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

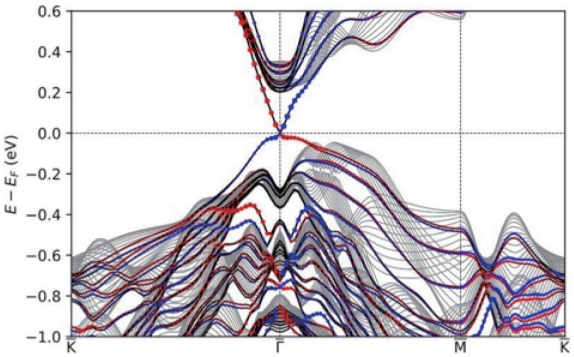
やまうち・くにひこ

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。現地での研究生活が気に入り、今も年 2 回程度イタリアを訪れている。

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・人工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ています。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、カイラル結晶構造をもつワイル半金属 Te の電子構造 [1] や、Bi 薄膜の原子構造に依存したバンド構造の変化 [2] などについて、ARPES 実験結果をよく再現する結果が得られました。引き続き、共同研究を進めて、様々なトポロジカル物質についての知見を深めたいと思います。

一方で、実験に先駆けた理論先行の新物質設計も手がけています。これまでに、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たところ、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 [3]。また、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ようと試みています [4]。各物質のバルクの仕事関数、バンドギャップの違いをもとに、図のように理想的な表面バンド構造を示す人工多層膜を設計しました。将来、このような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。

[1] K. Nakayama, et al., Phys. Rev. B **95**, 125204 (2017).
[2] K. Yamada et al., Nano Lett. **18**, 3235 (2018).
[3] K. Yamauchi et al., Phys. Rev. B **95**, 035146 (2017).
[4] T. Kosaka et al., in preparation.



図：Bi_2Se_3-Bi_2Te_3 多層膜のバンド構造。スピン分極した表面バンドがギャップ中に現れている。