



124 組成を持つテルライドの EXAFS 測定

片山尚幸

岡山大学学術研究院生命自然科学研究学域

キーワード：テルライド, EXAFS

1. 背景と研究目的

124 組成 AB_2X_4 ($A, B = 3d$ 元素, $X =$ 酸素族)のテルライドをはじめとする 124 組成物質はスピネル構造やオリビン構造などの多様な結晶構造を持つことが知られ、地殻中にも多く分布する代表的構造であることから古くから調べられてきた。特に、 $B = Cr$ の ACr_2X_4 は空隙が秩序化した Cr_3S_4 型構造を持ち、イオン半径比や電気陰性度などから構造の安定性を議論する構造フィールドマップ上では中央付近に多く分布する典型的な結晶構造であるにもかかわらず[1]、これらの電気輸送特性などの特性については室温付近で金属的かどうか程度しかわかっていなかった[2]。

そこで矢野らはこの AB_2X_4 系の単結晶育成方法を確立し、系統的に電気輸送特性を調査した。その結果、 $TiCr_2Te_4$ など複数組成が低温で異常ホール効果を示すことを明らかにした[3]。興味深いのが、結晶育成条件によって同組成でも複数の結晶構造を持つ多型である可能性を見出し、それに応じて磁気転移温度や異常ホール効果の発現にも変化が生じていた。この結晶構造の違いとして、A サイトと B サイトの秩序化具合や A 原子が B サイトへ入る逆構造の存在などが考えられるため、本課題では XAFS を用いて原子の価数と局所構造の解析からこれらの物質の結晶構造を間接的に明らかにする。

2. 実験内容

BL5S1 ビームラインにて $TiFe_2S_4$ 、 $TiFe_2Se_4$ の Ti K-edge 及び $TiCr_2Te_4$ の Cr K-edge における XAFS 実験を行った。試料は名古屋大学・矢野助教より提供された。高品質な単結晶を粉砕し、適量の BN と混合・成型することで、直径 $\phi 7$ mm のペレット試料を作成した。3 種類の試料について、輸送材の異なる 2 試料ペレットをホルダーに装着し、透過法による XAFS 実験を行った。温度は 300 K で固定した。十分な統計精度を担保するために複数回測定を行い、標準試料を基準として E_0 を整列させたのちマージした。

3. 結果および考察

各試料について純良な XAFS スペクトルの取得に成功した。それぞれの試料について、XAFS スペクトルの輸送材依存性は認められず、EXAFS 領域をフーリエ変換して得られた擬動径分布関数もよく一致しており、局所構造の輸送材依存性はないことがわかる。XANES スペクトルについてもエネルギーの立ち上がりは両者で一致しており、注目元素の価数状態に輸送材依存性はないことがわかる。以上の結果から、磁気転移温度の違いは、局所構造や価数状態には寄らず、異なる起源があることを突き止めた。今後は単結晶試料を用いた X 線回折実験などによる平均構造解析を実施し、磁気転移温度の違いの起源をより詳細に検討する必要がある。

4. 参考文献

- [1] J. E. Iglesias and H. Steinfink, *J. Solid Stat. Chem.* **6**, 119 (1973).
- [2] S. L. Holt, R. J. Bouchard, and A. Wold, *J. Phys. Chem. Solids Pergamon Press* **27**, 755 (1966).
- [3] 矢野力三 他 日本物理学会 第 80 回年次大会(2025 年), 17aSK312-8