

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 8 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(A)

研究期間：2012～2014

課題番号：24244053

研究課題名(和文) 固体中のディラック電子

研究課題名(英文) Dirac electrons in solids

研究代表者

小形 正男 (Ogata, Masao)

東京大学・理学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：60185501

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 35,800,000円

研究成果の概要(和文)：ディラック電子系の内、バルク測定が可能な物質について理論的な研究を行い、ディラック電子系に普遍的な性質を探求することを目的とした。

(1)ディラック電子系の出現条件等に関しては、有機伝導体 $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ および新しい物質 Ca_3PbO 等について、(2)ディラック電子系の内部自由度の問題に関しては、有機伝導体の単位胞内の4分子の内部自由度、面間やディラックコーンの傾きの自由度、鉄系高温超伝導体の反強磁性金属状態などについて、(3)スピン軌道相互作用の効果等に関しては、ビスマスのスピンホール効果、界面のRashba型、トポロジカル絶縁体の表面強磁性、skyrmion格子状態などを調べた。

研究成果の概要(英文)：We theoretically studied Dirac electron systems in solids where bulk measurements are possible, and planned to explore the universal properties of Dirac electron systems. (1) About the emergence and stability conditions of Dirac electron systems, we studied $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ and new Dirac systems such as Ca_3PbO . (2) About the internal degrees of freedom of Dirac electron systems, we studied the degrees of freedom of 4 molecules in a unit cell of $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$, interlayer transport properties, the effects of tilting of Dirac cone, and antiferromagnetic metal states in iron-pnictide superconductors. (3) About the effects of spin-orbit interaction, we studied spin Hall effects in Bismuth, Rashba interaction on surfaces, ferromagnetism in the surface states of topological insulators, and skyrmion lattice states.

研究分野：物性理論

キーワード：ディラック電子 ビスマス 有機伝導体

1. 研究開始当初の背景

ディラック電子系とは、エネルギー分散関係が $E(k) = \pm (v^2 + v^2 k^2)^{1/2}$ と近似でき、ギャップが小さく、広い領域にわたって波数 k にほぼ比例する分散関係を持つ電子系である。とくに $v=0$ の場合には、 $E(k) = \pm vk$ となる。

このようなディラック電子系は、炭素原子が2次元蜂の巣格子をなすグラフェンやトポロジカル絶縁体の表面状態として最近精力的に研究が進められている。これまでの研究では分散関係による特異な性質等が議論されている。しかしグラフェンは完全に2次元の系であり、トポロジカル絶縁体では表面状態のみにディラック電子が実現しているので、これらの系においてはバルクの測定が可能ではないという難点がある。

一方、他の物質系でもディラック電子系が見つかっている。ある種の有機伝導体[1]、単体ビスマス(Bi)[2]、鉄系超伝導体のフェルミ面の内側[3]、新しい Ca_3PbO の系[4] などである。これら4つの系は擬2次元系(有機伝導体、鉄系)または3次元系(Bi, Ca_3PbO)であり、グラフェンと異なりバルク測定が可能である。さらに上記のような物質の多様性があるために、ディラック電子系として普遍的に現れる性質と、個別な性質とを明確に区別して議論することができるというメリットがある。バルク測定の進展にともない、今後急速な発展が見込まれる分野である。

[1] S. Katayama et al., J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 054705 (2006). A. Kobayashi et al, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 034711 (2007).

[2] Y. Fuseya et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 066601 (2009).

[3] T. Morinari et al., Phys. Rev. Lett. **105**, 037203 (2010), JPSJ **78**, 023704 (2009).

[4] T. Kariyado and M. Ogata, J. Phys. Soc. Japan **80**, 083704 (2009).

[5] P. Richard et al., Phys. Rev. Lett. **104**, 137001 (2010).

