

2 種類の変調が競合する $RNiC_2$ の超格子構造解析 Superlattice Structure Analysis of $RNiC_2$ with two Independent Competing Superstructure

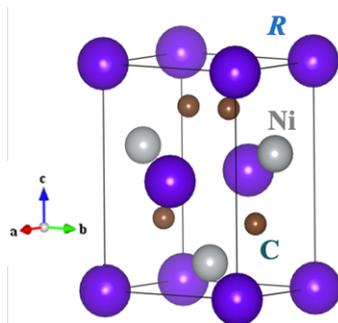
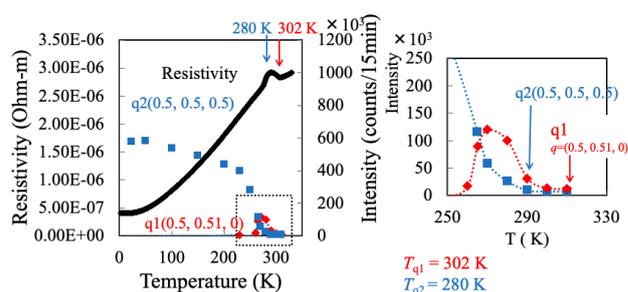
野上由夫¹, 近藤隆祐¹¹岡山大学 理学部 物理学科

〒700-8530 岡山市北区津島中 3-1-1

Yoshio NOGAMI^{1,*} and Ryusuke Kondo²¹Physics Department, Faculty of Science, Okayama University
3-1-1 Tsushimanaka, Kita, Okayama 700-8530, Japan

1 はじめに

CDW は、低次元的なフェルミ面に起因するパイエルス不安定性により起こる金属絶縁体転移を伴う構造相転移である。我々は $RNiC_2$ で二種類の変調構造 q_1 (0.5, ~0.52, 0) q_2 (0.5, 0.5, 0.5) が存在することをこれまでに報告してきた[1-4]。これらの変調構造はお互いに競合傾向にある[4, 5]。

図1 $RNiC_2$ の構造図3 $YNiC_2$ の抵抗と衛星反射強度の温度依存性

2 実験

2 つの変調の内 q_1 は電子構造計算のフェルミ面の不安定性を持つ波数と一致することから、CDW であることが確かめられたが[6]、 q_2 についてはその成因が明らかになっていなかった。我々は CDW である q_1 と競合する q_2 変調の成因に興味を持ち、KEK-PF の BL-6A ワイゼンベルクカメラを用いて $YNiC_2$ について 225K 以下で q_2 変調構造解析をおこなった。なお、Y の吸収や蛍光をへらすために波長は K 吸収端より下の 0.75\AA でおこなった。

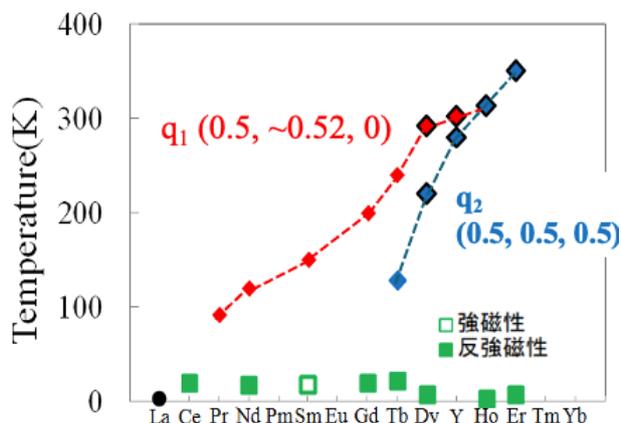
3 解析

低温では整合超格子形成により a - b , b - c , c - a が基本ベクトルとなる。消滅則等を参考に、この格子をさらに変換し、 $(2b, -2a, c-b)$ を基底とする単斜晶 Cm とした。なお形成されるドメインをすべて考慮した構造解析をおこなった。その結果を表 1 にまとめた。なお以下ではすべて室温格子で記述する。

