

研究成果概要

CsAlCl₄ 結晶の電子状態とフォノン分散のバンド構造について、Quantum ESPRESSO を用いて第一原理計算を行った。計算されたフォノンモードを分析し、先行研究におけるラマン分光法の結果と比較した。バンド構造は、Z 点付近の価電子帯上部と Γ 点の伝導帯下部との間に 5.401 eV の間接バンドギャップを示した。この相におけるフォノン振動モードが低周波、中周波、高周波のモードに分割され、四面体 AlCl₄ アニオンの運動を伴う低周波グローバルモードでのみ Cs 原子が振動し、AlCl₄ イオン内の中周波ローカルモードでは四面体の曲げおよびねじり運動が起こり、高周波ローカルモードでは Al-Cl 結合の伸縮運動が起きていることを示した。高周波モードは、完全な対称性があるかどうかによって、さらに 2 つに分類されることもわかった。

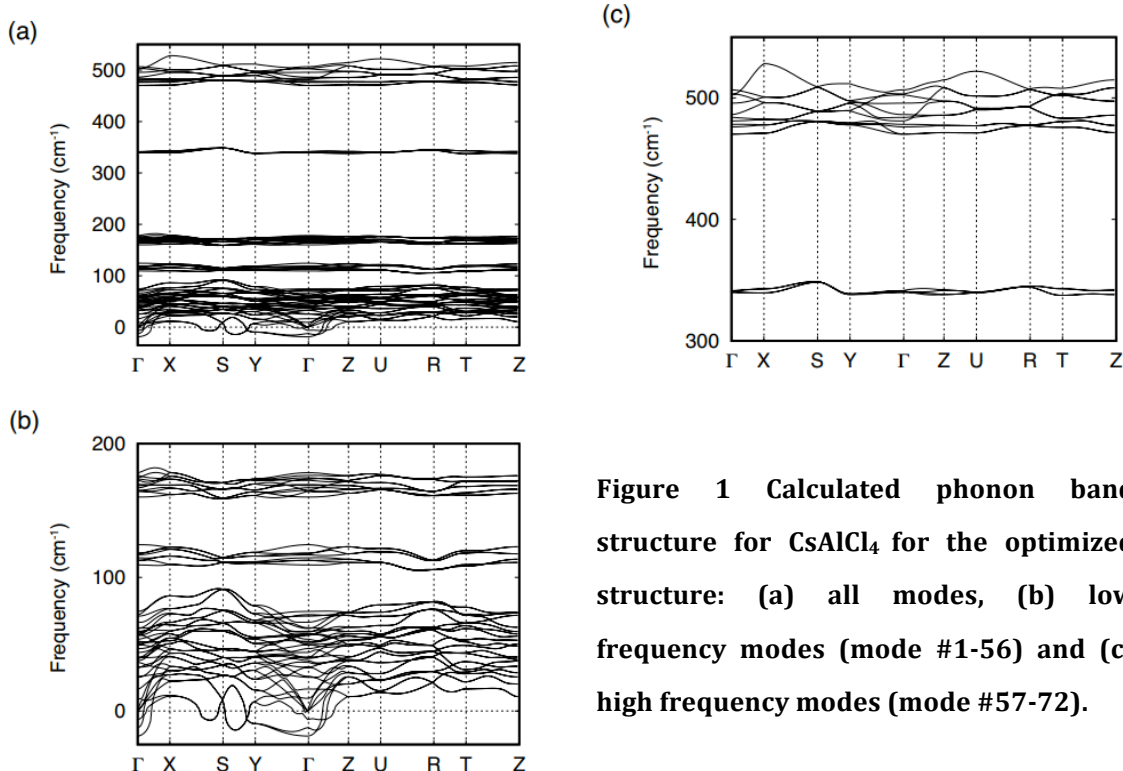


Figure 1 Calculated phonon band structure for CsAlCl₄ for the optimized structure: (a) all modes, (b) low frequency modes (mode #1-56) and (c) high frequency modes (mode #57-72).

