

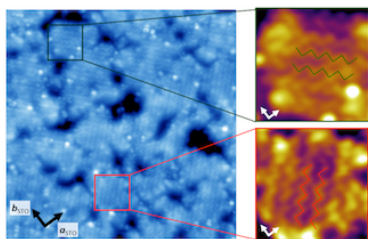
La_{0.75}Ca_{0.25}MnO₃ 薄膜表面における構造・電子状態の第一原理計算**First-principles calculation of structural/electronic properties on a La_{0.75}Ca_{0.25}MnO₃ surface**東大工¹, 東北大 WPI-AIMR², 理研³, 物材機構⁴, JST さきがけ⁵○中村 俊也¹, 安藤 康伸¹, 南谷 英美¹, 清水 亮太², 岩谷 克也³, 大澤 健男⁴, 一杉 太郎^{2,5}, 渡邊 聡¹Univ. Tokyo¹, Tohoku Univ.², RIKEN³, NIMS⁴, JST-PRESTO⁵○Shunya Nakamura¹, Yasunobu Ando¹, Emi Minamitani¹, Ryota Shimizu², Katsuya Iwaya³, Takeo Ohsawa⁴, Taro Hitosugi^{2,5}, Satoshi Watanabe¹E-mail: nakamura@cello.t.u-tokyo.ac.jp

ペロブスカイト型酸化物は、固体酸化物型燃料電池の空気極材料や太陽電池等、様々な用途で期待されている材料である。どの応用先に関しても材料表面の重要性が認識される中、ペロブスカイト型マンガン酸化物は容易劈開面を持たないため、原子スケールの表面構造・電子状態について研究が乏しい。そこで我々は、実験で観測された走査トンネル顕微鏡(STM)像の理論的解析とペロブスカイト型酸化物の表面電子状態の解明に取り組んだ。本講演ではその結果を報告する。

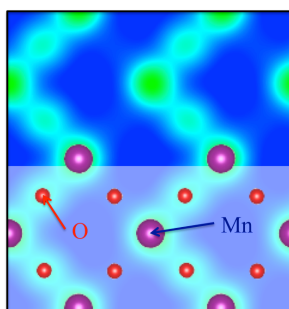
密度汎関数法計算プログラム VASP を用い、Mn 3d 軌道における強い電子間クーロン相互作用を適切に考慮するために LDA+U 法による計算を行った。計算モデルとしては、実験と組成の近い La₆Ca₂Mn₈O₂₄ スラブモデルを用いた。La を Ca に置換する位置については、3 パターンのモデルを検討した。また、実験では SrTiO₃(100)基板上に試料を作製していることを考慮し、スラブ最下層の格子定数を基板の格子定数の実験値に固定した。STM シミュレーションの際には、スラブモデル表面の局所状態密度(LDOS)を用いて行った。STM 像は、スラブ表面から 2Å離れた平面上の局所状態密度(LDOS)を用いてシミュレーションした。

状態密度の計算結果を解析した結果、バルク材料やスラブ中央では強磁性的な金属状態であったのに対して、表面のフェルミ準位近傍では電子が少なく、ほぼ絶縁化していることが分かった。また STM 像シミュレーションでは、最安定なドーパモデルの場合に実験で観察されたジグザグ構造(図 a)が計算結果にも明瞭に見られた(図 b)。この特徴は、表面再構成で周期構造が(1×1)から(√2×√2)に変化することによるものと考えられる。以上の結果は、いずれも清水らの実験結果(本講演の直前の講演)とよく整合している。

(a)



(b)



図(a) LCMO 薄膜の STM 像。拡大図(3.5nm 角)では 2 方向のジグザグ構造が確認できる。

図(b) STM 像のシミュレーション結果(フェルミ準位の 1.5eV 下のエネルギーでの LDOS)。実験と同様の傾向が見られる。