

## 学位申請論文公開講演会

日時：2021年2月1日(火) 15:00~

申請者：大木 大悟 (Sc 研)

場所：理学館 506 室

題目：Electron correlation and transport phenomena in organic Dirac electron systems  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> and  $\alpha$ -(BEDT-TSeF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub>

(有機ディラック電子系 $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> および $\alpha$ -(BEDT-TSeF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> における電子相関と輸送現象)

### 主論文の要旨

グラフェンや有機導体、ビスマス等の多様な物質において、相対論的粒子と類似した性質を示す準粒子、ディラック電子が発見され、量子伝導など興味深い物性が見出されている。有機ディラック電子系 $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> ( $\alpha$ -(ET)<sub>2</sub>I<sub>3</sub>)と $\alpha$ -(BEDT-TSeF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> ( $\alpha$ -(BETS)<sub>2</sub>I<sub>3</sub>)では、電子間相互作用の値がバンド幅より大きく、電子相関が電子状態に強く影響することが分かっている。両物質とも温度や圧力の減少により絶縁体化し、特異な振舞いを示すことが報告されている。 $\alpha$ -(ET)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> では横ストライプ電荷秩序による絶縁体化近傍でゼーベック係数  $S$  に特異な振舞いが現れており、 $\alpha$ -(BETS)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> では絶縁体化機構自体が未解明となっている。本研究ではこれらの解明を目的とした研究を行った。

初めに、 $\alpha$ -(ET)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> の横ストライプ電荷秩序相転移近傍で現れる、 $S$  の非単調な温度依存性に関する研究結果を報告する。一般的なディラック電子系では  $S$  は温度に比例し、化学ポテンシャル  $\mu$  と逆符号を持つ。一方、 $\alpha$ -(ET)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> の  $S$  は、ディラック電子相で  $\mu < 0$  に起因した正の値を示すが、絶縁体化近傍で鋭いピークを示し符号反転する。この原因解明のため、本研究では、ディラック電子系の  $S$  が① $\mu$  の符号、②不純物散乱、③バンドの電子-正孔非対称性とキャリアドーピング、に敏感であることに着目し、中野-久保公式と半古典的論を用いた数値計算を行った。結果として、相互作用によるバンドの電子-正孔非対称性の増強を考慮することで、 $S$  の非単調な温度依存性を説明できることが分かった。この結果は、横ストライプ電荷秩序相とディラック電子相の境界における緩和時間の変化が熱電効果に影響を及ぼすことを示している。

続いて、 $\alpha$ -(BETS)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> の絶縁体化機構の解明を目的とした研究結果を報告する。 $\alpha$ -(BETS)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> は $\alpha$ -(ET)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> とは異なり、絶縁体化前後で空間反転対称性に変化は無く、バンドはスピン軌道結合(SOC)による小さなギャップを有する。本研究で SOC を考慮した第一原理計算により構築した拡張ハバード模型を Hartree-Fock 近似で扱った結果、SOC によるギャップが相互作用により低温で増強され、実験の輸送係数の振舞いを再現することが分かった。また、このギャップの増強は他のディラック電子系で見出されている相互作用誘起の量子スピンホール状態が現れる原因と密接に関係していることを見出した。

これらの結果は、相互作用の強い他のディラック電子系にも応用できる可能性がある。