

# 2014S2-003 結晶場解析による新しい量子液体系物質の研究

## Study of the new quantum lattice liquid system by crystal field analysis

名古屋大学 工学研究科 応用物理学分野 澤博

### 本研究課題の目的

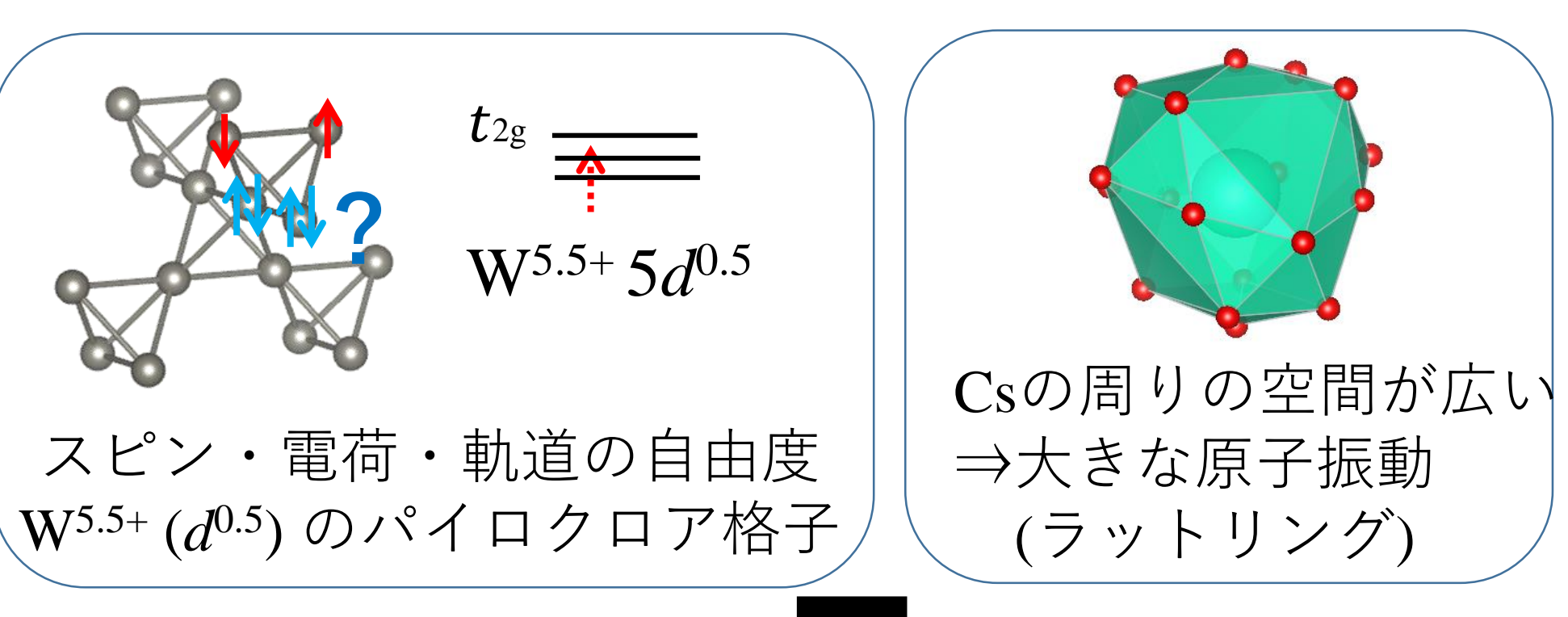
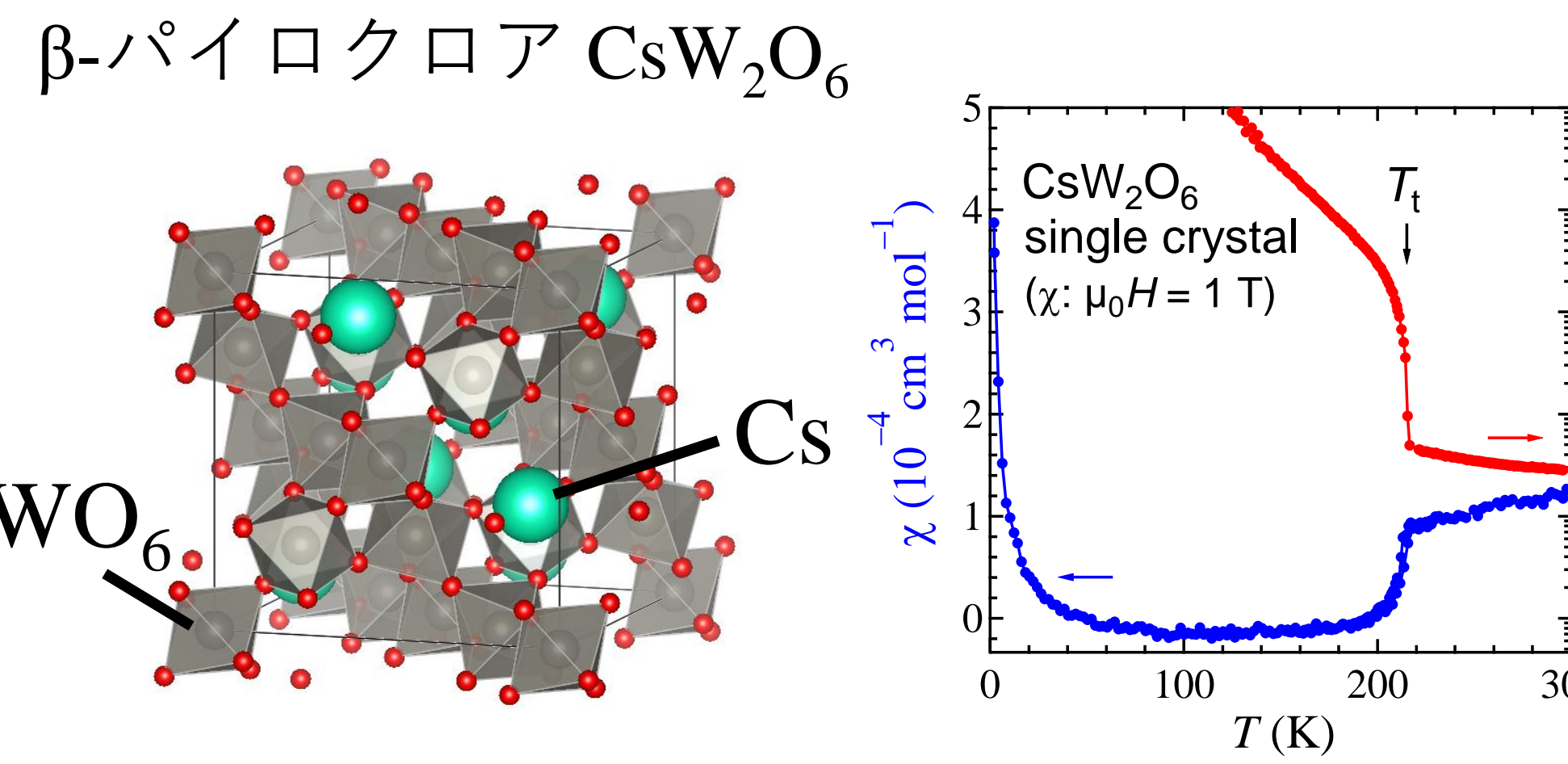
超伝導・巨大磁気抵抗・金属絶縁体転移などの興味深い物性を示す超伝導体・強相関系酸化物・分子性結晶などの幅広い物質群に対する研究は、物性の起源となる電子系および格子系の情報に基づいて構造物性の観点から研究することが必要である。電子軌道の形状を正確に把握することを目的とした電荷密度解析にはSPRING-8級の高輝度・高エネルギー放射光の利用が必要であるものの、従来の放射光施設においても高い部分座標精度を持った原子座標の解析結果を得ることが出来れば、結晶場を解析して多くの物性研究に必要な情報を得ることが可能である。更に、圧力・電場・磁場など外場を印加することでどのような構造変化が起こるかについて、解析した結晶場を元に、特定の逆格子空間の情報から推測することも可能である。長年の放射光X線実験研究から得られた蓄積を踏まえて、PFの放射光を用いた更なる構造物性研究を展開することを目指して研究を進めている。

