

BaIr_{1-x}Ru_xO₃ の格子定数の温度変化 The temperature dependence of lattice parameter in BaIr_{1-x}Ru_xO₃

伊藤駿^{1*}, 岡村卓真¹, 五十嵐太一¹, 浅井晋一郎¹, 岡崎竜二¹, 谷口博基¹,

寺崎一郎¹, 安井幸夫², 小林賢介³, 中尾裕則³, 熊井玲児³, 村上洋一³

¹名古屋大学理学研究科, 〒464-8602 愛知県名古屋市千種区不老町

²明治大学理工学部, 〒214-8571 神奈川県川崎市多摩区東三田 1-1-1

³高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所, 〒305-0801 茨城県つくば市大穂 1-1

1 はじめに

BaIrO₃ は Ir₃O₁₂ 三量体構造を持つ単斜晶物質である[1]. 単位格子内で IrO₆ 八面体が面共有して Ir₃O₁₂ 三量体を形成し, 三量体同士は頂点共有して c 軸にほぼ平行な準一次元チェーンを作り出している. また, 格子が歪んでいるため, 隣り合う三量体同士は結晶学的に非等価である. BaIrO₃ は 183 K で弱強磁性転移を示し, 同時に電気抵抗率や熱起電力にも異常を示すことが報告されている. 今回, 本物質における相転移と結晶構造の関係を調べるために多結晶試料 BaIr_{1-x}Ru_xO₃ (x = 0, 0.1) の放射光 X 線回折実験を行ったので, その結果を報告する.

2 実験

BaIr_{1-x}Ru_xO₃ (x = 0, 0.1) の多結晶試料は固相反応法で作製した. 放射光 X 線回折実験は高エネルギー加速器研究機構の光子ファクトリーのビームライン 8A で行い, 305 K から 33 K までの回折パターンの温度変化を測定した. 温度変化には He ガスの吹き付けを利用した. 得られた回折パターンの解析にはリートベルト解析用プログラム RIETAN-FP[2]を使用した. また, カンタム・デザイン社製の MPMS によって室温以下の磁化率の温度変化を測定し, 自作の測定装置を用いて電気抵抗率と熱起電力の温度依存性を測定した.

3 結果および考察

数%の置換によって, 試料の電気抵抗率, 熱起電力及び磁化率は大きく減少した. また, 試料の転移温度は, 2%の置換で約 30 K 減少しており, 希釈効果では説明ができないほど大きく変化している. 各置換試料における転移温度は電気抵抗率, 熱起電力および磁化率からそれぞれ求め, それらは誤差の範囲で一致し, 弱強磁性と輸送現象における転移が同時に起こることを示した.

図 1, 図 2 にそれぞれ BaIrO₃ と BaIr_{0.9}Ru_{0.1}O₃ の格子定数の変化率を示す. 縦軸は 305 K における格子定数からの変化率を表している. BaIrO₃ では温度低下に伴って c 軸長が伸びる振舞いが見られるが, BaIr_{0.9}Ru_{0.1}O₃ ではこの振舞いは抑制されている. ま

た, c 軸長以外の格子定数の変化率には置換による大きな変化は見られない.

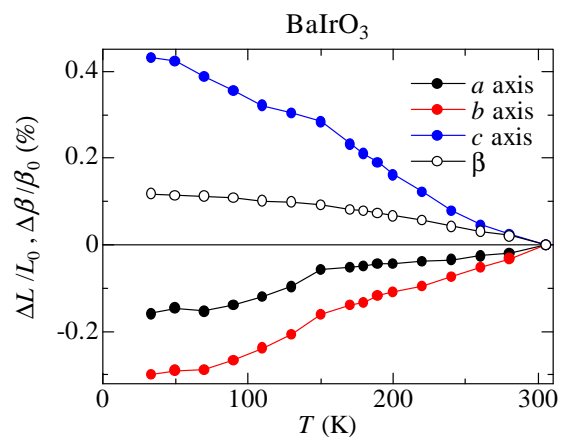


図 1 : BaIrO₃ の格子定数の変化率

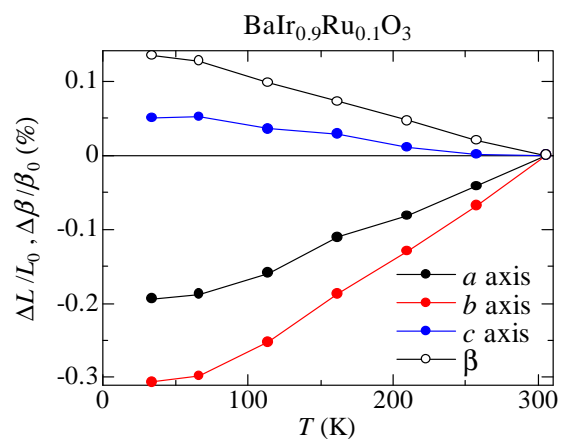


図 2 : BaIr_{0.9}Ru_{0.1}O₃ の格子定数の変化率

本物質は, 転移温度以上では三量体に電子が局在することによる Mott 絶縁体状態であり, 温度低下に伴う格子歪みによって非等価な三量体間のエネルギー

ギ一差が広がることにより三量体間で電荷が移動し、電荷移動型絶縁体への相転移が起こるとするモデルが提唱されている[3]。この Mott 絶縁体 - 電荷移動型絶縁体転移モデルからは、格子定数の温度変化が小さくなれば転移温度が下がることが予想される。今回の結果はこのモデルと一致する振舞いであると考えられる。

また、リートベルト解析によって BaIrO_3 の Ir の原子位置を決定し、Ir-Ir 間距離の温度依存性を調べたところ、温度低下とともに伸びる振舞いを見せる三量体と、長さのほぼ変化しない三量体が存在していることを発見した。これは温度の低下とともに三量体間で電荷の移動が起こっていることを示唆し、モデルから予想される振舞いと一致する。

参考文献

- [1] B. L. Chamberland, *Journal of Less-Comm Metals*. **170**, 93 (1991).
- [2] F. Izumi, K. Momma, *Solid State Phenom.* **130**, 15 (2007).
- [3] 中野智仁, *高圧力の科学と技術*. **18**, No.1 (2008).

* itou.shun@d.mbox.nagoya-u.ac.jp