

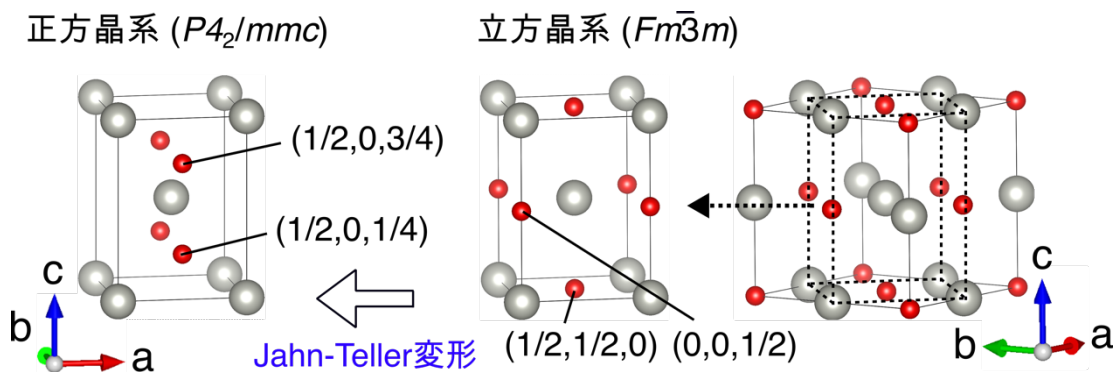
酸化パラジウムにおける電子-フォノン相互作用

(京大福井セ¹・京大院工²) 西川 雄太^{1,2}, 石川 晃久^{1,2}・○大田 航^{1,2}・佐藤 徹^{1,2}
 Electron-Phonon Coupling in Palladium Oxide (¹ *Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University*, ² *Graduate School of Engineering, Kyoto University*) Yuta Nishikawa,^{1,2}
 Akihisa Ishikawa,^{1,2} ○Wataru Ota,^{1,2} Tohru Sato,^{1,2}

Palladium oxide, which has a tetragonal structure (space group: $P4_2/mmc$) at standard temperature and pressure, forms a cubic structure (space group: $Fm\bar{3}m$) at high pressure or on a substrate. The symmetry lowering from $Fm\bar{3}m$ to $P4_2/mmc$ can be understood as a cooperative Jahn-Teller distortion induced by electron-phonon coupling. In this study, we investigated the vibronic structures responsible for the cooperative Jahn-Teller deformation.

Keywords : *Vibronic coupling, Palladium oxide, Cooperative Jahn-Teller effect*

酸化パラジウムは自動車触媒等の環境浄化触媒として利用されており、その基礎的な振電構造を理解することは重要である。酸化パラジウムは常温常圧下では正方晶系(空間群: $P4_2/mmc$)の構造を持つが、高压条件下や基板上では立方晶系(空間群: $Fm\bar{3}m$)の構造を持つ^{1,2)}。 $Fm\bar{3}m$ から $P4_2/mmc$ への対称性低下は電子-フォノン相互作用を駆動力とする協働的ヤーン・テラー変形として理解できる。本研究では、酸化パラジウムの振電状態の第一原理計算を行い、協働的ヤーン・テラー変形を引き起こす振電構造について検討した。電子状態計算は密度汎関数理論(DFT)に基づいて行った。計算手法には、PBE+U法³⁾を用いた。PBE+UのU値は線形応答理論に基づいて第一原理的に決定した⁴⁾。DFT計算には、計算パッケージとして、Quantum ESPRESSOを用いた⁵⁾。



1) A. G. Christy *et al.*, Phys. Rev. B **1995**, 52, 9259. 2) J. Kumer, *et al.*, J. Less. Common Metals **1989**, 147, 59. 3) S. L. Dudarev *et al.*, Phys. Rev. B **1998**, 57, 1505. 4) I. Timrov *et al.*, Comput. Phys. Commun. **2022**, 279, 108455. 5) P. Giannozzi *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **2009**, 21, 395502.