共同研究者: (名古屋大学) 片山尚幸 准教授、菅原健人 (D2)、天野春樹 (M1) 二木健太 (M2)、岡本佳比古 准教授、竹中康司 教授 (KEK 物構研) 佐賀山基 准教授、熊井玲児 教授

### スピン・軌道・電荷フラストレーション系CsW<sub>2</sub>O<sub>6</sub>

β-パイロクロア酸化物CsW<sub>2</sub>O<sub>6</sub>の単結晶X線回折測定を行い、立方晶-立方晶の構造相転移を発見した。

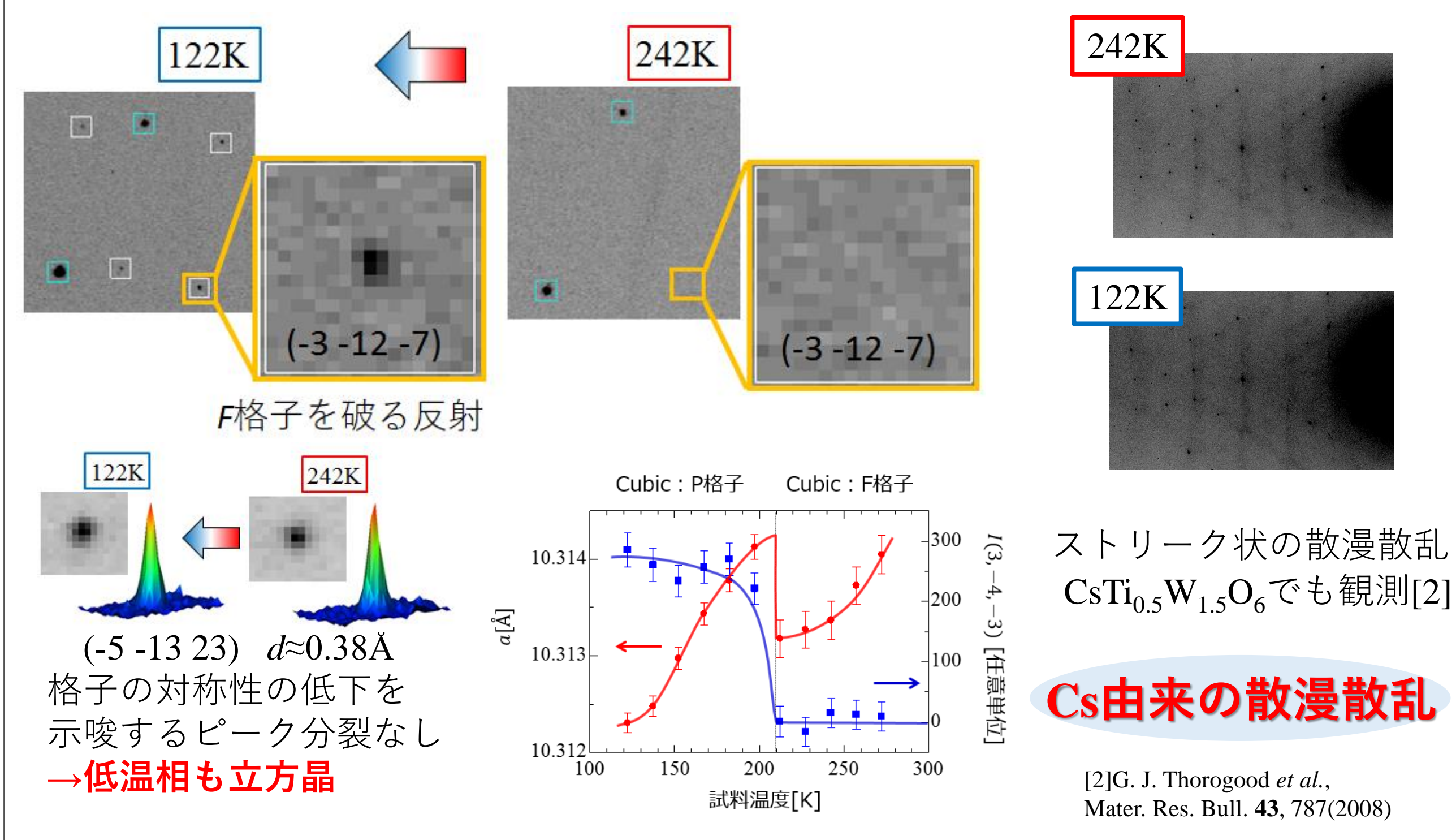
#### 研究背景



特異な基底状態の可能性

単結晶試料を用いた構造解析により基底状態の解明を目指す

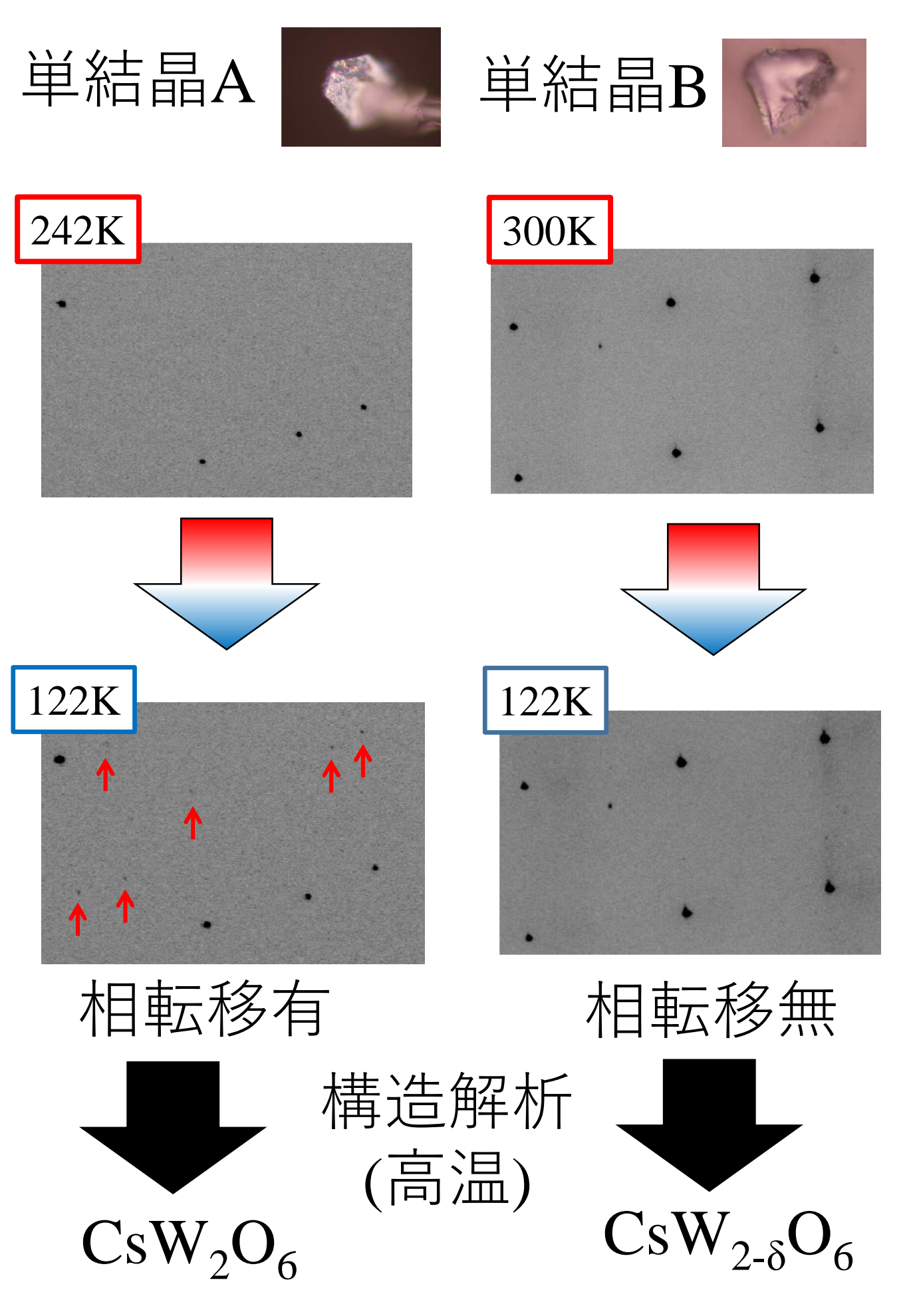
#### 単結晶X線回折測定



ストリーク状の散漫散乱 CsTi<sub>0.5</sub>W<sub>1.5</sub>O<sub>6</sub>でも観測[2] Cs由来の散漫散乱 [2] G. J. Thorogood et al., Mater. Res. Bull. 43, 787 (2008)

高い対称性を保つ特異な相転移 ⇒低温でも自由度が残る?

