

**Ba<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>Mn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> および LiMnAs の物性評価****Physical properties of Ba<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>Mn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> and LiMnAs**○石川響<sup>1</sup>, 曾根希萌<sup>2</sup>, 下村大河<sup>2</sup>, 石渡聖矢<sup>2</sup>, 渡辺忠孝<sup>3</sup>, 高野良紀<sup>3</sup>, 高瀬浩一<sup>3</sup>\*H. Ishikawa<sup>1</sup>, K. Sone<sup>2</sup>, T. Shimomura<sup>2</sup>, S. Ishiwata<sup>2</sup>, T. Watanabe<sup>3</sup>, Y. Takano<sup>3</sup>, K. Takase<sup>3</sup>

Abstract: We have investigated the hole doping effect of Ba<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>Mn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> Mott insulator, where the space groups of BaMn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> and LiMnAs are *I4/mmm* and *P4/nmm*, respectively. XRD profiles and room temperature resistivities are reported in this study.

## ・はじめに

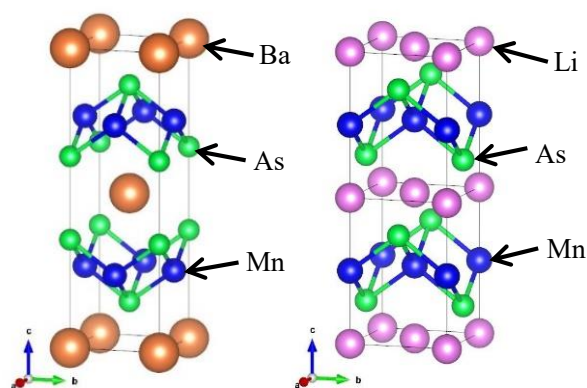
層状オキシニクタイト(LaO)FeAs にキャリアをドーピングした物質において超伝導が発見されて以来, この物質系やその関連物質に関する研究が精力的に行われている. この物質群で, 遷移金属元素が Mn の場合, (LaO)MnAs は, 強い電子相関によって反強磁性絶縁体となっており, 強いオンサイトクーロン相互作用のため, 電子ドーピングに対しては, 物性は全く変化しない. また, ホールドーピングでは, 電気抵抗の絶対値は減少するものの, 依然として, 反強磁性絶縁体のままである[1][2].

同じ MnAs 層をもつ BaMn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> も(LaO)MnAs と同様, 反強磁性絶縁体である[3]. 本研究では, この物質にホールドーピングを行うことで電子間相互作用を制御し, 金属相の出現や磁気秩序の崩壊が生じるかについて調査した.

Figure1(a) に BaMn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> の結晶構造を示す. この構造では, Ba を中心に MnAs 層が対称に配置されている. Ba を Li で完全に置き換えると LiMnAs という物質になるが, この物質は Figure1(b) に示す通り, (LaO)MnAs と同様な結晶構造をもつ. このように 2 つの物質で結晶構造が異なることから, Li ドーピングを増やしていくとやがて結晶構造が変化することが期待される. そこで, 本研究では, 結晶構造の変化にも注目した.

## ・実験方法

試料作成には固相反応法を用いた. 原材料は Li (99.2%), Mn (99.98%), As (99.999%), Ba (99%)であ

(a) BaMn<sub>2</sub>As<sub>2</sub>

(b) LiMnAs

**Figure1.** Crystal structure of BaMn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> and LiMnAs

る. Mn, As は大気中, Li, Ba は Ar 雰囲気中で計量を行った. Mn, As は 15 分混合, Li, Ba は混合せず Ta 管に入れ, 石英管内に真空封入した. 電気炉で, Ba<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>Mn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> は 850 °C で 18 時間, 500 °C で 5 時間焼成後, エアクエンチを行った. LiMnAs は 1150 °C で 2 時間, 900 °C で 24 時間温度を保ち焼成後, 水に入れクエンチを行った.その後, 試料を Ar 雰囲気中で 15 分間混合を行い, 6 t の圧力で 20 分間圧粉することで試料を短冊状に成形した後, Ta 管に入れ, 石英管内に真空封入した. Ba<sub>1-x</sub>Li<sub>x</sub>Mn<sub>2</sub>As<sub>2</sub> は, 750 °C で 6 時間, 900 °C で 16 時間, 500 °C で 10 時間焼成後, エアクエンチを行った. LiMnAs は電気炉で一度目と同様の焼成を行った.