2. 研究の目的

以下の3点に絞って研究目的とした。

- (1) ディラック電子系が出現する相転移、出現条件・安定化の条件
- (2) ディラック電子系の内部自由度の問題
- (3) スピン軌道相互作用の効果、磁場効果、スピンと電荷の相関効果

3. 研究の方法

本科研費研究計画では、さまざまな系で実現するディラック電子系について理論家から構成される研究組織を立ち上げ、定期的に意見交換・アイデアや成果の交換をおこなうこととした。

研究計画ではグラフェンでは起こらないような点に絞って計画を立てたが、それでも多岐にわたる現象が対象となる。しかしこれら研究目的は相互に密接に関連しているので、各分担者が一体となって効果的に研究を遂行できる。また実験家との相互作用、実験からのフィードバック、グラフェン分野・トポロジカル絶縁体分野の研究者との議論も意識的に行う。途中で臨機応変に分担者間の共同研究、実験研究者との共同研究を進めていく。

4. 研究成果

- (1) ディラック電子系が出現する相転移、出現条件・安定化の条件に関して

有機伝導体について、ディラック点をハミルトニアンを直接対角化を用いず得る計算手法を開発し、加圧によりディラック点がブリュアンゾーン内を動く様子を調べ、ディラック点の対が、時間反転対称点(TRIM)で生成及び消滅する様子を具体的に示した。

有機伝導体 $(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ の単位胞中には4分子(A, A', B, C)があるが、そのう

ちの A と A'の間には空間反転対称がある。4つの TRIM における波動関数は、この反転に対する偶奇性を持つことを見出し、この性質を用いてディラック点が存在する条件を明らかにした。

有機導体で重要な役割を演じるサイト間のクーロン相互作用を平均場近似で解析し、交換相互作用効果から生じるホッピングパラメータのくりこみ効果によるディラック電子の安定化機構を提案した。

有機導体において新たなディラック電子系の可能性を探索するため、分子 2 軌道系におけるディラック電子の発現条件を調べ、異なる対称性を有する 2 軌道の内部自由度によりディラック電子が発現し得ることを理論的に示した。

立方晶逆ペロブスカイト物質 Ca_3PbO (及びその関連物質) に対するタイトバインディングモデルを用いて表面状態の研究を行った。

Ca_3PbO の関連物質である Ba_3SnO に対しても、第一原理計算に基づく電子状態の詳細な解析を行った。

(2) ディラック電子系の内部自由度の問題

有機伝導体 $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ において、サイト表示 RPA を用いて高温におけるスピン揺らぎを解析した。その結果、ナイトシフトにおける極大の有無は、新たに見出された波動関数のノードに由来することがわかった。

NMR の $1/T_1T$ に関してエキシトニック揺らぎが単位胞内の 4 分子の内部自由度を通して局所スピン感受率の増大に寄与し得る事を示した。

$-(\text{BEDT-TTF})_2\text{I}_3$ における不純物効果として、欠陥誘起ゼロエネルギー局在状態を調べた。その結果、単位胞子中の A サイトに欠陥が存在するとき、局在状態がゼロエネルギーに現れることを見出した。

面間磁気抵抗でのスピン反転効果について、層間のクーロン相互作用に着目した解析を行った。

グラフェンと比べて有機ディラック電子系ではディラックコーンが傾斜しているという顕著な特徴がある。この効果について、電気伝導度・光学電気伝導度・磁気抵抗について調べた。

ディラック電子が出現する鉄系高温超伝導体に関して、反強磁性金属状態での電気抵抗の面内異方性や、反強磁性金属相の近傍での超伝導との共存相を調べた。

(3) スピン軌道相互作用の効果、磁場効果、スピンと電荷の相関効果

スピン軌道相互作用に起因するディラック電子系におけるスピンホール効果をビスマスを念頭に調べた。

界面で発生する強い Rashba 型スピン軌道相互作用が、磁性と電気伝導特性に与える効果を解析した。

トポロジカル絶縁体の表面状態を強磁性にした系を念頭において、2次元ディラック強磁性体における電流と磁化の相互作用を微視的に調べた。また強磁性体モデルを提案し、輸送係数を調べた。

ヘリカル磁性体での skyrmion 格子状態を 3 つの helix 構造の重ね合わせとして記述して解析した。

スピン軌道相互作用が大きな場合の 5d 電子系間の超交換相互作用を微視的に導出する方法を定式化した。

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 45 件)

(1) Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama, "Transport Properties and Diamagnetism of Dirac Electrons in Bismuth" [Invited review paper], J. Phys. Soc. Jpn. 84, 012001-1-22 (2015). 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.84.012001>