温度	135K	161K	185K	205K	222K	295K
反射点	4894	4897	4751	4405	4760	1197
Rint	0.065	0.068	0.064	0.07	0.076	0.046
R1	0.0442	0.0467	0.0458	0.0388	0.0512	0.059

表 1 $YNiC_2$ の構造解析データ

超格子構造解析の結果、図 5 のように Ni が大きく移動していることが判明した。

図2 $RNiC_2$ の変調構造と低温での磁気秩序[4]

我々はほぼ全種類希土類 R について $RNiC_2$ の単結晶試料を合成しその低温変調構造を調べた[2,4]。一部は下村らによってもすでに調べられている[5]。その全般を図 2 に示す。軽希土類の $RNiC_2$ では q_1 が優勢であるが、Tb, Dy あたりでは共存領域が見られるが、Y より半径が小さくなる R では q_2 が優勢になる。なお一部の q_1 については磁気秩序の影響を強く受けることが確かめられている[1-5]。

室温付近で q_1 , q_2 が共存する $YNiC_2$ について、抵抗と衛星反射強度の温度変化を図 3 に示す。低温では q_2 のみが存在していることがわかる。

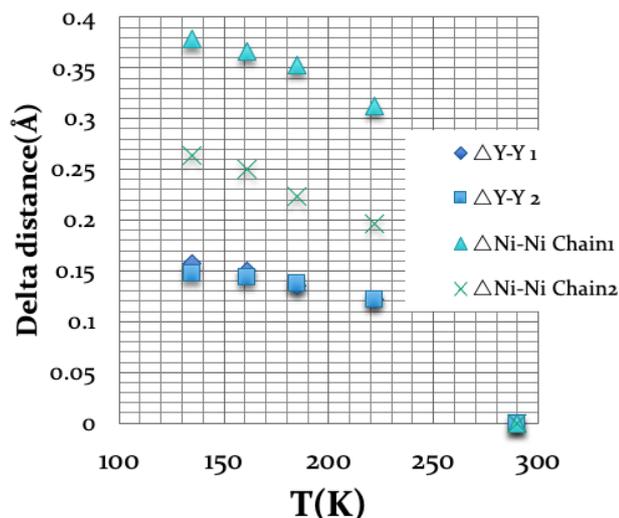


図5 YNi₂での q₂超格子構造による原子二量体化

Ni は a 方向に、Y は a-b 方向に移動して二量体化している。図 5 の二量体化の半分が原子変位量となるが、これは q₁CDW における変位[7](Ni が a 方向に 0.05Å Sm が b 方向に 0.035Å)と比較すると、R が約 2 倍、Ni が 2.5-4 倍も大きい。また方向は近い。これは R は a-b または b 方向に、Ni は a 方向に移動しやすい (ソフト化しやすい) ことを意味している。

この原子移動により電子構造も変化するるので、この原子位置をもとに第一原理による電子構造計算 (WIEN2k: L/APW 法)をおこなった。スピン軌道相互作用も含めて計算をおこなった。(図 6)

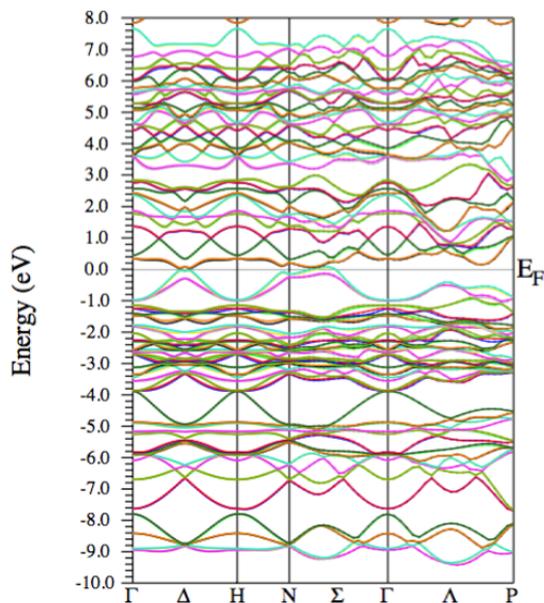


図 6 YNi₂の低温でのバンド構造 (q₂あり)

