

若手励起プログラム報告

池田 敦俊

京都大学 大学院理学研究科 修士課程 2 年

指導教員：京都大学 理学研究科 前野 悦輝 教授 (A01)

受入教員：名古屋大学 工学研究科 田仲 由喜夫 教授 (B01)

受入期間：2016 年 12 月 12 日 (月)～12 月 14 日 (水)、2016 年 12 月 19 日 (月)～12 月 22 日 (木)

物質のトポロジーの研究は理論先行であり、トポロジカル物質と実験的に確認された例は多くありません。私は新たなトポロジカル超伝導体の発見を目指して物質合成を行っているのですが、やみくもに新物質を合成するのは効率的ではありません。そこで以前より共同研究の関係にあった名古屋大学の田仲研究室に滞在し、第一原理バンド計算を教えてくださいました。これにより、そもそも超伝導になる可能性があるか、また非自明なトポロジーに不可欠であるバンド反転があるかが合成前に予想でき、実験効率やモチベーションの面で大きな効果があります。

私はバンド計算の全くの初心者だったので、最初はすでに結果が報告されている Ca_3PbO のバンド構造を再現することから始めました。しかしバンド計算の大前提となる、京都の研究室内のサーバーを名古屋から作動させるということが最初の関門でした。京都にいる同期や先輩に電話をかけ、何とか環境を整えてもらいました。環境さえ整えば、 Ca_3PbO の再現はほとんど問題なくできました。バンド計算の理論が全く分かっていない人間にも使えるよう、ソフトウェアが非常に親切に設計されていることに驚きました。

次に、これから合成に取り組む予定の新物質について計算しました。この物質は合成の報告すらないので、バンド計算の前に格子定数を最適化する必要がありました。その最適化も同じソフトウェアを使ってできるので、「コンピュータの中ではこんなに早く新物質ができるのか」と感動する裏で、「実験ではこんなに簡単にはいかないだろうな」と気分が重くなりました。

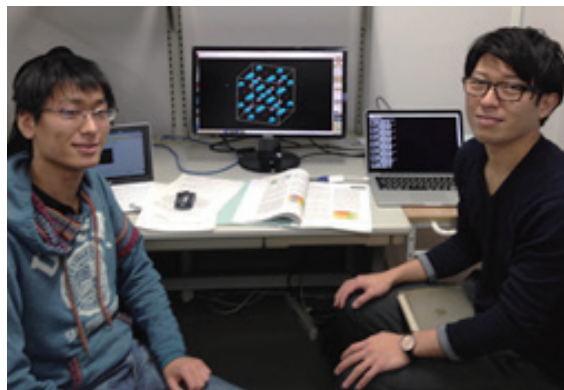
最後に、私たちが最近発見した超伝導体の $\text{Sr}_{3-x}\text{SnO}$ [1] における Sr 欠損を取り入れるため、単位胞を拡大

した計算を行いました。この計算では度重なるエラーに見舞われましたが、指導していただいた博士課程の福元敏之さんのおかげで何とかエラーを克服できました。

今回の滞りで、新物質探索の強力な指針を手に入れました。この技術を活かして、効率的な物質開発を行いたいと思います。

田仲由喜夫先生をはじめ、私を暖かく迎えてくださった研究室の皆さまに感謝いたします。特に福元さんには、毎晩遅くまでほとんどつきっきりでバンド計算を教えてくださいました。ありがとうございました。この機会を与えてくださった若手励起プログラムにもお礼申し上げます。

[1] M. Oudah, A. Ikeda, J. N. Hausmann, S. Yonezawa, T. Fukumoto, S. Kobayashi, M. Sato, and Y. Maeno, Nat. Commun. **7**, 13617 (2016).



バンド計算を教えてくださいました名大田仲研 D1 の福元さん (右) と私。 Sr_3SnO の単位胞を 8 個並べ、Sr 欠損を含む超格子のバンド計算をしている様子。