- (2) Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama,
 “Spin-Hall Effect and Diamagnetism of Anisotropic Dirac Electrons in Solids”, J. Phys. Soc. Jpn. 83, 074702-1-11 (2014). 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.074702>
- (3) T. Morinari and Y. Suzumura,
 “On the Possible Zero-gap State in Organic Conductor -(BEDT-TSF)2I3 Under Pressure” J. Phys. Soc. Jpn. 査読有 83 巻 2014 年 094701-1-5. DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.094701>
- (4) 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). 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.072002>
- (5) Y. Suzumura, I. Proskurin and M. Ogata,
 “Dynamical Conductivity of Dirac Electrons in Organic Conductors” J. Phys. Soc. Jpn. 査読有 83 2014 年 094705 1-9 DOI: <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.094705>
- (6) K. Kubo and T. Morinari,
 “Effect of Interlayer Spin-Flip Tunneling for Interlayer Magnetoresistance in Multilayer Massless Dirac Fermion Systems” J. Phys. Soc. Jpn. 83, 083701-1-4 (2014). 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.083701>
- (7) H. Matsuura and M. Ogata,
 J. Phys. Soc. Jpn. 83, 063701 1-4 (2014)
 “A Poorman’s Derivation of of Quantum Compass-Heisenberg Interaction: Superexchange Interaction in J-J Coupling Scheme” 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.063701>
- (8) Y. Fujimoto, K. Miyake and H. Matsuura,
 J. Phys. Soc. Jpn. 84, 043702 1-5 (2015)
 “Deformation of the Fermi Surface and Anomalous Mass Renormalization by Critical Spin Fluctuations through Asymmetric Spin-Orbit Interaction” 査読有 DOI: <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.84.043702>
- (9) Y. Matsui, T. Morinari, and T. Tohyama
 “Coexistence of Antiferromagnetism and Superconductivity in Iron-Based Superconductors” J. Phys. Soc. Jpn. 83, 094703-1-5 (2014). 査読有 <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.094703>
- (10) K. Sugimoto, P. Prelovsek, E. Kaneshita, and T. Tohyama
 “Memory function approach to in-plane anisotropic resistivity in the antiferromagnetic phase of iron arsenide superconductors” Phys. Rev. B 90, 125157 (1-6) (2014). 査読有 <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.90.125157>
- (11) A. Sakai, H. Kohno,
 “Spin torques and charge transport on the surface of topological insulator” Phys. Rev. B 89 (16), 165307 1-21 査読有 <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.165307>
- (12) J. Fujimoto, H. Kohno,
 “Transport properties of Dirac ferromagnet” Phys. Rev. B 90 (21), 214418 1-15 査読有 <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.90.214418>
- (13) G. Tatara and H. Fukuyama,
 “Phasons and Excitations in Skyrmion Lattice” J. Phys. Soc. Japan, 83, 104711-1-15 (2014). 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.094701>
- (14) H. Saarikoski, H. Kohno, C. H. Marrows, G. Tatara
 “Current-driven dynamics of coupled domain walls in a synthetic antiferromagnet” Physical Review B, 90, 094411-1-8 (2014). 査読有 <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.90.094411>
- (15) H. Kawaguchi and G. Tatara
 “Coupling Theory of Emergent Spin Electromagnetic Field and Electromagnetic Field” J. Phys. Soc. Jpn. 83, 074710-1-6 (2014). 査読有 DOI: <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.074710>
- (16) A. Kobayashi and Y. Suzumura,
 “Effects of Zero-line and Ferrimagnetic Fluctuation on Nuclear Magnetic Resonance for Dirac Electrons in Molecular Conductor -(BEDT-TTF)2I3” J. Phys. Soc. Jpn. 査読有, 82 (2013) 054715(1-7). DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.054715>
- (17) Y. Suzumura and A. Kobayashi:
 “Zero-gap State in -(BEDT-TTF)2I3 under Hydrostatic Pressure” J. Phys. Soc. Jpn. 査読有, 82 (2013) 044709 (1-5). DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.044709>
- (18) T. Morinari and Y. Suzumura,
 “Algebraic structure of Dirac fermion state in -(BEDT-TTF)2I3” J. Phys. Soc. Jpn. 査読有 82 (2013) 055002(1-2). DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.055002>

[tp://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.055002](http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.055002)

(19) F. Piechon and Y. Suzumura,
“Inversion Symmetry and Wave-Function-Nodal-Lines of Dirac Electrons in Organic Conductor -(BEDT-TTF)₂I₃” J. Phys. Soc. Jpn. 査読有, 82 (2013) 123703 (1-4). DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.123703>

