

ホーランド型酸化物 $K_2Cr_8O_{16}$ の 金属-絶縁体転移に伴う構造変化

中尾朗子^A, 磯部正彦^B, 長谷川邦洋^B, 中尾裕則^A, 村上洋一^A, 上田寛^B
^AKEK PF/CMRC, ^B東大物性研

ホーランド型酸化物 $K_2Cr_8O_{16}$ は, $Cr^{3+}:Cr^{4+}=1:3$ という珍しい混合原子価状態をとり, その物性は, 180 K で強磁性相に転移し, 90 K で強磁性金属-強磁性絶縁体相転移を起こす [1]。

結晶構造は, 稜共有した CrO_6 八面体が二重鎖を形成し, これらの二重鎖が頂点共有することにより, K イオンを内包しながら一次元トンネル構造を形成している。室温相では, Cr は結晶学的に等価であり, 形式的価数は 3.75 価である。相転移に伴う劇的な構造変化が期待されるが, 低温相の結晶構造については未だ分かっていない。

本研究では, 金属-絶縁体相転移の機構を理解するため, BL-8B において単結晶を用いた回折実験を行った。その結果, 転移点以下で, $\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times 1$ の超周期を観測した。20 K において超格子反射を含めた単結晶構造解析を行うことにより, 絶縁相で, 二重鎖内の Cr-Cr 間距離に有意な差を見出した。金属相では結晶学的に等価な Cr は, 非等価になり, 距離の異なる Cr-Cr は c 軸方向に沿ってジグザグに並ぶ。この結果は低温相での秩序状態を反映しているものと考えられる。

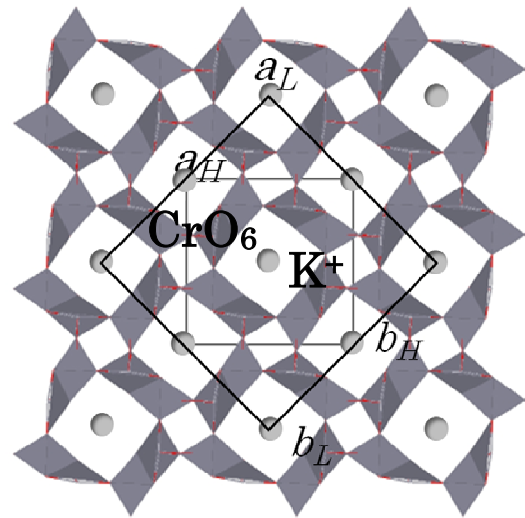


Figure 1: $K_2Cr_8O_{16}$ の結晶構造

[1] K. Hasegawa *et al.*, Phys. Rev. Lett. 103, 146403 (2009)