



超高压合成における高配位構造の探索と凍結性に関する研究

遊佐 齊

国立研究開発法人物質・材料研究機構

キーワード : 超高压, 高配位構造, ホウ化物, 低温測定, Shastry-Sutherland Lattice

1. 背景と研究目的

ホウ化物は、ホウ素比の様々な変化により、多彩な構造を形成することが知られる。今まで、我々は、 RB_{12} 構造の堅牢性について、構造中に同じ配位数（24配位）を持つ RB_6 構造と体積弾性率(B_0)を比較することにより、構造—圧縮特性の相関について議論をおこなってきた[1]。今回、それらとは異なる配位構造（18配位、double-bicapped heptagonal prism）を有する RB_4 （UB₄構造：空間群 $P4/mbm$ ）について着目し、前回報告した DyB_4 に引き続き、 $\text{RB}_4(\text{R}=\text{Gd}, \text{Tb}, \text{Ho}, \text{Tm})$ について低温X線回折実験をおこない、低温下での構造異方性について追究した。

2. 実験内容

測定に利用した各試料 ($\text{RB}_4[\text{R}=\text{Gd}, \text{Tb}, \text{Ho}, \text{Tm}]$) は、真空石英管中で高周波誘導加熱により合成したものである。試料を乳鉢上で粉碎し、金粉末と混合し、ポリイミドのキャビラリー先端に固定し、BL2S1において、窒素吹付による冷却の下で、単色X線回折実験(17.14 keV)をおこなった。検出器は PILATUS 1M を用いて、約 100mm のカメラ長で測定した。1回の測定時間は 36 秒である。測定は 298K から 98K まで 20 度おきにおこなった。測定温度は、金の低温での格子定数[2]を参照することで決定した。格子定数の精密化は GSAS (Le-Bail 法) によりおこなった。

3. 結果および考察

測定された各試料の格子定数の温度変化を Fig. 1 に示す。前回報告した DyB_4 [3]と同様、この温度範囲で構造相転移は観察されなかった。 RB_4 は立方晶である RB_6 や RB_{12} とは違い正方晶であり、特に(001)面に特徴的な Shastry-Sutherland Lattice (SSL)を有する。結果、軸比 a/c は、低温下で増加していくため、SSL の磁気的相互作用がその異方性に関与していることが考えられる[4]。

4. 参考文献

1. H. Yusa, F. Iga, and H. Fujihisa, *Inorg. Chem.*, **61**, 2568 (2022)
2. M. G. Pamato, I. G. Wood, D. P. Dobson, S. A. Hunt, and L. Vocadlo, *J. Appl. Crystallogr.*, **51**, 470 (2018)
3. 遊佐, あいちシンクロトロン光センター成果報告書 (2024N5004)
4. H. Yusa, and F. Iga, *J. Appl. Phys.*, **138**, 095903 (2025)

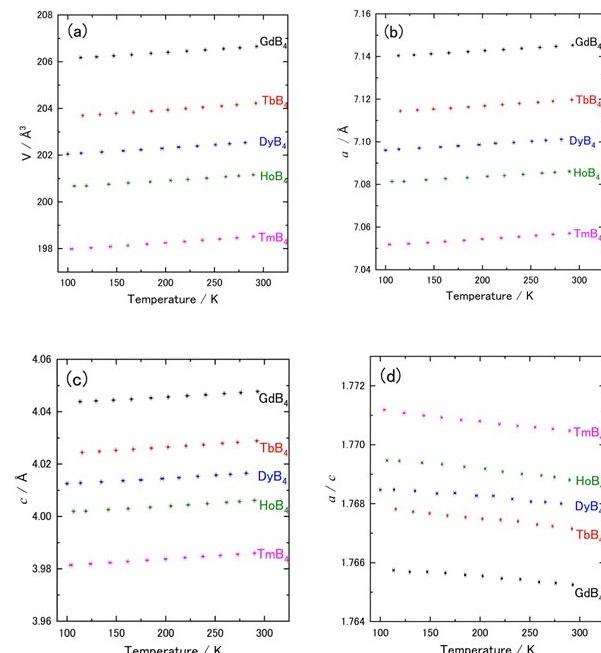


Fig. 1 各 RB_4 の低温下での格子定数変化と軸比(a/c)