



# 磁氣的フラストレーション硫化物の元素サイト同定

片山尚幸  
名古屋大学 工学研究科

キーワード：ブリージングパイロクロア、異常分散項

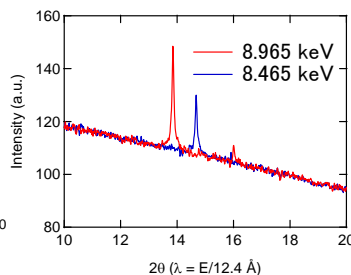
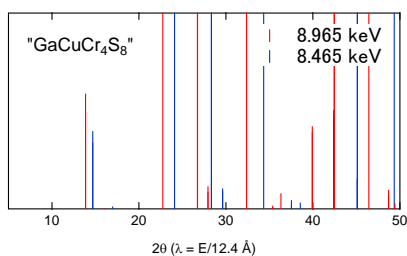
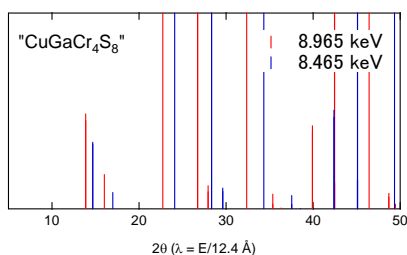
## 1. 背景と研究目的

スピネル化合物  $AB_2X_4$  において、B サイトは正四面体を頂点共有で三次元的に拡張させたパイロクロア格子を有している。パイロクロア格子は三角形を基調とした構造であることから、反強磁性的に相互作用した B サイト上のスピンは安定な磁氣的基底状態を取ることができない、いわゆる磁氣的フラストレーションの舞台となりうる。A サイトにイオン半径の異なる二種類の元素を 1:1 で用い、かつこれらの元素が結晶中で秩序化したとき(化学式は  $A^1A^2B_4X_8$ )、B サイトのパイロクロア格子には、構成する四面体の収縮と拡張が周期的に現れる。このようなブリージングパイロクロア格子系においては、従来のパイロクロアと比べて磁氣的相互作用が複雑化し、新奇な電子物性の出現が期待される。候補物質の一つである  $CuGaCr_4S_8$  においては、A サイトを構成する Cu と Ga サイトの原子番号の近さに由来して、Cu と Ga の秩序状態を従来の X 線回折法で同定するのが困難であった。本研究では、吸収端近傍における異常分散項の発散を利用して、Cu サイトと Ga サイトの秩序状態を同定しようと試みた。

## 2. 実験内容

$CuGaCr_4S_8$  粉末試料をリンデマンガラスキャピラリ ( $\phi 0.1$ ) に封入し、BL5S2 における回折実験を行った。Cu の K 吸収端が 8.98 keV, Ga の K 吸収端が 10.367 keV であることを念頭に、8.465 keV, 8.965 keV での回折実験を行い、その回折強度を比較した。吸収端以上のエネルギーにおいては、強い蛍光が現れバックグラウンドが上昇することから、吸収端よりもわずかに低いエネルギーが実験に適している。8.465 keV, 8.965 keV でエネルギー差はわずかだが、Cu の異常分散項には大きな差を生じるため、特定指数のピークに強度変化が観測できる。手法については、以前単結晶試料を用いて同様の実験を行った実績があり、参考文献 1 に詳細を記してある。

## 3. 結果および考察



まず、8.465 keV で室温での回折実験を行い、その後 8.965 keV に波長変更を行い、室温での回折実験を行った。図 1 左のシミュレーション結果が示すように、Cu と Ga サイトの入り方が逆である場合には、16 度付近や 37 度付近のスペクトルにわずかな違いが生じる。実際の実験では 8.965 keV においてのみ、16 度付近にピークが明瞭に現れており  $CuGaCr_4S_8$  の秩序が実現していることを示す。

## 4. 参考文献

1. S. Tamura, N. Katayama\* *et al.*, *Inorg. Chem.* **56** (2017) 3030-3035.

図 1 (左) シミュレーション結果、(右) 実験結果。