#### 試料依存



W欠損が電子物性に大きな影響

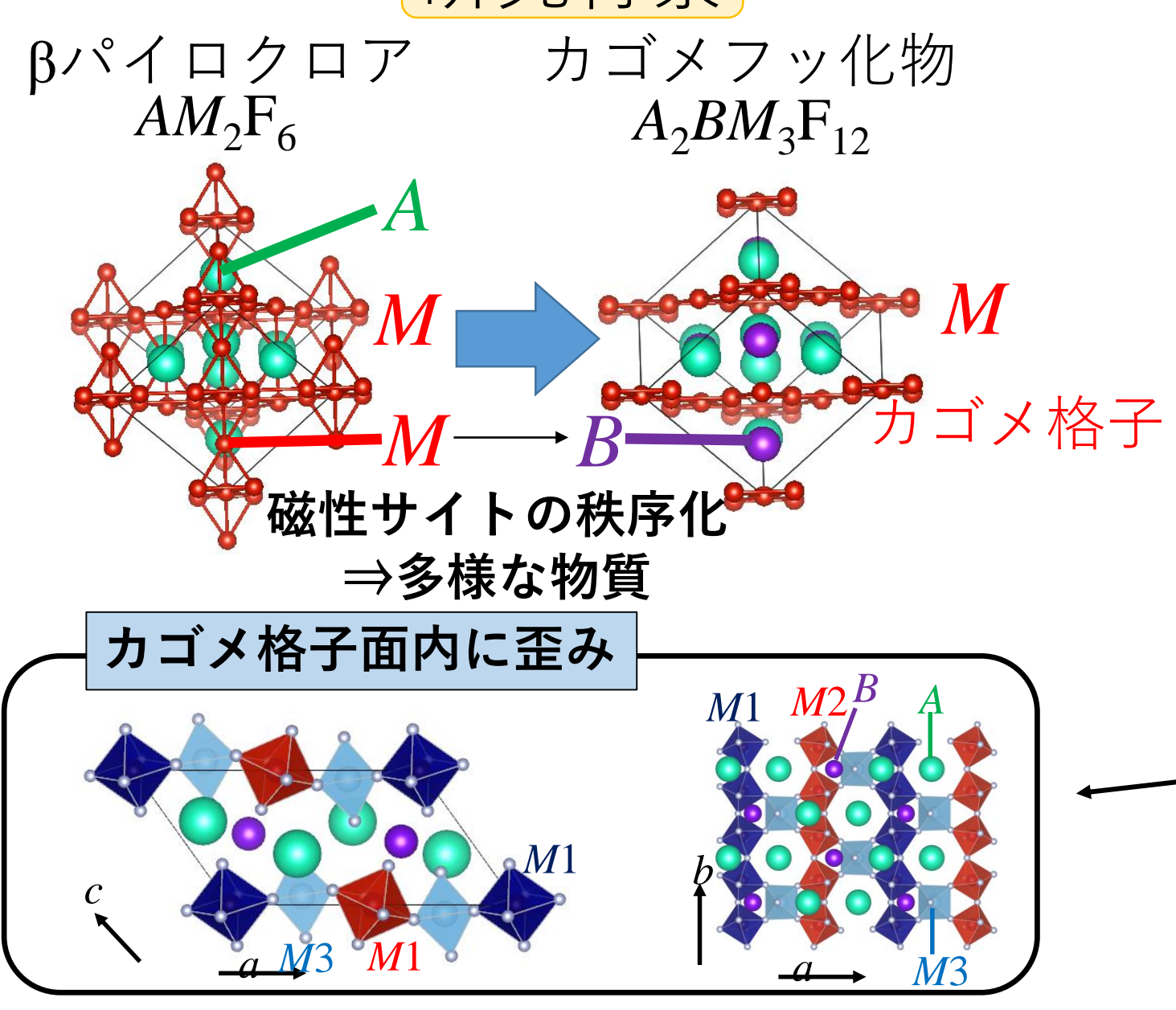
天野春樹、岡本佳比古、澤博ら、日本物理学会第72回年次大会(2017年)発表予定

