
会場 E

領域 8, 9

E-1 Ge(001) 上 Bi 超薄膜の角度分解光電子分光

佐賀大院理工^A, 佐賀大シンクロ^B 横山啓樹^A, 池田晴人^A, 今村真幸^B, 山本勇^B, 東純平^B, 高橋和敏^B

トポロジカル絶縁体は、特異な電気伝導特性やエッジ状態に起因する非常に興味深い性質を持っており、高速でエネルギー効率の高い情報伝達技術、量子コンピュータなど、様々な分野において重要な役割を果たすことが期待され、研究が行われている。ビスマス (Bi) は大きなスピン軌道相互作用を持ち、格子歪みや層数によって 2 次元トポロジカル絶縁相に転移することが理論的に予測されている。本研究では、Bi(111) 薄膜を Ge(001) 基板上に作製し、占有・非占有のバンド構造をシンクロトロン光を用いた角度分解光電子分光と、レーザー光を用いた角度分解 2 光子光電子分光によって調べた。

実験は、佐賀県立九州シンクロトロン光研究センター (SAGA-LS) の佐賀大学ビームライン BL13 にて行った。3bilayer (BL)、4BL、6BL の Bi(111)/Ge(001) の占有バンドについて、基板のダイマー列に対し平行 (方位角 0°) と斜め (方位角 30°) で測定し比較した結果、波数 $0.8(1/\text{Å})$ 付近に存在するバンドのエネルギーは、3BL のとき、方位角 0° で測定した場合に対し、方位角 30° で測定した場合の方が高結合エネルギー側にシフトしており、膜厚が厚くなるほど面内異方性が小さくなる。また、3BL、4BL の Bi(111)/Ge(001) と 11BL の Bi(111)/Si(111) の点における非占有バンドの位置を比較した結果、膜厚の増加とともにフェルミレベルに近づいていくことが分かった。

E-2

非負値行列因子分解による SiC 上に成長したグラフェンの空間分解 ARPES を用いたスペクトル解析

佐賀大院理工^A, 佐賀大シンクロ^B 入江優太^A, 今村真幸^B, 高橋和敏^B

光学素子やシンクロトロン光源の性能向上により、空間分解 ARPES はナノスケールでの局所電子構造の観測を可能にしたが、データ量の増加により効率的な解析手法が必要となっている。本研究では、非負値行列因子分解 (NMF) を ARPES 分析に適用し、効率的な解析手法の確立を目的とする。Fig.1 内の各グラフは (a) は単層グラフェン、(b) は二重の直線上のエネルギー分散がみられる二層グラフェンである。また、各グラフは左から、実験スペクトル、NMF で得られた基底ベクトルと活性化ベクトルの掛け合わせによる再現スペクトル、再現スペクトルにおける基底ベクトルの構成比である。得られた活性化ベクトルを特徴量

