

水素置換 LaMnAsO の磁気特性と電子構造の解析

Magnetic Properties and Electronic Structure of Hydrogen-Substituted LaMnAsO

東工大元素戦略¹, 東工大フロ材研² [○]松石 聡¹, 小畑由紀子², 細野秀雄^{1,2}

MCES, Tokyo Tech.¹, LMS Tokyo Tech.², [○]Satoru Matsuishi¹, Yukiko Obata², Hideo Hosono^{1,2}

E-mail: matsuishi.s.aa@m.titech.ac.jp

1111 型 LaMnAsO は、 O^{2-} の一部を H^- で置換すると、MnAs 層に電子ドーピングされ、反強磁性絶縁体($T_N = 317$ K)から強磁性金属へ変化する。本研究では、 $LaMnAsO_{1-x}H_x$ ($x = 0.63$)について、磁化率、比熱および紫外光電子分光(UPS)測定と、密度汎関数理論(DFT)による電子状態計算を行い、電子構造を調べた。Arrott プロットから、Fig.1(a)の飽和磁化(M_s)の温度依存性が得られ、 T_C は 218 K、2K での Mn 一個当たりの磁気モーメントは $1.72 \mu_B$ と求められた。また、ベキ乗則($M_s(T) = M_s(0)(T_C - T)^\gamma$, $\gamma = 0.38$)から、強磁性が 3 次元的であることが示唆された。 M - H カーブから求めた相転移に伴うエントロピー減少($-\Delta S_M$)は、 T_C を中心とした連続的な温度依存性を持つことから(Fig. 1(b))、転移が 2 次転移によるものであることがわかった。DFT 計算(GGA-PBE)を行ったところ、隣接 Mn のスピンの反平行になる AFM 配置の方が、平行になる FM 配置に比べ、 $x = 0.0$ - 1.0 の全範囲で安定になり、実験と一致しなかったが、そのエネルギー差は $x = 0.0$ での 740 meV から $x = 1.0$ での 4 meV まで単調に減少することから、H 置換により強磁性が安定化する傾向は確認された。 $x = 0.5$ の FM 配置での Mn 一個当たりの磁気モーメントの計算値は $1.89 \mu_B$ であり、実験値と

ほぼ一致する。He I(21.3 eV)光源を用いて、77 K で UPS 測定を行ったところ、Fig.2 のように、 $LaMnAsO_{0.37}H_{0.63}$ では LaMnAsO と異なるスペクトルが得られた。 $x = 0.63$ での O2p バンドの形状およびフェルミレベル以下にギャップがないといった特徴は、 $x = 0.5$ の AFM 配置ではなく、FM 配置での理論状態密度に見られるものであり、本系が強磁性金属状態であることが示された。

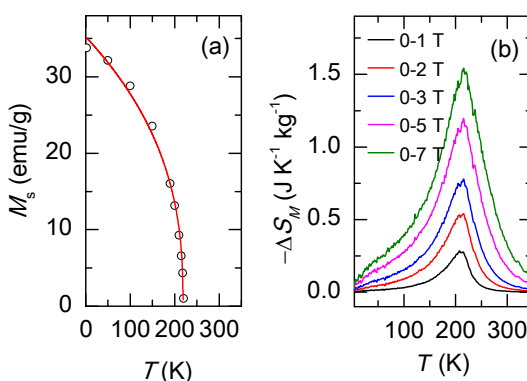


Fig.1 LaMnAsO_{0.36}H_{0.64} の M_s および $-\Delta S_M$ の温度依存性

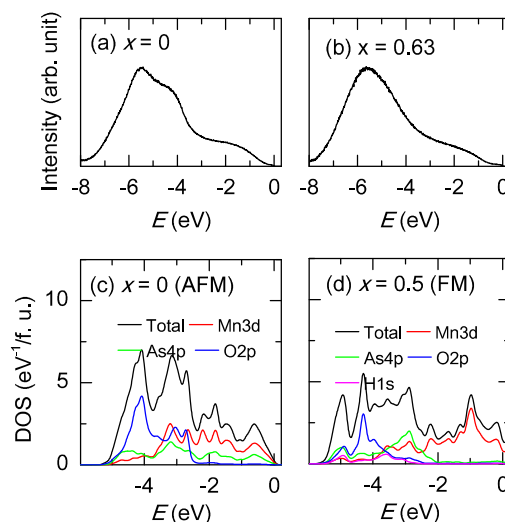


Fig.2 LaMnAsO および LaMnAsO_{0.36}H_{0.64} の UPS スペクトル(a,b)と DFT 計算による状態密度(c,d)