

# トポロジカル絶縁体における電子構造のシミュレーション

大阪大学 大学院工学研究科 物理学系専攻 湯川 龍

目的： トポロジカル絶縁体に於ける詳細な電子構造を計算により求める。

内容： トポロジカル絶縁体表面には高移動度の金属層が形成される。その電荷密度分布が外部摂動により変化する様子を明らかにするため、密度汎関数理論に基づく大規模計算を実施した。

結果：  $2 \times 2 \times 6$  quintuple layer (QL)のトポロジカル絶縁体を真空層で挟んだスラブ構造を用いて計算を行った。その結果、表面から1 nm以上深くまで表面状態の電荷密度が分布していることが確認された。さらに、外部摂動でその分布が大きく変わる様子を捉えた。本結果は外部摂動により表面状態スイッチングが可能であることを示唆している。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	20,498 時間
使用メモリ	最大760 GB
並列化	最大14ノード 並列

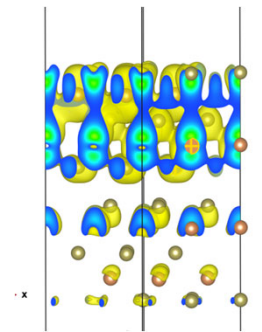


図 トポロジカル絶縁体表面近傍の電子状態密度