

研究責任者名 Name	小嶋 健児		所属機関 Affiliation	高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所
受理番号 Proposal No.	大型 14/15-13	研究課題名 Program title	第一原理計算を用いた結晶中のミュオン位置計算 シミュレーション	

研究を終了しましたので、下記の通り報告します。

成果の概要

Abstract

本課題は、正ミュオン粒子 (μ^+ : ミュオン) の結晶中の位置に関する情報を、密度汎関数法(DFT)を用いた第一原理計算で予測し、J-PARC MLFをはじめとする大型加速器施設を使った物質中のミュオンスピン緩和測定 (μ SR) の解釈に寄与することを目的としている。本年度の成果は以下の通りである。

ハートレーポテンシャル（密度汎関数法で求めた電子密度からのクーロンポテンシャル和）を用いて、

- (1) Ir 酸化物 Sr₂IrO₄, Sr₃Ir₂O₇ と V 酸化物 Sr₂V₂O₇ のミュオンサイトを決定し、 μ SR 実験データの解釈に用いた。（発表論文[1,2]）
- (2) T' 型 214 構造を持つ Cu 酸化物 (Pr, La)₂CuO₄, Eu₂CuO₄ のミュオンサイトを決定し、 μ SR 実験データの解釈に用いた。

なお、これらの物質は、これまでもっとも良くミュオン測定で調べられている銅酸化物 La₂CuO₄ と同様の構造を持っており、遷移元素の違いと頂点酸素の位置の違いによる酸化物中ミュオンサイトの比較研究ともなっている。

This project is aimed to predict the stable position of positive muon (μ^+) in the crystal structure of various materials using density functional theory (DFT), and employ the prediction to the analysis of muon spin relaxation (μ SR) measurement at large accelerator facilities such as J-PARC MLF. The result of this year is as follows, using Hartree Potential:

- (1) Determined muon sites in Ir oxides Sr₂IrO₄ and Sr₃Ir₂O₇ and V oxide Sr₂V₂O₇, and employed to the analysis of μ SR result (published results [1,2]).
- (2) Determined muon sites in Cu oxide with T' -type 214 structure (Pr, La)₂CuO₄ and Eu₂CuO₄ and compared to the experimental result.

The materials above have similar structures with the most investigated Cu oxide La₂CuO₄, and make a good comparison of muon sites with different transition metal ions or apical oxygen positions.

[1] M. Miyazaki *et al.* Phys. Rev. B 91, 155113 (2015)

[2] I. Yamauchi *et al.* Phys. Rev. B 92, 064408 (2015)

[3] M. Fujita *et al.* MLF annual report 2014 (page number to be assigned.)

研究成果を公開しているホームページアドレス

事務局にて使用	口頭研究発表 件数	査読つきの 学術論文数	プロシーディング 論文数	その他 (投稿中を含む)

密度汎関数法 (DFT) を用いた第一原理計算で最も基本的な計算手順は、与えられた原子配置と擬ポテンシャル中で運動する電子のエネルギー最適化である。これにより電子密度が計算され、ハートレーポテンシャル (最適化された電子密度からのクーロンポテンシャル) が計算出来る。この計算は物質のパラメータ (構成元素と座標) だけで実行可能で、正ミュオンを試験電荷として電子系への影響がないと仮定した場合の安定点を求めることができる。非常に少ないCPU時間で、ある程度正確なミュオン位置が計算でき、大型施設を用いたミュオンスピン緩和 (μ SR) 測定のデータ解析の第一歩として利用できる。

(1) バナジウム(V)酸化物とイリジウム(Ir)酸化物のミュオンサイト

図1に Sr_2VO_4 と Sr_2IrO_4 の結晶構造とハートレーポテンシャルの正電荷を持つ粒子に対する安定点を示す。ミュオン自身が電子に与える影響が小さく、試験電荷として扱うことが出来る限り、この安定点をミュオンサイトと仮定して良い。図1 (a)に示した Sr_2VO_4 は銅酸化物 La_2CuO_4 高温正方晶と同じ結晶対称性を持ち、遷移金属元素が銅かイリジウムかの違いはあるものの、頂点酸素付近にハートレーポテンシャル安定点を持ち、同様のミュオンサイトを持っていることが明らかになった。図1 (b)に示した Sr_2IrO_4 は遷移金属周りに8面体6配位の酸化物イオン配位子を持つ点は Sr_2VO_4 と同じであるが、8面体の軸が結晶軸に対して回転している。このため、 Sr_2VO_4 では1種類しかなかった安定ミュオンサイトが2種類に分裂し、さらに Ir サイトのスピンの配置によって各々さらに2種類の非等価なサイトに分裂することが分かった。これらの結果はビームを用いた μ SR 測定の結果の解釈に用いられた[1, 2]。