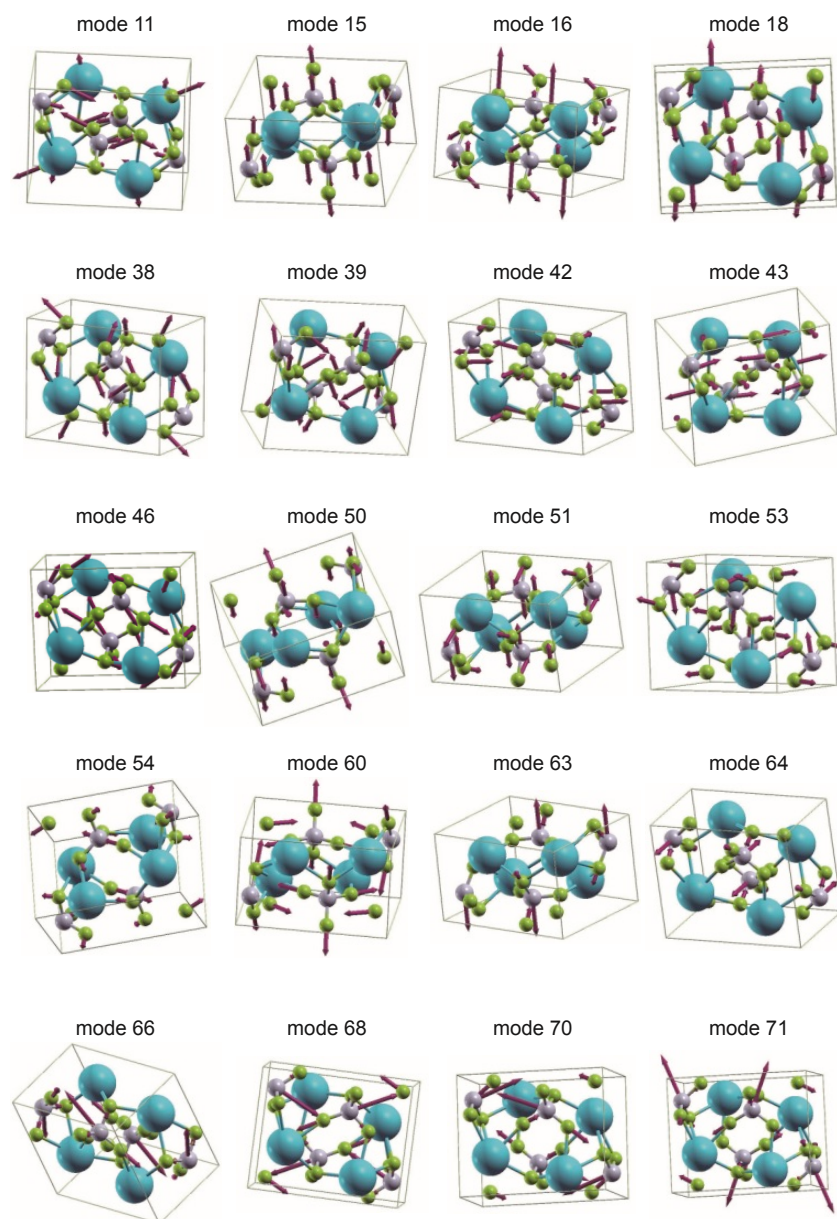


Figure 2 Visualized phonon vibration modes of CsAlCl₄ for the optimized structure. The Cs, Al and Cl atoms are colored with turquoise, grey and lime green, respectively.

発表論文(謝辞なし)

Y. Okazaki, H. Shimizu, K. Nakamura, K. Yoshida, G. Raffy, M. Kimura, K. Tsukamoto, R. Akasegawa, K. Hachiya, M. Takafuji, A. Del Guerzo, T. Sagawa, Materials Advances, *in print* (2024) DOI: [10.1039/d3ma00648d](https://doi.org/10.1039/d3ma00648d)