

## Nb系酸化物の非磁性の謎にせまる

利用者：<sup>a</sup>岡山大学自然科学研究科，<sup>b</sup>大阪大学理学研究科，<sup>c</sup>原子力機構  
 花咲徳亮<sup>a,b</sup>，鳥越秀平<sup>a,b</sup>，野上由夫<sup>a</sup>，米田安宏<sup>c</sup>，吉井賢次<sup>c</sup>，樹神克明<sup>c</sup>

研究支援者：日本原子力研究開発機構 吉井賢資，米田安宏，神樹克明

### 【研究目的】

電子の持つ電荷やスピンの間の相互作用にフラストレーションが働く場合、特異な物性が発現することが知られている。我々は、このような場合の一つとして、原子変位によって生じるダイポールアイス状態や、これに類似する状態を探索している(Fig.1(b)-(d))。非磁性状態のパイロクロア型ニオブ酸化物において、Nb原子が四面体中心方向に向かって内側か外側へ変位する事(Fig.1(a))が先行研究で指摘されていた。Nb変位の相関長が短いため、長距離相関を仮定した従来型の平均構造解析ではNb変位パターンを決定できなかった。そこで、原子の2体相関関数が調べられるExtended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS) 解析 (SPring-8 BL14B1)やPair Distribution Function (PDF)解析 (J-PARC BL21)などを活用することで、原子の変位状態を決定し、非磁性状態と原子変位の関係を精査した。

### 【成果】

J-PARC BL21 で得られた二体相関関数(PDF)をFig.2(a)、SPring-8 BL14B1で得られたEXAFSをFig.2(b)に示す。パイロクロア型酸化物の一般的な空間群(赤線)で計算すると4Å以下の範囲で再現できない。そこで、散漫散乱から示唆される周期性を考慮して、空間群F222でFig.2(a),(b)の実験スペクトルを再現することに成功した。この解析からNb原子は、all-in型で変位している事がわかった (Fig.2(c)の赤丸内)。得られたall-in型変位は軌道混成によるエネルギー安定化に由来すると考えられ、all-in型の“分子”形成により非磁性状態になったと考えられる。

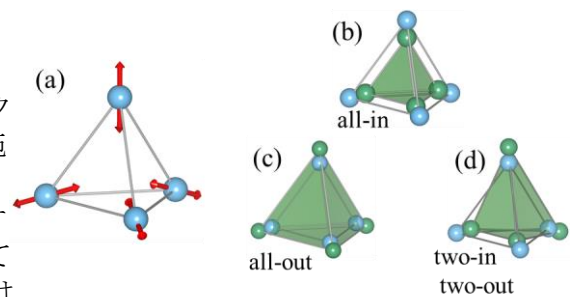


Fig.1 (a)先行研究が指摘したNb原子変位方向(赤矢印). (b),(c),(d)考えられる原子変位と四面体. 青丸は変位前、緑丸は変位後.

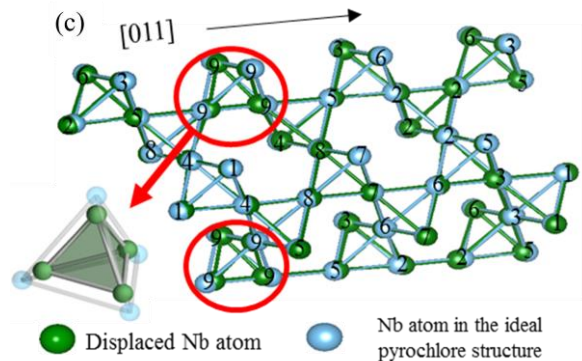
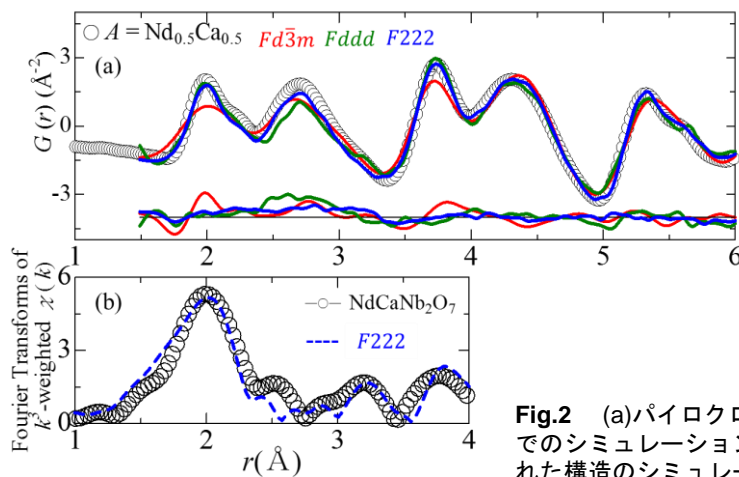


Fig.2 (a)パイロクロア型酸化物の二体相関関数(PDF)の実験結果(白丸)と各空間群でのシミュレーション結果(赤,緑,青).(b) EXAFSの実験結果(白丸)とPDF解析で得られた構造のシミュレーション結果(青).(c)決定されたNbの構造、赤丸内はall-in型変位のNb四面体.

### 【支援実施機関からのコメント】

放射光X線を利用したX線吸収微細構造測定と中性子を利用した原子2体相関分布関数を併用し原子力機構のソースを十分に利用することで、結晶構造には反映されにくい分子内の局所構造を解き明かした研究である。

### 【参考文献等】

- [1] S. Torigoe, *et al.*, Phys. Rev. B, **93**, 085109 (2016)  
 [2] <http://www-gmr.phys.sci.osaka-u.ac.jp/>