

学位申請論文公開講演会

日 時：2008年1月16日(水) 13:30~

申請者：片山 新也

場 所：理学館 506 講義室

題 目：Massless Dirac Particles in the Quasi-Two-Dimensional Organic Conductor
(擬二次元有機導体における質量ゼロのディラック粒子)

(主論文の要旨)

擬二次元有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ 塩は単位胞に4個のBEDT-TTF分子が存在し、最高被占軌道がつくるバンドに電子が3/4充填している物質である。この塩は高圧下において温度が減少するとホール係数が顕著に増大するが電気抵抗はほとんど変化しないというふるまいを示す。この電子状態は通常の金属や半導体では説明できず、1990年代前半以降問題となっていた。

本研究ではこの高圧下の性質を理解するため、 α -(BEDT-TTF)₂I₃ 塩のバンド構造を研究した。BEDT-TTF分子間の電子のトランスファーエネルギーの圧力依存性はX線構造解析から得られたデータから見積もり、タイトバインディングモデルを用いて計算した。その結果、圧力下では価電子帯と伝導帯が運動量のある二点(コンタクトポイント)でフェルミ点として縮退し、その周りでエネルギーと運動量が比例関係にあること(ゼロギャップ状態)を見つけた。これは質量ゼロの相対論的粒子がこの塩に存在していることを意味している。

α -(BEDT-TTF)₂I₃ 塩は7種類のトランスファーエネルギーが存在するため以下の性質を持っている。コンタクトポイントを与える波数の位置はハミルトニアンの特異性とは関係のない一般的な場所である。圧力が変化するとこのエネルギーも変化し、コンタクトポイントの位置も圧力依存性を持つ。コンタクトポイントの周りの線形分散が異方的であり、フェルミ速度の最大値は最小値の10倍程度である。電荷の不均化が起きており、拡張ハバードモデルを用いた平均場計算では電荷不均化とゼロギャップ状態の共存が可能である。

さらに、状態密度がエネルギーに対して比例する一方、電子の平均寿命は反比例するので、電気伝導度の温度依存性は小さい。バンド間の電子の励起と三次元性の効果によってゼロギャップ状態から不整合SDWが出現することが可能であることを示した。

物質中で相対論的エネルギー分散をもつ粒子が存在することはこれまでに単層グラファイトやビスマスで存在することが知られているが、今回見つかった α -(BEDT-TTF)₂I₃ 塩では上記のような本質的に新しい性質を持っている。他の有機導体でもゼロギャップ状態の出現が示唆されており、さらなる研究の発展が期待される。