

RESEARCH DO3

第一原理計算を用いたトポロジカル物性の機構解明と新物質設計

山内 邦彦 / 大阪大学 産業科学研究所 助教



やまうち・くにひこ

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。本新学術領域では、B01 佐藤宇史 角度分解光電子分光 (ARPES) 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バンド計算を進めました。ARPES 測定で得られた電子構造とバンド計算結果を比較することにより、フェルミ準位近傍の電子構造のもつ原子軌道成分が明らかになり、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、 HfTe_2 の電子構造の膜厚依存性 [1] や、ディラック半金属 ZrGeSe のノーダルライン [2] などについて共同研究を行い、種々のトポロジカル物質についての知見を深めました。

一方で、実験に先駆けた理論先行の新物質設計も進めました。イタリアのグループとの共同研究で、強誘電性を示すスピネル化合物 GaMo_4S_8 において新しいスキルミオン相を予測しました [3]。博士学生 Vu 氏および D01 班の鈴木通人氏(東北大)との共同研究で、ノンコリニア反強磁性を示すアンチペロプスカイト化合物 Mn_3PtN において巨大な異常ホール効果を予測しました [4]。さらに、マルチフェロイック(反強磁性および焦電性を同時に示す)物質 BiCoO_3 におけるラシュバ効果を予測しました(図) [5]。反強磁性体におけるラシュバ効果はほとんど前例がなく、今後この分野の研究が活発になると期待しています。また、修士学生高坂氏との共同研究で、 Bi_2Se_3 や Bi_2Te_3 などの典型的なトポロジカル絶縁体を組み合わせた人工多層膜を設計し、積層構造を調整することによってトポロジカル絶縁体の表面状態を制御しました [6]。将来、この理論予測が実験グループによって実証されることを目指しています。

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、現在は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。現地での研究生生活が気に入っており、今年2回程度イタリアを訪れている。

4年間にわたり、研究へのご支援をありがとうございました。当初は門外漢だった私は学ぶことが多く、共同研究や議論などで様々な研究者と親交を深めたことは素晴らしい経験となりました。この経験を今後の研究活動に活かしたいと思いません。

- [1] Y. Nakata et al., Phys. Rev. Materials **3**, 071001(R) (2019).
- [2] T. Nakamura et al., Phys. Rev. B **99**, 245105 (2019).
- [3] H.-M. Zhang et al., Phys. Rev. B **99**, 214427 (2019).
- [4] V. T. N. Huyen et al., Phys. Rev. B **100**, 094426 (2019).
- [5] K. Yamauchi et al., Phys. Rev. B **100**, 245115 (2019).
- [6] T. Kosaka, K. Yamauchi*, T. Oguchi, arXiv:1912.13239 (2019).

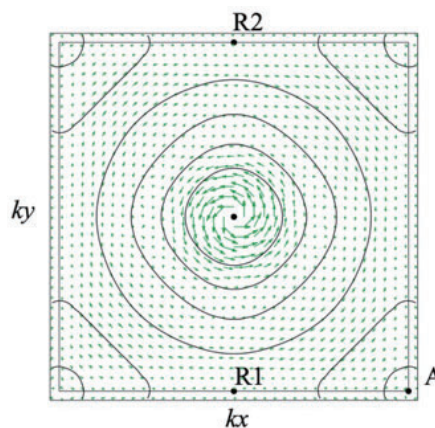


図: BiCoO_3 の正方晶ブリルアンゾーンにおけるZ点周りのスピンドキスチャ。伝導帯の底がBi-p軌道の成分をもち、強いスピントラッキング相互作用でスピンスプリットが生じる [5]。