として、k-means 法によりクラスタリングを行い、SiC 基板上のグラフェンの空間マッピングを得ることができた。

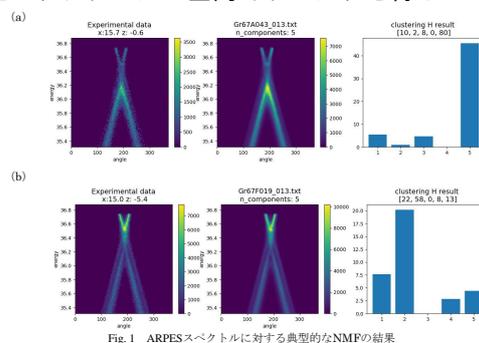


Fig. 1 ARPES スペクトルに対する典型的な NMF の結果

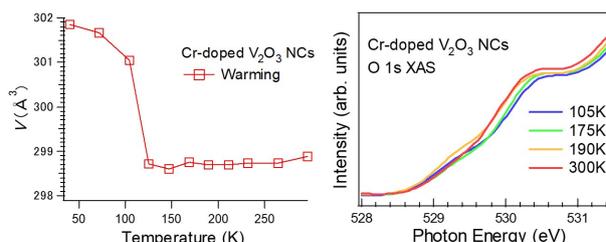
E-3

V₂O₃ ナノ結晶における金属絶縁体転移と構造転移の分離

佐賀大理工^A, NSRR^B, 佐賀大 SL セ^C, 弘前大院理工^D, 九大院工^E, 東大物性研^F, 熊本大院自然^G, 理研^H 古谷悠太^A, 赤瀬慶祐^A, 平木陵雅^A, 石井啓文^B, 吉村政人^B, 今村真幸^C, 高橋和敏^C, 手塚泰久^D, 河江達也^E, 松尾晶^F, 金道浩一^F, 木田徹也^G, 南任真史^H, 石橋幸治^H, 石渡洋一^A

モット型の金属絶縁体転移では、一般に、反強磁性秩序の形成と結晶構造の対称性の変化が伴われる。近年、金属絶縁体転移の電子デバイスへの応用が期待されているが、そのスイッチング速度は構造転移によって律速されると考えられており、両相転移を分離する手法の開発が望まれている。実際、VO_{2-δ}/VO₂ 二層ナノ薄膜において、金属絶縁体転移と構造転移の分離が観測された [1]。本研究では、平均サイズが約 10 nm の Cr ドープ V₂O₃ ナノ結晶について、金属絶縁体転移、反強磁性転移、構造相転移の発現を調べた。図は X 線回折とリートベルト解析によって求めた単位格子体積と O 1s 軟 X 線吸収分光 (XAS) スペクトルの温度依存性である。ともに昇温で測定した。単位格子体積は ~120 K で大きく収縮するのに対し、非占有状態の状態密度を反映する XAS スペクトルは ~180 K でギャップを閉

じる方向に変化していることがわかる。両者が変化する温度は ~60 K 離れており、金属絶縁体転移と構造転移が分離して生じていることが示された。構造転移温度の低下は、ナノ結晶の表面周囲における磁気秩序の不安定化が、構造転移 (磁気歪み) を抑制するようにはたらいたことに由来すると考えている。[1] D. Lee et al., Science 362,1037 (2018).



ランダム構造の単位格子の体積の温度変化 O 1s XAS スペクトルの温度変化

E-4

Vibrating Wire 法を用いた低温・水素脆性による材料劣化非破壊評価法の開発

九大院工^A, 九大総理工^B, 岡山理科大学^C 芳賀雄仁^A, 太子周^A, 志賀雅巨^A, 橋爪健一^B, 稲垣祐次^C, 河江達也^A

水素は金属内部に侵入・拡散すると脆化現象を引き起こすが、低温ではその強い量子性のためトンネル効果による侵入・拡散で脆化が進行する可能性がある。したがって液体水素(LH₂)を安全に利用するためには、その液化温度(~20K)まで材料の低温脆化・水素脆化に対する監視が必要と考えられる。しかし低温領域における金属材料の水素脆化に関する研究は存在しない。そこで本研究では *Vibrating Wire* 法を用いて、低温における水素吸蔵金属の機械的特性を観測する技術の開発を行った [1]。

定磁場中の金属ワイヤに交流電流を流すと、ワイヤはローレンツ力を受け振動する。電流の周波数を変化させると、周波数がワイヤの固有振動数と一致した際に共振により誘導起電力が最大となり、ワイヤの両端の電圧を測定するとピークが現れる。

図は、高温であらかじめ水素を吸蔵させた NbH_{0.02}ワイヤの共振のピーク高さと同共振周波数の温度変化を表している。室温から温度を下げて行くと、両方の値とも120Kでジャンプが起きて、 $T \sim 80K$ 付近で試料が破断した。これは

、水素吸蔵によって脆化した金属が連続的に共振させたことにより金属疲労が起これ、振動が不規則になったためであると考えられる。一方、*Pure Nb* ではこのような異常は見られなかった。このことから、*Vibrating Wire* 法実験は材料の非破壊評価に応用できる可能性があると考えられる。本講演ではこの詳細について報告する。

[1] Y. Inagaki et al., Appl. Phys. Exp. 8, 095502 (2015).