(20) Y. Suzumura, I. Proskurin and M. Ogata
“Effect of Tilting on the In-plane Conductivity of Dirac Electrons in Organic Conductor” J. Phys. Soc. Jpn. 査読有, 83 (2014) 023701 (1-4). DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.023701>

(21) I. Proskurin and M. Ogata
“Thermoelectric transport coefficients for massless Dirac electrons in quantum Limit” Phys. Soc. Jpn. 査読有, 82 (2013) 063712 (1-4) DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.063712>

(22) K. Kubo and T. Morinari,
“Spin Ordered States in Multilayer Massless Dirac Fermion Systems” J. Phys. Soc. Jpn. 83, 033702-1-4 (2014). 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.033702>

(23) K. Sasaki and T. Morinari,
“Dirac Fermion State with Real Space -Flux on Anisotropic Square Lattice and Triangular Lattice” J. Phys. Soc. Jpn. 83, 034712-1-4 (2014). 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.034712>

(24) K. Sugimoto, T. Tohyama, E. Kaneshita and K. Tsutsui
“Optical conductivity of antiferromagnetic metallic chromium: Mean-field calculation for the multi-orbital Hubbard model” 査読有 J. Korean Phys. Soc. 63, 632-635 (2013).

(25) H. Matsuura and K. Miyake:
“Effect of Spin-Orbit Interaction on (4d)³- and (5d)³-Based Oxides” J. Phys. Soc. Jpn. 82, 063709-1-4 (2013). 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.063709>

(26) N. Nakabayashi and G. Tatara:
“Rashba-induced spin electromagnetic fields in a strong sd coupling region” New J. Phys. 16, 015016-1-18 (2014). 査読有 doi:10.1088/1367-2630/16/1/015016

(27) G. Tatara and N. Nakabayashi

“Emergent spin electromagnetism induced by magnetization textures in the presence of spin-orbit interaction” (invited) J. Appl. Phys. 115, 172609-1-6 (2014). 査読有 <http://dx.doi.org/10.1063/1.4870919>

(28) K. Taguchi and G. Tatara:
“Inverse faraday effect driven by spin chirality in weak ferromagnets” 査読有 J. of Korean Phys. Soc., 62, 1759-1762 (2013).

(29) K.-J. Kim, R. Hiramatsu, T. Koyama, K. Ueda, Y. Yoshimura, D. Chiba, K. Kobayashi, Y. Nakatani, S. Fukami, M. Yamanouchi, H. Ohno, H. Kohno, G. Tatara, T. Ono “Two-barrier stability that allows low-power operation in current-induced domain-wall motion” 査読有 Nat. Commun. 4, 2011- 1-6 (2013). doi:10.1038/ncomms3011

(30) G. Tatara, Hiroaki T. Ueda, K. Taguchi, Y. Sasaki, M. Nishijima and A. Takeuchi
“Proposal for an active electromagnetic metamaterial based on spin-torque oscillators” Phys. Rev. B, 87, 査読有 155102-1-8(2013). DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.87.155102>

(31) G. Tatara, N. Nakabayashi and K.-J. Lee “Spin motive force induced by Rashba interaction in the strong sd coupling regime” Phys. Rev. B 87 054403-1-9 (2013). 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.87.054403>

(32) J. Fujimoto, A. Sakai and H. Kohno
“Ultraviolet divergence and Ward-Takahashi identity in a two-dimensional Dirac electron system with short-range impurities” Phys. Rev. B 87, 085437-1-5 (2013). 査読有 DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.87.085437>

(33) A. Sakai and H. Kohno “Spin torques and charge transport on the surface of topological insulator” Phys. Rev. B 89, 165307-1-21 (2014). 査読有 DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.89.165307>

(34) H. Fukuyama, Y. Fuseya, M. Ogata, A. Kobayashi, Y. Suzumura, “Dirac electrons in solids” Physica B: Condensed Matter 407, 1943-1947 (2012). 査読有 Doi:10.1016/j.physb. 2012.01.071

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

(36) Y. Suzumura, T. Morinari and F. Piechon "Mechanism of Dirac Point in - Type Organic Conductor under Pressure" *J. Phys. Soc. Jpn.* 82, 023708-1-4 (2013). 査読有 DOI:http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.023708

