

YbAl₃C₃の構造相転移と電気四極子秩序の可能性

Structural Phase Transition in YbAl₃C₃ and the Possibility of Antiferro Quadrupolar Ordering

松村 武¹⁾

稲見 俊哉²⁾

Takeshi MATSUMURA

Toshiya INAMI

¹⁾広島大学 ²⁾原子力機構

起源が未解明であった YbAl₃C₃ における 80K での相転移を X 線回折で調べ、構造相転移であることを見出した。また、低温相の構造解析を行い、空間群の決定および原子位置モデルの提出を行った。これにより低温相でどのような磁気格子が形成されるかが明らかになった。

キーワード : YbAl₃C₃, 構造相転移, ダイマー, 幾何学的フラストレーション

1. 目的

六方晶化合物 YbAl₃C₃ は、80K という高温で相転移を起こすことが 2005 年に小坂らによって発見され [1], 多くの注目を集めた。発見当初は磁気的な転移ではなく、電気四極子秩序ではないかと考えられてきたが、未だ確定的な証拠には至っていない。その後、2007 年 12 月に、落合らにより、80K での相転移は RAl₃C₃ 系に共通して現れる構造相転移であり、4f 電子とは関係のないものであるとの主張が提出された [2]。むしろこの物質では、構造相転移によって 2 つの Yb のスピンのペアを組み、Singlet 状態を形成しているのだという主張である。中性子非弾性散乱により一重項-三重項励起も観測され [3], ダイマーが形成されていることが確認されるようになっていく。ただ、ダイマーの形成機構および基底状態の理解のためには、その土台となっている結晶構造の知見が不可欠であるが、未だ未確定である。そこで、本課題では、80K の転移の由来を明らかにし、低温相の結晶構造を決定することを目的とする。

2. 方法

単結晶を使った X 線回折により、まず低温相で現れる超格子反射があるかどうかを探索する。超格子反射が見つければ、その強度の X 線エネルギー依存性、偏光依存性、温度依存性を測定し、相転移の性質を明らかにする。構造相転移の場合、多くの反射指数の強度を集め、構造モデルと比較することで結晶構造も決定する。実験は SPring-8 の BL22XU に設置された 4 軸回折計を用いる。

3. 研究成果

最低温度 10K で、ブリルアンゾーン内の主要軸方向をスキャンし、指数 (1/2 1/4 整数) で特徴づけられる回折ピークを発見した。エネルギー依存性が非共鳴型であること、強度が高温相での格子基本反射の約 1/1000 で強いこと、偏光が π - π 型であることから、この転移は原子変位を伴う構造相転移であることがわかった。さらに、回折が起こる指数の条件から低温相の空間群は Pbc₂a であることを決定した。超格子反射 19 点の強度を集め、構造モデルを設定し、比較したところ、原子変位のモデルも提出することができた。

4. 結論・考察

Yb は 0.1~0.3%, C は 3~4% の変位量と、三角格子からのずれはわずかであり、これが低温のスピンの物性に与える影響の解明に興味をもたれる。構造の完全決定も今後の課題である。

5. 引用(参照)文献等

- [1] M. Kosaka et al., J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 2413.
- [2] A. Ochiai et al., J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 123703.
- [3] Y. Kato et al., J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) 053701.