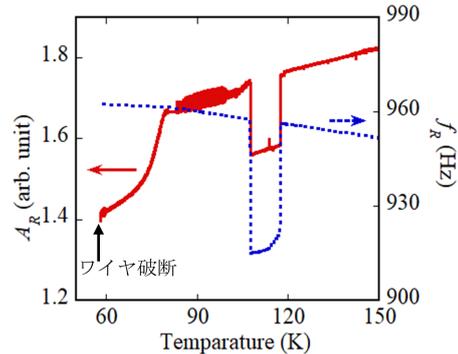


図1: NbH_{0.02}のピーク高さ(実線)と共振周波数(点線)の温度変化。

E-5

Nb-SNS ジョセフソン接合内部に侵入した水素が形成するエネルギー状態の観測

九大院工^A, 九大総理工^B 太子周^A, 宮川一慶^A, 芳賀雄仁^A, 志賀雅巨^A, 橋爪健一^B, 河江達也^A

水素は最も質量が小さい元素であるため、強い量子性を示す。例えば金属内に侵入した水素は、常伝導状態でトンネル拡散や離散的なエネルギー準位などの量子現象を示す。一方、超伝導転移するとフェルミ面に超伝導ギャップが出現するため、金属内に侵入した水素が示す量子的振る舞いも常伝導状態から変化すると予想される。例えば、トンネル拡散は常伝導状態に比べ指数関数的に増大すると予想されている [1]。また離散準位のエネルギー幅も変化すると予想される。しかし、超伝導金属内の水素の量子現象に関する実験研究はほとんどない。そこで本研究は、超伝導転移により金属内に侵入した水素の離散準位の測定を目的とした。実験は、低温で水素を吸蔵させた試料およびあらかじめ超伝導体内に水素を吸蔵させた試料、双方で超伝導 - 常伝導 - 超伝導ジョセフソン接合(SNS-JJ)を作製し、その電気伝導特性を調べた。図1にあらかじめ水素を吸蔵させた場合の結果を示す。このグラフわかるように超伝導ギャップ内に複数のピークが現れていることが分かる。さらに、ピーク間隔は温度変化してもほぼ一定で

あり、Andreev 反射によるピークとは明らかに異なる。以上よりこれらピークは離散準位に起因する可能性がある。講演では、以上の結果と併せて低温で水素を吸蔵させた試料の結果も報告する予定である。 [1] M. Matsumoto and Y. Ohashi, J. Phys. Soc. Jpn. 62, 2088 (1993)., Y. Ohashi and M. Matsumoto, J. Phys. Soc. Jpn. 62, 3532 (1993). [2] K. Miyakawa, et al., Appl. Phys. Express. 15, 013002 (2022)

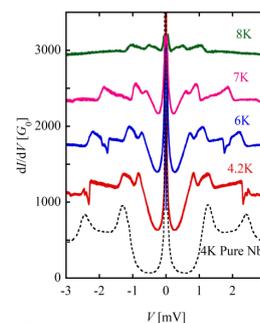


図1. NbH_{0.1}製 SNS-JJ 接合における dI/dV 信号の温度変化。

E-6

スピン三重項超伝導体 UTe₂ の点接合分光実験

九大院工^A, 九大 RI セ^B, 東北大金研^C 寺本翼^A, 本多史憲^B, 志賀雅巨^A, 高橋拓也^A, 李徳新^C, 仲村愛^C, 本間佳哉^C, 清水悠晴^C, 三宅厚志^C, 青木大^C, 河江達也^A

