



平成 23 年 12 月 22 日

報道関係者各位

国立大学法人 千葉大学
大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構
国立大学法人 東京大学

強磁性を保ったまま金属から絶縁体になるしくみを解明 ークロム4量体化とパイエルス機構ー

【概 要】

千葉大学大学院・理学研究科の太田幸則（オオタ ユキノリ）教授、融合科学研究科の小西健久（コニシ タケヒサ）准教授、高エネルギー加速器研究機構（KEK）物質構造科学研究所・構造物性研究センター（CMRC）の中尾裕則（ナカオ ヒロノリ）准教授、中尾朗子（ナカオ アキコ）助教（現：一般財団法人 総合科学研究機構）、および東京大学・物性研究所の上田寛（ウエダ ユタカ）教授、礒部正彦（イソベ マサヒコ）博士の研究グループは、KEK放射光科学研究施設フォトンファクトリー^{*1}を用い結晶構造解析によって、ホランダイト型^{*2}酸化物（ $K_2Cr_8O_{16}$ ）が強磁性^{*3}を保ったまま金属から絶縁体に転移するしくみを初めて明らかにしました。

この転移は温度によってクロム(Cr)が4量体化^{*4}を伴った格子変形が起こるために、電子の流れにくい状態になるというものです。このように格子構造の変化に伴ってバンド構造^{*5}が変化するパイエルス転移^{*6}を実験と理論の立場から明らかにしたのは初めてのことで、今後、新奇な物性を示す相関係物質の開発へ発展することが期待されます。

この研究成果は、米国科学誌Physical Review Lettersの2011年12月23日号（現地時間）に掲載予定です。

【背 景】

ホランダイト型酸化物は、ナノサイズのトンネル構造をもつため、この構造を利用した機能性材料として、近年注目されている物質です。また、この物質は価数の違うイオンが混在していること、結晶構造は低次元性であること、電気伝導性や磁氣的フラストレーション^{*7}が存在することから、多様な物性を示す可能性があり、物性研究の観点からも関心がもたれています。

これまで、上田寛教授と礒部正彦博士らは、 $K_2Cr_8O_{16}$ が強磁性を保ったまま金属から絶縁体に転移することを見出していましたが、その起源は未解明でした。ホランダイト型酸化物のような強相関電子系では、強磁性と金属性は密接な関係があり、強磁性の絶縁体は非常に希な物理的性質であるため、その発現機構の解明が期待されていました。

【研究内容と成果】

本研究では、強磁性金属・絶縁体転移を示すホランダイト型酸化物 $K_2Cr_8O_{16}$ について、KEK放射光科学研究施設フォトンファクトリーのBL-8を用いて強磁性絶縁体相の精密な結晶構造を調べました。その結果、低温絶縁体相で一次元的なトンネルを構成する4つのCr-O-Cr鎖の構造変化を見出しました。実験的に得られた結合距離の異なるCr-Oは、一次元方向に交互に配列（結合交替）し、クロムが4量体を形成していることが分かりました(図)。さらに、結晶構造結果を用いたバンド計算から、 $K_2Cr_8O_{16}$ はパイエルス不安定性^{*6}を持つことを発見しました。強磁性絶縁体相では、クロム3価(3d³):クロム4価(3d²)=1:3に対応して、4量体化したクロムが余りの1電子を共有してパイエルス転移が生じ絶縁化しているメカニズムを明らかにしました。

通常のパイエルス機構^{*6}では結晶格子を歪めて結合交替が起こるとともにスピンはシングレットと呼ばれるスピンの向きが反対の対を形成します。

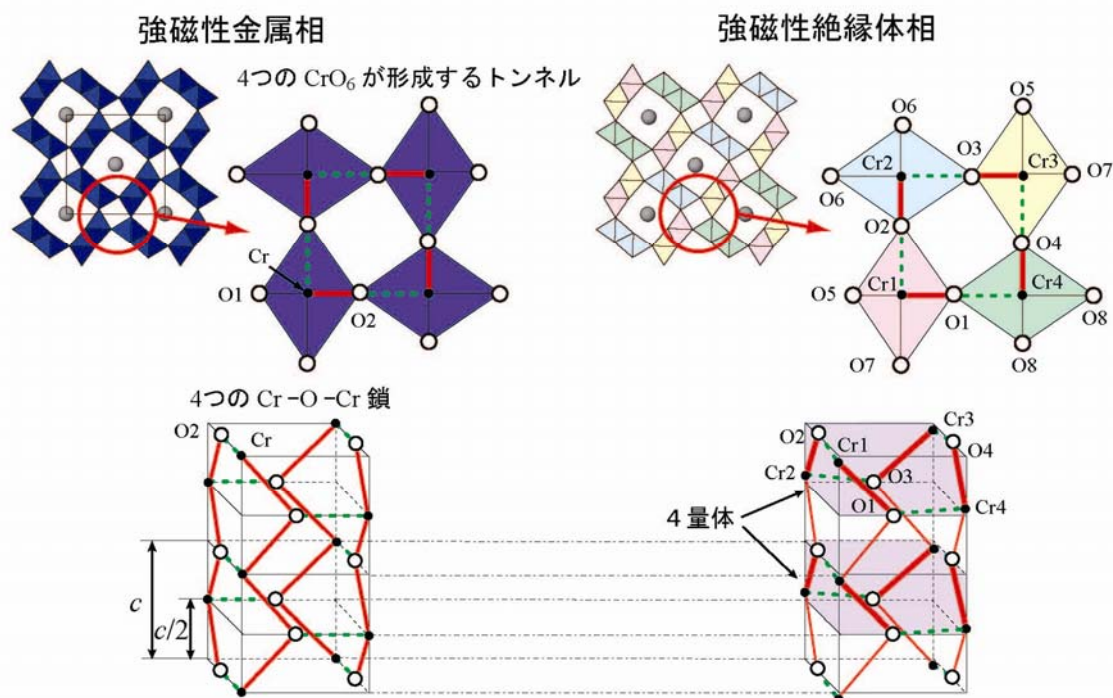
ところが本物質は、スピンの向きが全て揃っている状態（完全分極）の強磁性体が、スピンの向きを保ったままパイエルス転移する、すなわちスピン自由度のないパイエルス転移という特異な例であることがわかり、今後新奇な物性を示す強相関係物質の開発へ発展することが期待されます。