### カゴメ弗化物磁性体のドメイン解析

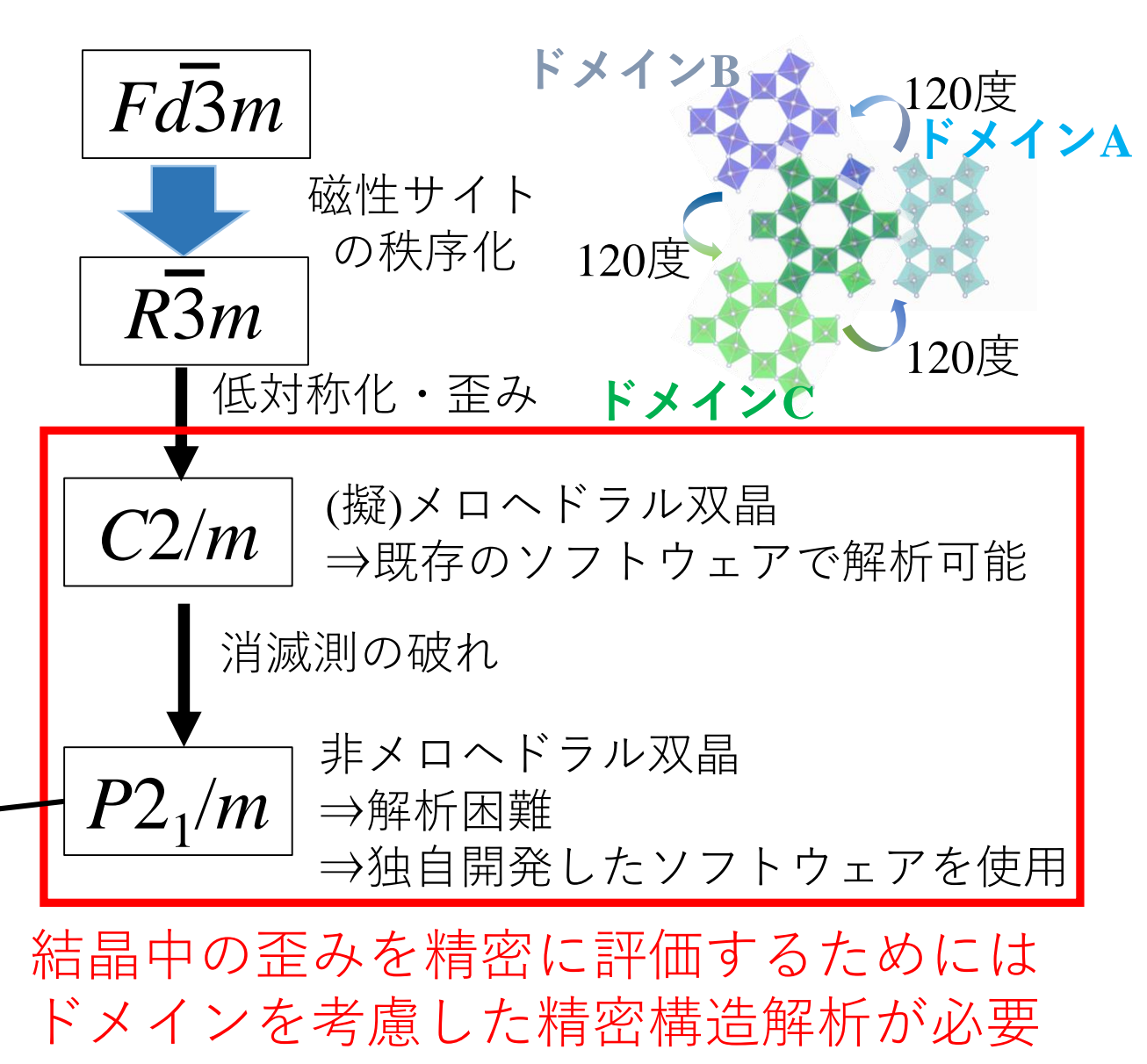
共同研究者: (名古屋大学) 片山尚幸 准教授、小林慎太郎 (PD)、菅原健人 (D2) (京都大学) 後藤真人 (D3)、植田浩明 准教授、道岡千城助教、吉村一良 教授

結晶内にドメインが内在するカゴメ弗化物A<sub>2</sub>BM<sub>3</sub>F<sub>12</sub> (A=Rb, Cs, B=Na, K, M=V, Cr)のドメインを考慮した精密構造解析を行った。

