

酸化物におけるトポロジカル電子相の開拓: PdO

Exploration of Topological Electronic Phases in Oxides : PdO

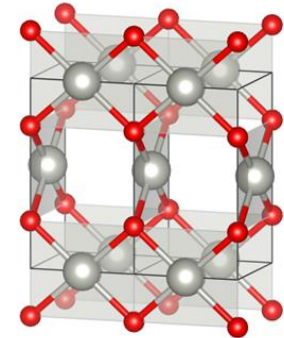
東工大フロンティア研 ○中川 貴大, 笹川 崇男

MSL, Tokyo Institute of Technology ○Takahiro Nakagawa and Takao Sasagawa

E-mail: nakagawa.t.ar@m.titech.ac.jp

はじめに

我々の研究では近年、酸化物を対象としてトポロジカル電子相の開拓に取り組んでおり、図(a)に示すような $P4_2/mmc$ の結晶構造を持つ PdO に注目した。この物質はつい最近、トポロジカルな表面電子状態を持つ事が計算から示唆された[1]。そこで本研究では、改めて第一原理計算により電子構造の検証を行い、実験実証に必要な純良な単結晶試料の育成を行った。



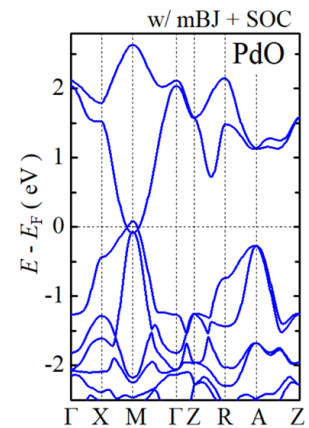
(a) PdOの結晶構造

実験

精密な第一原理計算は Wien2k を用いて行い、スピン軌道相互作用の効果に加えて、電子相関の影響を加味することによりギャップ値の補正も行った。PdO 単結晶は、PdCl₂ を輸送剤に用いて、PdO の化学気相輸送(CVT)法により育成した。

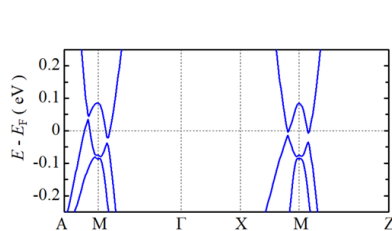
結果

PdO の第一原理計算の結果を図(b)に示す。M 点周りのバンドはフェルミ準位近傍でギャップレスなバンドに見えるが、図(c)に示す様に細かな k 点数で精密に電子分散を描くと、ギャップの開いたバンド反転した電子構造を持つ事を発見した。更に図(d)に示す様にフェルミ面は、小さなホールポケットと電子ポケットがほぼ 1 対 1 で存在するような、半金属的な構造を有する事も発見した。これら 2 つのバルクのフェルミ面を繋ぐ形で、トポロジカル表面状態の出現することが期待される。本研究では、量子振動をはじめとする実験実証に用いる事の出来るミリメートル級の単結晶試料の育成にも最近成功した(図(e))。

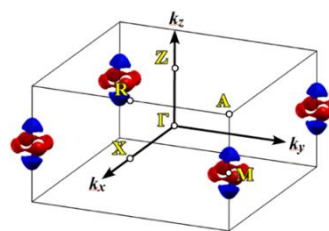


(b) PdOの電子構造

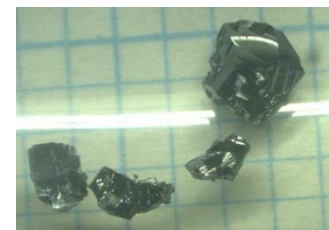
[1] L. Xu *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys. 22,18447 (2020).



(c) M点周りの電子構造



(d) フェルミ面



(e) PdO単結晶