



# 物理工学科セミナー

日時：2月5日（月） 16:00 - 17:00

場所：葛飾キャンパス研究棟8F第1セミナー室

**Speaker**：清水 真 氏 (Makoto Shimizu)

**Affiliation**：京都大学大学院 理学研究科 物理学第一分野  
凝縮系理論グループ 特定研究員

**Title**： $\text{Pb}_9\text{Cu}(\text{PO}_4)_6\text{O}$ （いわゆるLK-99）の電子構造・磁気構造

## Abstract：

2023年7月韓国のグループから室温常圧超伝導の発見が報告[1,2]されたが、早急な追試の数々によって超伝導の可能性が否定された。ここで問題になったのが磁気半浮上である。半浮上が超伝導でなく強磁性によるものであることが実験[3]によって示唆されているが、強磁性の機構は明らかでない。

本研究[4]では電子密度汎関数理論（DFT）を用いて $\text{Pb}_9\text{Cu}(\text{PO}_4)_6\text{O}$ の電子構造を解析し、有効模型として3次元三角格子4軌道模型を構築した。さらにこの有効模型に対してゆらぎ交換近似（FLEX）を適用し、磁気構造を議論した。結果として、 $\text{Pb}_9\text{Cu}(\text{PO}_4)_6\text{O}$ そのものは反強磁性的な磁気感受率を示すが、少量の電子ドーピングによって強磁性的な感受率を示すことがわかった。この一連の結果によって実験で見られていた強磁性が説明できる。本物質の特徴は、反強磁性から強磁性への転移が容易な点だ。現実的なドーピング量で反強磁性・強磁性転移、そしてスピン一重項・三重項の転移が実現できる可能性がある。

## Reference：

[1] S. Lee, J.-H. Kim, and Y.-W. Kwon, arXiv:2307.12008.

[2] S. Lee, J. Kim, H.-T. Kim, S. Im, S. An, and K. H. Auh, arXiv:2307.12037.

[3] K. Guo, Y. Li, and S. Jia, Sci. China Phys. Astron. **66**, 107411 (2023).

[4] M. Shimizu, J. Otsuki, and H. O. Jeschke, Phys. Rev. B **108**, L201105 (2023).