

Spectroscopic and Theoretical Investigation of Layered Perovskite Oxyfluoride $\text{Sr}_2\text{RuO}_3\text{F}_2$ Thin Films

H30海自20

派遣先 The 2018 E-MRS Spring Meeting (フランス・ストラスブール)

期 間 平成30年6月17日～平成30年6月21日 (5日間)

申請者 東京大学 理学系研究科 化学専攻 博士3年 倉内 裕史

海外における研究活動状況

研究目的

近年、金属酸化物に軽元素アニオン (H^- , N^{3-} , F^-) をドーブし、物性を変化させる試みが活発である。最近報告された金属 Sr_2RuO_4 から絶縁体 $\text{Sr}_2\text{RuO}_3\text{F}_2$ への物性変化は、カチオンの価数変化を伴わない金属絶縁体転移というフッ素ドーブでは初のケースであり、そのメカニズムに興味を持たれる。そこで本研究では、フッ素化による転移の機構解明を目的として、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_3\text{F}_2$ の電子状態をX線光電子分光と第一原理計算によって調べた。

海外における研究活動報告

固体材料の分野では、近年金属酸化物に対し H^- , N^{3-} , F^- といった軽元素アニオンをドーブする研究が活発に行われている。アニオンドーブによる物性変化は多岐にわたるが、特に電気伝導性 (金属・絶縁体) の変化はエレクトロニクス応用の観点から重要である。これまでに報告されているアニオンドーブによる電気伝導性変化は、アニオンの格子間挿入や、 O^{2-} の N^{3-}/F^- 置換によって、伝導を担う元素が酸化・還元されることが原因であった。ところが申請者の所属グループが最近報告したルテニウム酸化物 Sr_2RuO_4 のフッ素化では、ルテニウムの

酸化数が4価のまま変化していないにもかかわらず金属から絶縁体に転移していることがわかった。アニオンドーブにおいて、元素の酸化還元を伴わない金属絶縁体転移はこれが初めての例である。この転移の機構を明らかにするため、申請者らの研究グループはX線光電子分光、X線吸収そして第一原理計算によってフッ素化後の $\text{Sr}_2\text{RuO}_3\text{F}_2$ の結晶構造と電子状態の解析を行った。その結果、フッ素ドーブによってルテニウム周りの配位原子が一部置き換わり、 $4d$ 軌道の結晶場分裂が大きく変化したことが今回の転移を引き起こしたことが分かった。

申請者は上に述べた研究成果を、European Materials Research Society (E-MRS) 2018 Spring Meetingにて口頭で発表した。E-MRS学会はヨーロッパを中心に物質科学研究者が数多く集う学会であり、アニオンドーブという新しい物質探索のアプローチを知らしめ、今回明らかとなったアニオンドーブ特有の物性変化メカニズムを紹介する格好の機会であった。学会会場であるストラスブールのコンベンションセンターは、広大なアトリウムを介して各シンポジウムの部屋が接続する形となっており、アトリウムには常に多くの研究者がおり自由にディスカッションできる環境が整っていた。申請者自身も、口頭発表の内容に関する詳細な議論をアトリウムで行う機会があり、発表で取

り上げたルテニウム以外の元素におけるアニオンドープの動向などを情報共有することが出来た。そうした研究者同士の交流を通し、参加目的であったアニオンドープ研究のアピールに関して手ごたえを感じることが出来た。本学会はおよそ30のシンポジウムからなる大規模なものであり、申請者は専門が理論計算であることから専らエネルギー材料の理論探索のシンポジウムを聴講した。材料科学領域においては理論化学と情報科学を融合したマテリアルズインフォマティクスの手法を用いた物質探索が活発に行われていることは知っていたが、実際にシンポジウムでの発表題目は、インフォマティクスを活用した物質探索がほとんどであり、分野としての勢いを感じた一方、そうした最新の研究手法に追随しきれていない自身の現状を痛感した。今回の学会参加によって、そういった手法を実際に活用している研究者の口から、

研究の具体的な手続きを聴くことができ、今回の学会参加がより意義深いものとなった。

本学会は自身初の国際学会であり、海外研究者との研究交流はもちろんのこと、国際活動の第一歩としても大変重要な機会であった。それに臨むに際して貴財団からは大変心強い支援をいただき、今回の海外派遣を充実したものとする事が出来た。ここに厚く御礼を申し上げる。

**この派遣の研究成果等を発表した
著書、論文、報告書の書名・講演題目**

Akira Chikamatsu, Yuji Kurauchi, Keisuke Kawahara, Tomoya Onozuka, Makoto Minohara, Hiroshi Kumigashira, Eiji Ikenaga, and Tetsuya Hasegawa, "Spectroscopic and theoretical investigation of the electronic states of layered perovskite oxyfluoride $\text{Sr}_2\text{RuO}_3\text{F}_2$ thin film", *Physical Review B* **97**, 235101 (2018).