

# パイロクロア型ニオブ酸化物における局所的変位構造

花咲 徳亮

大阪大学大学院理学研究科物理学専攻

パイロクロア格子におけるフラストレーション効果について、f 電子系を中心にスピンスピンおよび関連した研究が盛んに行われてきた。一方、d 電子系では波動関数が比較的広がっているため、4 面体内で隣接した遷移金属間で電子軌道が混成する事もあり、多量体形成や格子ひずみがフラストレーション格子とどのように関わっているか興味深い。

我々はパイロクロア型酸化物  $A_2Nb_2O_7$  ( $A=Y_{0.5}Ca_{0.5}, Nd_{0.5}Ca_{0.5}$ ) に着目して研究を行っている。Nb 原子が四面体の中心方向（内向きもしくは外向き）に変位している事が先行研究の粉末中性子回折で指摘されていたが[1]、原子変位パターンは明らかでなかった。そこで、我々は原子の 2 体相関（EXAFS、中性子 PDF）と回折的手法（共鳴軟 X 線回折等）を併用して研究を進めた。X 線回折では (6 0 0)、(2 0 0) の周囲に散漫散乱が観測されたが、Nb 原子は相関長が短い長周期構造を形成する事が分かった。さらに、上記の長周期性を仮定して、EXAFS および中性子 PDF 解析を行った所、一部の Nb 原子が all-in 型で変位している事を見出した。この状態は、理論的研究で指摘されてきた charge singlet 状態に類似した状態である [2]。またこの状態は、Nb(4d)<sup>0.5</sup> であるにも関わらず非磁性状態である事と関連すると考えられる。本研究は、中尾裕則、大友季哉、樹神克明の各氏をはじめ多くの共同研究者の協力を得て行われた。

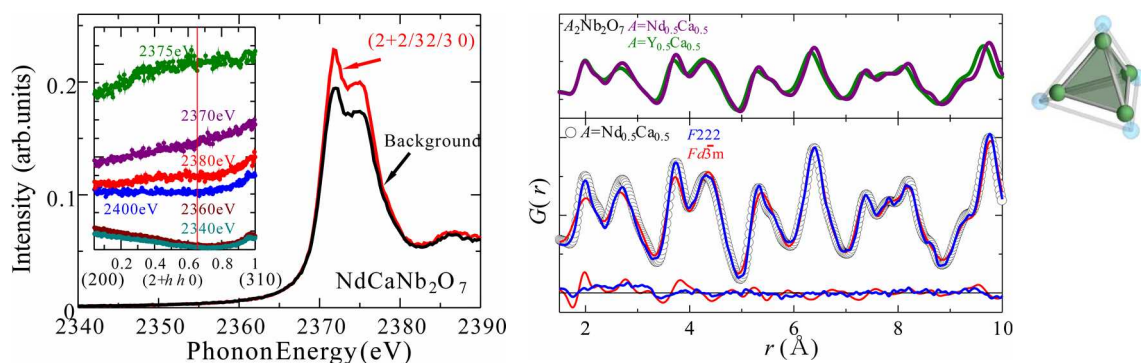


図 1.  $NdCaNb_2O_7$  の共鳴軟 X 線回折 図 2. 中性子 PDF と all-in 型原子変位

[1] T. M. McQueen *et al.*, *J. Phys. :Condens. Matter* **20**, 235210 (2008).

[2] P. Blaha *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 216403 (2004).