

## 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、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、B01 佐藤宇史実験班との共同研究を密に行っており、ワイル半金属・ディラック半金属・人口多層膜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理論研究を進めています。角度分解光電子分光測定で得られた電子構造とバンド計算結果を比較すると、フェルミ準位近傍の電子構造がどのような原子軌道成分をもつか明らかになり、トポロジカル物性の微視的起源について議論することができます。最近では、カイラル結晶構造をもつワイル半金属 Te の電子構造を計算し、図に示すように、実験結果と非常に良い一致を得ました [1]。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が、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。

また、実験に先駆けて、計算機シミュレーションで新しいトポロジカル物質を探索しています。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を試みて、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 [2]。現在は、ディラック・コーン制御を目的として、トポロジカル絶縁体  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  を基にした人口多層膜を設計しています。これらのシミュレーション結果が実験班にフィードバックされて新物質探索に貢献できるように、日々研究を進めています。

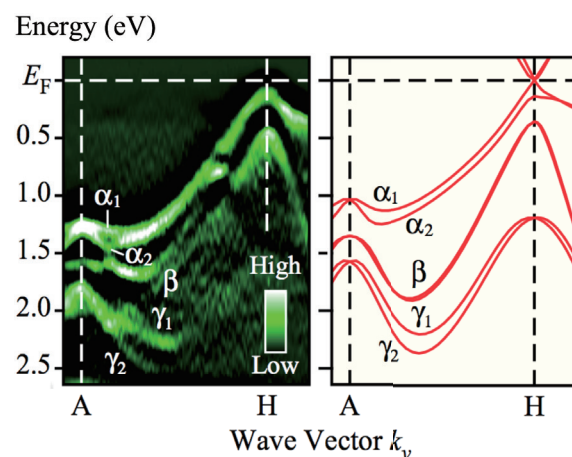
[1] “Band splitting and Weyl nodes in trigonal tellurium studied by angle-resolved photoemission spectroscopy and density functional theory”, K. Nakayama, et al., Phys. Rev. B **95**, 125204 (2017).



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。

[2] “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).



図：Teの電子構造についての角度分解光電子分光実験の結果（左）とバンド計算結果（右）の比較。