

論文の内容の要旨

論文題目	磁場中ディラック電子系半金属の電子状態と輸送現象の理論
学位申請者	大和田光明

近年、ビスマスやグラフェン、トポロジカル絶縁体など、ディラック電子系物質の物性が注目を集めている。これらの物質では、非飽和磁気抵抗や線形磁気抵抗など、異常な磁気抵抗のふるまいが実験的に報告されており、電子状態との関係が盛んに議論されている。

ディラック電子の特徴はそのエネルギー分散にある。自由電子のエネルギーが波数の2次に比例するのに対し、ディラック電子は波数の1次に比例する。しかし、先行研究のディラック電子系物質の磁気抵抗解析では、自由電子モデルを仮定した解析が多く見られる。これでは、真の意味でディラック電子の電子状態と磁気抵抗の関係を議論することができない。また、異常な磁気抵抗のふるまいが観測される強磁場領域で、キャリアのエネルギーは明瞭にランダウ量子化され、その効果が無視できなくなる。そこで本研究では、ディラック電子の電子状態から、ランダウ量子化も考慮し、磁気抵抗を理論的に研究した。

はじめに、ディラック電子のエネルギーからボルツマン理論に基づいて磁気抵抗の式を改めて導出した。導出した式には、ディラック電子特有の補正（相対論的補正）が存在することが明らかとなった。この相対論的補正を用いることで、従来の自由電子の場合とほぼ同様に、ディラック電子系物質における磁気抵抗の実験結果を解析することができる。次に、ランダウ量子化を考慮して、量子極限における磁気抵抗の計算を行った。ランダウ量子化を考慮したことで、半古典的なボルツマン理論に基づくディラック電子の磁気抵抗と、量子論的な久保理論に基づく磁気抵抗の計算結果が、量子振動を除き、量子極限まで定量的に一致した。一般的に、半古典的なボルツマン理論は弱磁場でのみ適応可能であると考えられるが、強磁場と量子極限でも量子論的な久保公式と一致することから、量子極限においてもボルツマン理論の計算が信頼できることが明らかとなった。この計算結果は、ディラック電子系の場合に限らず、様々な物質の磁気抵抗研究に応用が期待できる。最後に、これまでの計算（ディラ

ック電子の磁気抵抗の式、ランダウ量子化)を用いて、代表的なディラック電子系半金属であるビスマスの磁気抵抗のふるまいを議論した。ビスマスの異方的な電子状態を考慮し、磁気抵抗を計算することで、30テスラまでの磁気抵抗の実験結果を定性的だけでなく、定量的にも説明することができた。

以上の研究から、ディラック電子の電子状態を考慮することで、ディラック電子系物質の異常な磁気抵抗のふるまいを説明することができた。さらに本研究は、バンド計算と組み合わせることにより、任意のフェルミ面に対する角度依存磁気抵抗の研究へと発展した。

磁気抵抗研究では磁場依存性だけでなく、角度依存性にも注目が集まっている。角度依存磁気抵抗が報告された物質の中には、ZrSiSのように楕円体模型で表せない複雑なフェルミ面を持つ物質も存在する。通常、磁気抵抗の角度依存性解析には、楕円体フェルミ面を仮定した磁気抵抗の式が用いられる。これでは、楕円体と大きく異なるフェルミ面の異方性やトポロジを磁気抵抗の解析へ、十分に反映させることができない。

上述の問題を解決するため、ボルツマン理論に基づいた磁気抵抗の式を再構築することで、任意のフェルミ面に対する磁気抵抗を計算する手法を開発した。また、開発した手法の一部を応用することで、ド・ハース-ファン・アルフェン振動(dHvA)の計算も可能となった。

開発した手法を用いて、アンチモンの正孔フェルミ面について、角度依存磁気抵抗を計算した。従来の研究では、アンチモンの正孔フェルミ面は6つの楕円体が孤立して存在している(6楕円体模型)と考えられていたが、最近の研究で楕円体模型とはかけ離れたフェルミ面(連結フェルミ面)である可能性が示唆された。従来の楕円体を仮定した磁気抵抗の計算では、連結フェルミ面の異方性やトポロジを十分に計算へ反映させることができず、実験と比較可能な計算結果を得ることが困難であった。本研究で開発した手法を用いることで、実験と比較可能な角度依存磁気抵抗の計算結果を得ることができ、6楕円体模型と連結フェルミ面の角度依存磁気抵抗で違いがあることを明らかにした。また、dHvAについても磁気抵抗と同じく、角度依存性に違いがあることが明らかにした。