U 化合物では、f 電子と伝導電子の混成 (c-f 混成) により、重い電子状態や非従来型超伝導状態など多彩な量子状態が発現する。近年発見されたウラン系超伝導体 UTe₂ では、スピン三重項超伝導体である可能性が指摘されており、その超伝導対称性が注目されている。超伝導対称性を決定する実験として、STM 実験が行われたが超伝導による信号に加えて近藤共鳴状態も同時に観測されるためスペクトル形状からはその対称性は決定はできていない [1]。そこで、この問題点を解決するために我々は点接合分光実験を行った。点接合分光法では、探針と試料を微小面積で接触させた状態で微分伝導 (dI/dV) を測定する。この時、接触径が電子の平均自由行程よりも小さい場合、dI/dV 信号は試料の電子状態密度に比例するため、dI/dV 信号の計測を通して電子状態の直接観測が可能になる。また、点接合分光法では探針と試料を接触させた状態で dI/dV 信号の測定を行うため f 電子状態への電子のトンネル確率が増大し、STM 実験に比べ局在した f 電子状態

を明瞭に観測できると期待される [2]。図 1 にこれまでに得られた dI/dV 信号を示す。探針には Pt を使用している。講演では、点接合分光実験によって得られた dI/dV 信号とその温度依存性について説明する予定である。

[1] Jiao, L. et al. Nature 579, 523–527 (2020). [2] T. Takahashi, et al., J. Phys. Soc. Jpn. 93, 023704 (2024).

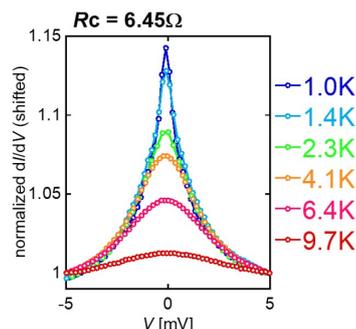


図1 UTe₂に対する点接合分光実験の微分伝導度信号の温度依存性

E-7

ソフトポイントコンタクト法を用いた重い電子化合物 CeRu₂Si₂ の電子状態測定

九大工^A, 九大院工^B, 東北大学金研^C, 都立大^D 高橋修二郎^A, 内藤叶登^A, 高橋拓也^B, 寺本翼^B, 志賀雅巨^B, 青木大^C, 大貫惇睦^D, 河江達也^B

希土類化合物では、伝導電子と f 電子の混成 (c-f 混成) により低温において、近藤効果、重い電子状態、価数揺動などの多彩な量子現象が発現する。これらの量子現象を深く理解するためには、フェルミエネルギー近傍の電子状態測定などの微視的な観点からの研究が重要である。我々の研究室では、電子状態の測定手法として点接合分光 (PCS) 法に注目している。PCS 法では、探針と試料を微小面積で接触させた状態で、微分伝導度 (dI/dV) を測定することにより、フェルミエネルギー近傍の電子状態の情報を得る。実際我々は、PCS 法を用いた典型的な重い電子化合物 CeRu₂Si₂ の電子状態測定により、c-f 混成に起因した近藤共鳴状態の形成を明らかにした [1]。一方、PCS 法の問題点は探針と試料を機械的に接触させているため、高磁場下での実験が困難な点である。そこで我々は、高磁場下における重い電子化合物の電子状態測定に向け、ソフトポイントコンタクト (SPCS) 法に注目した。SPCS 法では、探針を試料表面に微小面積で固着させるため、高磁場下での実験が可能になる。しかしながら、重い電子化

合物における SPCS 実験の報告例はほとんどなく、SPCS 法により重い電子化合物の電子状態測定が可能であるか自明でない。これらの背景から本研究では、SPCS 法により重い電子化合物の電子状態測定が可能であるか明らかにすることを目的に、重い電子化合物 CeRu₂Si₂ の SPCS 実験を行った。結果は CeRu₂Si₂ の PCS 実験で得られた信号と良く一致し [1]、SPCS 法は PCS 法と同様に重い電子化合物の電子状態測定に有効であることが分かった。講演では、dI/dV 信号の温度依存性などの詳細な結果を示す予定である。

[1] T. Takahashi, et al. J. Phys. Soc. Jpn. 93, 023704 (2024)