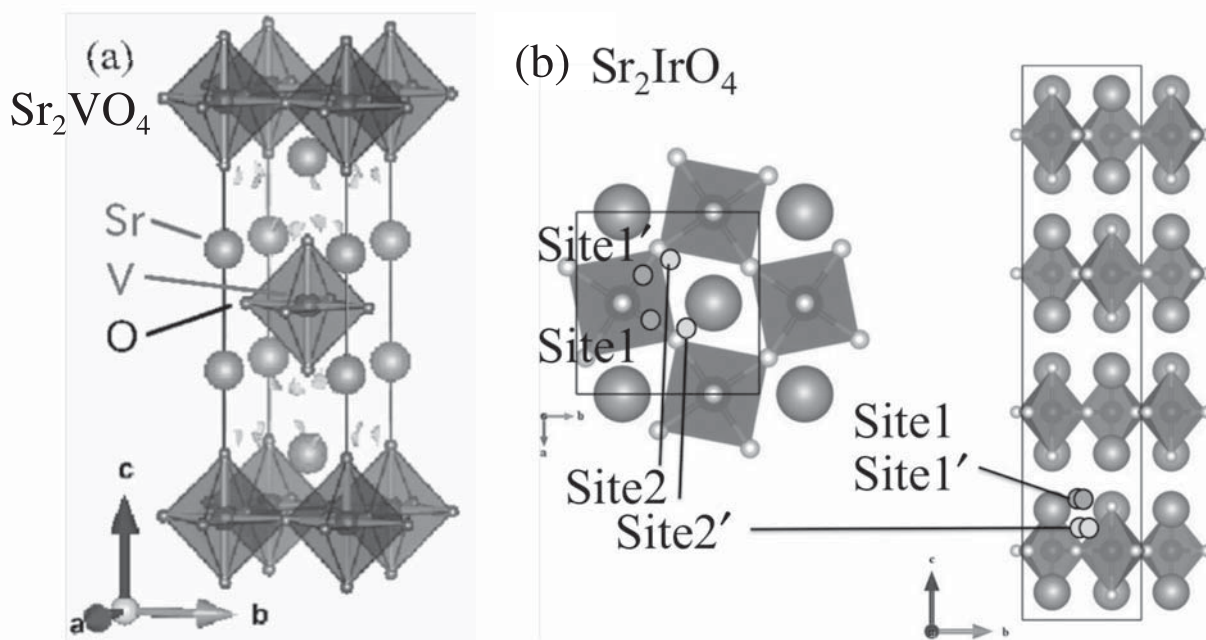


図1 (a) Sr_2VO_4 の結晶構造とハートレーポテンシャル安定点 (黄色いローブ)
 (b) Sr_2IrO_4 の結晶構造とハートレーポテンシャル安定点 (黄色とオレンジの●印)

(2) T' 型 214 構造を持つ銅酸化物のミュオンサイト

図 2 (a)に Pr₂CuO₄ の結晶構造とハートレーポテンシャル安定点から求めたミュオンサイトを示した。この物質は T' 型 214 構造と呼ばれる構造を持ち、La₂CuO₄ や Sr₂V₂O₇ のような T 型 214 構造の 8 面体頂点酸素の位置が Cu-Pr 面内に移動して、面内酸素位置の真上に来たような構造をしている。計算から予想されるミュオンサイトは Cu-Pr 面内 (zx 平面 y=0) にあり、頂点酸素付近と面内酸素付近にあることが分かった、

図 2 (b)に銅とプラセオジムの作る双極子磁場の等高線プロットに、予想されたミュオン位置を書込んだものを示した。ビームを用いた μ SR 測定で観測にかかる磁場はミュオン位置に置ける双極子磁場で、この値が測定結果と直接比較できるものである。その結果、図 1 に示したスピン構造を与えた時の計算が観測磁場と一致し、中性子測定では一意に決まらなかったスピン構造をミュオン測定で一意に決めることが出来た[3]。ミュオン・中性子測定の相補性を定量的なレベルに引き上げるのに本研究の有効性が明らかになった。

参考文献

- [1] M. Miyazaki *et al.* “Evidence for ordered magnetic moments at oxygen sites in antiferromagnetic Sr₂IrO₄ and Sr₃Ir₂O₇”, Phys. Rev. B 91, 155113 (2015)
- [2] I. Yamauchi *et al.* “Structural anomalies and short-range magnetic correlations in the orbitally degenerate system Sr₂V₂O₇”, Phys. Rev. B 92, 064408 (2015)
- [3] M. Fujita *et al.* “Special Spin Density Distribution in T' -structured Cuprate Oxides Studied by μ SR”, MLF annual report 2014.

