

# 学位論文公聴会

## 2次元物質における

### トポロジカル相転移の第一原理的研究

First-principles study of topological phase transition  
in two dimensional materials

氏名 澤端 日華瑠

自然科学研究科数物科学専攻(計算物性研究室)

日時 2021年1月27日(水) 10:30-11:30

場所 自然科学5号館 第2講義室

従来、物質は金属と絶縁体に分類されると考えられてきたが、波動関数の位相因子に着目することにより絶縁体を自明な絶縁体とトポロジカル絶縁体に幾何学的に分類することが可能となる。トポロジカル絶縁体のエッジには対称性によって保護された金属状態が出現し、非散逸なスピンの流れが流れている。このエッジ状態を電界で自明な絶縁体へとスイッチングすることが可能となれば新奇デバイス実現に繋がることを期待出来る。

本研究では電子状態からトポロジカル相を判別する計算コードを実装し、Bi(111)薄膜におけるトポロジカル相の電界効果及び格子歪み効果を第一原理計算によって解析した。本研究の成果として単層のBi(111)薄膜が電界  $E = 2.1 \text{ V/\AA}$  で Dirac 金属状態となりバンド反転し、自明な絶縁体へと量子相転移することを予言した。また、この相転移電界値は格子歪みによって調節が可能であり、格子歪みによるバンド反転で相転移時の Dirac 金属状態が変化することも明らかにした。

