

分子性導体におけるノーダルラインとそれによる軌道帯磁率

尾崎 壮駿 〈東京大学大学院理学系研究科 ozaki@hosi.phys.s.u-tokyo.ac.jp〉

立石 幾真 〈理化学研究所 ikuma.tateishi@riken.jp〉

松浦 弘泰 〈東京大学大学院理学系研究科 matsuuura@hosi.phys.s.u-tokyo.ac.jp〉

小形 正男 〈東京大学大学院理学系研究科・トランススケール量子科学国際連携研究機構 ogata@phys.s.u-tokyo.ac.jp〉

ディラックは量子力学と特殊相対論を両立させるためには 4×4 の行列を用いたディラック方程式を考えなければならないことを示した。ディラック方程式の平面波解は $E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2}$ の相対論的エネルギーを持ち、負のエネルギーを持つ陽電子解があることを予言した。ここで c , m , p はそれぞれ光速、電子の質量、運動量である(以下ディラック分散の原点をディラック点と呼ぶ)。

このようなディラック方程式で記述される電子、つまり「ディラック電子」は、固体中でも現れることが知られている。古くは炭素の蜂の巣格子からなる1層のグラフェンが、低エネルギーで2次元の**ギャップのないディラック方程式**に従うことが示された(固体中では mc^2 がエネルギーギャップに対応する)。これと同様のディラック電子系がいくつかの分子性物質で見られ、実験・理論とともに大きく進展している。

ディラック電子系を有する分子性導体には以下のような特徴がある。(1) ディラック点のエネルギーがフェルミエネルギーに非常に近く、かつ他のバンドがフェルミエネルギー付近に存在しない。(2) 低次元系でありながら3次元の結晶であるためにバルクの測定が可能であり、帯磁率や電気伝導度、ゼーベック係数などの物性について実験と理論との比較検討ができる。(3) 不純物が非常に少ない。(4) 圧力や分子置換などによって、ホッピングパラメータやバンド構造を比較的容易に変えることができる。(5) 1つの分子が大きいためにホッピングパラメータが比較的小さく、相対的にクーロン相互作用の効果が大きく効く。

ディラック電子系を持つ分子性導体とし

て α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ が有名であるが、この物質でディラック電子系を実現するためには圧力が必要で、このために実験が難しいことが知られている。これに対し、常圧下でディラック電子系が実現していると考えられるHMTSF-TCNQと α -(BETS) $_2$ I $_3$ について、ここでは紹介する。前者では、ディラック点が波数空間内で連続的に存在するという**ノーダルライン半金属**が実現していると考えられ、低温で電荷密度波への相転移が生じる。後者においても2次元波数空間に垂直な方向にノーダルラインが形成されているといえるが、スピン軌道相互作用によってディラック点に小さなギャップが開いていると考えられている。

これまでエキゾチックな電子状態には、それに付随する特徴的な物理量が存在し、それが実験・理論を主導してきた。もっとも典型的な例は量子ホール系でのホール伝導度である。ディラック電子系では、このような物理量は**軌道帯磁率**であると考えられる。実際、3次元ディラック電子系が実現していると考えられているビスマスとその関連物質において、巨大反磁性の起源がディラック電子系特有のバンド間効果であることが福山・久保によって示されている。

最近の研究により、HMTSF-TCNQでは、第一原理計算および帯磁率の理論解析からノーダルライン半金属由来の軌道帯磁率が実験結果を理解するためには重要であることがわかった。さらに、 α -(BETS) $_2$ I $_3$ については、スピン軌道相互作用によるギャップがスピンホール効果などを引き起こす可能性があること、また帯磁率の温度依存性がギャップのあるディラック電子系によって理解できることなどが明らかになった。

用語解説

ギャップのないディラック電子系とノード:

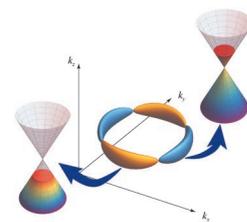
エネルギーギャップが0のとき、ディラック分散は $E = \pm c|p|$ となり、2つの円錐(ディラックコーン)が原点で接したものになる。この接点をノードという。

BEDT-TTF, HMTSF, TCNQ, BETS:

それぞれ分子を表す。長い分子名を省略形で表記したもの。

ノーダルライン半金属:

ギャップのないディラック電子系のノードが波数空間内で連続的に存在している状態。さらにノードのエネルギーが波数空間内で少しだけ上下するために、下図のように波数空間内の位置によって電子のフェルミ面(青い部分)とホールのフェルミ面(橙の部分)が交互に出現する。電子とホールが共存するので半金属である。



軌道帯磁率:

磁場中電子のローレンツ力による帯磁率を軌道帯磁率と呼ぶ。自由電子の場合はランダウの反磁性であるが、一般に結晶中で多くのバンドがある場合には複雑であり長い研究がある。とくにフェルミ面がなくとも磁場のバンド間効果によって軌道帯磁率は有限の値を持つ。