得られた試料の構造評価には, CuK $\alpha$  線 ( $\lambda = 1.5418$  Å) による粉末 X 線回折法を用いた. 電気抵抗率の

測定には直流四端子法を用い、室温での測定を行った。

・実験結果

Figure2 は  $Ba_{1-x}Li_xMn_2As_2$ ,  $LiMnAs$  の粉末 X 線回折測定結果とシミュレーションである。

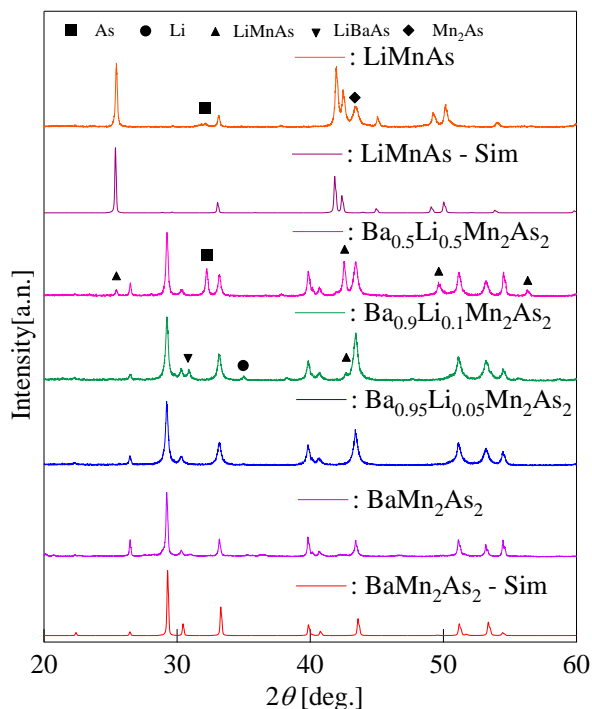


Figure2. Powder XRD patterns of  $LiMnAs$ ,  $Ba_{1-x}Li_xMn_2As_2$  and simulation

$Ba_{0.95}Li_{0.05}Mn_2As_2$  ではほぼ単相な試料が得られた。置換率が大きくなるにつれ、不純物のピークが多く見られるようになり、 $Ba_{0.5}Li_{0.5}Mn_2As_2$  では  $LiMnAs$  のピークが観測された。このことから、この試料では 2 つの相が同時に存在していると思われる。

Figure 3 に X 線回折測定の結果から求めた置換率ごとの格子定数を示す。

$a$  は置換率が大きくなると一度減少し、その後、わずかに増大する。一方、 $c$  は、わずかな置換に対して、大きく変化するが、その後、一定のままである。

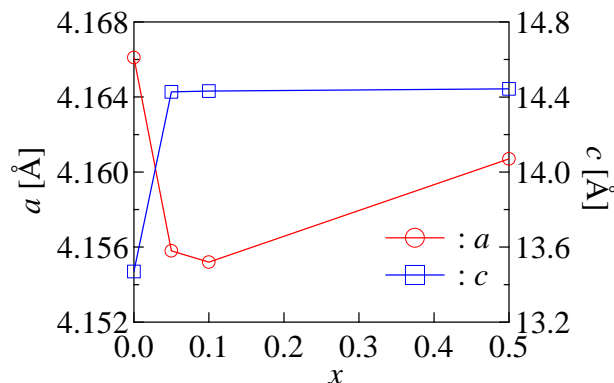


Figure3. Lattice constant of  $Ba_{1-x}Li_xMn_2As_2$

Table1. Electric resistivity at room temperature

試料	抵抗率 [ $\Omega \cdot m$ ]
$LiMnAs$	$6.75 \times 10^{-2}$
$Ba_{0.5}Li_{0.5}Mn_2As_2$	$1.56 \times 10^{-2}$
$Ba_{0.9}Li_{0.1}Mn_2As_2$	$7.32 \times 10^{-2}$
$Ba_{0.95}Li_{0.05}Mn_2As_2$	21.7
$BaMn_2As_2$	135

各試料の室温における電気抵抗率を Table 1 に示す。

$Ba_{1-x}Li_xMn_2As_2$  の抵抗率は置換率が大きくなるにつれ、減少した。

・まとめ

これらの結果より、2 つの異なる結晶構造をもつ  $BaMn_2As_2$  と  $LiMnAs$  において  $Ba$  を  $Li$  で置換していくと、ある置換濃度で構造相転移が生じるのではなく、途中の状態は二相混合状態にあることがわかった。

・参考文献

- [1] 内藤彰人 2014 年度 修士論文
- [2] 小山翔太 2016 年度 修士論文
- [3] Physical Review B **80**, 100403 (2009)