本研究で開発した角度依存磁気抵抗と角度依存dHvAの計算手法は、非常に有用である。実験結果からフェルミ面を決定する場合、実験結果とバンド計算から得られるフェルミ面の構造を比較する。この方法ではフェルミ面の構造が複雑になると、比較することが困難になる。しかし、本手法では実験結果と比較可能な角度依存磁気抵抗と角度依存dHvAを得られることから、より正確に実験結果との比較が可能になる。

本研究ではアンチモンの正孔フェルミ面について、角度依存磁気抵抗と角度依存dHvAの計算を行なったが、第一原理計算を用いることで、有効模型が明らかとなっていない物質でも計算が可能となる。本研究が開発した手法を用いることによって、様々な物質のフェルミ面研究の発展が期待できる。

本研究により、ディラック電子系半金属の磁気抵抗の新たな知見を得ると共に、有用な理論手法も得ることができた。この手法を用いることにより、ディラック電子系物質に限らず、磁気抵抗研究全体の発展が期待できる。

論文審査の結果の要旨

学位申請者氏名 大和田 光明

審査委員主査 伏屋 雄紀

委員 中村 仁

委員 尾関 之康

委員 大淵 泰司

委員 松林 和幸

委員

委員

第一章は序論とし、本論文の主題である磁気抵抗と固体中ディラック電子の最近の研究展開を踏まえ、論文の意義について述べている。論文は大きく分けて二つの主題（磁気抵抗の磁場依存性、角度依存性）を持っており、それぞれについての研究背景が述べられている。

第二章は、研究に関する基本的事項（輸送理論、磁場中電子論、ディラック電子、磁気抵抗）の解説にあてられている。前半は物性理論の観点から、輸送理論として、古典的なドゥルーデ模型、半古典的なボルツマン方程式、量子的な久保公式が順を追って説明されている。磁場中電子論として、ランダウ量子化、量子振動および量子極限を扱っている。後半は固体物理学の観点から、固体中のディラック電子とその有効模型、そしてV族半金属が説明されている。さらに磁気抵抗の長い歴史的経緯、近年の新しい展開が述べられ、最後に現時点での問題点が提起されている。

申請者の着眼する問題点は、次の通りである。近年盛んに研究されている異常な磁気抵抗を示す物質は、多くの場合ディラック電子が主たる役割を果たしていると指摘されている。にもかかわらず、磁気抵抗を具体的に解析する際には従来の自由電子模型に基づいた公式を用いている。これは明らかに矛盾を含んでいる。この状況を打破するためには、まずディラック電子模型に基づいた磁気抵抗の理論を改めて構築することであり、物質の具体的な電子構造を取り入れて実験を解析することが必要である。この着眼点に基づき、次章以降で申請者の具体的な研究内容が順を追って説明されている。

第三章では、ディラック電子系の磁気抵抗理論を述べている。まず新たにディラック電子をキャリアに持つ場合の磁気抵抗の公式をボルツマン理論に基づき導出。その結果を用いて、具体的な例（1キャリア，2キャリア）を取り上げ、磁気抵抗を計算している。

第四章では、磁場中電子論に基づき、固体中ディラック電子のランダウ量子化を説明し、それと久保公式をあわせ、ディラック電子系の磁気抵抗を量子論的に計算している。久保公式と前節でえたボルツマン理論の結果を比較し、（量子振動を除いて）量子極限まで両者が一致するという驚くべき結果を得た。通常、半古典的なボルツマン理論は弱磁場極限でのみ成立すると考えるが、強磁場のみならず、量子極限においても量子的な久保公式の結果と一致することを示したことは、ディラック電子系のみにとどまらず、広く磁気抵抗理論全体に波及する成果である。

第五章では、これまでの物性理論的研究を総合し、実際の物質へ適用している。ここでは特に典型的ディラック電子系物質であるビスマスを取り上げ、その詳細な電子状態を考慮し、磁気抵抗を計算している。その結果、30テスラまでの実験結果を定性的のみならず定量的にも一致する結果を得ている。近年、ビスマスの異常な磁気抵抗のふるまいについて様々な理論が提案されているが、ここまで高い定量性を持つ理論は本研究が初めてである。

第六章は、角度依存磁気抵抗の研究にあてられている。前章までで開発した理論手法が磁気抵抗の角度依存性にも応用できることに気づき、従来理論では困難であった複雑なフェルミ面を持った物質の角度依存磁気抵抗を、画像解析技術を応用した数値計算法を駆使し、計算している。さらに、ド・ハース-ファン・アルフェン振動の解析にも応用できることを示している。

第七章で、本論文の総括を行っている。

よって本論文は、博士（理学）の学位論文として、十分な価値を有するものと認める。