E-8

ベイズ計測を用いた重い電子化合物 CeRu₂Si₂ 点接合分光スペクトルの精密解析

九大工^A, 九大院工^B, 東大新領域^C, 熊大理^D, 東北大学金研^E, 都立大^F 内藤叶登^A, 高橋修二郎^A, 高橋拓也^B, 寺本翼^B, 志賀雅亘^B, 片上舜^C, 水牧仁一朗^D, 岡田真人^C, 青木大^E, 大貫惇睦^F, 河江達也^B

希土類化合物やアクチナイド化合物で出現する重い電子状態は、局在した f 電子と遍歴した伝導電子の混成 (c-f 混成) に起因する。従って、重い電子化合物の物性を理解するためには、低温における c-f 混成の発達過程を調べるのが重要である。我々は、電子状態測定という微視的な観点から c-f 混成の発達過程を明らかにすることを目指している。理論研究によれば、重い電子化合物のフェルミエネルギー近傍の電子状態は、温度が近藤温度 (TK) より十分に低い場合 ($T \ll TK$)、c-f 混成の発達に伴いフェルミエネルギー近傍の電子状態に混成ギャップが形成される [1]。この混成ギャップを点接合分光 (PCS) 法を用いて観測すると、微分伝導 (dI/dV) 信号に非対称なダブルピーク構造が現れることが予想されている。しかしながら重い電子化合物の多くでは、PCS 実験で dI/dV 信号に明瞭なダブルピーク構造が観測されていない。実際、我々の研究室で行われた典型的な重い電子化合物である CeRu₂Si₂ の PCS 実験では、 dI/dV 信号に単一のディップ構造だけが観測された [2]。一方、混成ギャップの大きさが小さければ dI/dV 信号には明瞭なダブルピーク構造は観測されず、単一のピーク (ディップ) が観測されると考えられるため、我々の実験結果において混成ギャップが形成されていないと結論付けるのは早計である。つまり、PCS 信号から混成ギャップの有無について議論するためには、最小二乗法を用いた一般的な解析手法ではなく、より精密に PCS 信号を解析できる手法が必要になる。以上の研究背景より、本研究では CeRu₂Si₂ の PCS 信号の精密解析の手法としてベイズ計測に注目した。ベイズ計測では、ベイズ自由エネルギーを導入することで実験データの解析に最適なモデルを決定することができる。実験結果をベイズ計測を用いて解析したところ、低温における CeRu₂Si₂ の PCS 信号は単一のディップ構造ではなく、二つのディップ構造から構成されていることが明らかになった。講演では、詳細な解析結果について説明する。[1] M. Maltseva, et al., Phys. Rev. Lett. 103, 206402(2009). [2] T. Takahashi, et al., J. Phys. Soc. Jpn. 93, 023704 (2024).

E-9

ソフトポイントコンタクト法を用いた CeRhIn₅ の電子状態測定

九大院工^A, 原子力機構^B 志賀雅亘^A, 高橋拓也^A, 寺本翼^A, 芳賀芳範^B, 河江達也^A

重い電子化合物として知られる CeRhIn₅ は、比熱測定によって T ~ 9 K において大きな電子比熱係数を持つこと、T = 3.8 K において反強磁性秩序することが知られている [1]。また近年では、CeRhIn₅ の磁気秩序相における電子状態を明らかにするため、走査トンネル分光 (STS) 法を用いた電子状態測定が盛んに行われている [2, 3]。一方、報告された STS 実験の結果は、グループによって大きく異なっており、低温における CeRhIn₅ の電子状態については良く分かっていない。そこで我々は、CeRhIn₅ の電子状態の解明を目的に、ソフトポイントコンタクト (SPCS) 法を用いた CeRhIn₅ の微分伝導度 (dI/dV) 測定を行った。図 1 に SPCS 法によって得られた T = 4.6 K における CeRhIn₅ の dI/dV 信号を示す。非対称なバックグラウンドに加え、ゼロバイアス近傍にピーク構造が現れることが分かる。 dI/dV 信号の詳細な温度依存性の測定や理論モデルを用いた解析の結果、それぞれ近藤共鳴状態と磁気揺らぎに起因していることが明らかになった。講演では、理論モデルによる解析や PCS 信号の温度依存性な

