

第一原理計算を用いた新奇トポロジカル物質の探索

山内 邦彦 / 大阪大学 産業科学研究所 助教

第一原理電子状態計算（いわゆる“バンド計算”）を専門にしています。これまで遷移金属酸化物の磁性・強誘電性についての研究を主なテーマとしつつ、物質のスピン転移・ラッシュバ効果・熱電効果・分子結晶の構造安定性など様々な物性について理論研究を行ってきました。本新学術領域では、計画研究 B01 の佐藤グループと共同でワイル半金属など新しいタイプのトポロジカル物質における電子状態の研究を行っています。光電子分光測定で得られた電子構造と計算結果を比較することによって、フェルミ準位近傍の電子構造がどの原子軌道に起因するかをつきとめ、トポロジカル物性がどのようなカラクリで発現するのかを明らかにします。トポロジカル物質は「バルク・エッジ対応」によって特徴的な表面状態を示すため、トポロジカル物性を明らかにするためには結晶と表面の両方の電子状態を調べる必要があります。第一原理計算では、ワニエ関数などを用いてバルク結晶でのトポロジカル不変量を計算することができます。また、スラブ構造モデルを用いることで、トポロジカル物質に特有の表面状態も計算することができます。これらを実験結果と照らし合わせると、複雑な電子構造のなかで何が重要であるかが見えてきます。

実験に先駆けて、理論計算で新しいトポロジカル物質を探索することも研究目標として掲げています。計算機上では、圧力効果や原子置換効果によってトポロジカル物性がどのように影響を受けるかを簡単に調べることができ、実験グループの負担を減らすことができます。また、私が興味をもっている遷移金属酸化物の様々な結晶歪みを利用したトポロジカル物質設計も行っており、これまでに、強誘電歪みでトポロジカル転移を生じる酸化物ヘテロ構造の組み合わせを発見しました [1]。さらに、インフォマティクス的手法である「進化的アルゴリズム」を用いた高効率な理論先行型のトポロジカル新物質探索を行うことを予定しています。これは、元素の組み合わせを入力パラメーターとして、安定な組成と結晶構造を求める強力な手法です。これらの計算手法を駆使して、トポロジカル物性を示す新たな候補物質を計算機上で設計し、実験グループに提案することを目指します。

[1] “Topological phase transition coupled with spin-valley physics in ferroelectric oxide heterostructures”, K. Yamauchi, P. Barone, and S. Picozzi, Phys. Rev. B **95**, 035146 (2017).



やまうち・くにひこ

1977年奈良県生まれ。大阪大学理学研究科博士後期課程修了：現在、大阪大学産業科学研究所小口多美夫研究室助教。2006年から4年間ポスドクとしてイタリアに研究滞在した。現地での研究生活が気に入り、今年2回程度イタリアを訪れている。



並列計算に用いる計算機クラスター