#### 研究背景

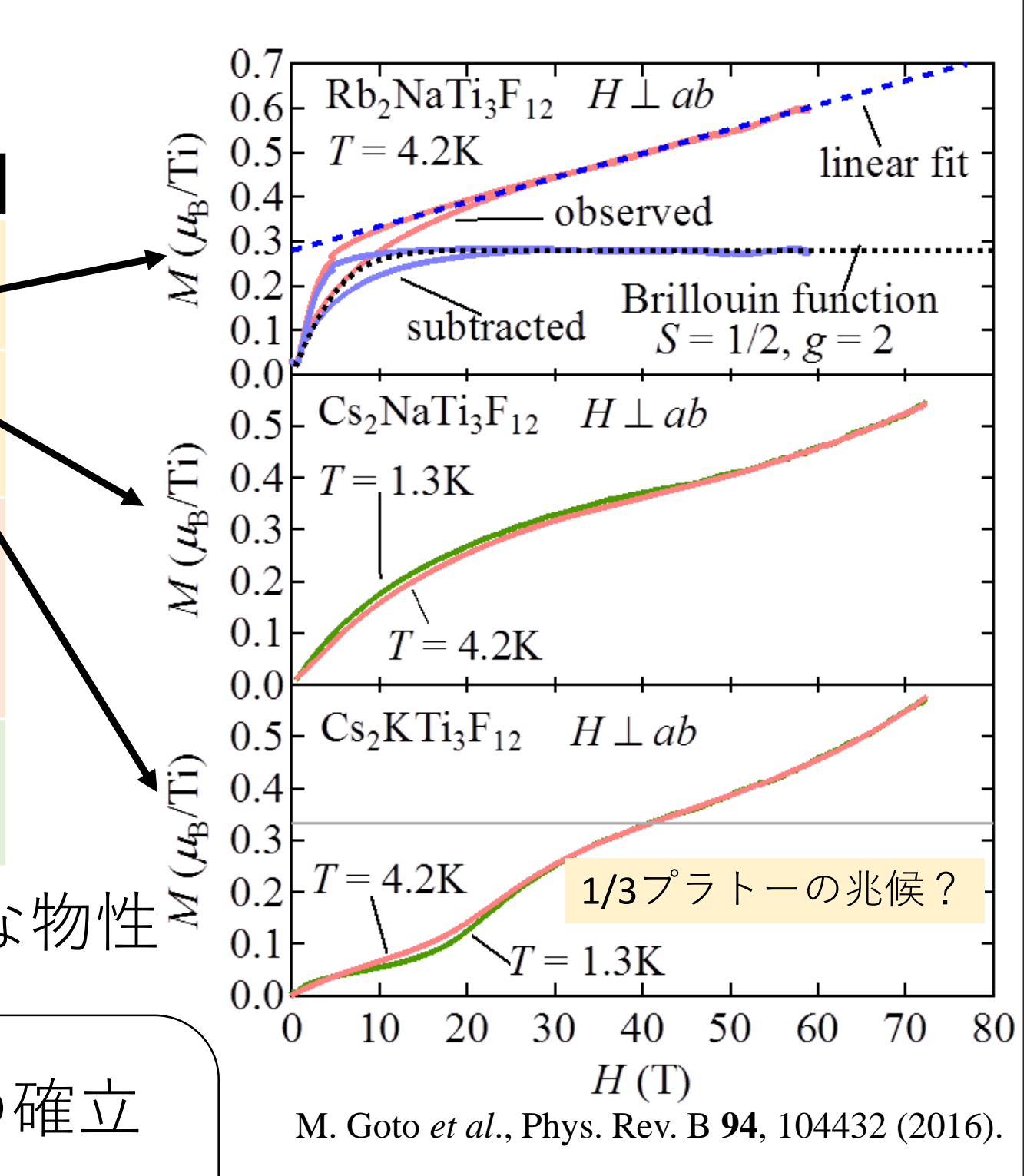


#### 低対称化とドメインの形成



#### 歪みの大きさに応じた多彩な物性

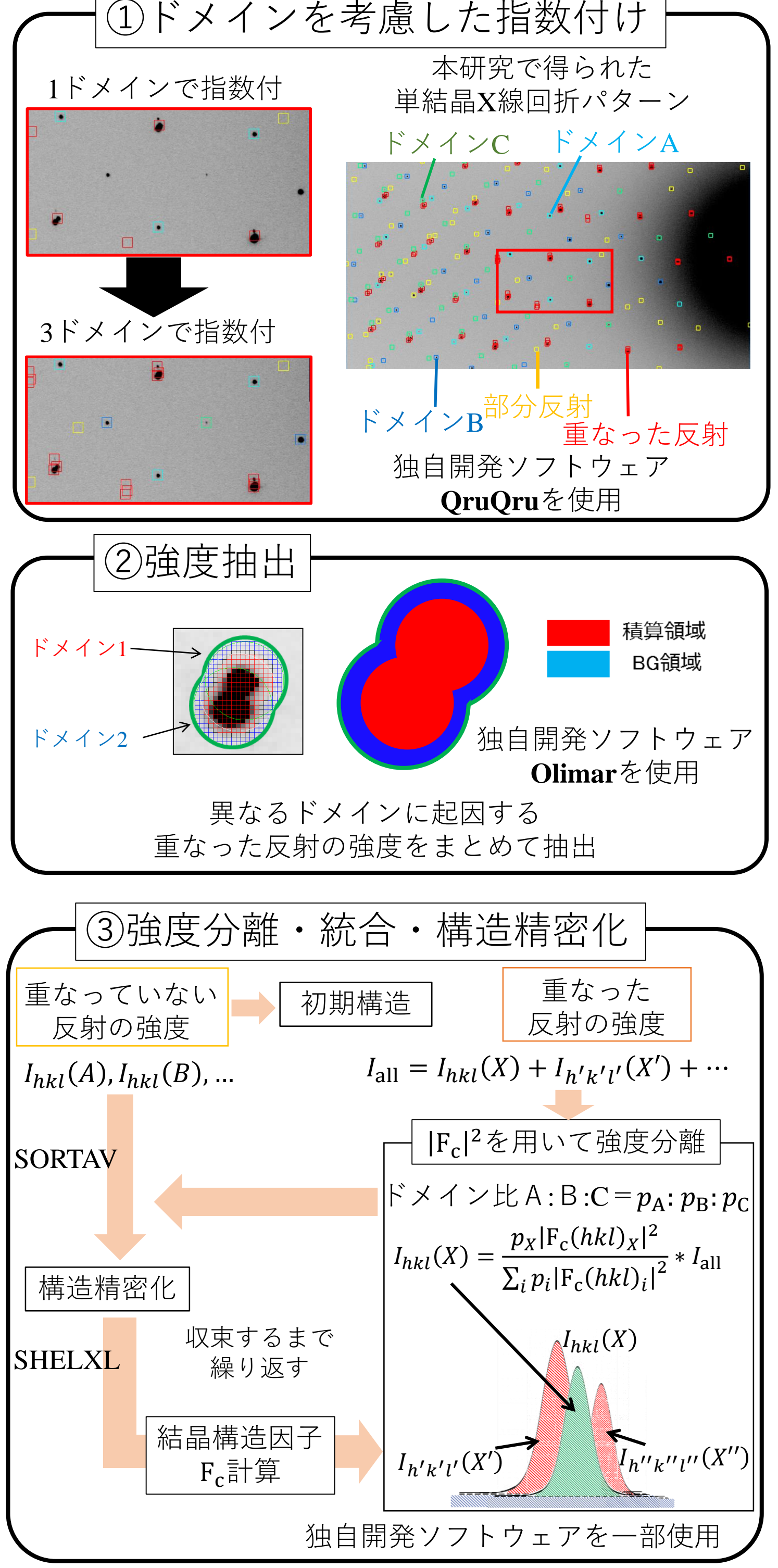
化学組成	歪み	基底状態および物性
Rb <sub>2</sub> NaTi <sub>3</sub> F <sub>12</sub>	大	Antiferromagnetic one-dimensional chain with 1/3 nearly free spin
Cs <sub>2</sub> NaTi <sub>3</sub> F <sub>12</sub>	中	Gapless disordered state
Cs <sub>2</sub> KTi <sub>3</sub> F <sub>12</sub>	小	Gapped disordered state
Rb <sub>2</sub> NaV <sub>3</sub> F <sub>12</sub>	大	自発磁化有 反強磁性秩序
Cs <sub>2</sub> NaV <sub>3</sub> F <sub>12</sub>	中	自発磁化無 2段階の磁化プラトー
Cs <sub>2</sub> KV <sub>3</sub> F <sub>12</sub>	小	自発磁化有 磁化プラトー
Cs <sub>2</sub> NaCr <sub>3</sub> F <sub>12</sub>	大	120度型スピン構造
Cs <sub>2</sub> KCr <sub>3</sub> F <sub>12</sub>	小	磁化過程が2種類の試料で異なる



