

学位申請論文公開講演会

日時：2026年1月26日(月) 14:00~

申請者：菊地 理紗子 (St 研)

場所：B5 講義室 (B501) およびハイブリッド

接続先の問い合わせ先：山影相 ai_@_st.phys.nagoya-u.ac.jp (_@_は@に置き換える)

題目：スピン1カイラルフェルミオン系の三重縮退に基づく非対称伝導率カスプの形成機構と熱電応答

主論文の要旨

トポロジカル半金属は、エネルギー-bandの交差に起因した特異な物理現象を創発する。近年、結晶対称性に保護されて、3本以上のバンドが一点で交差するトポロジカル半金属が提案された。そのうち、2本の線形バンドと1本の平坦なバンド（トリビアルバンド）が一点で交差する「スピン1カイラルフェルミオン系」は、CoSiなど空間群198の結晶材料で実現すると報告されている。

一方、トポロジカル半金属の代表例であるワイルフェルミオン系において、フェルミ準位がワイル点（バンド交差しているエネルギー点）にあるとき、不純物散乱が顕著に寄与し、電気伝導率に大きなエネルギー依存性が生じることが知られている。そのため、スピン1カイラルフェルミオン系においてもバンド交差点近傍で不純物効果が顕著に寄与し、電気・熱電応答に大きな影響を及ぼすことが示唆される。そこで本研究では、線形応答理論を用いてスピン1カイラルフェルミオン系の電気・熱電応答を理論解析し、バンド交差および不純物散乱に起因する特性を解明することを目的とする。

まず、電気伝導率の解析を行った。スピン1カイラルフェルミオン系ではトリビアルバンドを完全に平坦とみなす近似が用いられることが多いが、現実物質では有限の曲率を無視できないため、本研究では曲率効果もモデルに取り入れた。曲率効果により、電気伝導率が、バンド交差点から測ったエネルギーに対して非対称なカスプ構造を形成することを明らかにした。これは、線形バンドとトリビアルバンドの競合により形成されるものであり、多バンド交差に起因した現象である。さらに非対称カスプ構造の導出には、自己無撞着ボルン近似のように、散乱によるバンド交差点近傍のエネルギーにおける状態密度のブロードニングを取り込むことが可能な近似が必要であることを示した。

またゼーベック係数は伝導率のエネルギー依存の急峻さに敏感であるため、非対称カスプは熱電特性に大きく影響しうる。そこで次に、非対称カスプに起因する熱電応答を解析した。この解析では不純物散乱のみを考慮し、熱伝導は電子による寄与のみを考えた。この範囲で、ゼーベック係数や熱電性能指数ZTを導出した。その結果、非対称カスプに起因して、降温とともに熱電性能指数が上昇する低温領域があることを見出した。特に、不純物散乱が弱く、トリビアルバンドの曲率が大きいほど、性能は向上する傾向にある。さらに申請者は、電気伝導率の非対称カスプ構造を表す有効モデルを構築し、カスプ点での伝導率が小さく、かつその非対称性が強いときに、低温域での熱電性能が向上する傾向にあると示した。スピン1カイラルフェルミオン系のZTの振る舞いは、この有効モデルによる結果と整合しており、カスプ構造由来の性能向上であることを確認した。

以上のようにスピン1カイラルフェルミオン系は、多バンド交差由来の非対称伝導率カスプに起因して、低温域で高い熱電性能を示す。スピン1カイラルフェルミオン系以外のトポロジカル半金属でも、多バンド交差に由来して、電気伝導率にカスプライクなエネルギー依存性が生じることがある。そのため、本研究で示したカスプ構造由来の熱電効果は、他のトポロジカル半金属にも適用できる可能性がある。