

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。前回報告の計算結果の改善を目論んで、**non-analytical term correction**を考慮した再計算を行った。まず、エネルギーバンド構造は、Z点付近の価電子帯上部と Γ 点の伝導帯下部との間に **5.423 eV**の間接バンドギャップを示し、報告値に近づいた。 Γ 点間の直接遷移も **5.431 eV**であることから、エネルギーバンドはフラットに近い。フォノン振動モード（図 1, 2）の低周波、中周波、高周波のモードの分割は、もとの計算と変わらないが、グループ内でいくつかのモードは入れ替わった。

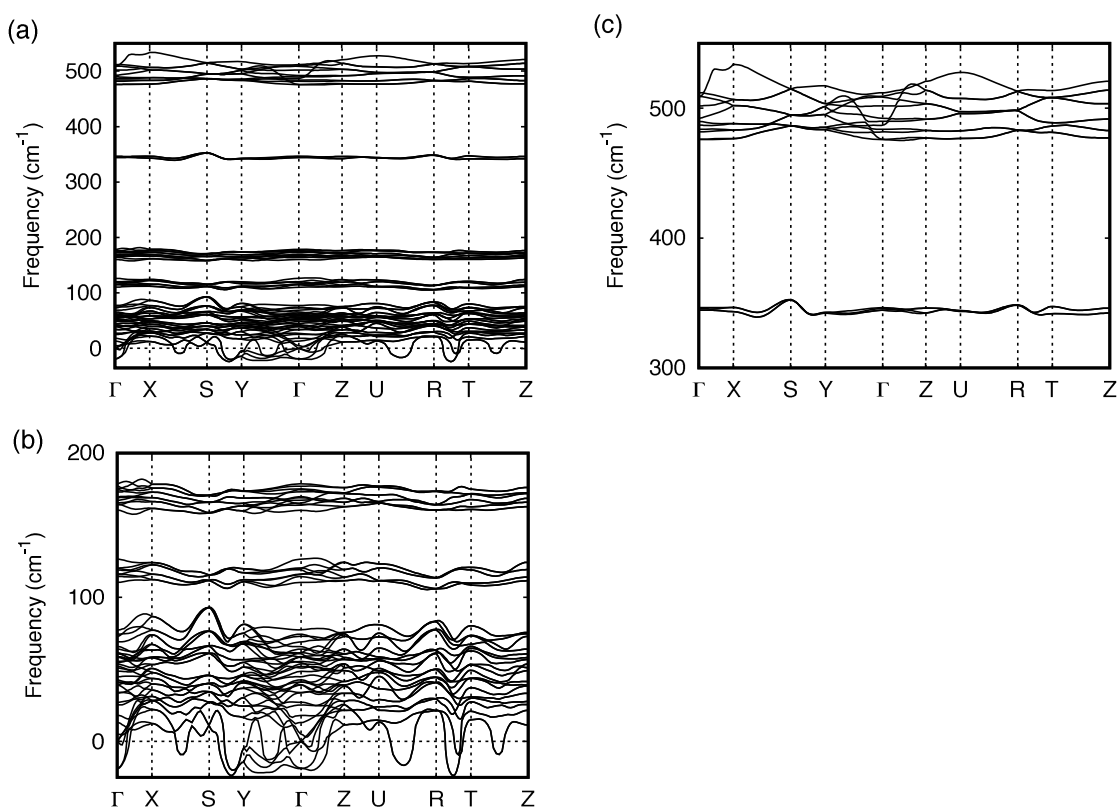


Figure 1: Calculated phonon band structure for CsAlCl₄ for the optimized structure: (a) all modes, (b) low frequency modes (mode #1-56) and (c) high frequency modes (mode #57-72).