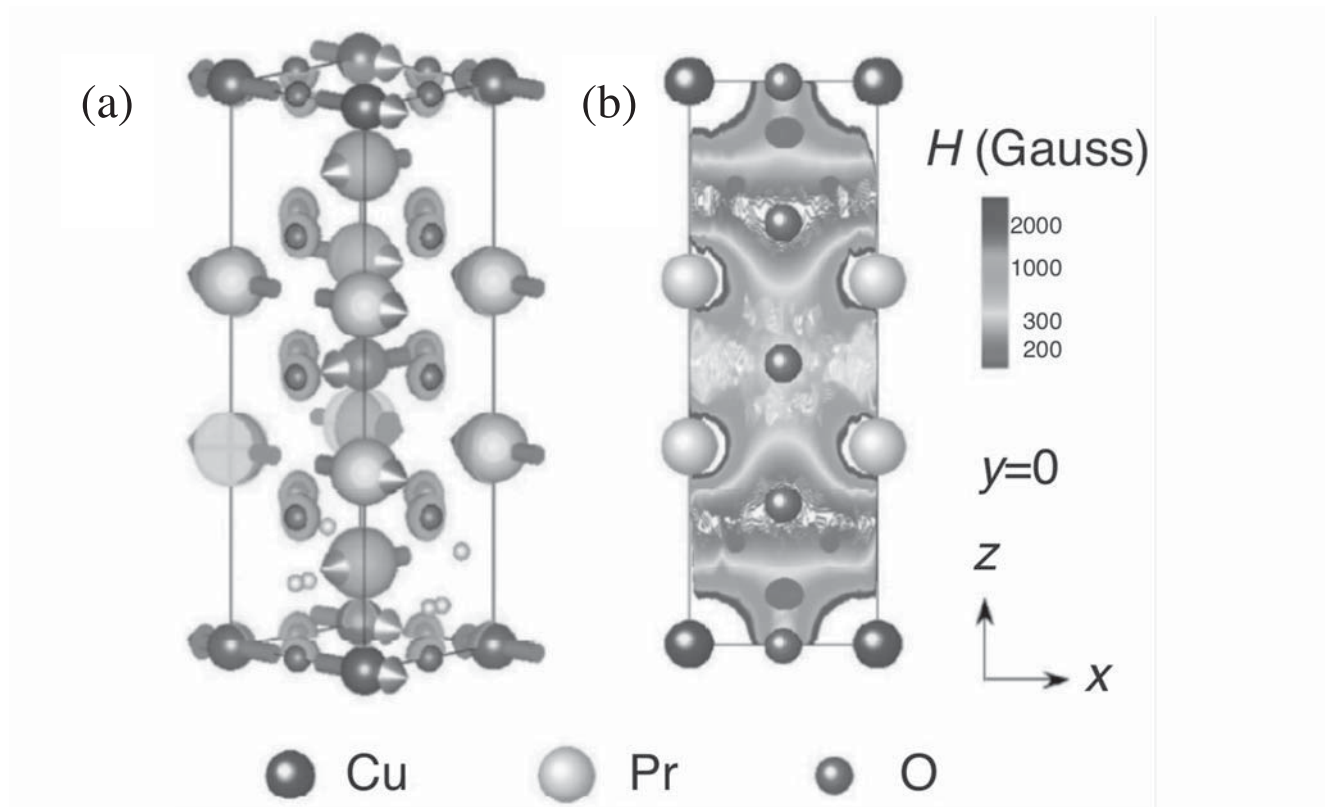


図 2 (a)Pr₂CuO₄ の結晶構造とハートレーポテンシャル安定点から求めたミュオンサイト (白い○) (b)銅とプラセオジムの作る双極子磁場計算。ミュオンサイトの存在する灰色の領域における計算値とビームを用いた μ SR 測定から求められる値を比較した。