ど詳細な結果について報告する。[1] H. Hegger, et al., Phys. Rev. Lett. 84, 4986 (2000) [2] P. Aynajian et al., Nature 486, 201 (2012)

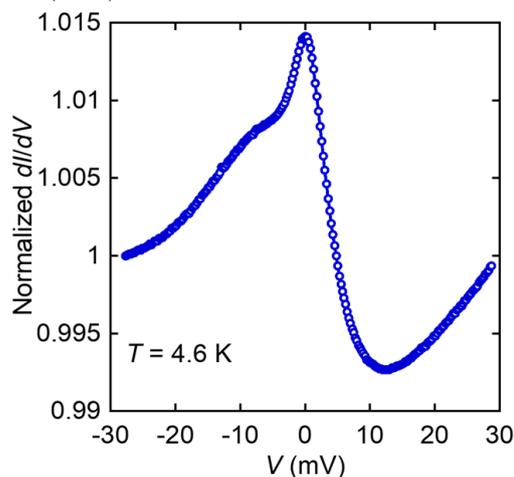


図 1 T = 4.6 K で得られた CeRhIn₅ の SPCS 信号

E-10

内殻 X 線分光法による AuCu₃ 型構造 Ce 金属間化合物の理論研究

九州大学 IMI^A, 大阪公立大学^B 雀部矩正^A, 魚住孝幸^B

強相関物質の代表的物質群である Ce 金属間化合物では近藤効果や磁気秩序・多極子秩序など多彩な物性が発現する [1]。Ce 金属間化合物の物性は極低温の電子状態に起因し、近藤効果に由来する一重項状態と Ruderman Kittel Kasuya Yosida 相互作用の競合によって、Ce 金属間化合物の電子状態は決定する。講演では、AuCu₃ 型結晶構造 Ce 金属間化合物の近藤効果の強さについて、内殻 X 線光電子分光 (XPS), 吸収分光 (XAS), 共鳴非弾性散乱 (RIXS) の電荷移動サテライト構造の混成強度依存性を議論する [2, 3]。

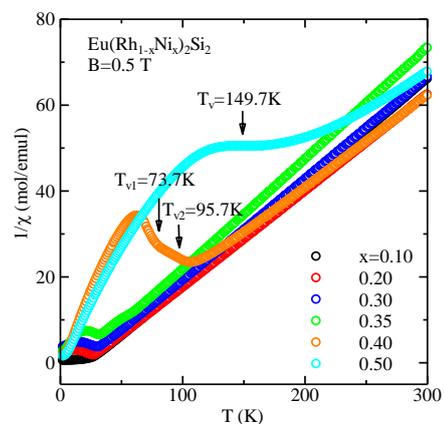
[1] S. Doniach, Physica B C 91, 231 (1977). [2] N. Sasabe, H. Tonai and T. Uozumi, J. Phys. Soc. Jpn. 86, 03701 (2017). [3] N. Sasabe and T. Uozumi, J. Phys. Soc. Jpn. 96, 054706 (2023).

E-11

Eu(Rh_{1-x}Ni_x)₂Si₂ における Eu 価数に対する Ni 置換効果

九大院理^A 田坂啓悟^A, 光田暁弘^A

EuRh₂Si₂ は常圧で $T_N = 25\text{K}$ の反強磁性体であり、1.00GPa 以上の静水圧力下では、反強磁性の消失と同時に、一次の価数転移が現れる。我々は、EuRh₂Si₂ を母物質とする置換系 Eu(Rh_{1-x}Ni_x)₂Si₂ の多結晶を作製し、磁化と電気抵抗の測定から Ni 置換による Eu 価数の影響を調べた。右図に 0.5T の磁場下で測定された逆帯磁率の温度依存性を示す。矢印は価数転移温度 T_V を示している。x=0.35 までは Ni 置換とともに T_N はわずかに高温側へシフトする。x = 0.4 で反強磁性が消失し価数転移が出現することが分かった。価数転移温度 T_V は x の増加とともに急激に上昇し、静水圧力下における振舞いと似ている。Ni 置換は化学的圧力とともに電子ドープの効果も期待されるので、その効果についても考察する。



