子対の Merging、日本物理学会 2010 年秋季大会、大阪府立大学、25aRB-11、2010 年 9 月 25 日

② 鈴村順三、小林晃人、J. -N. Fuchs, G. Montambaux, F. Piechon, α -(BEDT-TTF)2I3 のゼロギャップ状態近傍のディラック電子のベリー曲率、日本物理学会 2010 年秋季大会、大阪府立大学、25aRB-12、2010 年 9 月 25 日

③ 小林晃人、鈴村順三、J. -N. Fuchs, G. Montambaux, F. Piechon, α -(BEDT-TTF)2I3 の電荷秩序相におけるディラック電子対、日本物理学会第 66 回年次大会、新潟大学、25pTA13、2011 年 3 月 25 日

④ 鈴村順三、小林晃人、 α 型分子性導体における静水圧下でのディラック電子、日本物理学会第 66 回年次大会、新潟大学、25pTA14、2011 年 3 月 25 日

⑤ 丁子丈士、小林晃人、鈴村順三、 α -(BEDT-TTF)2NH4Hg(SCN)4 のベリー曲率とディラック電子、日本物理学会第 66 回年次大会、新潟大学、25pTA15、2011 年 3 月 25 日

⑥ 小林晃人、鈴村順三、福山秀敏、Mark O. Goerbig, α -(BEDT-TTF)2I3 における擬スピ

ン強磁性と KT 転移、基研研究会「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」、京都大学基礎物理学研究所、2009 年 7 月 2-3 日

⑦ 鈴村順三、片山新也、小林晃人、コメント： α -(BEDT-TTF)2I3 のゼロギャップ状態、基研研究会「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」、京都大学基礎物理学研究所、2009 年 7 月 2-3 日

⑧ 小林晃人、鈴村順三、福山秀敏、Mark O. Goerbig, α -(BEDT-TTF)2I3 のゼロギャップ状態における擬スピン強磁性と KT 転移、日本物理学会 2009 年秋季大会、熊本大学 25aYC-3 2009 年 9 月 25 日

⑨ 小林晃人、鈴村順三、福山秀敏、Mark O. Goerbig, α -(BEDT-TTF)2I3 のゼロギャップ状態における擬スピン強磁性と KT 転移、日本物理学会 2009 年秋季大会、熊本大学 25aYC-3 2009 年 9 月 25 日

⑩ 水野佑亮、小林晃人、鈴村順三、擬 1 次元磁場誘起超伝導体における軌道効果、日本物理学会 2009 年秋季大会、熊本大学 27pYC-5 2009 年 9 月 27 日

⑪ 小林晃人、鈴村順三、福山秀敏、 α -(BEDT-TTF)2I3 のゼロギャップ状態における磁場中での電子相関効果、日本物理学会 2008 年秋季大会、岩手大学 22aTC5、2008 年 9 月 22 日

⑫ 水野佑亮、小林晃人、鈴村順三、TMTSF 塩の超伝導状態における Flude-Ferrell 相、日本物理学会 2008 年秋季大会、岩手大学 21pTC12、2008 年 9 月 21 日

⑬ 片山新也、小林晃人、鈴村順三、ET 塩におけるゼロギャップ状態のフェルミ点近傍でのふるまい、日本物理学会 2008 年秋季大会、岩手大学 22aTC3、2008 年 9 月 22 日

⑭ 西根達郎、小林晃人、鈴村順三、 α -(BEDT-TTF)2I3 のゼロギャップ状態にお

るスクリーニング効果、日本物理学会 2008 年秋季大会、岩手大学 22aTC4、2008 年 9 月 22 日

⑮清水康弘、小林晃人、伊藤正行、山本浩史、鷹野芳樹、高橋利宏、 α -(ET)2I3 の高圧下 13C-NMR、日本物理学会 2008 年秋季大会、岩手大学 22aTC9、2008 年 9 月 22 日

⑯水野佑亮、小林晃人、鈴木順三、擬 1 次元有機導体 (TMTSF)2ClO4 におけるトリプレット超伝導、日本物理学会第 6 4 回年次大会、立教大学 28pYF-41、2009 年 3 月 28 日

⑰西根達郎、小林晃人、鈴木順三、 α -(BEDT-TTF)2I3 のゼロギャップ状態における動的誘電応答—Dirac コーンの傾きの効果、日本物理学会第 6 4 回年次大会、立教大学 29pYF-10、2009 年 3 月 29 日

⑱小林晃人、鈴木順三、福山秀敏、 α -(BEDT-TTF)2I3 のゼロギャップ状態における磁場下での電子間斥力の効果、日本物理学会第 6 4 回年次大会、立教大学 29pYF-11、2009 年 3 月 29 日

[図書] (計 1 件)

①小林晃人、電荷秩序下での超伝導、ゼロギャップ状態、超伝導ハンドブック (福山秀敏、秋光純 (編)、朝倉書店)、部分執筆、p. 44-48

[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：
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 AKITO)

研究者番号：80335009

(2) 研究分担者 なし
()

研究者番号：

(3) 連携研究者 なし
()

研究者番号：