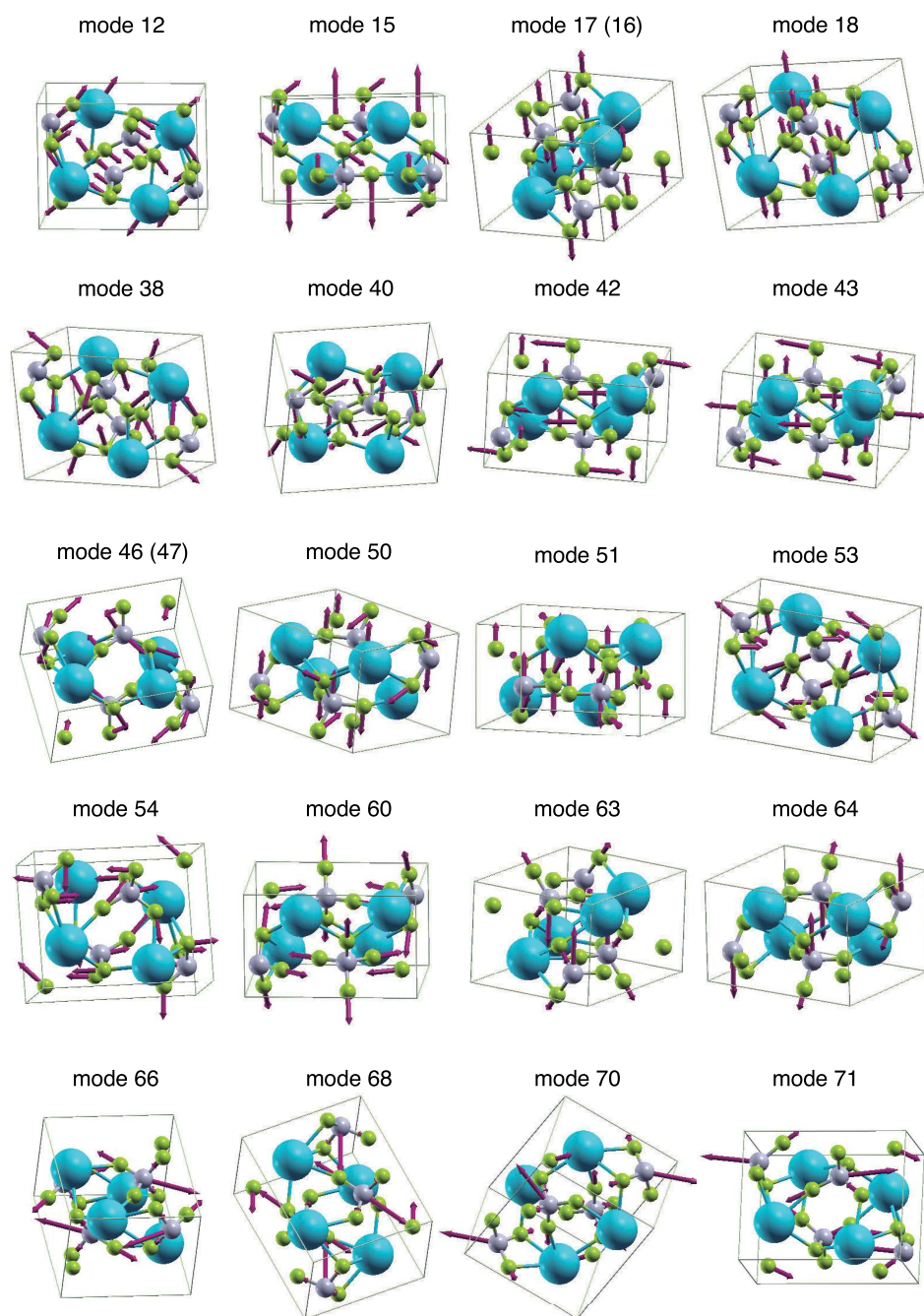


Figure 2: Visualized phonon vibration modes of CsAlCl₄ for the optimized structure. The Cs, Al and Cl atoms are colored with turquoise, grey and lime green, respectively. Mode numbers in brackets correspond to those of the recalculation with non-analytical term correction.

発表論文(謝辞なし)

R. Akasegawa, K. Hachiya, T. Sagawa, “In-gap states and local structures around substitutional defects in La- or Nb-doped n-type SrTiO₃”, *Next Materials*, **2**, 100067 (2024)
DOI: 10.1016/j.nxmate.2023.100067