E_F 付近の状態密度が低温で q₂ 超格子により減少しているように見える。これを確かめるために室温と低温の状態密度を比較した (図 7)

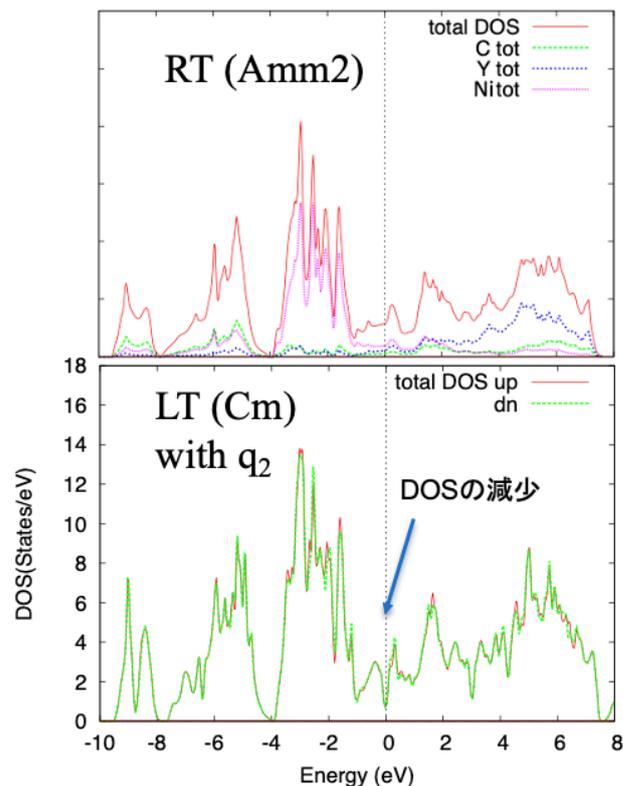


図 7 q₂超格子構造による E_F 付近の状態密度の減少

上図より明らかなように q₂ 超格子構造によりフェルミ面の大部分が消失し状態密度が減少していることがわかる。これは抵抗が q₂ 形成とともに上昇する (図 3) こととも符合している。したがって、q₂ 超格子構造もフェルミ面と関連した構造相転移であり、一種の CDW とみなすことができる。すなわち、RNi₂では q₁ (0.5, ~0.52, 0) q₂ (0.5, 0.5, 0.5)の 2 種類の CDW が競合している系となる。

4 まとめ

YNi₂で q₂ (0.5, 0.5, 0.5)の超格子構造は、フェルミ面の不安定性に起因する CDW であることが、超格子構造解析と電子構造計算の結果明らかになった。

参考文献

- [1] N. Hanasaki, Y. Nogami *et al.*, *Phys. Rev.* **B85**, 092402 (2012).
- [2] N. Yamamoto, R. Kondo, H. Maeda and Y. Nogami, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 123701 (2013).
- [3] N. Hanasaki, S. Shimomura, M. Mikami, Y. Nogami *et al.*, *Phys. Rev.* **B95**, 085103 (2017).
- [4] H. Maeda, R. Kondo, Y. Nogami, *J. Phys. Soc. Jpn.* **100**, 104107 (2019).
- [5] S. Shimomura *et al.*, *Phys. Rev.* **B 93**, 165108 (2016).
- [6] J. Laverock *et al.*, *Phys. Rev.* **B 80**, 125111 (2009).
- [7] A. Wölfel *et al.*, *Phys. Rev. B* **82**, 054120 (2010).

* nogami@science.okayama-u.ac.jp