(37) F. Piechon and Y. Suzumura, "Dirac Electron in Organic Conductor -(BEDT-TTF)₂I₃ with Inversion Symmetry" *J. Phys. Soc. Jpn.* 82, 033703-1-4 (2013). 査読有 DOI:http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.033703

(38) Y. Fuseya, M. Ogata and H. Fukuyama, "Spin-Hall Effect and Diamagnetism of Dirac Electrons" *J. Phys. Soc. Jpn.* 81, 093704-1-4 (2012). 査読有 DOI:http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.81.093704

(39) T. Kanao, H. Matsuura, and M. Ogata, "Theory of Defect-Induced Kondo Effect in Graphene: Numerical Renormalization Group Study" *J. Phys. Soc. Jpn.* 81, 063709-1-4 (2012). 査読有 DOI:http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.81.063709

(40) Z. Zhu, B. Fauque, L. Malone, A. B. Antunes, Y. Fuseya and K. Behnia, "Landau spectrum and twin boundaries of bismuth in the extreme quantum limit" 査読有 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 109, 14813-14818 (2012).

(41) G. Tataru, A. Takeuchi, N. Nakabayashi, and K. Taguchi, "Monopoles in ferromagnetic metals" 査読有 *J. Korean Phys. Soc.* 61, 1331-1348 (2012).

(42) K. Taguchi, J.-I. Ohe and G. Tataru, "Ultrafast magnetic vortex core switching driven by topological inverse Faraday effect" *Phys. Rev. Lett.* 109, 127204-1-5 (2012). 査読有 DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.127204

(43) H.T. Ueda, A. Takeuchi, G. Tataru, T. Yokoyama, "Topological charge pumping effect by the magnetization dynamics on the Surface of Three-Dimensional Topological Insulators" *Phys. Rev. B* 85, 115110-1-6 (2012). 査読有 DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.85.115110

(44) A. Takeuchi, G. Tataru, "Spin Damping Monopole" *J. Phys. Soc. Jpn.* 81 033705-1-4 (2012). 査読有 DOI:http:// dx.doi.org /10.7566/ JPSJ.81.033705

(45) T. Kariyado and M. Ogata, "Low-Energy Effective Hamiltonian and the Surface States of Ca₃PbO" *J. Phys. Soc. Jpn.* 81, 064701-1-11 (2012). 査読有 DOI:http:// dx.doi.org /10.7566/JPSJ.81.064701

[学会発表](計146件)

(1) 小形正男 "Spin Hall effect and large diamagnetism in Dirac electrons in solids", 13th German-Japanese Symposium, 2014.7.13-16, (Ringberg, Germany)

(2) 鈴木順三 "Novel aspects of Dirac electron in organic conductors", The 10th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets 2013 7.14-19 (Montreal, Canada) 等

2014年

国際会議 37 (うち招待講演11)

日本物理学会 15

2013年

国際会議 35 (うち招待講演13)

日本物理学会 26

2012年

国際会議 18 (うち招待講演7)

日本物理学会 15

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小形正男[Masao Ogata]

(東京大学理学系研究科・教授)

研究者番号: 60185501

(2) 研究分担者

福山秀敏[Hidetoshi Fukuyama] (東京理科大学理学部・教授) 研究者番号: 10004441

鈴木順三[Yoshikazu Suzumura] (名古屋大学理学研究科・教授) 研究者番号: 90108449

小林晃人[Akito Kobayashi] (名古屋大学理学研究科・准教授) 研究者番号: 80335009

河野 浩[Hiroshi Kohno] (名古屋大学基礎工学研究科・教授) 研究者番号: 10234709

伏屋雄紀 [Yuki Fuseya] (電気通信大学情報理工学研究科・准教授) 研究者番号: 00377954

遠山貴巳[Takami Tohyama] (東京理科大学理学部・教授) 研究者番号: 70237056

森成隆夫[Takao Morinari] (京都大学人間環境学研究科・准教授) 研究者番号: 70314284

多々良源[Gen Tataru] (理化学研究所創発物性科学研究センター・チームリーダー) 研究者番号: 10271529

松浦弘泰[Yasuhiro Matsuura] (東京大学理学系研究科・助教) 研究者番号: 40596607