博士論文公聴会の公示（物理学専攻）

学位申請者：鳥越 秀平

論文題目：Nanoscale Structural Analyses in Transition Metal Oxides with a Pyrochlore Lattice
（パイロクロア格子を有する遷移金属酸化物におけるナノスケール構造解析）

日時　：2017年　2月　6日　（月）　8:50－10:20

場所　：　理学研究科H棟7階7階セミナー室（H701号室）

主査　：花咲徳亮

副査　：田島節子、川村光、小林研介、酒井英明

論文要旨：

氷の構造では水素原子の配置の自由度が縮退しているため、低温まで巨視的な状態数を有しており、熱力学第三法則を破ることも指摘されている。このように幾何学的フラストレーションは固体物理学で興味深いテーマの1つである。

氷の状態の拡張として、本研究では、遷移金属原子の四面体構造がtwo-in two-out型で変位する“原子変位アイス”状態やこれに類似する状態を探るため、x線や中性子線などのマルチプローブを用いて、スピンS=1/2とパイロクロア格子を有する酸化物において格子系の長距離秩序や局所秩序を精査した。その結果、以下の2つの知見を得た。

1) パイロクロア型ニオブ酸化物$A_2Nb_2O_7$(A=$Y_{0.5}Ca_{0.5}$, $Nd_{0.5}Ca_{0.5}$)において、中性子二体相関関数(PDF)解析と単結晶x線回折実験によって、Nb四面体のall-in型変位を発見した。この局所構造は、Nbイオンの4d電子の混成軌道の形成によって理解できる。
2) スピネル型チタン酸化物$Mg_{1+x}Ti_{2-x}O_4$において、Tiイオンをごく少量のMgイオン(x=0.02)に置換することによって、立方晶から正方晶への構造相転移が消失することを発見した。広いx領域(0.32>x>0.125)の中性子PDF解析から、立方晶であるのにも関わらず、ナノスケールの正方晶構造揺らぎが存在する事が示唆された。正方晶構造では、Tiイオンはtwo-in two-out型の変位を示し、“原子変位アイス”状態が実現している可能性がある。

磁化率との比較から、スピンシングレットの形成は4量体や2量体形成と関わっていると考えられる。