E-12 X線分光による強的多極子秩序の観測

熊本大学理学部物理コース^A, 九州大学 IMI^B, 大阪公立大学^C 水牧仁一朗^A, 雀部矩正^B, 魚住孝幸^C

楠瀬・速水らによって提案された多極子完全基底は四種類の多極子で構築され、既知の物性応答の分類への適用だけでなく、新たな物性を探索するのに非常に有効である [1]。とくに完全基底を用いた電子状態の記述は興味ある物性の秩序変数を特定することにも利用できる。これまで秩序変数が反強的な多極子に関しては、共鳴 X 線散乱測定など [2] により秩序構造が明らかにされてきたが、強的な秩序に関しては、その秩序変数を明らかにすることは困難であった。本講演では、X 線吸収分光法が多極子の強的な秩序を明らかにするのに有用であることを示し、さらに多極子のランクの決定にも強力な手段であることを CeB₆ を例に示す。[1]H.Kusunose, *etal.*, *JPSJ*89, 104704(2020).[2]H.Nakao, *etal.*, *JPSJ*70, 1857(2001).

E-13 層状ペロブスカイト Nd_{2-x}Sr_xNiO₄ の結晶合成と物性評価

鹿児島大学理工学研究科^A, 鹿児島大学工学部^B 時任勇大^A, 丸田涼空^B, 奥田哲治^A

層状ペロブスカイト型酸化物 Nd₂NiO₄ は、NiO₆ 八面体が頂点共有で連なって形成するペロブスカイト層と NdO 岩塩層が交互積層した K₂NiF₄ 型構造をとる T_N=320 K の反強磁性絶縁体である。この Ni 酸化物の Nd³⁺ イオンを Sr²⁺ イオンで置換すると、Ni の形式価数が 2 価から増え、Ni イオンと希土類陽イオンの金属・酸素間の距離が変化し、NiO₆ 八面体の傾きが小さくなり結晶構造の対称性が斜方晶から正方晶になるため、電気的伝導性が向上することが知られている。Sr ドープ量を増やしていくと、 $x=0.2\sim 0.5$ の間で反強磁性と金属的性質が共存し、 $x=0.8$ 以上になると反強磁性が消失し金属相になると考えられている。

本研究では、新たな熱電材料として、この Sr²⁺ イオン置換を行った Nd₂NiO₄ (Nd_{2-x}Sr_xNiO₄) に着目し、その単結晶育成や多結晶作製を試み、得られた結晶の常温から高温までの輸送特性の評価を行った。

単結晶育成は、O₂ 雰囲気下で FZ 法により行った。現時点では $x=1.3$ まで不純物の無い単相の結晶育成に成功している。SEM 付属の EDX により組成分析を行ったところ、得られた結晶の組成は Sr ドープ量が大きくなるにつれ、仕込み値より実測値が大きくなるのがわかった。粉末 X 線回折による構造解析の結果、格子定数は過去の報告 [1] と定性的に一致した結果を示したことから、Nd が Sr に元素置換された結晶が得られたと考えられる。本講演では、Nd_{2-x}Sr_xNiO₄ の単結晶育成と高温輸送特性の詳細を示す。

[1] Y. Takeda, *et al.*, *J. Solid State Chem.* **96**, 72 (1992).

E-14

第一原理計算による1次元ファンデルワールス物質 Ta_4SiTe_4 の熱電効果の研究

九州工大院工^A, 東大物性研^B 富高楽斗^A, 河野翔也^A, 岡本佳比古^B, 松平和之^A

Ta_4SiTe_4 の結晶構造は空間群 $Pbam$ (D_{2h} , No.55) に属する直方晶であり、 c 軸方向に強い一次元性を持つファンデルワールス結晶である [1]。また、約 0.1 eV の小さなバンドギャップをもつ半導体である [2]。室温以下で高い熱電特性を示すことから、低温での熱電変換材料の候補として注目されている [3]。さらに元素置換により n 型および p 型の熱電半導体としての性能制御が可能である [3,4]。最近、我々の第一原理計算による研究から求めた反射スペクトルは実験結果をよく再現することが示され、これにより第一原理計算で Ta_4SiTe_4 の電子状態をよく記述できることが確認された [2]。そこで本研究では、さらなる熱電特性の性能向上を目的として、最適なキャリアドーピング条件を第一原理計算により検討を行った。

