

単結晶構造解析による URu₂Si₂ の隠れた秩序状態の解明

Investigation of Hidden Order State of URu₂Si₂ by means of Single-crystal Structure Analysis

田端千紘¹、三浦植幸¹、安孫子和弘¹、日高宏之¹、柳澤達也¹、横山淳²、
網塚浩¹、小林賢介³、熊井玲児³、中尾裕則³、村上洋一³

1 北大理、2 茨城大理、3 KEK—物構研

URu₂Si₂ (ThCr₂Si₂ 型体心正方晶, 空間群 *I4/mmm*) は、 $T_0 = 17.5$ K で起こる相転移の秩序変数が不明であることから、25 年以上の間多くの関心を集めてきた物質である[1~3]。この相転移は「隠れた秩序」と呼ばれ、この謎を解明するために様々な理論的・実験的研究が行われてきた。その中でも X 線や中性子を用いた回折実験および熱膨張測定の実験において、隠れた秩序に伴う格子の歪みの有無や格子定数の温度変化などが精密に調べられており[4~6]、*I4/mmm* からの対称性の低下が実験の精度内で無いことが報告されている。その一方で、結晶構造の内部パラメータの変化の有無についてはこれまでほとんど報告されていない。

ThCr₂Si₂ 型の結晶構造においては、4(e)サイトの Si 原子の *z* 位置パラメータがフリーパラメータであり、先行研究では室温で $z = 0.371$ と報告されている[7]。4(e)サイトの Si 原子は *c* 軸上で U 原子の上下の最隣接位置にあるため、隠れた秩序相における Si の *s*, *p* 軌道と U の 5*f* 軌道の混成効果やバンド構造などを考える上で、*z* パラメータを正確に決めることは重要であると考えられる。

我々は PF のビームライン 8B を利用し、URu₂Si₂ の単結晶試料に対して X 線構造解析を 6 K~300 K の温度範囲で行い、Si の *z* パラメータおよび原子変位パラメータの温度変化を調べた。その結果を報告する。

[1] T.T.M. Palstra *et al.*, Phys. Rev. Lett. 55, 2727 (1985).

[2] M.B. Maple *et al.*, Phys. Rev. Lett. 56, 185 (1986).

[3] W. Schlitz *et al.*, Z. Phys. B 62, 171 (1986).

[4] N. Kernavanois *et al.*, Physica B 259-261, 648 (1999).

[5] P.G. Niklowitz *et al.*, Phys. Rev. Lett. 104, 106406 (2010).

[6] A. de Visser *et al.*, Phys. Rev. B 34, 8168 (1986).

[7] G. Cordier *et al.*, J. Less-Common Met. 110, 327 (1985).