

# トポロジカル半金属のトポロジーと物質探索

村上 修一<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> 東京工業大学理学院物理学系

<sup>2</sup> 東京工業大学元素戦略研究センター

固体結晶では、バンドの縮退は波数空間での高対称点において現れ、縮退度は対称性により定まる。一方最近のトポロジカル半金属の研究により、波数空間の一般の点においても、トポロジーの理由でバンドの縮退が起こりうるということが分かった。その中にはワイル半金属・ディラック半金属・ノーダルライン半金属などが含まれる。このような縮退は第一原理計算で見逃されていることも多く、知られた物質にもこうした縮退が潜んでいる可能性がある。またワイル半金属でのフェルミアーク表面状態や、ノーダルライン半金属におけるドラムヘッド型表面状態など特徴的な表面状態が出るなど、光電子分光にとっても興味深い課題が少なくない。本講演ではこうしたトポロジカル半金属について概観した後、これについての我々の最近の研究を紹介したい。

ワイル半金属については、空間反転対称性が破れているときにはトポロジカル絶縁体と通常の絶縁体の間に必ずワイル半金属相が挟まる[1,2]という研究を以前行った。これに関連して、空間反転対称性の破れた非磁性半導体を考え、何らかのパラメータを変化させてそのギャップを閉じるとする。そのときパラメータをさらに変化させるときのバンド構造の変化はどうなるか考察した。その結果、結晶の空間群およびギャップの閉じる波数によって、ワイル半金属ないしノーダルライン半金属になることが分かった(図1)[3]。この理論はさまざまな物質に適用でき、例えば単体のテルル(Te)は、高圧下でワイル半金属になることが理論的に見いだされた[4]。このようにトポロジカル半金属は、空間反転対称性の破れた半導体のギャップを閉じるときに普遍的に現れる。

時間が許せば、Ca,Sr等のfccアルカリ土類金属においてトポロジカルノーダルラインが現れ、 $\pi$ のZak位相に起因して表面の電気双極子が現れるという理論[5]についても報告する。

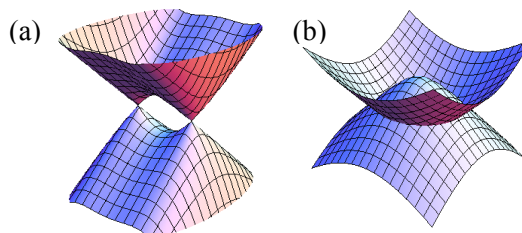


図1: (a) ワイル半金属、(b) ノーダルライン半金属.

[1] S. Murakami, *New J. Phys.* 9, 356 (2007).

[2] S. Murakami and S. Kuga, *Phys. Rev. B* 78, 165313 (2008).

[3] S. Murakami, M. Hirayama, R. Okugawa, S. Ishibashi, T. Miyake, arXiv:1610.07132, to appear in *Sci. Adv.*

[4] M. Hirayama, R. Okugawa, S. Ishibashi, S. Murakami, and T. Miyake, *Phys. Rev. Lett.* 114, 206401 (2015).

[5] M. Hirayama, R. Okugawa, T. Miyake, S. Murakami, *Nat. Commun.* 8, 14022 (2017).