

結果・考察

-§ *B*F₃の構造安定性の解析



東京大学物性研究所に深く感謝いたします。また、本研究に関わる講演会を実施して頂きました、ペンシルバニア州立大学 Gopalan 研究室 の吉田傑博士と、東京大学木村剛研究室の永井隆之博士にも厚くお礼申し上げます。

[1] B. K. Greve et al., J. Am. Chem. Soc. 132, 15496 (2010).

[2] G. Kresse and J. Furthmuller, Comput. Mater. Sci. 6, 15 (1996); G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B 47, 558 (1993); G. Kresse and J. Furthmuller, *ibid.* 54, 11169 (1996).

[3] P. E. Blochl, Phys. Rev. B 50, 17953 (1994); G. Kresse and D. Joubert, ibid. 59, 1758 (1999).

[4] J. P. Perdew et al., Phys. Rev. Lett. 100, 136406 (2008); S. L. Dudarev et al., Phys. Rev. B 57, 1505 (1998). [5] A. Togo and I. Tanaka, Scr. Mater. 108, 1 (2015). [6] V. Wang et al., Comput. Phys. Commun. 267, 108033 (2021). [7] Anubhav Jain *et al., APL materials* **1**, 011002 (2013).

- 配位数の多い構造の場合、 $\gamma_{q,v} > 0$ のフォノンモードが支配的であり 負熱膨張性を示さない

[8] Y. Mochizuki et al., Phys. Rev. Mater. 4, 044601 (2020). [9] S. Yoshida et al., Phys. Rev. Lett. 127,215701 (2021). [10] V. Popescu and A. Zunger, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 236403 (2010); V. Popescu and A. Zunger, *Phys. Rev. B* 85, 085201 (2012). [11] E. Gruneisen, Ann. Phys. 331, 211 (1908); E. Gruneisen, Ann. Phys. 344, 257 (1912). [12] K. Momma and F. Izumi, J. Appl. Crystallogr., 44, 1272 (2011).