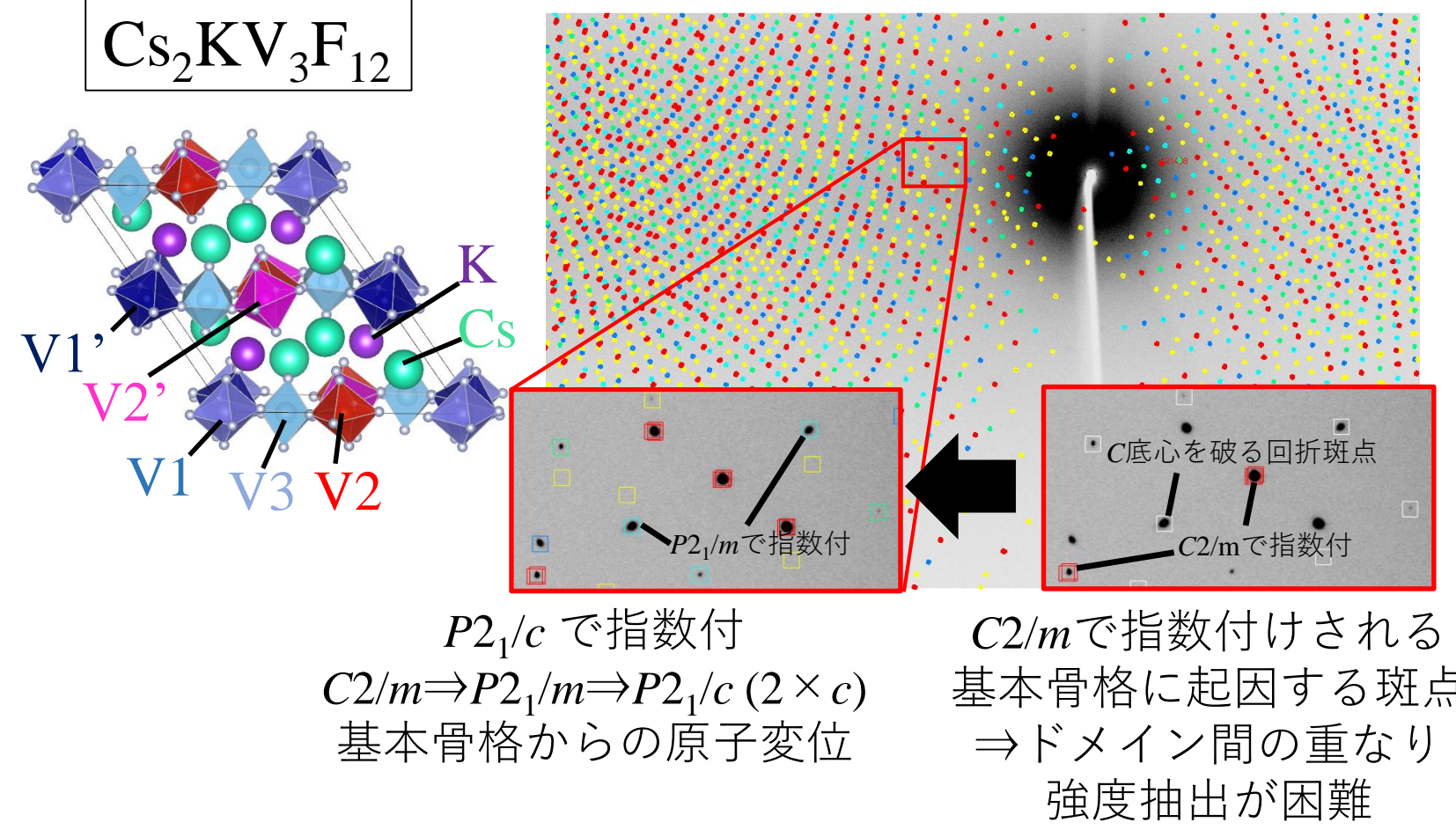
#### 歪みの大きさの異なる多様な物質、多彩な物性

- ①ドメインを含む結晶の構造解析手法の確立
- ②単結晶を用いた精密構造解析による
  - 歪みの大小を決める構造パラメータの探索
  - 基底状態を決定する歪みの正体の解明