<論文名>

「Peierls Mechanism of the Metal-Insulator Transition in Ferromagnetic Hollandite $K_2Cr_8O_{16}$ 」

雑誌名「Physical Review Letters」+2011年12月23日号(オンライン版2011年12月20日)

【参考図】



【お問い合わせ先】

< 研究内容に関すること >

千葉大学大学院理学研究科

教授 太田幸則（オオタ ユキノリ）

TEL : 043-290-2755

E-mail : ohta@faculty.chiba-u.jp

< 報道担当 >

国立大学法人 千葉大学

理学部総務係

TEL : 043-290-2871

FAX : 043-290-2874

E-mail : iac2871@office.chiba-u.jp

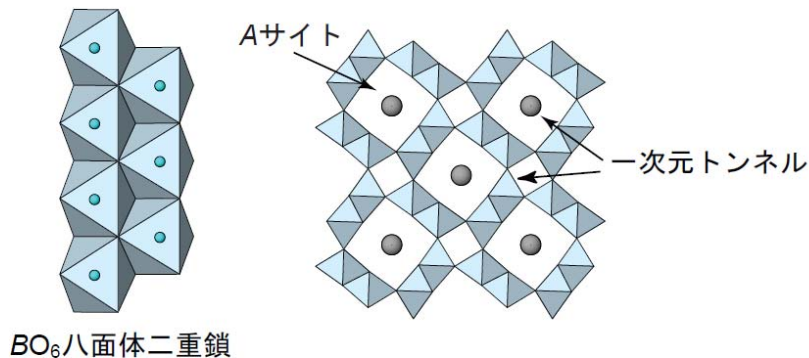
【用語解説】

※1：放射光科学研究施設フォトンファクトリー（PF）

光(Photon)の工場(Factory)の愛称で親しまれているPFは、日本初のX線を利用出来る放射光専用光源として1982年に完成しました。大学や研究機関が共同で利用実験するための施設(大学共同利用機関)としてKEKで運用され、年間約3千名を超える国内外の研究者が実験に訪れ、物質科学・生命科学の基礎から応用に至る世界最先端の研究成果を創出しています。

※2：ホランダイト型（酸化物）

化学式 $A_2B_8O_{16}$ で表される。 BO_6 八面体で2重鎖を形成し(左図)、4つ二重鎖がトンネル構造を形成した結晶構造をとる(右図)。



※3：強磁性

スピンの同一の向きに並んでいる状態をいう。

※4：4量体（化）

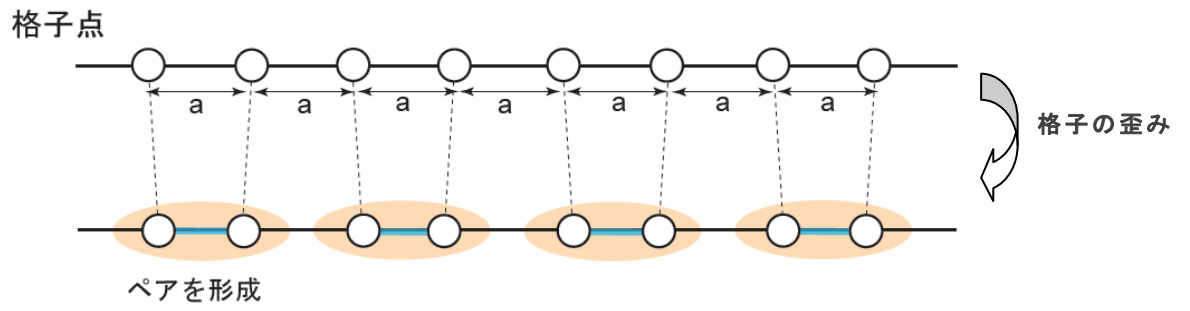
同種の4つの単量体が物理・化学的な力によってまとまることをいう。

※5：バンド構造

周期的構造によって生じる帯状の電子のとり得るエネルギー状態を表した構造をいう。

※6：パイエルス不安定性・パイエルス転移・パイエルス機構

一次元的に等間隔に並んだ格子点は、隣接するサイトの電子から受ける斥力(反発力)が増大することで不安定になる。このため、エネルギーを得るために格子点の配置はペアをつくり安定化を図る。この電子-格子系の不安定性をパイエルス不安定性といい、パイエルス不安定性のために格子歪みが起こることをパイエルス転移、そのしくみをパイエルス機構と呼ぶ。



※7：磁氣的フラストレーション
 スピンが安定した構造を取れないこと。