ゼーベック係数、電気伝導率、電子の熱伝導率は密度汎関数法で計算した電子状態から緩和時間近似の下でボルツマン輸送方程式を解くことで算出した。緩和時間は電気抵抗率の実験値と比較して決定した。電子状態の計算には VASP、輸送係数の計算には BoltzTraP を使用した。

まず、電子ドーピングを行った際のゼーベック係数を実験結果と比較したところ、計算結果は Ta を Mo で元素置換した場合の実験値と一致する傾向を示した。さらに、熱電特性の性能指数 ZT のキャリア濃度依存性を評価した結果、キャリア濃度が 10^{20}cm^{-3} 付近で最大化することが予測された。この結果は、実験により合成された試料で評価されたキャリアドーピング量と一致している。ホールドーピングについても同様に計算を行い、性能指数を評価したところ、実験で見積もられるドーピング量よりも高いキャリア濃度で性能が最大化することが予測された。

- [1] L. Jing, *et al.*, Inorg. Chem. **29**, 3943 (1990).
- [2] F. Matsunaga, *et al.*, Phys. Rev. B **109**, L161105 (2024).
- [3] T. Inohara, *et al.*, Appl. Phys. Lett. **110**, 183901 (2017).
- [4] Y. Okamoto, *et al.*, Appl. Phys. Lett. **115**, 043901 (2019).

E-15

Ca_2MnO_4 の電子構造に対する酸素八面体回転効果の第一原理解析

九州工業大学大学院^A 吉田悠作^A, 中村和磨^A, 堀部陽一^A

本講演では、層状ペロブスカイト型マンガン酸化物 Ca_2MnO_4 (CMO) の持つ酸素八面体の回転による電子構造への影響について第一原理計算を用いた研究結果を発表する。CMO は、高温では対称性の高い $I4_1/mmm$ 空間群に属し、 CaMnO_3 ペロブスカイト層と岩塩型 CaO 層が周期的に堆積した構造を持つ。1,000 K 以下では、CMO の酸素八面体が容易に c 軸回りに回転する相変態が起こり、八面体回転の空間パターンや $\text{Mn}-\text{O}$ 結合長などが異なる $I4_1/acd$ 構造と $Acam$ 構造からなる層状構造をとりやすいことが知られている [1,2]。CMO は、結晶場分裂、磁気相互作用、電子相関を通じて、さまざまな新機能発現が期待され、活発な研究が行われている [3]。本研究では、CMO の酸素八面体回転が低エネルギー電子構造に及ぼす影響に着目し、第一原理計算の観点から電子構造解析と輸送特性評価を行う。第一原理スピン偏極 GGA 計算を行い、CMO の電子構造を調べた。スピン偏極を施すことで 0.82 eV のバンドギャップを形成することが分かった。また、八面体回転の効果を調べたところ、約 9.09° の回転によりバンドギャップは 0.09 eV 小さくなることが分かった。伝導バンドには影響は小さいが、 Γ 点と Y 点の放物線バンドにおいて、 Y 点のそれは消失することが分かった。講演では、構造モデルおよび第一原理計算の詳細に加えて、輸送特性に関する第一原理計算の結果も報告する。

- [1] P. Rocha-Rodrigues *et al.*, Phys. Rev. B **102** 104115 (2020).
- [2] C. Autret, C. Martin, M. Hervieu, R. Retoux, B. Raveau, G. Andre, and F. Boure, J. Solid State Chem. **177**, 2044 (2004).
- [3] D. Kan, R. Aso, R. Sato, M. Haruta, H. Kurata and Y. Shimakawa, Nature Mater. **15**, 432 (2016).