#### ドメイン解析の手法

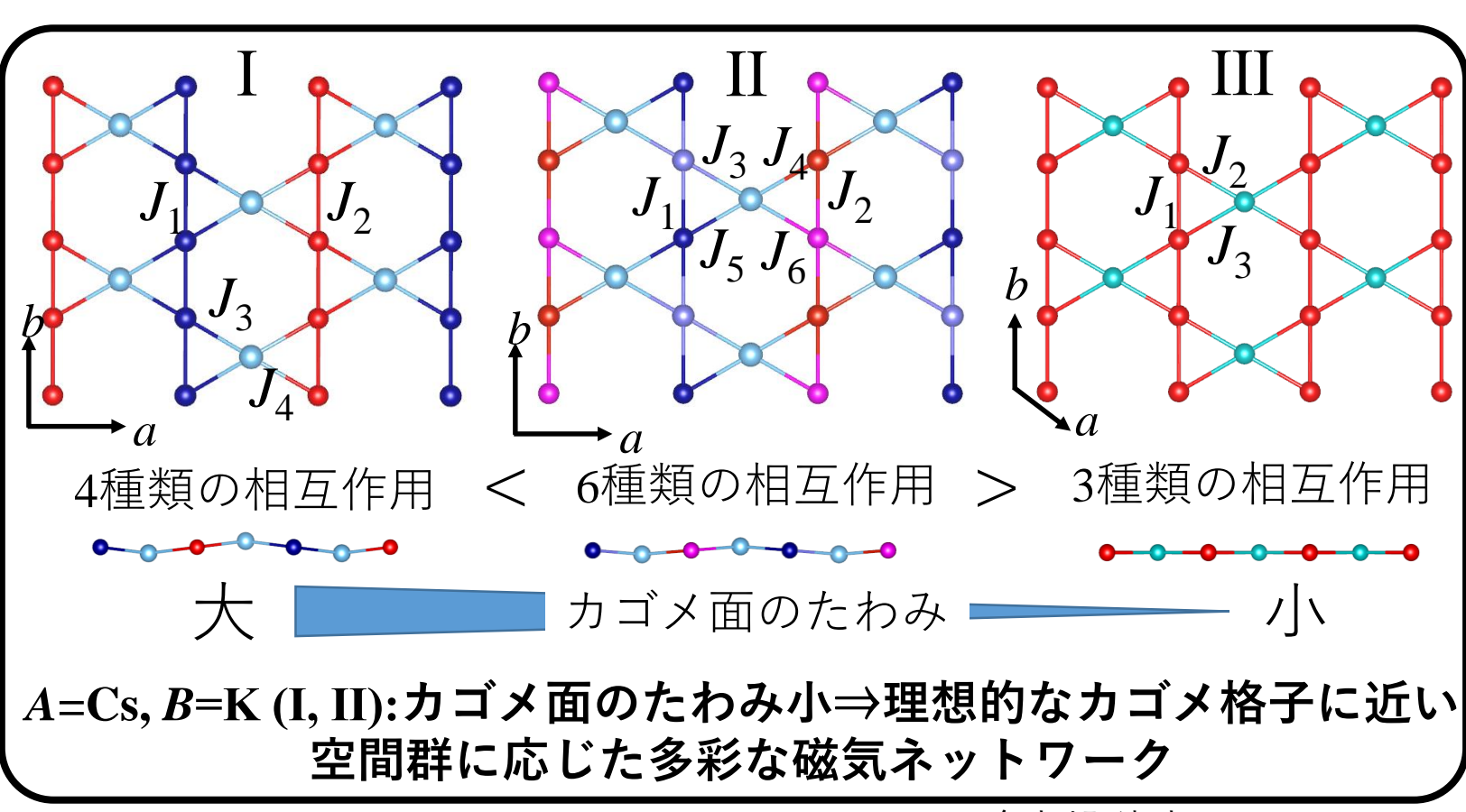


#### 単結晶X線回折測定



	I	II	III	IV	V
ドメイン数	無	4	3	3	メロヘドラル
空間群	P2 <sub>1</sub> /m	P2 <sub>1</sub> /m	P2 <sub>1</sub> /c	P2 <sub>1</sub> /m	P3 <sub>2</sub> 1
a (Å)	12.578(6)	12.789 (3)	12.925 (6)	12.566(3)	7.321(2)
b (Å)	7.414 (3)	7.433 (3)	7.467 (3)	7.284(1)	7.321(2)
c (Å)	7.192(1)	7.385 (3)	15.028 (4)	7.401(2)	18.699(10)
β (Å)	126.26(1)	125.67 (2)	124.83 (1)	125.02(1)	-
completeness d > 0.4 Å	57 %	91 %	86 %	89 %	71 %
R	0.0150	0.0221	0.0464*	0.0153	0.0172
wR	0.0382	0.0591	0.1290*	0.0310	0.0340

ドメイン解析によりcompletenessが向上  
ドメインを考慮した精密構造解析に成功



M. Goto, H. Ueda, H. Sawa, and K. Yoshimura et al., 論文投稿中