

分子性導体におけるギャップの開いたディラック電子とスピン伝導

[1] 要旨

擬 2 次元の有機導体である α -(BETS) $_2$ I $_3$ を念頭に、質量のある（エネルギーギャップがある）場合のディラック電子系における、スピンの関与した特異な輸送現象が明らかにされた。スピン軌道相互作用によってギャップが開いた場合、一般にスピンに依存したトポロジカルな量であるベリー曲率が生じることが分かった。このような場合にスピンホール伝導度や磁場中のスピン伝導度など、スピン流が関与した物理量においてベリー曲率の寄与が典型的に現れることが明らかになった。

[2] 本文

有機伝導体は、分子の置換や圧力効果によって物質パラメータを比較的容易に変化させることができ、そのために相図上でさまざまな面白い物性が見出される。モット絶縁体、超伝導、スピン液体などが見出されているが、トポロジカル物性と関連して、質量のない（エネルギーギャップがない）ディラック電子系が実現する有機伝導体の系にも興味をもたれている。

ディラック電子系は質量のあるなしにかかわらず、軌道磁性や輸送現象に特異な性質を示す。とくに昔から謎であったビスマスの巨大反磁性が福山一久保の理論によって軌道反磁性として解明されたことは、ディラック電子系研究の嚆矢である。最近では実験的にも 3 次元ディラック物質や擬 2 次元有機導体での軌道反磁性が議論されるようになってきた。さらに、さまざまな輸送現象にベリー曲率というトポロジカルな寄与が現れることが理論的に示され注目されている。

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻の研究グループは、 α -(BETS) $_2$ I $_3$ という擬 2 次元有機導体を念頭に、質量のある場合のディラック電子系の輸送係数について報告した。とくに有機導体ではディラックの分散関係が傾いている (tilting という) という特徴があるが、これの効果についても明らかにした。さらにスピンホール効果など、スピン流が関与した物理量に特徴があり、スピンホール伝導度が、典型的なプラチナにおけるスピンホール伝導度程度まで大きくなる可能性を指摘した。また磁場の 1 次に比例した磁気スピン伝導度においてベリー曲率の寄与が現れることも明らかになった。この成果は、JPSJ の 2022 年 2 月号に掲載された。

擬 2 次元有機導体のうち、圧力下でギャップの無いディラック電子系が形成される α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ が有名であるが、 α -(BETS) $_2$ I $_3$ は、BEDT-TTF 分子の硫黄原子がセレンに置き換わったものである。セレンの方が周期表で下の方にあるためにスピン軌道相互作用が大きい。また、常圧下でも電荷秩序状態は起こらず、ディラック電子系が実現していると考えられている。さらに第一原理計算によると、スピン軌道相互作用のためにディラック電子の分散関係に小さなエネルギーギャップが開くだろうと予測されている。2 次元のディラック電子系の場合、ギャップが存在しない場合にはベリー曲率が 0 になってしまう。しかし、系の空間反転対称性が破れるか、もしくはスピン軌道相互作用が存在すればギャップが生じる。実際 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の低圧側で電荷秩序が生じると、これによって空間反転対称性が破れるためにギャップが生じ、ベリー曲率が生じる。しかしこの場合には、2 つのディラック点の周りでのベリー曲率が逆符号を持つことがわかっている。輸送係数などの異常を与えるものはベリー曲率の波数空間における積分で与えられる値なので、この場合は効果が打ち消されてしまう。これに対して、 α -(BETS) $_2$ I $_3$ の場合のようにスピン軌道相互作用によってギャップが開く場合には、2 つのディラック点の周りでのベリー曲率は同符号となるので大変都合がよい。ただし、ベリー曲率はスピンの z 成分に比例してしまうので、ベリー曲率が現れる物

理量はスピンの関与したスピンホール効果とかスピン伝導度ということになる。

以上の状況下で、最近の JPSJ の論文では次のことがらが明らかにされた。

- (1) 擬 2 次元物質では、一般にスピン軌道相互作用はスピンの z 成分に比例する項が主要項となる。このため、スピン軌道相互作用があってもスピンの z 成分はよい量子数となる。
- (2) 系に時間反転対称性がある場合（スピン軌道相互作用があっても時間反転対称性をもつ）、スピン軌道相互作用のためにギャップが開くと、2 つのディラック点におけるベリー曲率は同符号でありかつスピンの z 成分に比例する。
- (3) これらの結果をもとに、tilting のある場合のいくつかの輸送係数が、微視的な線形応答理論によって求められた。ベリー曲率がスピンの z 成分に比例するために、通常の電気伝導度にはベリー曲率の効果は表れないが、スピンホール係数にはベリー曲率の寄与があり、図 1 に示すような化学ポテンシャル依存性をもつことが示された。とくに絶対零度での解析的な形が得られている。さらに化学ポテンシャルがギャップ内にある場合にはスピンホール伝導度は $|e|/h$ (h はプランク定数) という普遍的な値になることが分かる。このスピンホール伝導度の値を α -(BETS) $_2$ I $_3$ 系を意識したパラメータを使って 3 次元での値として評価すると、プラチナで考えられているスピンホール伝導度と同程度に大きくなるが示された。
- (4) 磁場下で磁場の 1 乗に比例した対角スピン伝導度 σ_{Sxx} なども調べられ、この輸送係数にもベリー曲率の寄与があることが見出された。

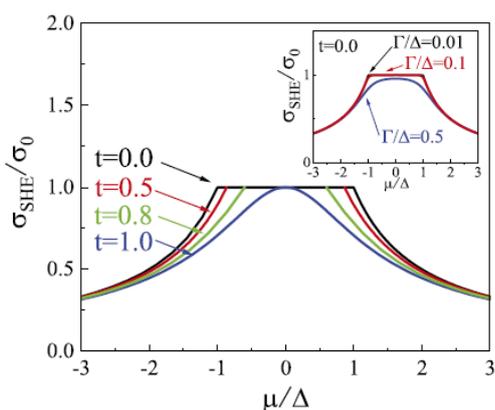


図 1. スピンホール伝導度の化学ポテンシャル依存性。 t は tilting を表すパラメータ ($t=0$ が tilting なしの場合)。値が平な部分は化学ポテンシャルがギャップ内にある場合である。

以上のように擬 2 次元ディラック電子系をもつ有機導体を念頭に、スピン軌道相互作用によりギャップが開き、さらに tilting がある場合のスピン伝導度等が理論的に明らかにされた。スピン軌道相互作用が強い場合のディラック電子系を持つ物性、とくにトポロジカル物理量に関連する現象の開拓やスピントロニクスへの応用として、今後の研究の展開が期待される。

原論文 (2022 年 1 月 27 日公開済)

Anomalous Spin Transport Properties of Gapped Dirac Electrons with Tilting

Masao Ogata, Soshun Ozaki, and Hiroyasu Matsuura: J. Phys. Soc. Jpn. **91**, 023708 (2022).

<情報提供 : 小形正男 (東京大学大学院理学系研究科物理学専攻)>